

¹Институт тепло- и массообмена им. А.В. Лыкова НАН Беларуси, Минск

²Белорусский государственный университет, Минск

ДИНАМИКА НАНОМАШИН В НЕОДНОРОДНЫХ СРЕДАХ

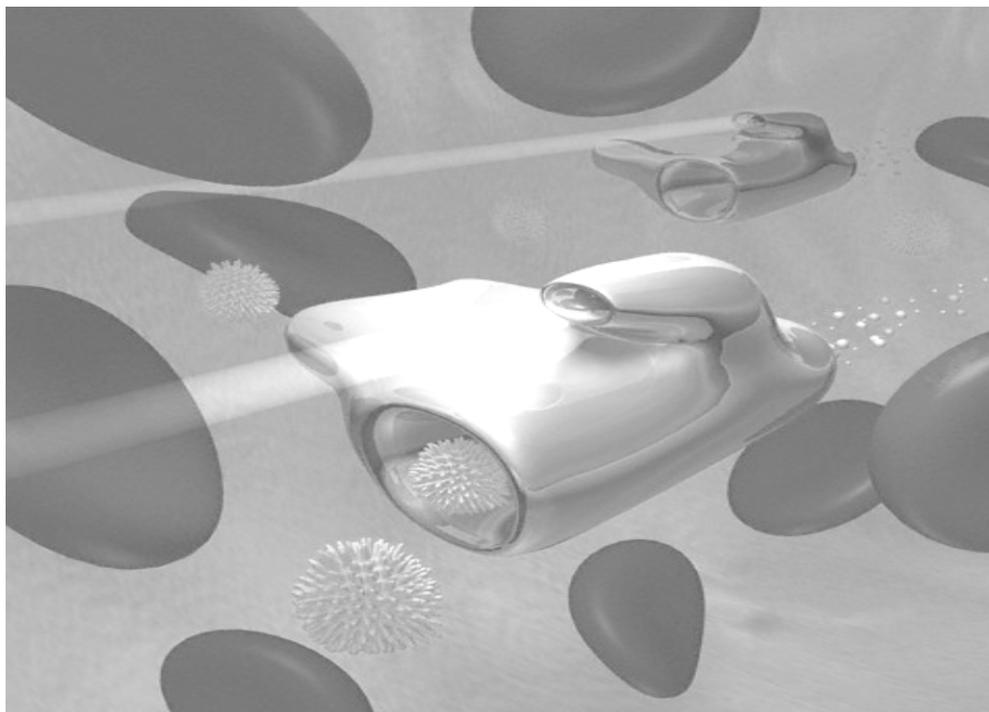
Плескачевский Ю.М.¹, Чигарев А.В.², Василевич Ю.В.²

Проектирование, конструирование и производство наномашин разного назначения из стадии научных проектов переходят в стадию опытно-конструкторских разработок и их физической реализации. Из многочисленных проблем, требующих исследования и решения в этой области рассмотрим вопросы динамики наномашин и ее управляемости в реальных средах, а так же вопросов, связанных с расчетом напряженно-деформированных состояний в таких структурах.

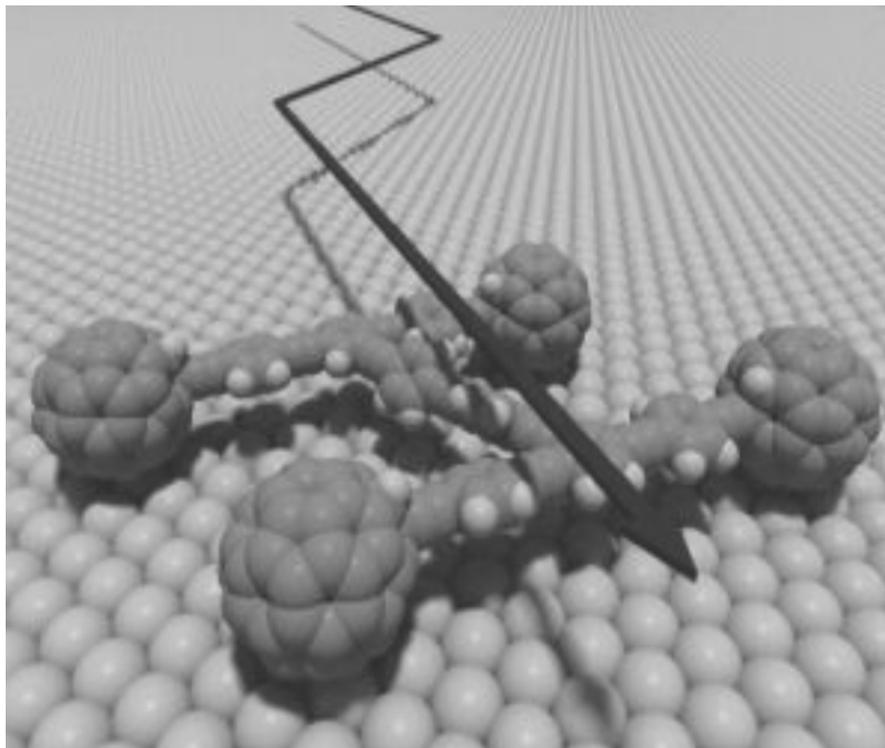
Приведем некоторые данные сравнительного анализа структур из рассматриваемого диапазона

