

ПРИКЛАДНАЯ МАТЕМАТИКА

УДК 539.3+539.6+532.612.3

MSC 74M25

Континуальная аппроксимация энергии деформации нанокантилевера**А. О. Бочкарев, А. В. Орехов*

Санкт-Петербургский государственный университет,
Российская Федерация, 199034, Санкт-Петербург, Университетская наб., 7–9

Для цитирования: Бочкарев А. О., Орехов А. В. Континуальная аппроксимация энергии деформации нанокантилевера // Вестник Санкт-Петербургского университета. Прикладная математика. Информатика. Процессы управления. 2025. Т. 21. Вып. 1. С. 5–15.

<https://doi.org/10.21638/spbu10.2025.101>

В отличие от макромеханики упругие характеристики нанообъектов перестают быть константами в обычном понимании, т. е. как усредненные по объему коэффициенты определяющих соотношений, и зависят от размеров нанообъекта, вследствие чего их называют эффективными. Немаловажный аспект континуальной наномеханики состоит в том, что эффективные упругие модули проблематично измерить классическим способом, например, на наностенде. Вместо этого прибегают к различным видам атомистического моделирования, в частности, к симуляции растяжения и изгиба нанокантилевера при заданных абсолютных смещениях его свободного конца. Как результат средствами физики твердого тела определяются абсолютные смещения всех его атомов, а также изменения его энергии. Верификация полученных экспериментальных данных имеет важное значение и является необходимым этапом для их дальнейшего адекватного математического описания. В данной работе рассматривается задача континуального описания дискретных значений изменения энергии изгиба и самого прогиба наностержня на основе учета поверхностной упругости. В двух классах трансцендентных функций и одним кубическим многочленом аппроксимируются экспериментальные данные прогиба нанокантилевера. Оценивается погрешность аппроксимации и вычисляется интеграл от функциональной части потенциальной энергии деформации.

Ключевые слова: нанокантилевер, поверхностная упругость, энергия изгиба, эффективные упругие модули.

1. Введение. Нанотехнологии играют важную роль в разработке современных устройств для различных отраслей науки и техники, потому изучение механических свойств наноструктур является актуальной задачей. Для этих целей активно используются континуальные модели наномеханики. Считается, что усредненные по объему

* Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-11-00087, <https://rscf.ru/project/22-11-00087/>.

© Санкт-Петербургский государственный университет, 2025

макрообъекта упругие модули, такие как модуль Юнга E и коэффициент Пуассона ν (или эквивалентная им пара параметров Ламе λ и μ , или др.), постоянны во всех точках изотропной и однородной сплошной среды для данного материала. Их можно измерить опытным путем, например, растягивая или сжимая испытуемый образец.

Есть все основания полагать, что, переходя на наноуровень, упругие модули остаются актуальными и для описания локальных упругих свойств нанобъектов на удалении от его границ. Однако вблизи граничной поверхности нанобъекта имеются естественные физические неоднородности (так, у атомов меньше связей и др.), что неизбежно отражается и на его усредненных по объему упругих свойствах. Другими словами, для конкретного нановолокна или нанопластины усредненные по поперечному сечению упругие модули (называемые эффективными) должны зависеть от размеров нанобъекта — размерный эффект, незаметный для макрообъектов.

Такое положение не может быть объяснено с позиции классического закона Гука и дало толчок развитию новых континуальных подходов, в частности, моделей поверхностной упругости Гертца — Мердока [1, 2] и ее обобщения с учетом поверхностных моментов Стейгманна — Огдена [3, 4]. Во многом эти модели идентичны объемной упругости, в том числе имеют свои поверхностные упругие модули.

Придание особых упругих свойств листовым поверхностям нанобъекта с помощью моделей поверхностной упругости позволяет объяснить размерный эффект для эффективных упругих свойств, но одновременно ставит и новые вопросы. Один из них, как измерить поверхностные упругие модули? Понятно, что лицевой слой не «отделить» от нановолокна или нанопластины и не установить на испытательный стенд. Один из выходов предлагает атомистическое моделирование [5–8]. В [7, 8], например, наностержень в буквальном смысле собирают из атомов, обладающих своими типами связей, своей ориентацией и пр. Это позволяет моделировать изменение его энергии, исходя из термодинамического равновесия атомов, что невозможно осуществить на макроуровне. Континуальная же модель предназначена для описания полученных экспериментальных значений энергии в зависимости от соответствующих им значений мер деформации. Если это удастся сделать за счет подбора значений поверхностных упругих модулей, то данную энергию можно назвать энергией деформации и говорить о приемлемости континуальной модели.

