

УДК 539.3+539.4

## АНОМАЛИИ МЕХАНИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК НАНОРАЗМЕРНЫХ ОБЪЕКТОВ

© 2001 г. А. М. Кривцов, академик Н. Ф. Морозов

Поступило 18.07.2001 г.

Бурное развитие нанотехнологий в последние годы привело к необходимости построения адекватных аналитических моделей, позволяющих описать физико-механические свойства объектов наноразмерного масштабного уровня. В большинстве существующих моделей подобного рода принимается, что основные механические характеристики нанобъектов совпадают со своими значениями, полученными из макроскопических экспериментов. Однако, когда речь идет о структурах, содержащих всего несколько слоев атомов, не может не сказываться противоречие между очевидной дискретностью рассматриваемого объекта и непрерывностью его описания. Несответствие между значениями модулей упругости, полученных из микро- и макроэкспериментов, отмечалось многими исследователями. В частности, одним из методов определения упругих характеристик нанобъектов является исследование микрорельефа, образующегося при растяжении образца, имеющего ультратонкое покрытие [1–3]. Решение эквивалентной непрерывной задачи позволяет из подобных экспериментов определить коэффициент Пуассона и модуль Юнга покрытия [2, 4, 5]. Однако полученные таким образом значения упругих характеристик обнаруживают существенное расхождение со своими макроскопическими значениями.

В предлагаемой работе в качестве модели для исследования влияния масштабного фактора на механические характеристики материала используется двумерная полоса из монокристаллического материала, обладающего гексагональной плотноупакованной (ГПУ) решеткой. Взаимодействие между атомами считается парным. Основной задачей данной работы является определение зависимости коэффициента Пуассона и модуля Юнга конечного (в одном из направлений) монокристалла от числа атомарных слоев.

Рассмотрим двумерный монокристалл, изображенный на рис. 1, имеющий бесконечную дли-

ну в направлении  $x$  и  $N \geq 2$  атомарных слоев в направлении  $y$ . Каждый атом взаимодействует только с ближайшими соседями, как показано на рис. 1. К атомам на торцах кристалла приложены постоянные растягивающие силы  $Q$ . Рассматриваемое деформированное состояние монокристалла полностью определяется расстоянием  $a$  между соседними атомами в каждом слое и расстоянием  $h$  между слоями. Обозначим символом  $b$  расстояние между ближайшими атомами в соседних слоях (рис. 1). Очевидно  $b^2 = \frac{a^2}{4} + h^2$ . В недеформированном состоянии решетка состоит из равнобедренных треугольников с ребром  $a = b = a_0$ , а торцевая нагрузка отсутствует ( $Q = 0$ ). Пусть  $F(r)$  – сила взаимодействия между двумя атомами, разделенными расстоянием  $r$  (положительным считается притяжение). Тогда, проецируя на направление  $y$  уравнение равновесия атома, находящегося на поверхности кристалла, получим

$$Q = 2\frac{h}{b}F(b) \Rightarrow \sigma_2 \stackrel{\text{def}}{=} \frac{Q}{a} = 2\frac{h}{ab}F(b). \quad (1)$$

Здесь  $\sigma_2$  – нормальное напряжение в направлении  $y$ . Разрежем теперь мысленно кристалл вертикальной прямой  $AB$  (рис. 1). Суммарная нормальная сила, действующая со стороны одной части кристалла на другую, равна

$$H\sigma_1 = NF(a) + (N-1)\frac{a}{2b}F(b). \quad (1a)$$

Здесь  $\sigma_1$  – нормальное напряжение в направлении  $x$ ,  $H$  – толщина кристалла (его протяженность в направлении  $y$ ). Величина  $H$  принципиально не может быть определена однозначно. Например, если положить, что толщина кристалла равна расстоянию между слоями атомов, лежащими на противоположных торцах (рис. 1), то тогда  $H = (N-1)h$ . Но, с другой стороны, вполне резонно определить толщину кристалла как произведение числа слоев на толщину одного слоя, что приводит к формуле  $H = Nh$ . Поэтому обозначим