Проекты конструкций наномашин:

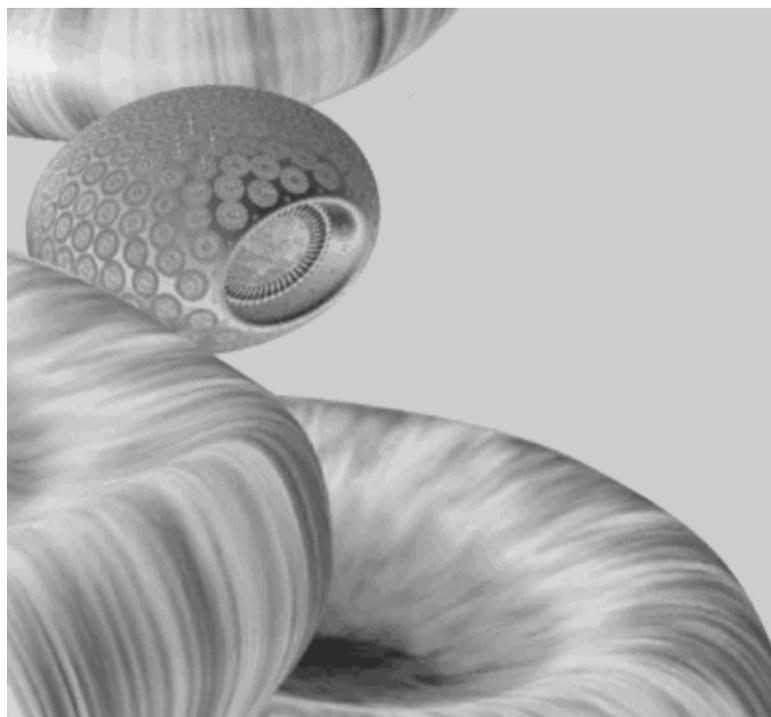
Проекты наномашин Медицинский наноробот:



Наноавтомобиль



*Микрофагоцит по сравнению с эритроцитом
(взято из Наномедицинской Галереи Института Предвиденья),
автор: Forrest Bishop.*



Сравнительный анализ масштабов объектов наномира:

2 nm – диаметр двойной спирали ДНК

20 nm – диаметр бактерии

90 nm – вирус HIV

200 nm – бактерия микоплазма, наименьшая форма клеточной жизни

1–10 μm (=1000 nm) – длина типичной бактерии

80 μm – диаметр человеческого волоса

$d_{\text{эритроцита}} \approx 8$ мкм,

$d_{\text{капилляра}} = 3$ мкм.

В линейном приближении динамика наноструктуры может быть описана системой уравнений вида

$$\dot{\bar{x}} = A \bar{x} + B \bar{u} + \bar{\xi}, \quad (1)$$

где \bar{x} – вектор обобщенных координат центра масс частицы и углов Эйлера размерности $n = 6$, \bar{u} – вектор управляющих воздействий размерности m , $\bar{\xi}(t)$ – случайный процесс, определяющий воздействия со стороны среды на наномашину, A , B матрицы $n \times n$, $n \times m$, элементы которых могут зависеть от t и возможно некоторых $\bar{y}(t)$.

Вследствие малой массы наноструктура обладает малой инерцией. Уравнение (1) можно представить в виде системы уравнений 2го порядка с малым параметром при старшей производной. Вместо уравнений Ньютона-Эйлера целесообразно использовать уравнения Брауна, описывающие брауновское движение.