В настоящей работе рассматриваются математические аспекты континуального описания результатов атомистического моделирования [7, 8], в частности, верификация числовых значений параметров потенциальной энергии деформации нанокантилевера при изгибе.

2. Потенциальная энергия наностержня. Рассмотрим энергию деформации нанокантилевера длины L с прямоугольным поперечным сечением. Направим ось x вдоль оси стержня: начало координат совместим с центром одного из торцов, на другом торце координата $x = L$. Оси y и z направим перпендикулярно сторонам прямоугольника поперечного сечения.

Определим энергию деформации нанокантилевера как сумму энергий объемной фазы V (с поперечным сечением S) и боковой поверхности S_s без учета торцов (с контуром поперечного сечения P):

$$U = \iiint_V \varphi dV + \iint_{S_s} \gamma dS = \int_0^L dx \left(\iint_S \varphi dS + \oint_P \gamma ds \right), \quad (1)$$

где φ — удельная объемная упругая энергия, согласно закону Гука (с параметрами

Ламе μ и λ) равная

$$\varphi = \frac{1}{2}(2\mu\epsilon^2 + \lambda\text{tr}^2\epsilon), \quad (2)$$

а γ – удельная поверхностная упругая энергия, в соответствии с моделью Стейгмана – Огдена (с поверхностными параметрами Ламе μ_s и λ_s для напряжений, χ_s и ζ_s для моментов и с остаточным поверхностным натяжением τ_0):

$$\gamma = \frac{1}{2}(2\gamma_0 + 2\tau_0\text{tr}\epsilon_s + 2(\mu_s - \tau_0)\epsilon_s^2 + (\lambda_s + \tau_0)\text{tr}^2\epsilon_s + \tau_0(\nabla_s\mathbf{u})^2 + 2\chi_s\kappa_s^2 + \zeta_s\text{tr}^2\kappa_s). \quad (3)$$

Здесь $\mathbf{u}$ – вектор перемещений, ϵ – тензор деформаций, κ – тензор кручения, нижний индекс $(\dots)_s$ для упругих параметров означает принадлежность к боковой поверхности, для тензоров и оператора ∇ – проекцию на соответствующую поверхность грани (т. е. без компонент, относящихся к нормали к поверхности). Заметим, что в случае применения модели поверхностной упругости Гертгина – Мердока в выражении удельной поверхностной энергии (3) будут отсутствовать два последних слагаемых, связанных с тензором кручения.

Для моделирования растяжения и плоского (в Oxz) изгиба наностержня, согласно балочной теории Эйлера – Бернулли, используем статическую гипотезу для нормальных напряжений $\sigma_{xx} \gg \sigma_{yy}, \sigma_{zz}$ (влекущую тождество для продольных деформаций $\epsilon_{yy} = \epsilon_{zz} = -\nu\epsilon_{xx}$) и кинематическую гипотезу плоских сечений об их ортогональности изогнутой оси стержня (приводящую к условию для деформаций сдвига $\epsilon_{xy} = \epsilon_{yz} = \epsilon_{xz} = 0$). Переходя к эквивалентной форме записи удельной энергии объемной фазы (2) для упругого материала, приходим к известному выражению энергии стержня при плоском изгибе

$$\varphi = \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\epsilon} = \frac{1}{2}\sigma_{xx}\epsilon_{xx} = \frac{1}{2}E\epsilon_{xx}^2, \quad (4)$$

где E – модуль Юнга, физическая константа материала, единая для всех точек объема сплошной среды.

Для поверхностных напряжений применение статической гипотезы для нормальных напряжений различно [9]. Например, в [7, 10, 11] полагают, что $\tau_{xx} \gg \tau_{yy}$ на гранях, ортогональных оси z , и $\tau_{xx} \gg \tau_{zz}$ на гранях, ортогональных оси y . Строго говоря, это приводит к избыточному линейному соотношению между продольными деформациями. Альтернативный вариант рассматривается в [12], где в силу неразрывности деформаций считается, что поверхностные напряжения наводятся за счет объемных (т. е., если $\sigma_{yy}, \sigma_{zz} = 0$, то $\tau_{yy}, \tau_{zz} \neq 0$), – ему и последуем. Такой подход приводит к выражению удельной поверхностной энергии (3) не только через поверхностные модули, но и через объемный коэффициент Пуассона ν :

$$\gamma = \frac{1}{2}(2\gamma_0 + 2\tau_0(1-\nu)\epsilon_{xx} + ((2\mu_s + \lambda_s)(1+\nu^2) - 2\nu(\lambda_s + \tau_0))\epsilon_{xx}^2 + (2\chi_s + \zeta_s)\kappa_{xx}^2 + \tau_0 u_{z,x}^2). \quad (5)$$

