

УДК 538.911;539.32

ВЫВОД УПРУГОГО ЗАКОНА МОНОКРИСТАЛЛОВ МЕТАЛЛОВ ИЗ ПОТЕНЦИАЛА МЕЖАТОМНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

© 2011 г.

И.Ю. Зубко, О.В. Мелентьева, В.П. Морозова, В.И. Кочуров

Пермский государственный технический университет

zoubko@pstu.ru

Поступила в редакцию 24.08.2011

Исследуется вопрос об установлении связи между (двумя) параметрами потенциала Леннарда – Джонса, описывающего центральное взаимодействие атомов, и упругими модулями металлов с идеальной кристаллической ГЦК и ОЦК решеткой. Показано, что тензор линейно-упругих свойств C таких металлов является анизотропным и симметричным. Получено, что период решетки a_* монокристалла макроскопических размеров связан с равновесным расстоянием для изолированной пары атомов α (первый параметр потенциала) для ГЦК материалов как $a_*^{FCC} = 1.3918\alpha$, для ОЦК материалов как $a_*^{BCC} = 1.1251\alpha$. Получено представление второго параметра потенциала Леннарда–Джонса через период решетки a_* и макроскопический модуль сдвига G . Проведена верификация полученных соотношений: анизотропные модули Юнга и коэффициент Пуассона, вычисленные с помощью идентифицированных для меди значений параметров потенциала Леннарда–Джонса, отличаются на 2.0–3.5% от известных экспериментальных значений. Выведены зависимости упругих модулей, периода решетки и плотности от размера образца, показано, что с уменьшением его размеров модули уменьшаются, а равновесное межатомное расстояние растет. Рассчитаны значения модуля сдвига для образцов меди с характерными размерами от 10 нм до 1 см. Полученные результаты могут использоваться для уточненного расчета механических свойств наночастиц, упругий закон для которых, как показано в работе, является анизотропным, а упругие постоянные зависят от размеров частиц.

Ключевые слова: ГЦК и ОЦК монокристаллы, прямое вычисление упругих модулей, кубическая анизотропия, параметры потенциала Леннарда–Джонса, зависимость упругих модулей от размеров тела.

Развитие вычислительной техники расширило возможности дискретных подходов к описанию механического поведения твердых тел, включая их неупругое деформирование и разрушение. Так, метод молекулярной динамики/статики позволяет при задании потенциала межатомного взаимодействия описывать ряд физико-механических эффектов, сопровождающих деформирование монокристаллов. Полученные для них зависимости могут использоваться при построении многоуровневых упругопластических моделей поликристаллических металлов, мезоуровень которых отождествляется с отдельным зерном (субзерном). Ядром дискретных подходов являются потенциалы взаимодействия, которые представляют собой приближенный способ описания взаимодействия частиц материала, качественно отражающий основные свойства атомов отталкиваться на малых и притягиваться на больших расстояниях. Получаемые количественные результаты определяются числовыми значениями параметров потенциалов. В настоящее время не существует единых методик определения этих параметров для произвольных материалов.

В настоящем исследовании для анализа уп-

ругого отклика бездефектный монокристалл в форме куба подвергается заданной деформации. На его гранях в деформированной конфигурации в предположении наличия только центрального типа межатомного взаимодействия определяются силы, действующие на атомы из рассматриваемых граней со стороны всех остальных атомов тела. По ним без предположения о симметрии тензора напряжений Коши находятся его компоненты, которые раскладываются в степенные ряды по параметру деформации. Коэффициенты при первых степенях этих рядов принимаются за искомые упругие модули монокристалла. Материал, упругий по Коши с несимметричным тензором напряжений, описывается соотношением $\sigma = C:\nabla u$, где σ – тензор напряжений, ∇u – тензор дисторсии, $C_{ijkl} \neq C_{jikl}$, $C_{ijkl} \neq C_{jilk}$, $C_{ijkl} = C_{klij}$, то есть коэффициенты при первых степенях соответствующих параметров деформации (компонент ∇u) суть компоненты тензора линейно-упругих свойств C . Материал с кубической решеткой имеет 3 взаимно ортогональные оси симметрии 4-го порядка, совпадающие с кристаллографическими осями. С учетом всех свойств тензор C имеет четыре независимые компоненты, в ка-

