

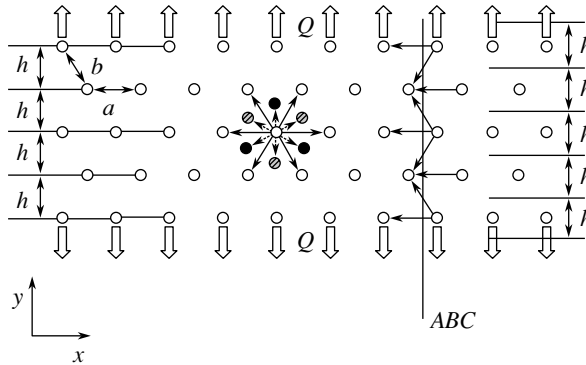
**ВЛИЯНИЕ МАСШТАБНОГО ФАКТОРА НА МОДУЛИ УПРУГОСТИ
ТРЕХМЕРНОГО НАНОКРИСТАЛЛА**

Рассматривается трехмерный нанокристалл, имеющий гранецентрированную кубическую решетку. Кристалл содержит конечное число слоев по одному из направлений (x, y, z) и бесконечное по двум другим направлениям (нанопластина), а также бесконечное число слоев по одному из направлений и конечное по двум другим направлениям (нанобрус). Для данных моделей определяются значения модулей упругости – коэффициентов Пуассона и модулей Юнга в трех направлениях и исследуется зависимость этих значений от размеров нанокристалла. Показано, что тензор упругости рассматриваемого кристалла не является симметричным. Размер кристалла по направлению, содержащему конечное число слоев, определяется неоднозначно, что приводит к неоднозначности в определении его механических характеристик. Определяется зависимость модулей упругости от размеров кристалла в различных направлениях, причем показано, что для модулей Юнга существенным оказывается способ определения размеров нанокристалла.

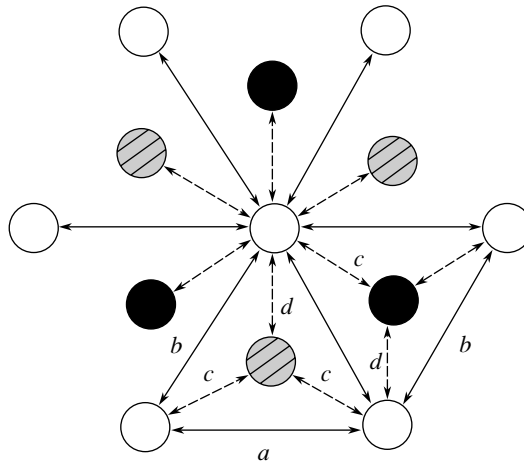
Работа является продолжением исследований влияния масштабного фактора на механические характеристики материала, начатых авторами для двухмерной полосы из монокристаллического материала, обладающего гексагональной плотноупакованной (ГПУ) решеткой. В публикуемой работе исследования были продолжены для трехмерного случая, показан переход к двухмерной модели. Дается оценка масштабных эффектов, возникающих при применении континуальной теории упругости к нанообъектам.

1. Введение. С развитием нанотехнологий возникла необходимость в построении адекватных аналитических моделей, которые бы описывали механические свойства объектов наноразмерного масштабного уровня. Следует особо выделить “адекватных”, так как многими исследователями отмечалось несоответствие между значениями основных механических характеристик, полученных из микро- и макроэкспериментов [1]–[3]. Вероятно, это несоответствие можно объяснить противоречием между очевидной дискретностью рассматриваемого объекта и континуальностью его описания. Публикуемая работа посвящена исследованию того, насколько подобная дискретность может влиять на значения модулей упругости материала и является развитием и продолжением работ [4]–[6].

В [4, 5] в качестве модели для исследования влияния масштабного фактора на механические характеристики материала рассматривалась двухмерная полоса из монокристаллического материала, обладающего гексагональной плотноупакованной (ГПУ) решеткой (треугольной решеткой). В двухмерном случае это единственная плотноупакованная решетка. Для обобщения исследований на трехмерное пространство был выбран монокристалл, обладающий гранецентрированной кубической решеткой. Эта решетка не единственная плотноупакованная, однако она была выбрана по нескольким причинам. Решетка весьма простая и широко распространена, такой решеткой



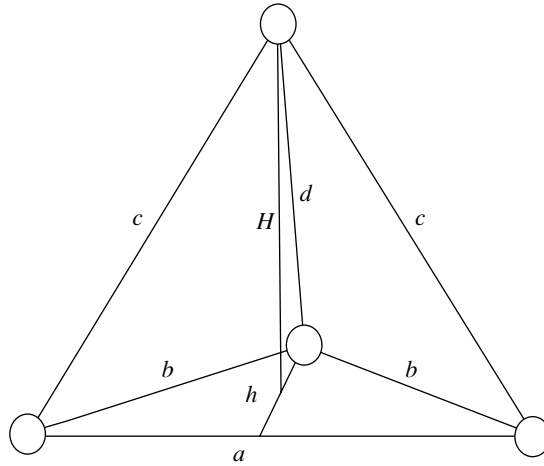
Фиг. 1



Фиг. 2

обладают многие металлы. Кроме того, если рассмотреть сечение, перпендикулярное главной диагонали куба (направление 111), то можно получить двухмерную ГПУ решетку, что позволяет сравнить результаты, полученные для трехмерного случая с двухмерным [4, 5]. В работе также рассматривается направление вдоль ребра кубической решетки (направление 100), а результаты сравниваются с [7]. Взаимодействие между атомами считается парным. Для определения модулей упругости рассматривается задача трехостного растяжения монокристалла (без учета сдвига), в кристалле учитывается взаимодействие только ближайших атомов.

2. Исследование масштабной зависимости модулей упругости для кристалла в направлении 111. Рассмотрим трехмерный монокристалл. Будем считать, что он имеет бесконечную длину в направлении x , содержит N_y слоев в направлении y и N_z слоев в направлении z , т.е. получаем вытянутый вдоль оси x брус. В качестве кристаллической решетки, как было сказано выше, выбрана гранецентрированная кубическая решетка и рассматривается направление вдоль главной диагонали куба. На фиг. 1 изображено сечение кристалла плоскостью xy . Атомы, находящиеся в одной плоскости, обозначены светлыми кружками. Штрихованными и темными кружками обозначены атомы,



Фиг. 3

находящиеся в верхнем и нижнем слоях по отношению к изображенному на рисунке. К атомам на торцах кристалла приложены постоянные растягивающие силы Q .