Окончательное выражение полной энергии деформации (1) получается из сложения интегралов от удельной энергии (4) и (5), вычисленных по поперечному сечению и его периметру после применения кинематической гипотезы Кирхгофа:

$$\epsilon_{xx} = \varepsilon(x) - y\vartheta', \quad \kappa_{xx} = \vartheta', \quad \vartheta = w', \quad u_z = w(x),$$

а именно,

$$\Delta U_t = \frac{1}{2} \int_0^L (2P\tau_0(1-\nu)\varepsilon + SE_t^*\varepsilon^2) dx = S_s\tau_0(1-\nu)\varepsilon + \frac{V}{2}E_t^*\varepsilon^2 \quad (6)$$

есть приращение полной энергии деформации при растяжении (прогиб $w = 0$), а

$$\Delta U_b = \frac{1}{2} \int_0^L (P\tau_0 w'^2 + IE_b^* w''^2) dx = \frac{1}{2} P\tau_0 A + \frac{1}{2} IE_b^* B - \quad (7)$$

при изгибе ($\varepsilon = 0$).

Здесь введены эффективный модуль Юнга при растяжении

$$E_t^* = E + \frac{P}{S} ((2\mu_s + \lambda_s)(1 + \nu^2) - 2\nu(\lambda_s + \tau_0)) \quad (8)$$

и при изгибе

$$E_b^* = E + \frac{I^*}{I} ((2\mu_s + \lambda_s)(1 + \nu^2) - 2\nu(\lambda_s + \tau_0)) + \frac{S^*}{I} (2\chi_s + \zeta_s). \quad (9)$$

В выражениях приращения энергии (6), (7) и эффективных модулей Юнга (8), (9) используются следующие геометрические параметры (приведены их значения в случае квадратного поперечного сечения со стороной h):

$$I = \iint_S y^2 dS = \frac{h^4}{12} \text{ — второй момент поперечного сечения,}$$

$$I^* = \oint_P y^2 ds = \frac{2h^3}{3} \text{ — второй момент контура поперечного сечения,}$$

$$S = h^2 \text{ — площадь, } P = 4h \text{ — периметр поперечного сечения,}$$

$$S_s = LP \text{ — площадь боковой поверхности, } V = LS \text{ — объем стержня,}$$

$$S^* = \oint_P n_y^2 ds = 2h, \mathbf{n} = (n_x, n_y, n_z) \text{ — нормаль к боковой поверхности.}$$

Как видно из формул приращения энергии (6) и (7), эффективные модули Юнга (8) и (9) функционально выполняют ту же роль, что и в макромеханике стержня, хотя присутствуют и дополнительные слагаемые, обусловленные поверхностным натяжением. Сами эффективные модули Юнга (8) и (9) не только выражаются через упругие параметры материала (известные E , ν для объемной фазы и неизвестные μ_s , λ_s , τ_0 , χ_s и ζ_s на поверхности), но связаны еще с геометрическими параметрами поперечного сечения. Это говорит о том, что усредненные по поперечному сечению наностержня упругие свойства не являются постоянными, а зависят от размера поперечного сечения (в макрозадаче они постоянны по объему независимо от размера).

Приведенная континуальная модель позволяет рассмотреть обратную задачу по отысканию неизвестных поверхностных упругих параметров, если известны значения энергии. И первым этапом ее решения является аппроксимация интегралов

$$A = \int_0^L (w')^2 dx, \quad B = \int_0^L (w'')^2 dx, \quad (10)$$

связывающих эффективные упругие модули с приращением энергии изгиба (7).

3. Аппроксимация кривизны по форме прогиба нанокантилевера. В результате атомистического моделирования [7, 8] был рассмотрен нанокантилевер, составленный из атомов Ag и имеющий длину 18 нм, с прямоугольным поперечным сечением и толщиной в диапазоне от 1.6 до 7 нм. На свободном конце нанокантилевера задавалось либо продольное смещение оси стержня (в относительных единицах до 1.2 %), либо поперечное — прогиб (в абсолютных единицах до 0.5 нм). В последнем случае были получены значения прогиба, которые можно представить в виде кортежа $Y = \{0, -0.004, -0.012, -0.028, -0.046, -0.066, -0.088, -0.112, -0.138, -0.166, -0.200, -0.240, -0.290, -0.340, -0.390, -0.440, -0.500, -0.560, -0.630, -0.700, -0.770, -0.840, -0.920, -1.000, -1.080, -1.170, -1.260, -1.360, -1.460, -1.560, -1.660, -1.760, -1.870, -1.980, -2.100, -2.220, -2.340, -2.460, -2.580, -2.700, -2.830, -2.960, -3.090, -3.220, -3.350, -3.480, -3.610, -3.740, -3.870, -4.000, -4.140, -4.280, -4.420, -4.560, -4.700, -4.840, -4.980, -5.120, -5.270, -5.420, -5.570, -5.720, -5.870, -6.020\} \times 0.1$ нм, соответствующего значениям координаты x в диапазоне от 0 до 18 нм (рис. 1).