$$H \stackrel{\text{def}}{=} N_*h, \quad N-1 \leq N_* \leq N, \quad (2)$$

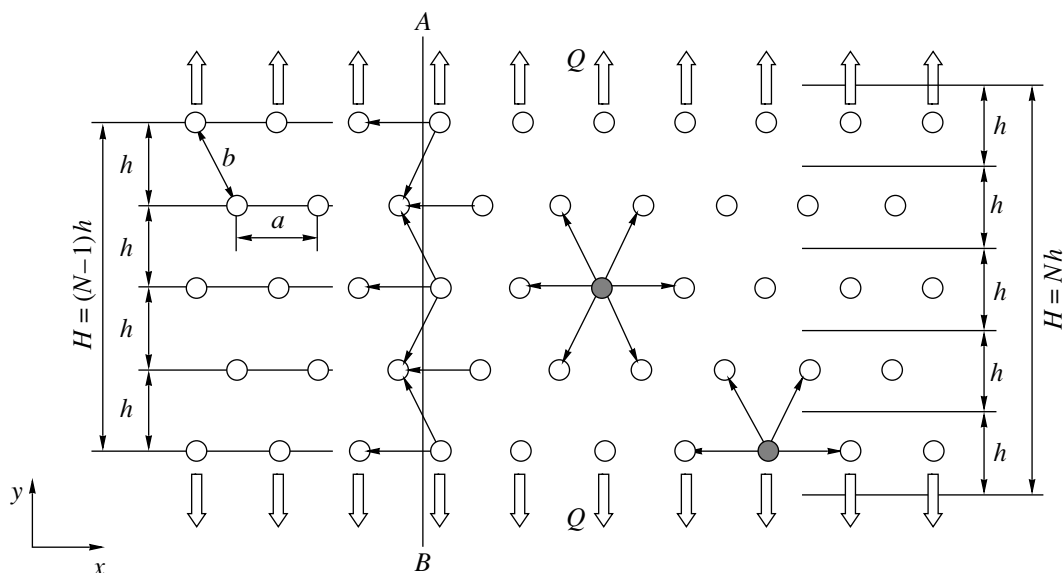


Рис. 1. Двумерная монокристаллическая полоса.

где  $N_*$  – величина, отражающая произвол в определении  $H$ . В силу малости деформаций, силы, действующие в кристалле, могут быть приближенно записаны в виде

$$F(a) = C\Delta a, \quad F(b) = C\Delta b, \quad C \stackrel{\text{def}}{=} F'(a_0) > 0, \quad (3)$$

где  $C$  имеет смысл жесткости межатомной связи, а  $\Delta$  означает отклонение величины от ее значения, соответствующего недеформированному кристаллу. Деформации кристалла в направлениях  $x$  и  $y$  обозначим  $\epsilon_1$  и  $\epsilon_2$ , где

$$\epsilon_1 \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\Delta a}{a_0}, \quad \epsilon_2 \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\Delta h}{h_0}, \quad h_0 \equiv \frac{\sqrt{3}a_0}{2}. \quad (4)$$

Подстановка (2), (3) и (4) в (1) и (1a) дает соотношения упругости

$$\sigma_1 = \frac{\sqrt{3}}{12} \frac{C}{N_*} ((9N-1)\epsilon_1 + 3(N-1)\epsilon_2), \quad (5)$$

$$\sigma_2 = \frac{\sqrt{3}}{4} C(\epsilon_1 + 3\epsilon_2).$$

Из (5) видно, что рассматриваемый кристалл анизотропен. Напомним, что бесконечный кристалл с ГПУ кристаллической решеткой изотропен, а стало быть полученная анизотропия – проявление масштабного фактора. Обозначим

$$v_1 \stackrel{\text{def}}{=} -\frac{\epsilon_2}{\epsilon_1} \Big|_{\sigma_2=0}, \quad E_1 \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\sigma_1}{\epsilon_1} \Big|_{\sigma_2=0};$$

$$v_2 \stackrel{\text{def}}{=} -\frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \Big|_{\sigma_1=0}, \quad E_2 \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\sigma_2}{\epsilon_2} \Big|_{\sigma_1=0}.$$

Здесь  $v_1$  и  $E_1$  – коэффициент Пуассона и модуль Юнга при растяжении вдоль оси  $x$ , величины  $v_2$  и  $E_2$  соответствуют растяжению вдоль оси  $y$ . Используя соотношения (5), получим