Ограничимся случаем, когда каждый атом взаимодействует только с ближайшими соседями. Расстояние между ближайшими атомами в недеформированном кристалле обозначим a_0 . При произвольном растяжении кристалла в трех взаимно перпендикулярных направлениях x , y и z расстояния между ближайшими соседями, очевидно, изменятся; обозначим их, соответственно, a , b , c и d – (см. фиг. 2), где показан фрагмент решетки с указанием расстояний между соседними атомами. Символами a и b обозначены длины связей между атомами, принадлежащими одной плоскости xy (сплошные линии), c и d – длины связей между атомами из различных плоскостей (штриховые линии). В недеформированном состоянии решетка симметрична и справедливо следующее равенство:

$$a = b = c = d \equiv a_0 \quad (2.1)$$

Обозначим h – расстояние между горизонтальными слоями в плоскости xy (фиг. 1); H – расстояние между соседними атомными плоскостями xy (фиг. 3). Обозначим толщину кристалла L_y (протяженность кристалла в направлении y). Толщина L_y не может быть определена однозначно [4, 5]. Например, если положить, что толщина кристалла равна расстоянию между слоями атомов, лежащими на противоположных торцах, то тогда $L_y = (N_y - 1)h$ (фиг. 1). Но, с другой стороны, можно определить толщину кристалла как произведение числа слоев на толщину одного слоя, что приводит к формуле $L_y = N_y h$. Поэтому обозначим

$$L_y \stackrel{\text{def}}{=} N_y^* h, \quad N_y - 1 \leq N_y^* \leq N_y \quad (2.2)$$

где N_y^* – величина, отражающая произвол в определении L_y . Аналогично можно получить для высоты кристалла L_z (его протяженности в направлении z):

$$L_z \stackrel{\text{def}}{=} N_z^* H, \quad N_z - 1 \leq N_z^* \leq N_z \quad (2.3)$$

где N_z^* – величина, отражающая произвол в определении L_z .

Пусть $F(r)$ – сила взаимодействия между двумя атомами, разделенными расстоянием r , причем положительным будет считаться притяжение. Разрежем теперь мысленно кристалл плоскостью, перпендикулярной направлению x (плоскость ABC на фиг. 1). Суммарная нормальная сила, действующая со стороны одной части кристалла на другую, равна

$$S_1\sigma_1 = N_y N_z F(a) + N_z(N_y - 1)F(b)/2 + (N_y - p)(N_z - 1)F(c)/2 \quad (2.4)$$

где σ_1 – нормальное напряжение на торцах кристалла (нормальное напряжение в направлении x); p – коэффициент, который принимает значение 1 при N_y , кратном 3 и значение 0 при N_y , не кратном 3; S_1 – площадь сечения, на которое приходится нормальное напряжение.

Для направления y нормальное напряжение можно получить, поделив сумму сил, действующих на внешней грани кристалла и обеспечивающих его однородное деформирование, на площадь этой грани. В кристалле существует три различных слоя в плоскостях xy . Присвоим нижнему слою, изображенному на фиг. 2 темными кружками, номер 1; среднему слою, состоящему из светлых кружков, номер 1; и верхнему слою из штрихованных кружков – номер 3. Слои идут строго друг за другом, периодически повторяясь. Для тонких нанобрусков имеет значение не только количество слоев атомов, но и с какого слоя начинается и на каком заканчивается кристалл. Таким образом, суммарную нормальную силу, действующую на внешней грани xz , можно записать в виде

$$S_2\sigma_2 = 2N_z F(b)\frac{\sqrt{3}}{2} + \frac{1}{3}(2N_z - k_1)F(c)\frac{\sqrt{3}}{6} + \frac{1}{3}(2N_z - k_2)F(d)\frac{\sqrt{3}}{3} \quad (2.5)$$

где σ_2 – нормальное напряжение в направлении y ; k_1, k_2 – поправки, вносимые геометрией кристалла: k_1 может принимать значения $-2, 0, 2, 4, 6$; k_2 – $0, 1, 2, 3, 4$. Конкретные значения поправок определяются остатком от деления числа слоев на 3 и тем, с какого именно слоя начинается кристалл (всего существует 9 вариантов комбинаций k_1, k_2).

Аналогично, для направления z получаем

$$S_3\sigma_3 = 2(N_y - p)F(c)\sqrt{2/3} + (N_y - (1 - p))F(d)\sqrt{2/3} \quad (2.6)$$

где σ_3 – нормальное напряжение в направлении z .

Площади сечений S_1, S_2, S_3 определяются формулами

$$S_1 = L_y L_z, \quad S_2 = a_0 L_z, \quad S_3 = a_0 L_y \quad (2.7)$$

Как следует из формул (2.7), для направлений y и z берется лишь часть площади соответствующей грани, соответствующая минимальному периоду кристаллической решетки вдоль этой грани.

Выразим теперь правые части соотношений (2.4)–(2.6) через деформации кристалла. Для этого обозначим

$$a = a_0 + \Delta a, \quad h = h_0 + \Delta h, \quad H = H_0 + \Delta H \quad (2.8)$$

Будем считать величины $\Delta a, \Delta h, \Delta H$ малыми по сравнению с a_0 . В силу малости деформаций, силы, действующие в кристалле, могут быть приближенно записаны в виде

$$F(a) = C\Delta a, \quad F(b) = C\Delta b, \quad F(x) = C\Delta c, \quad F(d) = C\Delta d \\ C \stackrel{\text{def}}{=} F'(a_0) > 0 \quad (2.9)$$

где C имеет смысл жесткости межатомной связи. Величины Δa , Δh , ΔH , Δb , Δc и Δd связаны с деформациями кристалла соотношениями

$$\begin{aligned} \Delta a &= a_0 \varepsilon_1, \quad \Delta h = h_0 \varepsilon_2 = \frac{\sqrt{3}}{2} a_0 \varepsilon_2, \quad \Delta H = H_0 \varepsilon_3 = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} a_0 \varepsilon_3 \\ \Delta b &= \frac{a_0}{4} (\varepsilon_1 + 3\varepsilon_2), \quad \Delta c = \frac{a_0}{12} (3\varepsilon_1 + \varepsilon_2 + 8\varepsilon_3), \quad \Delta d = \frac{a_0}{3} (\varepsilon_2 + 2\varepsilon_3) \end{aligned} \quad (2.10)$$

Здесь ε_1 , ε_2 и ε_3 – деформации кристалла в направлениях x , y и z соответственно. Общие соотношения упругости для нормальных напряжений имеют вид:

$$\begin{aligned} \sigma_1 &= C_{11} \varepsilon_1 + C_{12} \varepsilon_2 + C_{13} \varepsilon_3 \\ \sigma_2 &= C_{21} \varepsilon_1 + C_{22} \varepsilon_2 + C_{23} \varepsilon_3 \\ \sigma_3 &= C_{31} \varepsilon_1 + C_{32} \varepsilon_2 + C_{33} \varepsilon_3 \end{aligned} \quad (2.11)$$