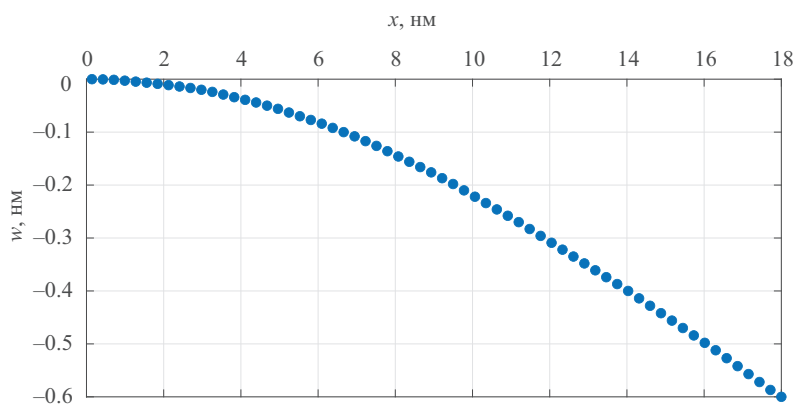


Рис. 1. Дискретные значения прогиба нанокантилевера, полученные атомистическим моделированием [7]

Задача аппроксимации функции по ее дискретным значениям относится к рядовой. Однако нас интересует не сама функция, а ее производная и кривизна (вторая производная) — точнее, интегралы вида (10). Тогда возникает вопрос о верификации аппроксимации данных значений различными типами функций, а именно: насколько будут отличаться интегралы (10) при использовании различных аппроксимирующих функций? С этой целью были рассмотрены три класса функций (две трансцендентные и один кубический многочлен), зависящих от вещественной переменной x и двух параметров a, b :

$$\begin{aligned} w_1(x; a, b) &= b(e^{-a\tilde{x}^2} - 1), \\ w_2(x; a, b) &= -b \operatorname{th}^2 a\tilde{x}, \\ w_3(x; a, b) &= a\tilde{x}^3 + b\tilde{x}^2. \end{aligned} \quad (11)$$

Здесь безразмерная координата $\tilde{x}$ выражает количество нанометров в координате x , т. е. $x = \tilde{x} \cdot 1$ нм, и сами функции w_i , также безразмерные, выражают прогиб w в нанометрах, т. е. $w = w_i \cdot 1$ нм. Выбор вида функций (11) обусловлен кинематическими граничными условиями для кантилевера, выпуклым характером кривой,

а также предположением, что поведение описываемой функции прогиба не должно сильно отличаться от поведения прогиба макрокантилевера:

$$w_i(0; a, b) = 0, \quad w'_i(0; a, b) = 0, \quad w''_i(x; a, b) \leq 0, \quad w_i^{IV}(x; a, b) \simeq 0. \quad (12)$$

Очевидно, что w_3 — общее решение однородного уравнения изгиба для макрокантилевера при удовлетворении первых двух условий (12). Параметр a связан с длиной отрезка изменения x , на котором w_1 и w_2 имеют отрицательную кривизну, параметр b — масштабирующий множитель.

Верификации подвергался именно простейший вариант аппроксимации w_3 , заимствованный из макромеханики, ибо в наномеханике нет четкого представления, какому дифференциальному уравнению удовлетворяет прогиб.

Коэффициенты a и b для аппроксимирующих функций w_1 и w_2 вычислялись при помощи комбинации стохастической аппроксимации (рекуррентного построения последовательности оценок приближения экспериментальных данных) [13, 14] и варианта метода Монте-Карло [15, 16], основанного на простом алгоритме случайного поиска, когда значения неизвестных a и b равномерно распределены в некоторой плоской области евклидова пространства $\mathbb{E}^2$.

В качестве критерия точности аппроксимации экспериментальных значений прогиба использовалось относительное среднеквадратичное отклонение как функция двух переменных a и b

$$\delta(a, b) = \sqrt{\frac{1}{m-1} \sum_{n=1}^m \left(\frac{y_n - w(x_n; a, b)}{y_n} \right)^2},$$

где m — число измерений; y_n и $w(x_n; a, b)$ — экспериментальные и расчетные значения прогиба соответственно.

