

**Gwidon Szefer**

**NANOMECHANIKA MATERIAŁÓW  
I STRUKTUR MATERIALNYCH**



Wydawnictwo  
Politechniki Poznańskiej 2017

Recenzent – prof. dr hab. inż. Mieczysław Kuczma

Redakcja – Katarzyna Muzia

Opracowanie komputerowe tekstu – Janusz Dębiński

Projekt okładki – Andrzej Jakubowski

Utwór w całości ani we fragmentach nie może być powielany ani rozpowszechniany za pomocą urządzeń elektronicznych, mechanicznych, kopiujących, nagrywających i innych bez pisemnej zgody posiadacza praw autorskich.

ISBN 978-83-7775-470-2

Wydanie I

Copyright © by Politechnika Poznańska, Poznań 2017

WYDAWNICTWO POLITECHNIKI POZNAŃSKIEJ

ul. Piotrowo 5, 60-965 Poznań

tel. +48 (61) 665 3516, faks +48 (61) 665 3583

e-mail: office\_ed@put.poznan.pl

www.ed.put.poznan.pl

Druk i oprawa

PERFEKT DRUK ul. Świerzawska 1, 60-321 Poznań, tel. +48 (61) 8 611 181-83

# Spis treści

<b>Wstęp</b> . . . . .	7
<b>Opis ważniejszych oznaczeń</b> . . . . .	11
<b>Rozdział 1. Podstawy modelowania w mechanice</b> . . . . .	13
<b>Rozdział 2. Nanostruktury materialne</b> . . . . .	17
2.1. Podstawy mechaniki molekularnej . . . . .	17
2.2. Model PARRINELLO–RAHMANA . . . . .	30
2.3. Model ciała afinicznie sztywnego . . . . .	39
2.4. Modele kontynuualno-molekularne . . . . .	45
2.4.1. Hipoteza Cauchy–Borna . . . . .	45
2.4.2. Uogólniona reguła Cauchy–Borna . . . . .	50
2.4.3. Aproksymacja harmoniczna . . . . .	55
2.4.4. Modele mechaniki konstrukcji . . . . .	56
2.5. Nanokompozyty . . . . .	72
<b>Rozdział 3. Kwantowe struktury materialne</b> . . . . .	75
3.1. Podstawy mechaniki kwantowej . . . . .	75
3.1.1. Nieskończona bariera potencjału . . . . .	77
3.1.2. Nieskończona studnia kwantowa . . . . .	79
3.1.3. Skończona studnia kwantowa . . . . .	81
3.1.4. Tunelowanie . . . . .	83
3.1.5. Oscylator harmoniczny . . . . .	84
3.1.6. Układ cząstek . . . . .	85
3.2. Wariacyjna postać równania Schrödingera . . . . .	90
3.3. Twierdzenie HELLMANNA–FEYNMANA . . . . .	91
3.4. Kwantyzacja układu . . . . .	93
3.4.1. Kwantyzacja układu cząstek afinicznie sztywnych . . . . .	95
3.5. Tunelowanie w mechanice pękania . . . . .	96
3.6. Kwantowomechaniczne podstawy wytrzymałości i wyężenia materiałów . . . . .	99
3.7. Deformacyjne efekty w kropkach kwantowych . . . . .	100

<b>Rozdział 4. Podsumowanie</b> . . . . .	103
4.1. Rezultaty dotyczące deformacji . . . . .	103
4.2. Rezultaty dotyczące miar naprężeń . . . . .	104
4.3. Rezultaty dotyczące równań ruchu . . . . .	105
4.4. Wnioski . . . . .	106
<b>Bibliografia</b> . . . . .	107

# Podziękowania

Opracowanie jest rezultatem cyklu wykładów wygłoszonych na Politechnice Poznańskiej i powtórzonych na Politechnice Krakowskiej w 2016 roku.

Z inicjatywą opublikowania tych wykładów wystąpił Rektor Politechniki Poznańskiej – prof. dr hab. inż. TOMASZ ŁODYGOWSKI, któremu tą drogą składam serdeczne podziękowania. Oddzielne, równie gorące podziękowanie należy się przewodniczącemu Polskiego Towarzystwa Metod Komputerowych Mechaniki – prof. dr hab. inż. MIECZYŚLAWOWI KUCZMIE, głównemu organizatorowi kursu, podczas którego wygłoszono te wykłady. Wykonał On też ogromną pracę edytorską, jak i recenzencką, za co jestem szczególnie wdzięczny.