Приводя уравнения (2.4)–(2.6) к аналогичному виду с использованием соотношений (2.7)–(2.10), получим следующие формулы для коэффициентов жесткости:

$$\begin{aligned} C_{11} &= \frac{(9N_y - 1)N_z + N_y(N_z - 1)}{N_y^* N_z^*} \frac{1}{4} G, \quad C_{12} = \frac{9N_z(N_y - 1) + N_y(N_z - 1)}{N_y^* N_z^*} \frac{1}{12} G, \\ C_{13} &= \frac{N_y(N_z - 1)}{N_y^* N_z^*} \frac{2}{3} G \\ C_{21} &= \frac{(N_z - 0.1)5}{N_z^*} G, \quad C_{22} = \frac{(N_z - 0.1)5}{N_z^*} \frac{1}{2} G, \quad C_{23} = \frac{(N_z - 1)2}{N_z^*} \frac{1}{3} G \\ C_{31} &= \frac{N_y 2}{N_y^* 3} G, \quad C_{32} = \frac{(3N_y - 2)2}{3N_y^*} \frac{1}{3} G, \quad C_{33} = \frac{(3N_y - 1)8}{3N_y^*} \frac{1}{3} G \end{aligned} \quad (2.12)$$

Данные формулы получены для случая, когда поправки имеют значения $p = 0$, $k_1 = k_2 = 2$, что соответствует нанокристаллу, у которого число атомарных слоев равно $3n + 1$, где n – некоторое целое число. Для других N эти значения поправок представляют собой среднее значение от трех возможных вариантов, когда на нижнюю грань кристалла приходится соответственно слой 1, 2 или 3.

Отметим, что согласно полученным формулам для коэффициентов жесткости тензор упругости рассматриваемого нанокристалла несимметричен: $C_{kn} \neq C_{nk}$. Отметим, что в макроскопической механике сплошной среды тензор жесткости обязан быть симметричным, так что полученная несимметрия тензора жесткости является специфическим проявлением дискретности нанокристалла. Как показано в [4], при этом не возникает противоречий с энергетическими соображениями, обеспечивающими симметрию тензора жесткости на макроуровне. Напомним, что для бесконечного ГЦК кристалла выполняются следующие соотношения:

$$\begin{aligned} C_{11} &= \frac{5}{2} G, \quad C_{12} = \frac{5}{6} G, \quad C_{13} = \frac{2}{3} G \\ C_{21} &= \frac{5}{6} G, \quad C_{22} = \frac{5}{2} G, \quad C_{23} = \frac{2}{3} G \\ C_{31} &= \frac{2}{3} G, \quad C_{32} = \frac{2}{3} G, \quad C_{33} = \frac{8}{3} G \end{aligned} \quad (2.13)$$

они могут быть получены как из непосредственного рассмотрения бесконечного кристалла, так и в результате предельного перехода при $N_y \rightarrow \infty$, $N_z \rightarrow \infty$ в формулах (2.12). Согласно соотношениям (2.13) тензор жесткости симметричен и содержит 4 различных значения коэффициентов нормальной жесткости (в публикуемой работе не рассматриваются компоненты тензора жесткости, отвечающие за жесткость на сдвиг). Из сравнения формул (2.12) и (2.13) видно, что к анизотропии рассматриваемого кристалла добавляется анизотропия, обусловленная масштабным фактором. Все коэффициенты жесткости зависят от числа атомарных слоев и от размеров кристалла, которые определяются неоднозначно. При увеличении числа атомарных слоев все коэффициенты стремятся к своим значениям, соответствующим бесконечному кристаллу. Проведем сравнение с результатами работ [4, 5]. Если положить количество атомарных слоев по оси z равным единице ($N_z = 1$), то получим двухмерную полосу монокристаллического материала, обладающего ГПУ решеткой, т.е. модель, которая была исследована в [4, 5]. Рассмотрим выражения (2.12) при $N_z = 1$, представив модуль G в виде

$$G = \frac{\sqrt{3} C}{3 H} \quad (2.14)$$

Это приводит к следующим выражениям для коэффициентов жесткости

$$C_{11} = \frac{3\sqrt{3}(N_y - 1/9)C}{4N_y^* N_z^* H}, \quad C_{12} = \frac{\sqrt{3}(N_y - 1)C}{4N_y^* N_z^* H} \quad (2.15)$$

$$C_{21} = \frac{\sqrt{3}C}{4N_z^* H}, \quad C_{22} = \frac{3\sqrt{3}C}{4N_z^* H}$$

Коэффициенты жесткости (2.15) совпадают с полученными в двухмерном случае в [4, 5] с точностью до величины $N_z^* H$, отражающей неоднозначность при переходе от двухмерной модели к трехмерной.

Выше был рассмотрен нанокристаллический брус, однако на практике более широкое применение нашли нанокристаллические покрытия, толщина которых может составлять всего несколько атомарных слоев. Упругие свойства подобных объектов могут быть приближенно описаны с помощью модели нанопластины, которую можно получить из рассмотренной выше модели нанобруса, если устремить количество слоев по оси z к бесконечности: $N_z \rightarrow \infty$. В результате нанопластина будет содержать N_y слоев в направлении y и бесконечное число слоев в направлениях x , и z . Для этой модели, используя (2.12), можно получить следующие выражения для коэффициентов жесткости:

$$C_{11} = \frac{(N_y - 1/10)5}{N_y^*} G, \quad C_{12} = \frac{(N_y - 9/10)5}{N_y^*} G, \quad C_{13} = \frac{N_y 2}{N_y^* 3} G$$

$$C_{21} = \frac{5}{6} G, \quad C_{22} = \frac{5}{2} G, \quad C_{23} = \frac{2}{3} G \quad (2.16)$$

$$C_{31} = \frac{N_y 2}{N_y^* 3} G, \quad C_{32} = \frac{(3N_y - 2)2}{3N_y^*} G, \quad C_{33} = \frac{(3N_y - 1)8}{3N_y^*} G$$

Как видно из полученных формул, для нанопластины зависимости коэффициентов жесткости от числа слоев существенно упрощаются, а коэффициенты вдоль направления с ограниченным количеством слоев совпадают со своими значениями для бесконечного кристалла.