Устойчивость однородного плоского движения центра масс наноробота при скачкообразных изменениях параметров

Конкретизируем (1) в виде

$$\dot{x} = A(t, y)x + F(t) \frac{d\omega}{dt}, \quad (2)$$

где x смещение от номинальной плоской траектории движения вдоль оси y ($z = 0$).

Пусть $y(t)$ скачкообразный случайный процесс с двумя состояниями y_0, y_1 , причем переход из одного состояния в другое происходит в случайные независимые моменты времени с вероятностями

$$\text{в состояние } y_0 - \beta_0 \Delta t + 0(\Delta t) \text{ и в состояние } y_1 - \beta_1 \Delta t + 0(\Delta t). \quad (3)$$

Можно рассмотреть два процесса с матрицами

$$A^{(0)}(t) = A(t, y_0) \text{ и } A^{(1)}(t) = A(t, y_1). \quad (4)$$

Если матрицы (4) удовлетворяют условиям устойчивости или неустойчивости, то процесс $x(t)$ будет устойчивым или неустойчивым.

Процесс $x(t)$ является p -устойчивым, если устойчиво тривиальное решение для p -моментов процесса $x(t)$.

Рассмотрим некоторые случаи когда одна из матриц $A^{(0)}$ или $A^{(1)}$ может быть неустойчивой. Например, пусть $\beta_0 = 0$, $\beta_1 > 0$, тогда для устойчивости этих уравнений нужно, чтобы были устойчивыми матрицы $A^{(0)}$, $A^{(1)} - (\beta_1 / p)I$, т.е. матрица $A^{(1)}$ неустойчива, но если вещественные части ее характеристических чисел меньше β_1 / p , то имеет место устойчивость. Физически это означает, что если в момент времени t' было принято значение y_0 и далее оно не меняется, то матрица $A^{(0)}$ будет устойчивой. Поэтому если начальное значение было y_1 , а в момент t' принято значение y_0 , но даже при неустойчивой матрице $A^{(1)}$ процесс $x(t)$ не уйдет далеко от заданной траектории. Аналогично можно рассмотреть случай когда $A^{(0)}$ неустойчива, а $A^{(1)}$ устойчива.

Соотношения между числами β_0, β_1 и элементами матриц $A^{(0)}, A^{(1)}$ при которых процесс $x(t)$ будет p -устойчивым можно получить на основе критерия Рауса-

Гурвица. Например, для устойчивости процесса $x(t)$ по первому моменту (математическое ожидание) необходимо, чтобы была устойчива матрица

$$\begin{vmatrix} A^{(0)} - \beta_0 I & \beta_1 I \\ \beta_0 I & A^{(1)} - \beta_1 I \end{vmatrix}. \quad (4)$$

Пусть процесс движения центра масс наномашин рассматривается в одномерном случае около положения $x \equiv 0$.

$$\dot{x} = a(y)x.$$

а уравнения для математических ожиданий имеют вид

$$\begin{aligned} \dot{m}_1^{(0)} &= a_0 m_1^{(0)} + \beta_1 m_1^{(1)} - \beta_0 m_1^{(0)}, & a_0 &= a(y_0), \\ \dot{m}_1^{(1)} &= a_1 m_1^{(1)} + \beta_0 m_1^{(0)} - \beta_1 m_1^{(1)}, & a_1 &= a(y_1), \end{aligned} \quad (5)$$

Уравнения (5) устойчивы, если

$$a_0 + a_1 < (\beta_0 + \beta_1), \quad a_0 a_1 (\beta_0 a_1 + \beta_1 a_0). \quad (6)$$

На рис. 1 представлена область значений a_0, a_1 . В заштрихованной области система устойчива. Видно, что параметры a_0, a_1 могут принимать положительные значения, т.е. могут быть неустойчивыми.

