

УДК 539.3+539.4

ОСОБЕННОСТИ РАСЧЕТА ИЗГИБНОЙ ЖЕСТКОСТИ НАНОКРИСТАЛЛОВ

© 2002 г. Е. А. Иванова, А. М. Кривцов, академик Н. Ф. Морозов

Поступило 12.03.2002 г.

В связи с развитием нанотехнологий актуальной становится задача создания аналитических моделей для описания механического деформирования объектов наноразмерного масштабного уровня. Большинство существующих теоретических моделей основано на уравнениях теории упругости. При этом, как правило, используются значения упругих модулей, полученные из макроскопических экспериментов. Вместе с тем многие исследователями отмечено несоответствие между значениями модулей упругости, полученными из микро- и макроэкспериментов (см., например, [1, 2, 3]). В [4] на примере двумерной монокристаллической полосы теоретически исследована зависимость значений модуля Юнга и коэффициента Пуассона от числа атомарных слоев монокристалла. Показано, что при уменьшении числа атомарных слоев коэффициент Пуассона убывает, а модуль Юнга возрастает, причем для двухслойных кристаллических пленок указанные модули могут в два раза отличаться от своих макроскопических значений. Результаты работы [4] убеждают в необходимости учета масштабных эффектов при использовании понятий механики сплошной среды применительно к нанообъектам. В предлагаемой работе теоретически исследовано влияние масштабного фактора на изгибную жесткость монокристаллической полосы. Актуальность данной задачи обусловлена, в частности, необходимостью исследования напряженно-деформированного состояния нанотрубок, получивших широкое распространение в современной технике [5–8].

Рассмотрим двумерный монокристалл, имеющий $N \geq 2$ слоев в направлении y и $J \gg N$ слоев в направлении x . Предполагается, что каждый атом взаимодействует только с ближайшими соседями (см. рис. 1). К атомам на боковых гранях кристалла приложены силы Q_n , где индекс n означает номер слоя ($n = 1, 2, \dots, N$). При переходе от одного слоя к другому силы меняются по линей-

ному закону, причем таким образом, что суммарная нагрузка, действующая на боковую грань кристалла, является чисто моментной:

$$\sum_{n=1}^N Q_n = 0, \quad \sum_{n=1}^N R_n Q_n = M. \quad (1)$$

Деформированное состояние монокристалла полностью определяется расстояниями a_{jn} между соседними атомами в каждом слое и расстояниями b_{jn} между ближайшими атомами в соседних слоях. Индексы j, n соответствуют номерам слоев в направлении осей x и y (см. рис. 1). Очевидно, что расстояния между слоями h_{jn} можно определить из геометрического соотношения $h_{jn}^2 = b_{jn}^2 - \frac{a_{jn}^2}{4}$. В недеформированном состоянии кристаллическая решетка состоит из равносторонних треугольников с ребром $a = b = a_0$; для нее выполняется условие

$$h_0 = \frac{\sqrt{3}}{2} a_0, \quad R_n = (n-1)h_0.$$

Легко показать что формула для Q_n , удовлетворяющих условиям (1), имеет вид

$$Q_n = \frac{4\sqrt{3}M(2n-N-1)}{a_0(N-1)N(N+1)}. \quad (2)$$

Пусть $F(r)$ – сила взаимодействия между двумя атомами, находящимися на расстоянии r друг от друга. Предполагая малость деформаций (перемещения на рисунке увеличены для большей наглядности), для сил взаимодействия атомов в кристалле, будем использовать линейное приближение

$$F(a_{jn}) = C\Delta a_{jn}, \quad F(b_{jn}) = C\Delta b_{jn}, \quad (3)$$

$$C \stackrel{\text{def}}{=} F'(a_0) > 0,$$

где C – жесткость межатомной связи, $\Delta a_{jn} \stackrel{\text{def}}{=} a_{jn} - a_0$, $\Delta b_{jn} \stackrel{\text{def}}{=} b_{jn} - a_0$. Такой упрощенный подход оправдывается тем, что и в механике сплошных сред

@@@

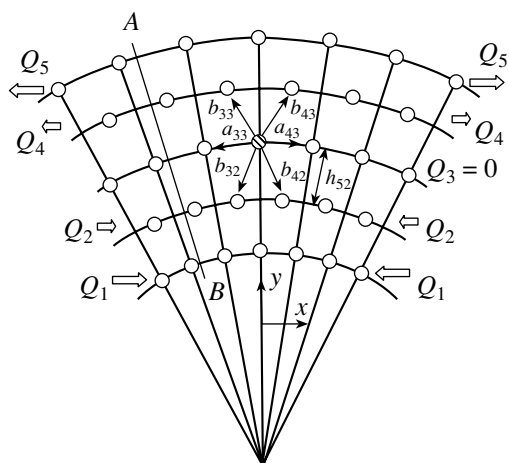


Рис. 1. Изгиб нанокристаллической полосы.