Выше были получены выражения для коэффициентов жесткости нанокристалла. Однако на практике часто бывает более удобно пользоваться модулями упругости, которые, с учетом анизотропии кристалла, можно определить следующим образом

$$\begin{aligned}
 E_1 &\stackrel{\text{def}}{=} \frac{\sigma_1}{\epsilon_1} \Big|_{\sigma_2=0, \sigma_3=0}, & E_2 &\stackrel{\text{def}}{=} \frac{\sigma_2}{\epsilon_2} \Big|_{\sigma_1=0, \sigma_3=0}, & E_3 &\stackrel{\text{def}}{=} \frac{\sigma_3}{\epsilon_3} \Big|_{\sigma_1=0, \sigma_2=0} \\
 \nu_{12} &\stackrel{\text{def}}{=} -\frac{\epsilon_2}{\epsilon_1} \Big|_{\sigma_2=0, \sigma_3=0}, & \nu_{13} &\stackrel{\text{def}}{=} -\frac{\epsilon_2}{\epsilon_1} \Big|_{\sigma_2=0, \sigma_3=0}, & \nu_1 &\stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2}(\nu_{12} + \nu_{13}) \\
 \nu_{21} &\stackrel{\text{def}}{=} -\frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \Big|_{\sigma_1=0, \sigma_3=0}, & \nu_{23} &\stackrel{\text{def}}{=} -\frac{\epsilon_3}{\epsilon_2} \Big|_{\sigma_1=0, \sigma_3=0}, & \nu_2 &\stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2}(\nu_{21} + \nu_{23}) \\
 \nu_{31} &\stackrel{\text{def}}{=} -\frac{\epsilon_1}{\epsilon_3} \Big|_{\sigma_1=0, \sigma_2=0}, & \nu_{32} &\stackrel{\text{def}}{=} -\frac{\epsilon_2}{\epsilon_3} \Big|_{\sigma_1=0, \sigma_2=0}, & \nu_3 &\stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2}(\nu_{31} + \nu_{32})
 \end{aligned} \tag{2.17}$$

Здесь ν_1 и E_1 – коэффициент Пуассона и модуль Юнга при растяжении вдоль оси x , величины ν_2 и E_2 соответствуют растяжению вдоль оси y , а величины ν_3 и E_3 – вдоль оси z . Необходимость введения различных обозначений для коэффициента Пуассона и модуля Юнга при растяжении в разных направлениях связаны с анизотропией кристалла. Используя (2.11) получим выражения модулей Юнга через коэффициенты жесткости

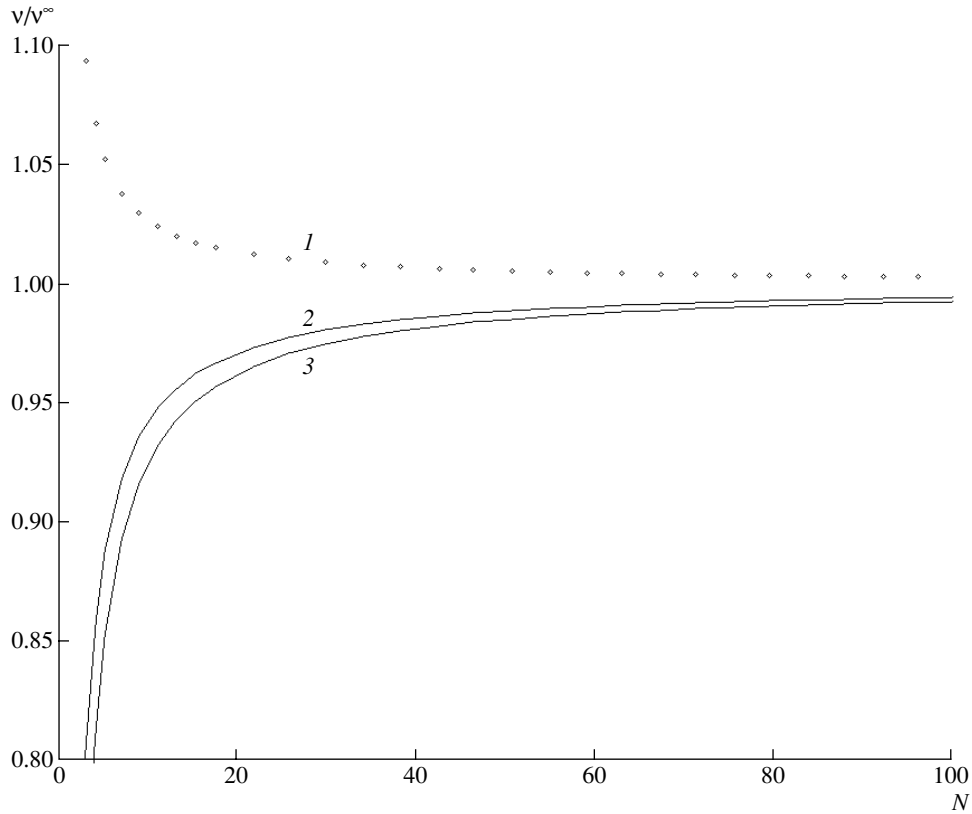
$$\begin{aligned}
 E_1 &= \frac{D}{C_{22}C_{33} - C_{23}D_{32}}, & E_2 &= \frac{D}{C_{11}C_{22} - C_{12}C_{21}}, & E_3 &= \frac{D}{C_{11}C_{33} - C_{31}C_{13}} \\
 D &\stackrel{\text{def}}{=} C_{11}C_{22}C_{33} + C_{12}C_{23}C_{31} + C_{12}C_{21}C_{32} - C_{12}C_{22}C_{31} - C_{11}C_{23}C_{32} - C_{33}C_{21}C_{12}
 \end{aligned} \tag{2.18}$$

Аналогично для коэффициентов Пуассона получим

$$\begin{aligned}
 \nu_{12} &= \frac{C_{23}C_{31} - C_{21}C_{33}}{C_{22}C_{33} - C_{23}C_{32}}, & \nu_{13} &= \frac{C_{21}C_{32} - C_{22}C_{31}}{C_{22}C_{33} - C_{23}C_{32}} \\
 \nu_{21} &= \frac{C_{32}C_{13} - C_{12}C_{33}}{C_{11}C_{33} - C_{13}C_{31}}, & \nu_{23} &= \frac{C_{31}C_{12} - C_{32}C_{11}}{C_{11}C_{33} - C_{13}C_{31}} \\
 \nu_{31} &= \frac{C_{23}C_{12} - C_{13}C_{22}}{C_{11}C_{22} - C_{12}C_{21}}, & \nu_{32} &= \frac{C_{21}C_{13} - C_{23}C_{11}}{C_{11}C_{22} - C_{12}C_{21}}
 \end{aligned} \tag{2.19}$$

Подстановка (2.12) в (2.19) дает зависимости коэффициентов Пуассона нанобруса от числа слоев атомов при $N_y = N_z = N$, которые приведены на фиг. 4. На графике цифрами обозначены: (1) ν_1/ν_1^∞ , (2) ν_2/ν_2^∞ , (3) ν_3/ν_3^∞ .