Пусть $\Theta = (a, b)$ — вектор неизвестных параметров аппроксимирующих функций, а $\tilde{\delta}$ — случайная ошибка аппроксимации. При решении экстремальной задачи нахождения минимума неотрицательной функции $\delta(\Theta)$ определялись соответствующие значения параметров a и b .

В каждом эксперименте метода Монте-Карло компоненты вектора Θ формировались с помощью генератора псевдослучайных чисел. В начале процесса решения экстремальной задачи задавалось $\tilde{\delta}_0$ — стартовое значение случайной ошибки аппроксимации и вычислялось $\delta(\Theta)$ с фиксированными компонентами случайного вектора Θ . Если $\delta(\Theta)$ оказывалось меньше текущего значения случайной ошибки аппроксимации, то $\tilde{\delta}_0$ заменялось на $\tilde{\delta}_1 = \delta(\Theta)$. Снова задавались компоненты случайного вектора Θ при помощи генератора псевдослучайных чисел и вычислялось относительное среднеквадратичное отклонение $\delta(\Theta)$. Если $\delta(\Theta)$ меньше, чем $\tilde{\delta}_1$, то оно заменялось на $\tilde{\delta}_2 = \delta(\Theta)$ и т. д. Таким образом, строилась строго монотонно убывающая последовательность $\tilde{\delta}_0 > \tilde{\delta}_1 > \dots > \tilde{\delta}_n > \dots$ случайных ошибок аппроксимации. Этой последовательности ставилась в соответствие монотонно убывающая последовательность множеств $Q_0 \supset Q_1 \supset \dots \supset Q_n \supset \dots$, где

$$Q_n = \{\Theta \mid \delta(\Theta) < \tilde{\delta}_n\} \subset \mathbb{E}^2.$$

Очевидно, что для $\forall n: Q_n \supset Q_{n+1}$, так как если $\delta(\Theta) < \tilde{\delta}_{n+1}$, то тем более $\delta(\Theta) < \tilde{\delta}_n$.

Последовательность случайных ошибок аппроксимации $\tilde{\delta}_0 > \tilde{\delta}_1 > \dots > \tilde{\delta}_n > \dots$ ограничена снизу, например, нулем. Если ввести ограничение по времени для выбора

компонентов случайного вектора Θ , то для последовательности случайных ошибок аппроксимации всегда можно определить минимальное значение. Обозначим его через $\tilde{\delta}_{\min}$, которому соответствует множество

$$Q_{\min} = \{\Theta \mid \delta(\Theta) < \tilde{\delta}_{\min}\}.$$

По построению $Q_{\min}$ не является пустым.

Отметим, что для получения решения задачи нахождения минимума неотрицательной функции $\delta(\Theta)$ методом Монте-Карло необходимо выполнить серию статистических испытаний (например, 50 раз) с минимальным значением $\tilde{\delta}_{\min}$ случайной ошибки аппроксимации. Затем вычислялись значения a и b как среднее арифметическое соответствующих компонент случайного вектора $\Theta \in Q_{\min}$.

В рассматриваемом случае проблема нахождения глобального минимума остается открытой. Тем не менее, не умаляя общности, можно предположить, что если погрешность аппроксимации не превышает 1–2 %, то результаты приближения экспериментальных значений прогиба можно считать вполне удовлетворительными, даже если найденные значения компонент вектора $\Theta \in Q_{\min}$ соответствуют локальному минимуму, не являющемуся глобальным.

Для расчета коэффициентов a и b многочлена w_3 использовалась более простая процедура — метод наименьших квадратов: для функции двух переменных

$$f(a, b) = \sum_{n=1}^N (w_3(x_n; a, b) - y_n)^2$$

разыскивался локальный минимум из условия стационарности

$$\frac{\partial f(a, b)}{\partial a} = \frac{\partial f(a, b)}{\partial b} = 0.$$

Найденные коэффициенты a и b для функций w_i , а также относительная погрешность аппроксимации заданных значений приведены в табл. 1. Погрешность менее 1 % для всех трех функций говорит о более чем удовлетворительном результате аппроксимации. Графики полученных функций не приведены, поскольку они все фактически проходят через дискретные точки на рис. 1 и ничем не отличаются.