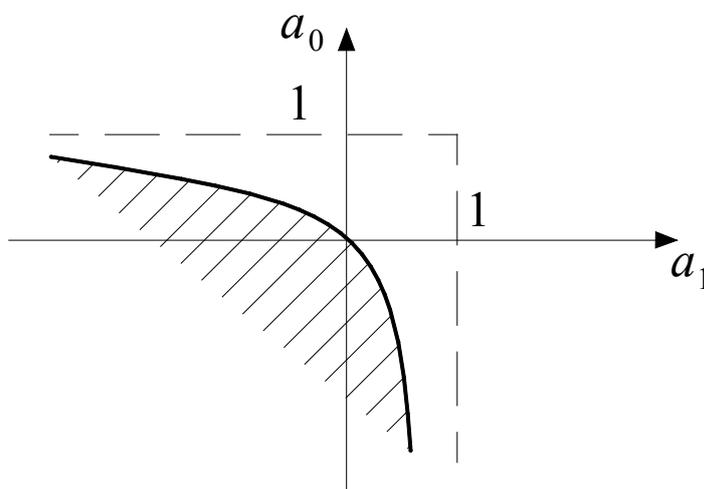


Рис. 1

Оптимальное управление наномашинной может быть программным или иметь обратную связь.

Таким образом, в принципе несмотря на то, что движение наномашин происходит в среде со случайными воздействиями по реальной траектории, которая отличается от заданной, однако целенаправленное движение может быть в среднем осуществлено.

Как следует из вышесказанного наномашинной будут работать в условиях постоянных динамических и статических воздействий, которые будут вызывать изменение их параметров. Поэтому актуальной проблемой наномеханики является вопрос о создании моделей наноструктур, позволяющих получать расчет напряжений, деформаций, (обратимых и необратимых) в таких структурах.

Как известно, реальный мир дискретен и механически поведение структур от микроуровня до макроуровня наиболее точно можно было бы описать на основе методов кристаллической решетки.

Однако объем вычислений в дискретной математической модели твердого тела еще не под силу и современным вычислительным системам поэтому методы контину-

альной механики, основанной на моделях сплошных сред, продолжают оставаться базой для инженерного проектирования, конструирования машин.

После открытия наноструктур, некоторые из которых подобны, известным в механике деформируемого твердого тела: оболочкам (трубки, фуллерены), пластинам (графены), стержни, проволоки, возникли проблемы, связанные с расчетом их физико-механических свойств, (материальная жесткость, плотность, твердость, прочность, пластичность), а также геометрии (формы) и внутренней структуры и т.д.

Дискретность структуры, континуальное приближение

В континуальной механике характерный, представительный объем V содержит n структурных элементов объемом каждый V_0 значительно больше 1

$$n = V / V_0 \gg 1. \quad (7)$$

Неоднородность, анизотропия свойств объема V ужесточает требование (7). Если объем V состоит из кластеров с неоднородными границами (горные породы) компонентов, то обычно требуется, чтобы масштаб неоднородности (средний размер кластера) был значительно меньше диаметра характерного объема. Наноматериалы, применяемые в различных областях должны обладать высокой степенью однородности (примесей не более 1%), что позволяет на первый взгляд измерять их физико-механические характеристики на приборах с меньшей осредняющей базой, однако проведение опытов по растяжению нанообразцов сегодня затруднительно, т.к. сложно получить захваты, надежно удерживающие образец и основным методом является индентирование.

Модельные расчеты показывают, что в наноматериалах сильное влияние на величину, например, упругих модулей оказывает масштабный фактор и напрямую связанная с этим дискретность структуры и возможность континуального приближения.

Как известно, в континуальных моделях неоднородных сред имеет место масштабный эффект, проявляющийся в зависимости средних упругих модулей от масштаба осреднения.

Пример: [8] Пластина, растягивается в направлении оси x силами величиной σ_0 . Неоднородность пластины задана законом

$$\gamma = \gamma(y) = \frac{1 - \nu^2}{E(y)}; \quad q = q(y) = \frac{1 + \nu}{E(y)}. \quad (7)$$

Случайные статистически однородные функции $\gamma(y)$, $q(y)$ заданы своими моментами

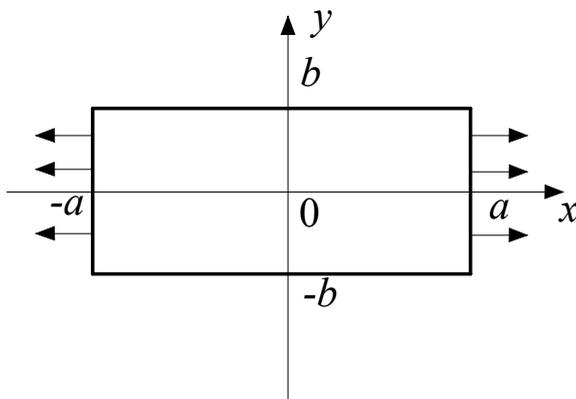


Рис. 1

Зависимость $\langle E_* \rangle / \langle E \rangle$ (кривая 1 при $\delta = 0,3$), E_s / E_σ (кривая 2) пластины показаны на рис. 2