$$v_1 = v_\infty, \quad E_1 = \frac{N}{N_*} E_\infty;$$

$$v_2 = \frac{N-1}{N-1/9} v_\infty, \quad E_2 = \frac{N}{N-1/9} E_\infty.$$

Здесь  $v_\infty = \frac{1}{3}$ ,  $E_\infty = \frac{2C}{\sqrt{3}}$  – значения модуля Юнга и коэффициента Пуассона, соответствующие бесконечному кристаллу [6, 7]. Рассмотрим полученные формулы. При растяжении вдоль атомарных слоев модуль Юнга  $E_1$  существенно зависит от величины  $N_*$ , т.е. от того, как определяется толщина нанокристаллической полосы. Если положить  $N_* = N$  (максимальное значение  $N_*$ ), то тогда при растяжении вдоль атомарных слоев коэффициент Пуассона и модуль Юнга не зависят от числа слоев. Связано это, очевидно, с тем, что в продольном направлении рассматриваемый кристалл бесконечен. Модуль Юнга  $E_1^{\text{max}}$ , соответствующий минимальному значению  $N_* = N - 1$ , напротив, отнюдь не постоянен, он увеличивается при уменьшении числа атомарных слоев, достигая при  $N = 2$  значения, в два раза превышающего  $E_\infty$  (табл. 1). Таким образом, неоднозначность в определении модуля Юнга оказывается весьма существенной для малых  $N$ . При растяжении перпендикулярно атомарным слоям и коэффициент

Пуассона, и модуль Юнга зависят от  $N$ , причем при уменьшении числа слоев коэффициент Пуассона убывает, а модуль Юнга возрастает. Их значения для разных  $N$  сведены в табл. 1. Отметим, что при  $N = 2$  коэффициент Пуассона почти в два раза меньше  $\nu_\infty$ . При  $N \rightarrow \infty$  упругие модули стремятся к значениям, соответствующим бесконечному кристаллу, которые не зависят от направления деформирования.

На основании проведенных исследований перечислим основные свойства, специфичные для нанокристаллов.

1. Для модуля Юнга нанокристалла определяется лишь возможный интервал значений, что связано с невозможностью однозначного определения размеров нанобъекта.

2. Упругие характеристики нанокристалла существенно зависят от числа атомарных слоев, формирующих нанокристалл.

3. Форма и размеры нанокристалла вносят дополнительную анизотропию в его упругие свойства.

Перечисленные эффекты получены на основании весьма упрощенной модели. Однако, если они проявляются для простейшего нанокристалла, то тем более они должны играть существенную роль и для более сложных нанокристаллических объектов. Указанная неоднозначность в определении модуля Юнга, очевидно, проявляется для всех механических характеристик, в определение которых существенно входит понятие размера нанобъекта; в частности, неоднозначно определяется удельная энергия деформирования, отнесенная к единице объема.

В данной работе учитывалось взаимодействие только соседних атомов в кристаллической решетке. Можно показать, что учет дальнейших соседей приводит к усилению влияния масштабного фактора, особенно в трехмерном случае.

Таким образом, понятия классической механики сплошной среды, в том числе теории упругости, должны использоваться с большой осторожностью при их применении к нанобъектам. Обязательно необходимо учитывать изменение

**Таблица 1.** Зависимость коэффициента Пуассона и модуля Юнга нанокристалла от числа атомарных слоев

$N$	$E_1^{\max}/E_\infty$	$\nu_2$	$\nu_2/\nu_\infty$	$E_2/E_\infty$
2	2.00	0.18	0.53	1.06
3	1.50	0.23	0.69	1.04
4	1.33	0.26	0.77	1.03
5	1.25	0.27	0.82	1.02
10	1.11	0.30	0.91	1.01
20	1.05	0.32	0.96	1.01
50	1.02	0.33	0.98	1.00
100	1.01	0.33	0.99	1.00

механических характеристик при приближении масштабов рассматриваемого объекта к нанометровым. Особое внимание следует уделять величинам, принципиально неоднозначным на нанометровом уровне (таким, как модуль Юнга). При их использовании необходимо четко определять, что именно понимается под указанными величинами в применении к нанобъектам.

Данная работа выполнена при поддержке грантов Российского фонда фундаментальных исследований (9907–90443 и 0001–00489).

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Вольнский А.Л., Чернов И.В., Бакеев Н.Ф.* // ДАН, 1997. Т. 355. № 4. С. 491–493.
2. *Баженов С.Л., Вольнский А.Л., Воронина Е.Е., Бакеев Н.Ф.* // ДАН. 1999. Т. 367. № 1. С. 75–77.
3. *Байдаровцев Ю.П., Савенков Г.Н., Тарасенко В.А.* // Высокомолекуляр. соединения. Сер. А. 1999. Т. 41. № 8. С. 1302–1307.
4. *Быков Д.Л., Коновалов Д.Н.* Тр. XXXVI Междунар. сем. "Актуальные проблемы прочности". Витебск, 2000. С. 428–433.
5. *Быков Д.Л., Коновалов Д.Н.* // Вестн. Тамбов. гос. ун-та. 2000. Т. 5. № 314. С. 224–226.
6. *Кривцов А.М.* // Тр. СПбГТУ. 1992. Т. 443. С. 9–17.
7. *Krivtsov A.M.* // ZAMM. 1999. V. 79. № S2. P. 419–420.