Известно, что для бесконечного ГЦК кристалла с парным взаимодействием между атомами выполняется $\nu_1^\infty = \nu_2^\infty = 13/56$, $\nu_3^\infty = 1/5$. В данном случае, при растяжении как в направлении x , так в направлениях y и z , коэффициенты Пуассона существенно зависят от числа слоев N . При больших N они близки к ν^∞ , но при уменьшении N они могут существенно отличаться от предельного значения. При этом в направлении x коэффициент Пуассона возрастает при уменьшении N , а в направлениях y и z , напротив, – убывает.

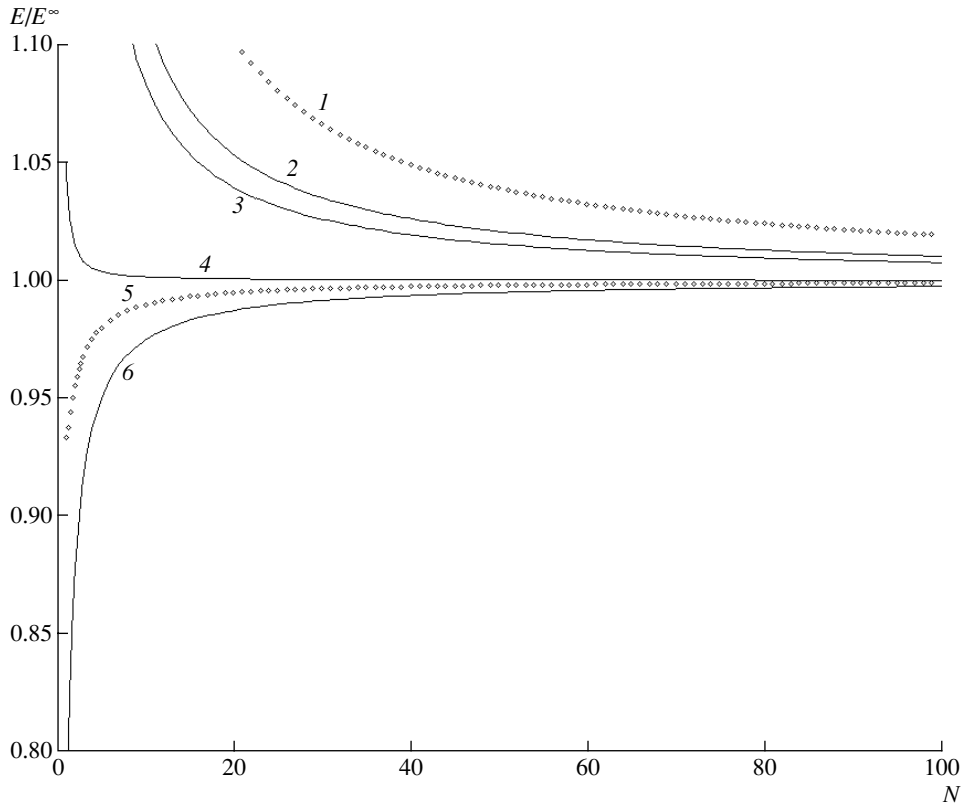


Фиг. 4

Значения коэффициентов Пуассона для различного количества атомарных слоев N сведены в табл. 1. Для двух атомарных слоев приведены два варианта коэффициентов Пуассона при различных значениях поправок k_1, k_2, p . В строке $N = 2^*$ приведены результаты, полученные при подстановке в исходные уравнения (2.4)–(2.6) поправок $k_1 = 4, k_2 = 1, p = 0$, которые точно соответствуют нанобрусу, имеющему $N_y = N_z = 2$ и бесконечное число слоев по направлению N_x . Коэффициенты жесткости при точных

Таблица 1

N	ν_1/ν_1^∞	ν_2/ν_2^∞	ν_3/ν_3^∞
2*	1.123	0.676	0.569
2	1.163	0.676	0.568
4	1.072	0.847	0.799
6	1.046	0.900	0.869
10	1.027	0.941	0.923
20	1.013	0.971	0.962
50	1.005	0.988	0.985
100	1.003	0.994	0.993



Фиг. 5

значениях поправок для такого особо тонкого нанобруса выглядят следующим образом:

$$\begin{aligned}
 C_{11} &= \frac{9G}{N_y^* N_z^*}, & C_{12} &= \frac{5G}{3N_y^* N_z^*}, & C_{13} &= \frac{4G}{3N_y^* N_z^*} \\
 C_{21} &= \frac{3G}{2N_z^*}, & C_{22} &= \frac{29G}{6N_z^*}, & C_{23} &= \frac{2G}{3N_z^*} \\
 C_{31} &= \frac{4G}{3N_y^*}, & C_{32} &= \frac{8G}{9N_y^*}, & C_{33} &= \frac{40G}{9N_y^*}
 \end{aligned} \tag{2.20}$$

В строке $N = 2$ и ниже приведены значения коэффициентов Пуассона, полученные (как было уже сказано выше) при подстановке в исходные уравнения (2.4)–(2.6) усредненных значений поправок: $k_1 = k_2 = 2$, $p = 0$. Как видно из табл. 1, максимальное отклонение точного значения коэффициента Пуассона от значения, полученного для усредненной модели, не превышает 4 процента.

Рассмотрим теперь модули Юнга. Положим $N_x^* = N_y^* \stackrel{\text{def}}{=} N^*$. Подставляя (2.12) в (2.18) получаем зависимости для модулей Юнга, графики которых приведены на фиг. 5. Обозначение "min" соответствует минимальному (при данном N) значению модуля Юнга, реализующемуся при $N^* = N$, обозначение "max" – максимальному значению

Таблица 2

N	E_1^{\min}/E_1^∞	E_2^{\min}/E_2^∞	E_3^{\min}/E_3^∞	E_1^{\max}/E_1^∞	E_2^{\max}/E_2^∞	E_3^{\max}/E_3^∞
2*	0.958	1.047	0.872	3.833	2.095	1.744
2	0.954	1.015	0.872	3.818	2.030	1.744
4	0.975	1.005	0.937	1.734	1.340	1.249
6	0.983	1.003	0.958	1.416	1.204	1.150
10	0.990	1.002	0.975	1.222	1.113	1.083
20	0.995	1.000	0.988	1.103	1.053	1.039
50	0.998	1.000	0.995	1.039	1.021	1.015
100	0.999	1.000	0.998	1.019	1.010	1.008

чению, реализующемуся при $N^* = N - 1$. На графике цифрами обозначено: (1) E_1^{\max}/E_1^∞ , (2) E_2^{\max}/E_2^∞ , (3) E_3^{\max}/E_3^∞ , (4) E_2^{\min}/E_2^∞ , (5) E_1^{\min}/E_1^∞ , (6) E_3^{\min}/E_3^∞ , где E_k^∞ – макроскопическое значение модуля Юнга бесконечного кристалла

$$E_1^\infty = E_2^\infty = 15/7G, \quad E_3^\infty = 12/5G \quad (2.21)$$

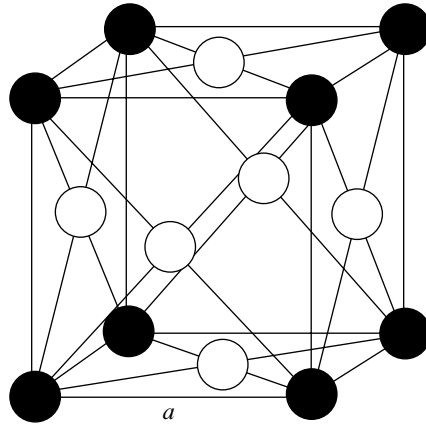
Значения модулей Юнга для разных N сведены в табл. 2. В строке $N = 2^*$ приведены результаты, полученные для нанобруса с поперечными размерами $N_y^* = N_z^* = 2$, подсчитанные с учетом точных поправок k_1, k_2, p .