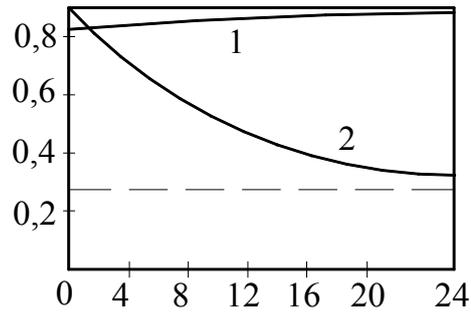


Рис. 2. Растяжение микронеоднородной упругой пластины [8]

Здесь $E_* = \frac{\sigma_0}{\epsilon_*}$, $E_s = \sqrt{\langle (E_* - \langle E_* \rangle)^2 \rangle}$, $\delta = E_\sigma / \langle E \rangle$.

Масштабный эффект хорошо выражен для дискретных структур. Показано [6], что в случае растяжения нанослоя

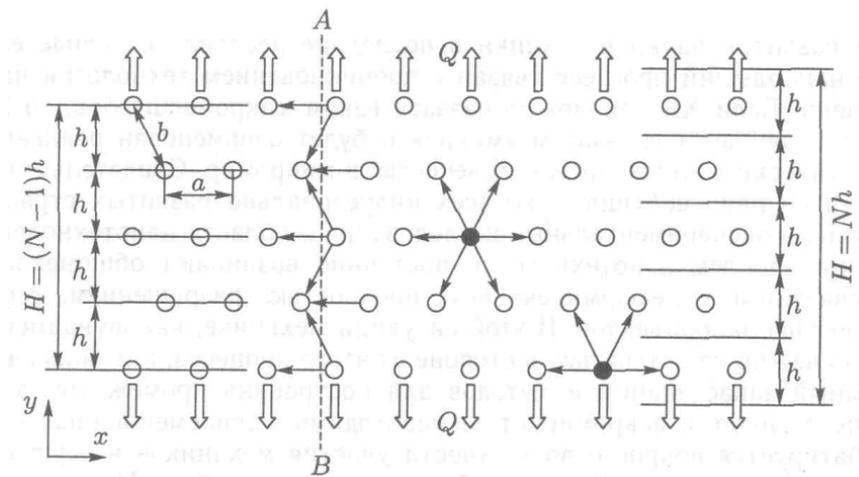


Рис. 3. Растяжение двухмерного нанокристалла [6]

Зависимость E_1^{\max} / E_∞ от N числа атомных слоев в направлении растяжения может изменяться практически в два раза рис. 4

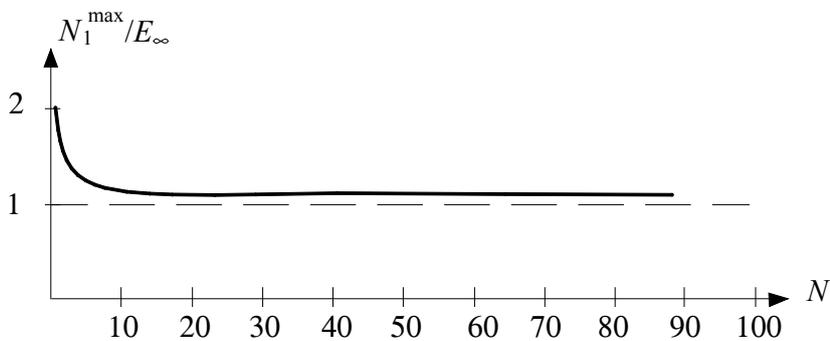


Рис.4

$$E_1 = \frac{N}{N_*} E_\infty, \quad N - 1 \leq N_* \leq N.$$

Поведение упругих модулей в неоднородной среде и дискретной наноструктуре согласно рисунков 3, 4 указывает на наличие краевых эффектов, что требуется учитывать при постановке граничных задач. Так в приближении квазиконтинуума [9] (нелокальная теория упругости) граничные условия ставятся с учетом изменения характера упругих связей в граничной области.