при определении упругих модулей, как правило, используется линейная теория. Заметим, что предлагаемый здесь подход может быть реализован и без предположения о линейности упругих связей; возникающие при этом трудности носят чисто технический характер. Записав уравнения равновесия атомов кристаллической решетки, получим систему рекуррентных уравнений, связывающих между собой величины Δa_{jn} , Δb_{jn} и Q_n .

$$\begin{aligned} \Delta a_{j,n} + \frac{1}{2}(\Delta b_{j,n} + \Delta b_{j,n-1}) &= \\ &= \Delta a_{j-1,n} + \frac{1}{2}(\Delta b_{j-1,n} + \Delta b_{j-1,n-1}), \\ \Delta b_{j,n} + \Delta b_{j-1,n} &= \Delta b_{j,n-1} + \Delta b_{j-1,n-1}, \\ \Delta a_{2,n} + \frac{1}{2}(\Delta b_{2,n} - \Delta b_{1,n} + \Delta b_{2,n-1} - \Delta b_{1,n-1}) &= \frac{Q_n}{C}, \\ \Delta a_{j-2,n} + \frac{1}{2}(\Delta b_{j-2,n} - \Delta b_{j-1,n} + \Delta b_{j-2,n-1} - \\ &- \Delta b_{j-1,n-1}) = \frac{Q_n}{C}. \end{aligned}$$

Решение этих уравнений имеет вид

$$\Delta b_{jn} = 0, \quad \Delta a_{jn} = \frac{Q_n}{C}. \quad (5)$$

Разрежем мысленно кристалла вертикальной прямой AB (см. рис. 1). Согласно формулам (2), (5), суммарная нормальная сила, действующая с одной части кристалла на другую, равна нулю; суммарный изгибающий момент вычислен по формуле (1) и равен M . Как видно из формул (2), (5), изменения межатомных расстояний Δa_{jn} линейно зависят от номера слоя n в направлении оси y и не зависят от номера слоя j в направлении оси x . Это означает, что слои атомов в направлении

оси y при деформировании кристалла остаются прямолинейными и в деформированном состоянии углы между любыми соседними слоями атомов одинаковы. Тогда угол между соседними слоями атомов α и соответствующая относительная деформация β определяются следующим образом:

$$\alpha \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\Delta a_{jN}/2 - \Delta a_{j1}/2}{h_0(N-1)}, \quad \beta = \frac{\alpha}{a_0/2}. \quad (6)$$

Изгибная жесткость монокристаллической полосы, согласно формулам (2), (5), (6), имеет вид

$$D \stackrel{\text{def}}{=} \frac{M}{\beta} = \frac{Ca_0^3}{16}(N-1)N(N+1). \quad (7)$$

При попытке выразить изгибную жесткость через макроскопические параметры возникают трудности, связанные с неоднозначностью определения толщины H нанокристалла. С одной стороны, толщину монокристалла можно определить как расстояние между слоями атомов на противоположных торцах $H = (N-1)h_0$; с другой стороны, толщину нанокристалла разумно определить как произведение числа слоев на толщину одного атомарного слоя $H = Nh_0$. Поскольку трудно отдать предпочтение одному из сформулированных определений, примем для толщины нанокристалла определение [4]

$$H \stackrel{\text{def}}{=} N_*h_0, \quad N-1 \leq N_* \leq N, \quad (8)$$

где N_* – безразмерный параметр, отражающий неоднозначность в определении H . Как показано в [4], модуль Юнга E_1 , соответствующий растяжению вдоль оси x бесконечной в этом направлении монокристаллической полосы, вычисляется по формуле

$$E_1 = \frac{N}{N_*}E_\infty, \quad E_\infty = \frac{2C}{\sqrt{3}}. \quad (9)$$

Здесь E_∞ – значение модуля Юнга бесконечного кристалла [9, 10]. Заметим, что в настоящей работе рассмотрена конечная в направлении оси x полоса, однако предполагается, что число атомарных слоев в направлении оси x достаточно велико, так что формулы (9) можно использовать. С учетом формул (8), (9) выразим изгибную жесткость монокристаллической полосы (7) через ее макроскопические параметры

$$D = \frac{E_1 H^3 (N^2 - 1)}{12N_*^2}. \quad (10)$$

Из экспериментальных данных известно, что изгибная жесткость однослойной полосы оказывается в 25 раз меньше того значения, которое получено при вычислении по формуле, известной из теории упругости [11]. Действительно, при клас-

сическом рассмотрении однослойная цепочка атомов не должна обладать изгибной жесткостью. Поэтому в задачах изгиба наиболее подходящими следует считать такие значения N_* , для которых при $N = 1$ изгибная жесткость D обращается в нуль (малая изгибная жесткость, обнаруженная в эксперименте, связана с эффектами, не учитываемыми данной моделью). Рассмотрим два значения N_* , удовлетворяющих сформулированному условию.