Рассмотрим максимальные значения модулей Юнга, реализующиеся при $N^* = N - 1$. Зависимости возрастают при уменьшении числа слоев и наибольшее отклонение от макроскопического значения имеет E_1^{\max} . При $N = 10$ отклонение составляет 22 процента, а при $N = 2$ значение E_1^{\max} может почти в 4 раза превышать значение модуля Юнга для бесконечного кристалла. В [4, 5] для двухмерной полосы макроскопическое значение превышалось не более чем в 2 раза, так что масштабный эффект в трехмерном случае может проявляться значительно сильнее. Наименьшее отклонение наблюдается для зависимости E_3^{\max} . При $N = 10$ оно составляет 8 процентов. Противоположную ситуацию наблюдаем при $N^* = N$ (минимальные значения модулей Юнга). Зависимости убывают при уменьшении числа слоев (кроме E_2^{\min}) и наибольшее отклонение у E_3^{\min} (2.5 процента при $N = 10$), т.е. при $N^* = N$ значения модулей Юнга гораздо меньше отклоняются от своих макроскопических значений.

Таким образом можно рекомендовать выбор величины $N^* = N$ из соображений минимизации отклонения от макроскопических значений.

3. Исследование масштабной зависимости модулей упругости для кристалла в направлении 100. Рассмотрим ту же задачу для направления 100. В недеформированном состоянии решетка состоит из кубов с ребром $a = \sqrt{2}/2a_0$, атомы находятся в узлах решетки и в центре граней (фиг. 6). Аналогично предыдущему параграфу получим выражения для нормальных напряжений в направлениях x, y, z :

$$\begin{aligned} S_1\sigma_1 &= (N_y - 1)N_z F(b_{xy})\sqrt{2}/2 + N_y(N_z - 1)F(b_{xz})\sqrt{2}/2 \\ S_2\sigma_2 &= N_z F(b_{xy})\sqrt{2}/2 + (N_z - 1)F(b_{yz})\sqrt{2}/2 \\ S_3\sigma_3 &= (N_y - 1)F(b_{xy})\sqrt{2}/2 + N_y F(b_{xz})\sqrt{2}/2 \end{aligned} \quad (3.1)$$



Фиг. 6

$$S_1 = N_y^* N_z^* (a/2)^2, \quad S_2 = N_z^* (a/2)^2, \quad S_3 = N_y^* (a/2)^2 \quad (3.2)$$

где b_{xy} , b_{xz} и b_{yz} – расстояние между ближайшими атомами в соседних слоях в плоскостях xy , xz и zy соответственно; S_k – площадки, на которые приходятся нормальные напряжения.

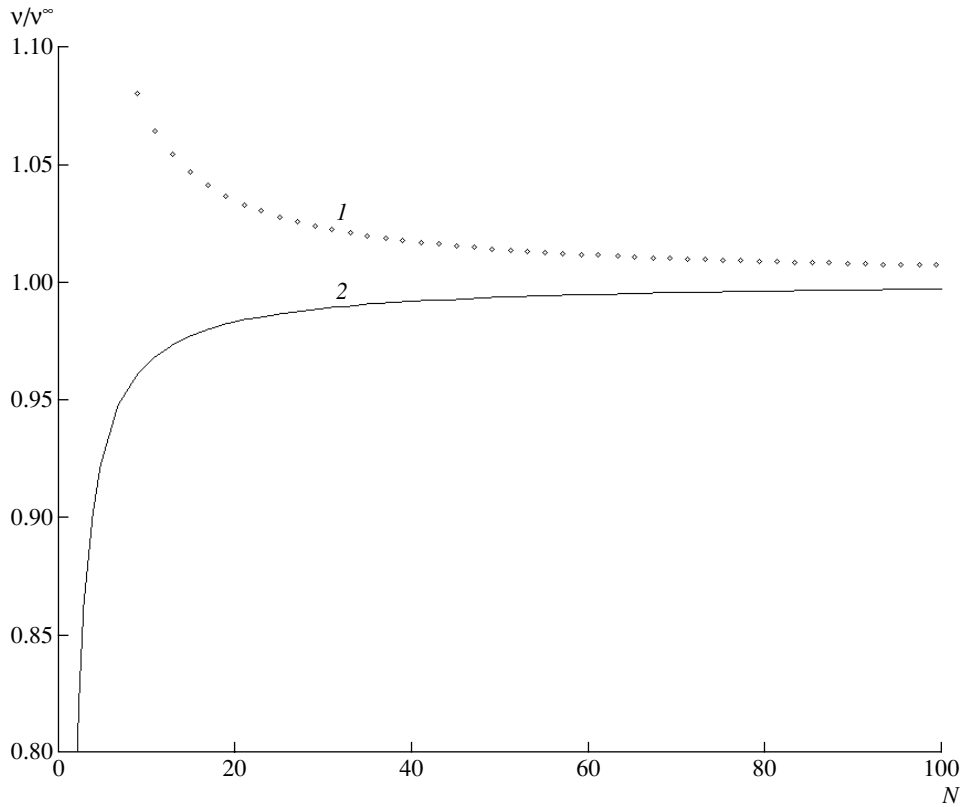
Зависимости для коэффициентов жесткости C_{kn} в этом случае имеют вид:

$$\begin{aligned} C_{11} &= \frac{2N_y N_z - N_y - N_z}{N_y^* N_z^*} G, & C_{12} &= \frac{(N_y - 1)N_z}{N_y^* N_z^*} G, & C_{13} &= \frac{(N_z - 1)N_y}{N_y^* N_z^*} G \\ C_{21} &= \frac{N_z}{N_z^*} G, & C_{22} &= \frac{2N_z - 1}{N_z^*} G, & C_{23} &= \frac{N_z - 1}{N_z^*} G \\ C_{31} &= \frac{N_y}{N_y^*} G, & C_{32} &= \frac{N_y - 1}{N_y^*} G, & C_{33} &= \frac{2N_y - 1}{N_y^*} G \end{aligned} \quad (3.3)$$