Отметим некоторые механические свойства наноматериалов.

Медь, которая проявляет в макромасштабе свойства материала пластичного, с малой выносливостью, прочностью при достижении зерном размера меньше 20 nm демонстрирует пластичность порядка 1GPa. Пластичность мала, а поведение материала близко к хрупкому (~2%). Высокую выносливость и малую пластичность демонстрируют и другие наноматериалы.

Как известно, при механическом размоле материалов, твердость и прочность (выносливость) материалов для обычного масштаба зерна $d > 1 \mu\text{m}$, можно описать с помощью эмпирического закона Холла-Петча

$$\sigma = k \langle d \rangle^{-1/2} + \sigma_0$$

где k и σ_0 постоянные, d – размер зерна. При $d < 20 \text{ nm}$ обнаруживаются отклонения от этого закона и даже обратная зависимость.

Растяжение и трещиностойкость наноматериалов зависят от 3^x факторов: дефектов, возникающих в процессах производства (например: пористость, нанотрещины), нестабильность, обусловленная торможением и распространением нанотрещин, пластическая нестабильность при растяжении.

Наличие дефектов связывается со значительным ограничением растяжимости наноматериалов. Для традиционно существующих размеров зерна полезным для сопротивления трещинообразованию является его уменьшение. Для случая наноматериалов граница пластичности сильно вырастает как результат дробления структуры и, в общем, возможно, что она становится более прочной с большим сопротивлением на разрушение. Кроме того, напряжение разрушения может быть меньше с учетом снижения активности дислокации и увеличения пористости границ зерен. Высокая энергия и большое количество таких областей позволяют трещинам относительно легко распространяться вдоль границ или через зерно.

Ползучесть традиционных материалов сильно зависит от размера зерна, а при сверхпластичности удлинения могут достигать 100-1000% при температурах $0,5T_m$.

В области микрометровой одновременно с уменьшением зерна материал становится сверхпластическим при значительно более низкой температуре, растет скорость деформирования. Основным уравнением, описывающим ползучесть и сверхпластичность является уравнение.

$$\dot{\epsilon} = A \frac{DGb}{k_B T} \left(\frac{b}{\langle d \rangle} \right)^s \left(\frac{\sigma}{G} \right)^n$$

где A – постоянная, зависит от механизма ползучести, σ – приложенное напряжение, s – показатель величины зерна, n – показатели деформирования.

Сверхпластичность является частным случаем ползучести при большой скорости деформирования.

Можно было бы предположить, что для малых размеров зерен и низкой температуре T/T_m доминирующим механизмом транспорта массы в наноматериалах является ползучесть. Можно было бы также ожидать явления сверхпластичности при более низкой температуре. Однако оказывается, что скорость ползучести наномате-

риалов такая же как и в области зерен микрометрового размера. Не установлена возможность сверхпластичности при $T < 0,5T_m$.

ЛИТЕРАТУРА

1. Nanoscale Science and Technology, Editors: Robert W. Kelsall, Mark Geoghegan, 2005. John Willey & Sons Ltd. England. P 469.
2. R. A. Jones. Soft Machines, Oxford University Press, Oxford. 2004.
3. K. E. Drexler. Engines of Creation, Fourth Estate, London, 1990.
4. 4). Morris D.G. Mechanical. Behavior of Nanostructured Materials. Trans. Tech., Szwajcaria, 1998.
5. 5). Перспективные материалы (к 60-летию д.т.н. В.В. Рубашка) авт.: сост.: М.В. Астахов и др., Витебск, изд-во УО «ВГТУ» 2009, 548 с.
6. 6). Кривцов А.М., Морозов Н.Ф. Две причины проявления масштабного фактора при описании механических свойств наноструктур. - Проблемы механики, сборник статей к 90-летию со дня рождения А.Ю. Шилинского, Минск, Физмалит, 2003, с. 485-489.
7. 7). Дудукаленко В.В., Чигарев А.В. О связи масштабного и кривого эффектов в стохастически неоднородных средах, Изв. АН СССР, Механика твердого тела, 1969 г., № 4, с. 70-74.
8. 8). Ломалин В.А. Статистические задачи механики деформируемых тел. – Минск, «Наука», 1970 г., 139 с.
9. 9). Кунин И.А. Теория упругости неоднородных сред с микроструктурой. Нелокальная теория упругости. – Минск, «Наука», 1975 г., 412 с.