Таблица 1. Значения параметров для аппроксимирующих функций

Параметры	Аппроксимирующие функции		
	w_1	w_2	w_3
a	$1.57 \cdot 10^{-3}$	$3.50 \cdot 10^{-2}$	$4.47 \cdot 10^{-5}$
b	1.51	1.90	$-2.66 \cdot 10^{-3}$
Отн. погрешность, %	0.64	0.62	0.42

Графики w' и w'' (кривизны) для трех аппроксимирующих функций показаны на рис. 2. Они также схожи между собой, но все-таки отличаются кривизной, прежде всего от прямой, задаваемой многочленом w_3 .

Наконец, значения интегралов (10), которые в паре с эффективными модулями определяют приращение энергии деформации при изгибе, приведены в табл. 2. Ее данные показывают, что вычисленные значения подлежащих верификации интегралов A и B (10) для разных классов аппроксимирующих функций отличаются не более чем на 1 %, т. е. фактически дают одинаковый результат.

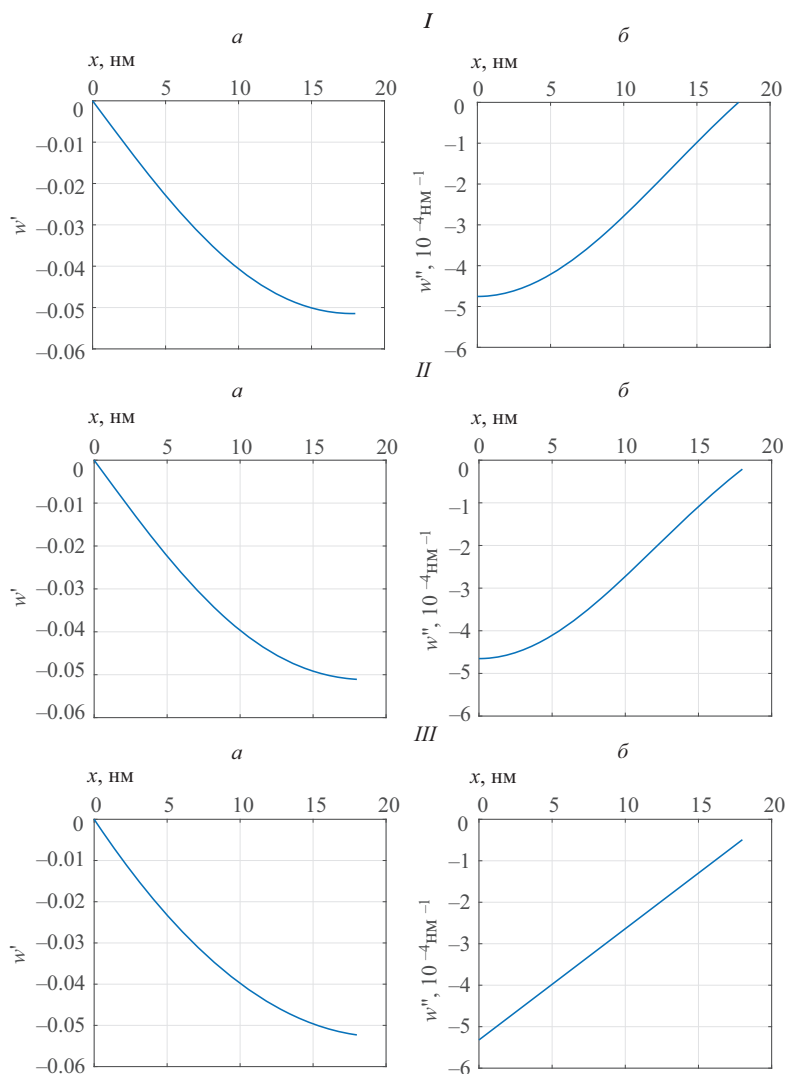


Рис. 2. Графики w' (а) и w'' (б) для аппроксимирующих функций w_1 (I), w_2 (II) и w_3 (III)

Таблица 2. Значения интегралов A и B для аппроксимирующих функций

Интегралы (10)	Аппроксимирующие функции		
	w_1	w_2	w_3
$A = \int_0^L (w')^2 dx, \text{ нм}$	2.47	2.47	2.45
$B = \int_0^L (w'')^2 dx, \text{ нм}^{-1}$	$1.89 \cdot 10^{-6}$	$1.88 \cdot 10^{-6}$	$1.88 \cdot 10^{-6}$

4. Заключение. В рамках континуального подхода рассмотрено приращение энергии деформации наностержня с учетом поверхностной упругости, моделирующей неоднородность сплошной среды на ее границе. Выведены усредненные по поперечно-

му сечению эффективные модули Юнга при растяжении и при изгибе, аналогичные макромеханике, но не являющиеся постоянными материала в зависимости от размеров поперечного сечения наностержня. По данным атомистического моделирования изгиба нанокантилевера изучена аппроксимация прогиба на трех семействах функций с целью верификации значений функциональной части энергии изгиба. Полученные результаты позволяют утверждать, что континуальное описание, основанное на учете поверхностных напряжений, соответствует физическим реалиям, поскольку было апробировано на разных семействах аппроксимирующих функций, и во всех случаях был получен результат, отличающийся не более чем на 1 %. Это позволяет решить обратную задачу: об определении поверхностных упругих модулей как параметров аппроксимации эффективных упругих модулей, найденных по значениям энергии.