Gorące podziękowanie składam dr. inż. JANUSZOWI DĘBIŃSKIEMU z Instytutu Konstrukcji Budowlanych Politechniki Poznańskiej, który podjął się trudu zapisu wzorów i wykonania wielu rysunków.



# Wstęp

Dzisiejszy stan wiedzy i możliwości badawczych pozwala na obserwację i pomiary zjawisk ruchu materii w obszarze rozmiarów  $10^{-15} - 10^{27}$  m, tj. w przedziale od zakresu ruchu cząstek elementarnych w fizyce atomowej po ruch galaktyk rozważanych w astrofizyce. Fenomenologiczny opis ruchu i deformacji oparty na kontynuualnym modelu materii doprowadził do ogromnego postępu w budowie maszyn, robotyce, inżynierii lądowej, wodnej, lotniczej itp. Mechanikę materiałów skupioną na modelowaniu konstytutywnym odznacza w ostatnim 50-leciu nie tylko znaczący rozwój w zakresie wiedzy o materiałach (kompozyty, ciekłe kryształy, materiały z pamięcią kształtu, piezoceramiki, ciecze magnetoreologiczne), ale zyskała ona także silne podstawy matematyczne. Teoria grup symetrii materiałowej oraz twierdzenia o reprezentacji funkcji tensorowych dostarczają ważnych narzędzi również do weryfikacji eksperymentu. Zaistniała następująca sytuacja: z jednej strony osiągnięto niezwykle wysoki poziom formalny modeli fenomenologicznych, z drugiej zaś założenie kontinuum kłóci się z pominięciem dyskretnej struktury materiału. Takie procesy, jak: ruch dyslokacji, pękanie, delaminacja, adhezja i tarcie, krzepnięcie i topnienie, przemiana fazowa itp. wymagają opisów uwzględniających rzeczywistą strukturę materiału. Stąd naturalna potrzeba badań oraz pomiarów w mikro- i nanoskali.

Nanomechanika jest multidyscyplinarnym obszarem badań procesów ruchu, deformacji i naprężeń zachodzących w nanoskali, tj. w rozmiarach, w których istotne stają się efekty molekularne i kwantowe. Obok mechaniki, jako autonomicznej nauki o ruchu ciał materialnych, nanomechanika stanowi wspólny przedmiot badań fizyki ciała stałego i płynów, chemii fizycznej, inżynierii materiałowej, elektroniki, a nawet biologii i medycyny.

Narodziny nanotechnologii, a więc i nanomechaniki wiązać należy z laureatem Nagrody Nobla, autorem znanej w mechanice kwantowej metody całkowania po trajektoriach – FEYNMANEM, który w słynnym wykładzie

pt. „There is Plenty of Room at the Bottom”, wygłoszonym na Zjeździe Fizyków w Kalifornii w 1959 r., wyraził przekonanie, iż możliwe jest kontrolowane układanie atomów kolejno „atom po atomie” w skupiska (gromady) o większych wymiarach. Celność tytułu objaśnia przytaczane często przez fizyków porównanie: gdyby atom (który ma średnicę  $1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$ ) był wielkości dużego pokoju, to jego jądro byłoby wielkości ziarenka pyłu (skupiając przy tym 90% masy całego atomu). Elektrony mają więc ogromną przestrzeń dla swego ruchu orbitalnego.

W roku 1982 BINNIG i ROHRER zaprezentowali skaningowy mikroskop tunelowy STM (Scanning Tunneling Microscope), demonstrując (na monitorze) ustawienie 35 atomów ksenonu w napis (logo) IBM.

Wkrótce, bo w 1983 r., pojawił się atomowy mikroskop siłowy AFM (Atomic Force Microscope), który pozwala na pomiar siły z dokładnością do  $10^{-13} \text{ N}$ . W latach późniejszych pojawiły się mikroskopy wysokiej rozdzielczości HR TEM (High Resolution Transmission Electron Microscope) oraz spektroskopy nowego typu. Rozwinęły się nowe metody wytwarzania w mikro- i nanoskali – epitaksja, wytrawianie, litografia, elektroprzędzenie. W 1991 r. japoński chemik Iijima doniósł (publikacja w „Nature”) o odkryciu nanorurek węglowych CNT (SWCNT i MWCNT – Single i Multi Walled Carbon Nano Tubes). Są to cylindryczne włókna węglowe o średnicy rzędu 2 nm, o niezwykłych właściwościach mechanicznych (tab. 1).