Для пластины, т. е. в случае, когда кристалл содержит N_y слоев в направлении y и бесконечное количество слоев в направлениях x и z , из формул (3.3) получим

$$\begin{aligned} C_{11} &= \frac{N_y - 1/2}{N_y^*} 2G, & C_{12} &= \frac{N_y - 1}{N_y^*} G, & C_{13} &= \frac{N_y}{N_y^*} G \\ C_{21} &= G, & C_{22} &= 2G, & C_{23} &= G \\ C_{31} &= \frac{N_y}{N_y^*} G, & C_{32} &= \frac{N_y - 1}{N_y^*} G, & C_{33} &= \frac{N_y - 1/2}{N_y^*} 2G \end{aligned} \quad (3.4)$$

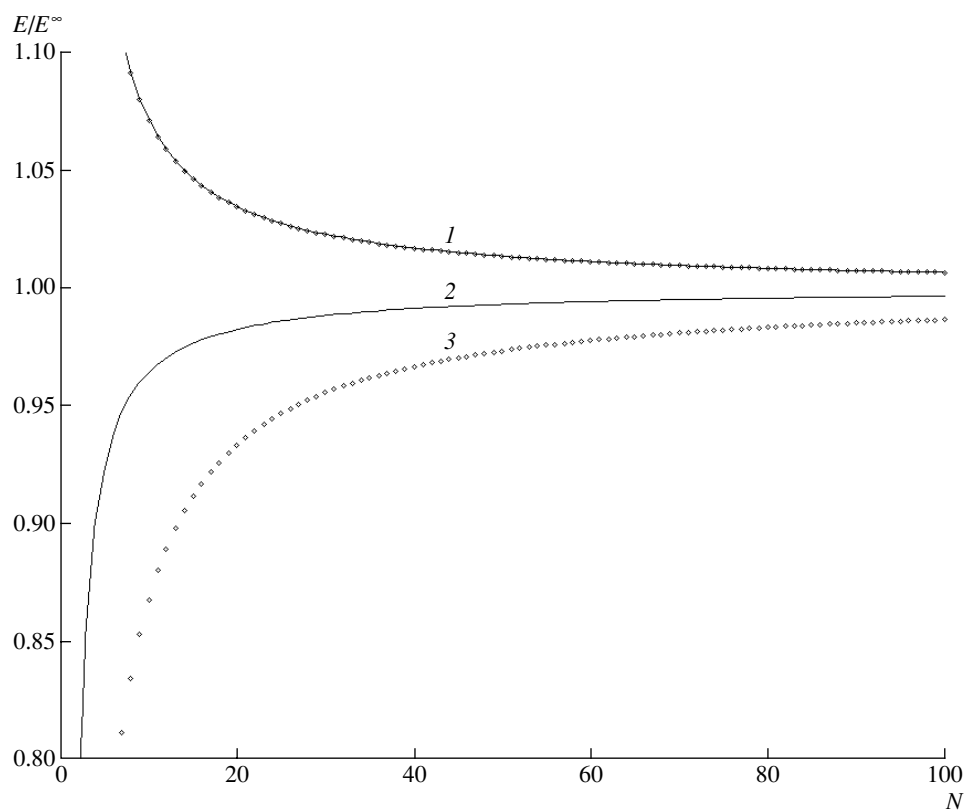
Отметим, что полученные соотношения упругости для нанопластины (3.4) симметричны относительно перестановки индексов 1 и 3, т.е. для направлений, в которых кристалл бесконечен. Следовательно всего имеется 5 различных коэффициентов жесткости. Однако, при $N_y^* = N_y$ получаем дополнительно $C_{12} = C_{13} = C_{32} = C_{23}$, при $N_y^* = N_y - 1$ аналогично $C_{12} = C_{13} = C_{21} = C_{31}$, т.е. в обоих случаях имеется 4 различных коэффициента (в макроскопическом пределе ГЦК кристалл с парным взаимодействием атомов имеет всего два различных коэффициента жесткости).



Фиг. 7

Зависимости коэффициентов Пуассона симметричного нанобруса ($N_y = N_z \stackrel{\text{def}}{=} N$) от числа атомарных слоев N представлены на фиг. 7 (макроскопический предел для значения коэффициента Пуассона $v^\infty = 1/3$). На графике цифрами обозначено: (1) v_1/v_1^∞ , (2) v_2/v_2^∞ . Зависимость $v_1(N)$ (в направлении, по которому кристалл неограничен) возрастает с уменьшением числа слоев, зависимости $v_2(N) = v_3(N)$ – убывают. Максимальное отклонение от значений для бесконечного кристалла для v_2 при $N = 10$ составляет 7 процентов.

На фиг. 8 приведены аналогичные зависимости модулей Юнга для симметричного нанобруса. На графике обозначено: (1) $E_1^{\max}/E^\infty = E_2^{\max}/E^\infty = E_3^{\max}/E^\infty$, (2) $E_2^{\min}/E^\infty = E_3^{\min}/E^\infty$, (3) E_1^{\min}/E^∞ . Наблюдается та же тенденция, что и для направления 111: максимальные значения, реализующиеся при $N^* = N - 1$, возрастают с уменьшением числа слоев; а минимальные, реализующиеся при $N^* = N$, убывают. Максимальные значения совпадают между собой и дают отклонение 7 процентов при $N = 10$ от макроскопического значения, а минимальные отклоняются от 14 процентов E_1^{\min} до 3 процентов $E_2^{\min} = E_3^{\min}$. Значения упругих модулей для разных N сведены в табл. 3. Остальные модули могут быть получены из таблицы с помощью тождеств: $v_2 = v_3$, $E_2^{\min} = E_3^{\min}$, $E_1^{\max} = E_2^{\max} = E_3^{\max}$.