Произведенная верификация вычислительных алгоритмов необходима в тех случаях, когда физический эксперимент над реальными объектами невозможен.

Литература

1. Gurtin M. E., Murdoch A. I. A continuum theory of elastic material surfaces // Archive for Rational Mechanics and Analysis. 1975. Vol. 57. P. 291–323.
 2. Gurtin M. E., Murdoch A. I. Surface stress in solids // International Journal of Solids Structures. 1978. Vol. 14. P. 431–440.
 3. Steigmann D. J., Ogden R. W. Plane deformations of elastic solids with intrinsic boundary elasticity // Proceedings of the Royal Society of London. Series A (Mathematical and Physical Sciences). 1997. Vol. 453. P. 853–977.
 4. Steigmann D. J., Ogden R. W. Elastic surface-substrate interactions // Proceedings of the Royal Society of London. Series A (Mathematical and Physical Sciences). 1999. Vol. 455. P. 437–474.
 5. Miller R. E., Shenoy V. B. Size effect elastic properties of nanosized structural elements // Nanotechnology. 2000. Vol. 11. P. 139–147.
 6. Shenoy V. B. Atomistic calculations of elastic properties of metallic fcc crystal surfaces // Physical Review B. 2005. Vol. 71. Art. N 094104.
 7. Chhapadia P., Mohammadi P., Sharma P. Curvature-dependent surface energy and implications for nanostructures // Journal of the Mechanics and Physics of Solids. 2011. Vol. 59. P. 2103–2115.
 8. Chhapadia P., Mohammadi P., Sharma P. Erratum to: “Curvature-dependent surface energy and implications for nanostructures” // Journal of the Mechanics and Physics of Solids. 2012. Vol. 60. P. 1241–1242.
 9. Nanocantilever Beams: Modeling, Fabrication, and Applications. Ed. I. Eds I. Voiculescu, M. Zaghoul. New York: Jenny Stanford Publ., 2016. 544 p.
 10. Bochkarev A. Buckling of a nano-rod with taken into account of surface effect // Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik. 2024. Vol. 104. N e202300738.
 11. Кондратьева А. Д. Выпучивание под собственным весом нанокантилевера с упругим поворотом // Процессы управления и устойчивость. 2024. Т. 11. Вып. 27. С. 112–120.
 12. Zhang G. I., Gao X. L., Guo Z. W. A new model for spatial rods incorporating surface energy effects // Mathematics and Mechanics of Solids. 2024. Vol. 29 (8). P. 1646–1666.
 13. Невельсон М. Б., Хасьминский Р. З. Стохастическая аппроксимация и рекуррентное оценивание. М.: Наука, 1972. 304 с.
 14. Robbins H., Monro S. A stochastic approximation method // Annals of Mathematical Statistics. 1951. Vol. 22. N 1. P. 400–407.
 15. Kroese D. P., Taimre T., Botev Z. I. Handbook of Monte Carlo methods. New York: John Wiley & Sons, 2011. 772 p.
 16. Ермаков С. М. Метод Монте-Карло и смежные вопросы. М.: Наука, 1975. 472 с.
- Статья поступила в редакцию 22 октября 2024 г.
Статья принята к печати 9 декабря 2024 г.

Контактная информация:

Бочкарев Анатолий Олегович — канд. физ.-мат. наук, доц.;
<https://orcid.org/0000-0002-5908-3045>, a.bochkarev@spbu.ru

Continual approximation of the nanocantilever stain energy*

A. O. Bochkarev, A. V. Orekhov

St. Petersburg State University, 7–9, Universitetskaya nab., St. Petersburg,
199034, Russian Federation

For citation: Bochkarev A. O., Orekhov A. V. Continual approximation of the nanocantilever stain energy. *Vestnik of Saint Petersburg University. Applied Mathematics. Computer Science. Control Processes*, 2025, vol. 21, iss. 1, pp. 5–15. <https://doi.org/10.21638/spbu10.2025.101> (In Russian)