Tabela 1. Właściwości mechaniczne materiałów

Material	Moduł Younga $E$ [GPa]	Moduł Kirchhoffa $G$ [GPa]	Współczynnik Poissona $\nu$ [–]	Wytrzymałość $R$ [GPa]
CNT	1000–1800	200–500	0,19–0,28	45–150
Diamant	1000	478	0,1	50
Karborund	440–700	230	–	21
Stal	210	80	0,3	0,5
Grafit	686	–	–	20

W roku 1992 ukazała się bestsellerowa monografia DREXLERA *Nano-systems*, co niewątpliwie przyczyniło się do rozwoju nanotechnologii, a w konsekwencji i nanomechaniki.



Nowe mikroskopy, nowe techniki rozpoznawania obrazów, nowe metody wytwarzania i nowe materiały (nanokompozyty z włóknami CNT, heterostruktury krystaliczne, grafen, kompozyty kwantowe QTC – Quantum Tunneling Composites), nanostruktury materiałne (NEMS – Nano Electro Mechanical Systems, nanoroboty – nanoskopowe moduły z elementami PZT i SMA) oraz kropki kwantowe w półprzewodnikach sprawiły, że metody modelowania procesów w nanoskali i w rozmiarach atomowych stają się nieodzowne dla dalszego rozwoju nanotechnologii oraz nanoinżynierii. Stają się też podstawą lepszego poznania i zrozumienia mechanizmów ważnych dla zachowań w skali makro, takich jak pękanie, zużycie, zmęczenie, propagacja defektów, korozja, przemiana fazowa itp.

Trwają prace nad wytwarzaniem włókien CNT o większych makroskopowych długościach (i uruchomieniem produkcji przemysłowej). Znane są przypadki laboratoryjnego wyprodukowania włókna polimerowego wzmocnionego kawałkami CNT o łącznej długości 100 m i średnicy 50  $\mu\text{m}$  (grubość włosa ludzkiego wynosi około 80  $\mu\text{m}$ ). Wytrzymałość włókna wyniosła 1,8 GPa (wytrzymałość stali jest równa 0,52 GPa).

Układ niniejszego opracowania jest następujący: zaczęto od krótkiego przedstawienia związków skali obiektu z istniejącymi w mechanice modelami. Stanowi to przedmiot rozdziału 1. Rozdział 2 dotyczy nanostruktur. Rozpoczyna się od przedstawienia podstaw mechaniki molekularnej. Lista tzw. twierdzeń wirialnych jest ważnym fragmentem rozdziału. Wywód tensora wirialnych naprężeń momentowych jest oryginalnym wynikiem pracy. Następnie szczegółowo omówiono najczęściej stosowane modele opisu ruchu, deformacji i naprężeń. Przytoczono wyniki obliczeń dotyczących propagacji szczeliny, nanorurek węglowych (CNT) oraz wciskania sondy AFM w membranę grafenu. Rozdział kończy omówienie modelowania nanokompozytów. Rozdział 3 jest poświęcony strukturom kwantowym. Przytaczając podstawowe wiadomości z zakresu mechaniki kwantowej, położono nacisk na te wielkości i pojęcia, które są fundamentalne dla mechaniki materiałów, a więc na wielkości polowe (tensory odkształceń i naprężeń). Podkreślono więc znaczenie twierdzenia HELLMANNA–FEYNMANA. Stany deformacji mają ogromne znaczenie we współczesnej optoelektronice oraz inżynierii komputerowej (kropki kwantowe), stąd ważny fragment dotyczący struktury pasmowej energii wyznaczonej na podstawie aproksymacji BORNA–OPPENHEIMERA. Zaakcentowano znaczenie metod obliczeniowych stosowanych powszechnie w mechanice kontinuum, a więc MES i MEB

oraz ich zastosowanie w mechanice kwantowej. Oddzielną uwagę poświęcono procedurze kwantyzacji opartej na formalizmie Hamiltona. Przytoczone w rozdziale przykłady zadań jednowymiarowych (1D) mają nie tylko znaczenie dydaktyczne, ale są okazją do zaprezentowania znaczenia efektu tunelowania w mechanice pęknięcia (QTF – Quantum Tunneling Fracture). Rozdział 4 – ostatni jest nie tylko podsumowaniem, ale i komentarzem do przedstawionego materiału.