Фиг. 8

Сравним полученные значения модулей Юнга с результатами работы [7], в которой модуль Юнга определялся методом молекулярной динамики в результате компьютерных экспериментов по распространению волн в симметричном нанобрусе, аналогичном рассматриваемому в данной работе. В [7] расчеты проводились для трех симметричных нанокристаллов со значениями $N_y = N_z \stackrel{\text{def}}{=} N$ равными 7, 13 и 17; в направлении x кристаллы имели 41 слой. Способ определения модуля Юнга в [7] со-

Таблица 3

N	E_1^{\min}/E^∞	E_2^{\min}/E^∞	E_1^{\max}/E^∞	v_1/v^∞	v_2/v^∞
2	0.375	0.750	1.500	1.500	0.750
4	0.675	0.900	1.200	1.200	0.900
7	0.812	0.947	1.105	1.105	0.947
10	0.868	0.965	1.072	1.071	0.964
13	0.898	0.973	1.054	1.054	0.973
17	0.922	0.980	1.041	1.041	0.980
20	0.934	0.983	1.035	1.034	0.983
50	0.973	0.993	1.014	1.014	0.993
100	0.987	0.997	1.007	1.006	0.997

ответствует $N^* = N$, следовательно полученные там модули следует рассматривать как E_1^{\max} . Сравним зависимость модуля Юнга от числа кристаллических слоев в [7] и в данной работе. Согласно [7], отклонение $E_1(7)$ от $E_1(13)$ составляет 12.5%, а табл. 3 дает для этого отклонения значение 9.6%. Таким образом масштабная зависимость модулей Юнга имеет сходный качественный характер. Однако, следует отметить, что в [7] использовался не парный, а многочастичный закон взаимодействия (потенциал Джонсона), что может объяснить некоторое количественное расхождение. Кроме того, расхождение может быть связано с тем, что в [7] модули Юнга определялись из волны деформации, ограниченной в направлении x , что могло внести дополнительный масштабный эффект. Отклонение $E_1(13)$ от $E_1(17)$, согласно таблице 3 составляет 2.6%, в то время как в [7] отклонение равно -0.49% , при этом оно имеет противоположный знак. Однако, как отмечалось в [7], полученная там разница между значениями модуля Юнга при $N = 13$ и $N = 17$ лежит в пределах точности численных расчетов. Отметим также, что согласно табл.3 отклонение $E_1(17)$ от E_1^∞ составляет 7.8%, что свидетельствует о том, что свойства подобного нанокристалла заметно отличаются от макроскопических.

4. Заключение. Исследовался трехмерный нанокристалл, обладающий гранецентрированной кубической решеткой. Так как упругие свойства данной кристаллической решетки анизотропны, то рассматривались два направления: вдоль главной диагонали и вдоль ребра кубической подрешетки. В качестве моделей исследовались нанобрус и нанопластина. Результаты сравнивались с [4, 5] и [7].

Из результатов работы следует, что форма и размеры нанокристалла вносят дополнительную анизотропию в его упругие свойства. На анизотропию, связанную с видом кристаллической решетки накладывается анизотропия, вызванная его размером и формой. Все упругие характеристики трехмерного нанокристалла существенно зависят от числа атомарных слоев N . При увеличении числа слоев все они стремятся к своим макроскопическим значениям, соответствующим бесконечному кристаллу.

В определении размера нанобъекта существует принципиальный произвол, приводящий к неоднозначности таких макроскопических характеристик, как модуль Юнга. Особенно сильно эта неоднозначность проявилась для нанобруса в направлении кристалла 111. Из сравнения результатов, полученных в пунктах 2 и 3 следует, что нельзя однозначно рекомендовать выбор величины N^* . Для направления 111 предпочтительнее выбор $N^* = N$, тогда как для 100 более выгодно выбрать $N^* = N - 1$.

В [4, 5] в двухмерной задаче было получено, что для особо тонких пленок модуль может в 2 раза отличаться от своего макроскопического значения. В данной работе для трехмерного случая было получено увеличение модуля Юнга в 3.83 раза. Однако значения модуля Юнга не всегда возрастают при уменьшении размеров кристалла. Если выбрать другое определение размеров, то значения модуля Юнга будут уменьшаться с уменьшением количества атомарных слоев.

Показано, что при усложнении модели (трехмерная вместо двухмерной) влияние масштабного фактора усиливается, как и было предсказано в [4, 5], причем для нанобруса это влияние сильнее, чем для нанопластины. Масштабные эффекты вносят существенный вклад в значения упругих характеристик нанокристалла, особенно когда количество атомарных слоев исчисляется единицами. Ошибка в определении модуля Юнга при $N = 10$ может составлять более 20 процентов, однако уже при $N = 100$ ошибка составляет не больше 2 процентов.

Подводя итог вышесказанному, можно сделать вывод, что понятия классической механики сплошной среды, и в том числе теории упругости, при применении к нанобъектам должны использоваться с большой осторожностью. Обязательно следует учитывать изменение механических характеристик при приближении масштабов рас-

смаатриваемого объекта к нанометровым. Особое внимание необходимо уделять величинам, принципиально неоднозначным на наноуровне, таким, как модуль Юнга. При их использовании следует четко определять, что именно понимается под указанными величинами в применении к нанообъектам. Однако все сказанное не означает, что классическая теория упругости неприменима на наноуровне. Просто она должна использоваться с учетом масштабных эффектов, а адекватность континуального подхода следует оценивать при рассмотрении конкретных задач.

Авторы благодарны Н.Ф. Морозову за полезные обсуждения.

Работа выполнена в рамках программы фундаментальных исследований ОЭММ-ПУ РАН "Структурная механика материалов и элементов конструкций. Взаимодействие нано-микро-мезо- и макромасштабов при деформировании и разрушении" и при поддержке грантов РФФИ (проекты № 03-01-0072, № 05-01-0094-а).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Быков Д.Л., Коновалов Д.Н.* Особенности сопротивления вязкоупругих материалов при потере устойчивости тонкостенных конструкций // Тр. XXXVI Межд. семинара "Актуальные проблемы прочности", Витебск, 2000. С. 428–433.
2. *Байдаровцев Ю.П., Савенков Г.Н., Тарасенко В.А.* Метод определения прочностных характеристик ультратонких слоев // Высокомолекулярные соединения. Сер. А. 1999. Т. 41. № 8. С. 1302–1307.
3. *Kim J.J., Marzouk H.A., Eloi C.C., Robertson J.D.* Effect of water vapor on the nucleation and growth of chemical vapor deposited copper films on spin-coated polyimide // J. Appl. Phys. 1995. V. 78. № 1. P. 245.
4. *Кривцов А.М., Морозов Н.Ф.* О механических характеристиках наноразмерных объектов // Физика твердого тела. 2002. Т. 44. № 12. С. 2158–2163.
5. *Кривцов А.М., Морозов Н.Ф.* Аномалии механических характеристик наноразмерных объектов // Докл. АН. 2001. Т. 381. № 3. С. 825–827.
6. *Иванова Е.А., Кривцов А.М., Морозов Н.Ф.* Особенности расчета изгибной жесткости нанокристаллов // Докл. АН. 2002. Т. 385. № 4. С. 494–496.
7. *Golovneva E.I., Golovnev I.F. and Fomin V.M.* Research of nanoclusters size effect on the molecular-dynamic modeling results // Физическая мезомеханика. 2004. № 7. Спец. выпуск. Ч. 2. С. 11–13.

С.-Петербург

Поступила в редакцию
12.02.2005