Unlike macromechanics, the elastic characteristics of nanoobjects cease to be constants in the usual sense, as volume-averaged coefficients of the constitutive relationships, and become dependent on its size. Therefore, these elastic moduli are called effective. An important aspect of continual nanomechanics is that these moduli are problematic to measure in a classical way, for example, on a nanostand. Instead, they resort to various types of atomistic modeling, in particular the simulation of nanocantilever bending under the absolute displacement of its free edge. As a result, using solid state physics, the displacement of its atoms and the energy change are determined. Verification of the obtained experimental data is important and is a necessary stage for their adequate mathematical description. In this work, the problem of continual description of the bending energy of a nanorod and of its deflection is considered taking into account surface elasticity. Experimental data on nanocantilever bending are approximated in two classes of transcendental functions and a cubic polynomial. The approximation error is estimated and the integral of the functional part of the potential energy of deformation is calculated.

Keywords: nanocantilever, surface elasticity, bending energy, effective elastic moduli.

References

1. Gurtin M. E., Murdoch A. I. A continuum theory of elastic material surfaces. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, 1975, vol. 57, pp. 291–323.
2. Gurtin M. E., Murdoch A. I. Surface stress in solids. *International Journal of Solids Structures*, 1978, vol. 14, pp. 431–440.
3. Steigmann D. J., Ogden R. W. Plane deformations of elastic solids with intrinsic boundary elasticity. *Proceedings of the Royal Society of London, Series A (Mathematical and Physical Sciences)*, 1997, vol. 453, pp. 853–977.
4. Steigmann D. J., Ogden R. W. Elastic surface-substrate interactions. *Proceedings of the Royal Society of London, Series A (Mathematical and Physical Sciences)*, 1999, vol. 455, pp. 437–474.
5. Miller R. E., Shenoy V. B. Size effect elastic properties of nanosized structural elements. *Nanotechnology*, 2000, vol. 11, pp. 139–147.
6. Shenoy V. B. Atomistic calculations of elastic properties of metallic fcc crystal surfaces. *Physical Review B*, 2005, vol. 71, art. no. 094104.
7. Chhapadia P., Mohammadi P., Sharma P. Curvature-dependent surface energy and implications for nanostructures. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2011, vol. 59, pp. 2103–2115.
8. Chhapadia P., Mohammadi P., Sharma P. Erratum to: “Curvature-dependent surface energy and implications for nanostructures”. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2012, vol. 60, pp. 1241–1242.
9. *Nanocantilever Beams: Modeling, Fabrication, and Applications*. Ed. 1. Eds I. Voiculescu, M. Zaghoul. New York, Jenny Stanford Publ., 2016. 544 p.
10. Bochkarev A. Buckling of a nano-rod with taken into account of surface effect. *Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik*, 2024, vol. 104, art. no. e202300738.

* This research was supported by the Russian Science Foundation, project N 22-11-00087, <https://rscf.ru/project/22-11-00087/>.

11. Kondratyeva A. D. Vypuchivanie pod sobstvennym vesom nanokantilevera s uprugim povorotom [Self-weight buckling of a nanocantilever on an elastic substrate]. *Protsessy upravleniia i ustoiichivost'* [Control Processes and Stability], 2024, vol. 11 (27), pp. 112–120. (In Russian)
12. Zhang G. I., Gao X. L., Guo Z. W. A new model for spatial rods incorporating surface energy effects. *Mathematics and Mechanics of Solids*, 2024, vol. 29 (8), pp. 1646–1666.
13. Nevelson M. B., Khas'minskii R. Z. *Stokhasticheskaia approksimatsiia i rekurrentnoe otsenivanie* [Stochastic approximation and recurrent estimation]. Moscow, Nauka Publ., 1972, 304 p. (In Russian)
14. Robbins H., Monro S. A stochastic approximation method. *Annals of Mathematical Statistics*, 1951, vol. 22 (1), pp. 400–407.
15. Kroese D. P., Taimre T., Botev Z. I. *Handbook of Monte Carlo methods*. New York, John Wiley & Sons Publ., 2011, 772 p.
16. Ermakov S. M. *Metod Monte-Karlo i smezhnye voprosy* [Monte Carlo method and related topics]. Moscow, Nauka Publ., 1975, 472 p. (In Russian)

Received: October 22, 2024.

Accepted: December 9, 2024.

A u t h o r s ' i n f o r m a t i o n :

Anatoli O. Bochkarev — PhD in Physics and Mathematics, Associate Professor;
<https://orcid.org/0000-0002-5908-3045>, a.bochkarev@spbu.ru

Andrey V. Orekhov — Senior Lecturer; <https://orcid.org/0000-0001-7641-956X>, a.orekhov@spbu.ru