Предположим сначала, что $N_* = N$. Тогда $E_1 = E_\infty$, а изгибная жесткость определяется формулой

$$D = D_\infty \left(1 - \frac{1}{N^2}\right), \quad D_\infty = \frac{E_\infty H^3}{12}, \quad H = Nh_0. \quad (11)$$

Здесь D_∞ – значение изгибной жесткости полосы, известное из макроскопической теории упругости. Согласно формуле (11), изгибная жесткость нанокристалла изменяется в пределах $0 \leq D \leq D_\infty$. При малых N она существенно зависит от числа атомарных слоев. При увеличении N она возрастает, стремясь при $N \rightarrow \infty$ к своему значению, принятому в теории упругости.

С другой стороны, предположим, что

$$N_* = N \sqrt[3]{1 - \frac{1}{N^2}}.$$

Отметим, что введенный таким образом параметр N_* удовлетворяет неравенству (8): $N - 1 \leq N_* \leq N$. Выражения для изгибной жесткости и толщины нанокристалла в этом случае принимают вид

$$D = \frac{E_\infty H^3}{12} \equiv D_\infty, \quad H = Nh_0 \sqrt[3]{1 - \frac{1}{N^2}}. \quad (12)$$

Легко видеть, что выражение для изгибной жесткости в точности совпадает с известным из теории упругости. Для толщины же полосы получается выражение, которое при больших N совпадает со значением Nh_0 , соответствующим предыдущему случаю. При малых N формула (12) дает значения толщины меньшие, чем Nh_0 ; при $N = 1$ она равна нулю, что соответствует представлению о том, что одиночный слой атомов обладает нулевой изгибной жесткостью.

Альтернативным способом определения изгибной жесткости является решение задачи о де-

формировании монокристаллической полосы при ее изгибе в кольцо. Данная задача может быть рассмотрена как линейная по деформациям, однако она является геометрически нелинейной по перемещениям. Преимущество данной постановки состоит в том, что она не требует никаких предположений относительно характера внешней нагрузки. Выражения для изгибной жесткости D , полученные в результате решения подобной задачи, в точности совпадают с выражениями (10), (11), (12).

В работе [5] рассмотрена задача об определении изгибной жесткости нанотрубок в квазиконтинуальной постановке. Для нескольких конкретных значений N в этой работе определена изгибная жесткость полосы, совпадающая с результатами вычисления по формуле (11). Для толщины полосы в [5] взята формула $H = h_0 N$, что привело к расхождению изгибной жесткости с ее значением, известными из теории упругости. Однако, как показано выше, применение альтернативного определения для толщины пластины позволяет использовать макроскопическую формулу для изгибной жесткости без каких-либо изменений.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Быков Д.Л., Коновалов Д.Н. Тр. XXXVI Междунар. сем. "Актуальные проблемы прочности". Витебск, 2000. С. 428–433.
2. Байдаровцев Ю.П., Савенков Г.Н., Тарасенко В.А. // Высокомолекуляр. соединения. Сер. А. 1999. Т. 41. № 8. С. 1302–1307.
3. Kim J.J., Marzouk H.A., Eloi C.C., Robertson J.D. // J. Appl. Phys. 1995. V. 78. № 1. P. 245.
4. Кривцов А.М., Морозов Н.Ф. // ДАН. 2001. Т. 381. № 3. С. 825–827.
5. Ru C.Q. // Phys. Rev. B. 2000. V. 62. № 15. P. 9973–9976.
6. Ru C.Q. // Phys. Rev. B. 2000. V. 62. № 15. P. 10405–10408.
7. Ru C.Q. // J. Appl. Phys. 2000. V. 87. № 10. P. 7227–7231.
8. Prinz V.Ya., Chehovskiy A.V., Nenasheva L.A. Proc. VII Intern. Symp. "Nanostructures: Physics and Technology". St. Petersburg, 1999. P. 481–484.
9. Кривцов А.М. // Тр. СПбГТУ. 1992. Т. 443. С. 9–17.
10. Krivtsov A.M. // Z. angew. Math. und Mech. 1999. Bd. 79 (S2). S. 419.
11. Yakobson B.I., Brabec C.J., Bernholc J. // Phys. Rev. Lett. 1996. V. 75. P. 2511.