честве которых выбираются компоненты с наименьшими значениями индексов в указанных осях: C_{1111} , C_{1122} , C_{1212} , C_{1221} . Другие компоненты либо равны нулю, либо выражаются как: $C_{1313} = C_{2121} = C_{2323} = C_{3131} = C_{3232} = C_{1212}$, $C_{1133} = C_{3311} = C_{2233} = C_{3322} = C_{2211} = C_{1122}$, $C_{2222} = C_{3333} = C_{1111}$, $C_{1331} = C_{3113} = C_{2332} = C_{3223} = C_{2112} = C_{1221}$. Вводятся обозначения $G_{12} \equiv C_{1212}$, $G_{21} \equiv C_{1221}$, $E_{11} \equiv C_{1111}$, $E_{22} \equiv C_{1122}$.

Для ОЦК и ГЦК решеток для различных N получены коэффициенты разложения в ряд Тейлора при первых девяти степенях γ при простом сдвиге. Для коэффициентов степенного ряда недиагональных компонент тензора напряжений вводятся обозначения: $\sigma_{ij}(\gamma) = \sigma_{ij}(0) + G_{ij}\gamma + G_{ij}^{\text{II}}\gamma^2 + G_{ij}^{\text{III}}\gamma^3 + \dots$. Коэффициенты имеют строение

$$G_{ij} = \alpha^6 (C_1^{G_{ij}} a^6 + C_2^{G_{ij}} \alpha^6) \beta / a^{15}$$

и отличаются числовыми множителями $C_1^{G_{ij}}(N)$ и $C_2^{G_{ij}}(N)$, зависящими от числа атомов N . Оказалось, что коэффициенты при первых степенях γ в разложениях $\sigma_{12}(\gamma)$ и $\sigma_{21}(\gamma)$ совпадают. Коэффициенты при четных степенях меньше коэффициентов при первых степенях на 15–18 порядков и ими можно пренебречь. Коэффициенты для $\sigma_{12}(\gamma)$ и $\sigma_{21}(\gamma)$ при нечетных степенях γ , начиная с третьей, оказались различными. Эти члены дают вклад $1-2 \cdot 10^{-3}\%$ в значение компонент тензора напряжений, то есть тензор напряжений Коши симметричен. Вид зависимостей $C_1^{G_{ij}}(N)$ и $C_2^{G_{ij}}(N)$ найден методом наименьших квадратов в классе функций $f(x) = a(x - x_0)^k + b$: $C_{1,FCC}^{G_{12}}(N) = 1343.13(N + 0.47)^{-1.01} - 811.86$ и $C_{2,FCC}^{G_{12}}(N) = -23608.90(N + 0.41)^{-1.008} + 15367.82$.

В пределе:

$$G_{12,FCC}^{\infty} = \alpha^6 (-811.86 a_*^6 + 15367.82 \alpha^6) \beta / a_*^{15}. \quad (1)$$

Для ОЦК решетки

$$C_{1,BCC}^{G_{12}}(N) = 275.61(N + 0.63)^{-1.009} - 121.33,$$

$$C_{2,BCC}^{G_{12}}(N) = -1356.20(N + 0.62)^{-1.008} + 648.28,$$

$$G_{12,BCC}^{\infty} = \alpha^6 (-121.33 a_*^6 + 648.28 \alpha^6) \beta / a_*^{15}. \quad (2)$$

Все касательные напряжения на гранях исходного недеформированного куба оказываются нулевыми, а нормальные напряжения совпадают между собой и выражаются через параметры α , β и a . При условии их равенства нулю получается однозначная связь параметра решетки a и параметра потенциала α , то есть в пределе при $N \rightarrow \infty$ все упругие модули выражаются через параметры α и β . Так, для ГЦК решетки:

$$a^{FCC} / \alpha = 0.0104(N + 0.0834)^{-1.03} + 1.3918, \quad (3)$$

в пределе при $N \rightarrow \infty$:

$$a_*^{FCC} = 1.3918\alpha. \quad (4)$$

Для ОЦК решетки:

$$a^{BCC} / \alpha = -0.0283(N - 1.078)^{-1.02} + 1.1251,$$

$$a_*^{BCC} = 1.1251\alpha. \quad (5)$$

С использованием (1), (2), (4), (5) второй параметр потенциала Ленарда–Джонса β находится как:

$$\beta^{FCC} = 0.150 G^{FCC} (\alpha^{FCC})^3 =$$

$$= 0.05581 G^{FCC} (a_*^{FCC})^3,$$

$$\beta^{BCC} = 0.146 G^{BCC} (\alpha^{BCC})^3 =$$

$$= 0.01023 G^{BCC} (a_*^{BCC})^3. \quad (6)$$

Например, для меди ($a_*^{\text{Cu}} = 0.3615 \cdot 10^{-9}$ (м), $G^{\text{Cu}} = 4.55 \cdot 10^{10}$ (Па)) получаем:

$$\alpha^{\text{Cu}} = 2.5974 \cdot 10^{-10} \text{ (м)},$$

$$\beta^{\text{Cu}} = 1.1996 \cdot 10^{-20} \text{ (Н} \cdot \text{м)}. \quad (7)$$

Вычисления показывают, что модуль сдвига для образца меди с размером 1 см равен $G = 4.54 \cdot 10^{10}$ (Па), для образца с размером 1 мкм – $G = 4.53 \cdot 10^{10}$ (Па), с размером 100 нм – $G = 4.51 \cdot 10^{10}$ (Па), с размером 10 нм – $G = 4.28 \cdot 10^{10}$ (Па). То есть с уменьшением размеров рассматриваемого объема монокристалла его модуль сдвига уменьшается. Аналогичные результаты получены в численном эксперименте.

Модули растяжения-сжатия определяются как (приведены для ГЦК решетки):

$$E_{11\infty}^{FCC} = \alpha^6 (-2626.65 a_*^6 + 37232.60 \alpha^6) \beta / a_*^{15},$$

$$E_{22\infty}^{FCC} = \alpha^6 (-2512.43 a_*^6 + 27729.90 \alpha^6) \beta / a_*^{15}. \quad (8)$$

С учетом соотношения (4) получено, что

$$E_{11}^{FCC} = 127.36 \beta^{FCC} / (\alpha^{FCC})^3,$$

$$E_{22}^{FCC} = 66.47 \beta^{FCC} / (\alpha^{FCC})^3,$$

т.е. коэффициент Пуассона $\nu = C_{1122} / (C_{1111} + C_{1122}) = E_{22} / (E_{11} + E_{22})$ для ГЦК монокристаллов: $\nu^{FCC} = 0.343$. В частности, для меди при полученных выше значениях параметров потенциала (7) следует, что

$$E_{11}^{\text{Cu}} = 8.72 \cdot 10^{10} \text{ (Па)}, \quad E_{22}^{\text{Cu}} = 4.55 \cdot 10^{10} \text{ (Па)}. \quad (9)$$

Рассчитанное значение соответствует экспериментально определенной величине макроскопического модуля Юнга для сверхчистой литой меди: $E_{11}^{\text{Cu}} = 8.40 \cdot 10^{10}$ (Па), отличие составляет 3.5%. Экспериментальное значение макроскопического коэффициента Пуассона меди равно $\nu^{\text{Cu}} = 0.35$, отличие – 2%.

Основные идеи, постановки и полученные при выполнении работы результаты обсуждались с проф. П.В. Трусовым (ПГТУ).

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант №10-08-00156-а).

**DERIVING THE ELASTIC LAW OF METAL MONOCRYSTALS
FROM THE INTERATOMIC INTERACTION POTENTIAL***I.Yu. Zubko, O.V. Melentieva, V.P. Morozova, V.I. Kochurov*

The ascertainment of connection between parameters of Lennard–Jones potential for central type of interatomic interaction and macroscopic elastic moduli of metals with ideal FCC and BCC lattice was studied. It is shown that the found linear tensor \mathbf{C} of elastic properties for FCC and BCC materials is symmetric and anisotropic. The lattice period a_* of macroscopic monocrystal was found to be equal to $a_*^{FCC} = 1.3918\alpha$ for FCC-lattice and to $a_*^{BCC} = 1.1251\alpha$ for BCC-lattice, where α is an equilibrium distance for the isolated pair of atoms (one of the parameters of Lennard–Jones potential). An expression for the second parameter of Lennard–Jones potential was represented using lattice period a_* and macroscopic shear modulus G . The verification of the parameters showed that the difference between the experimental data and the values of the other elastic moduli calculated using these potential parameters is of the order of 2.0–3.5%. The dependences of lattice period, density and elastic moduli on the body size were found. It was shown that the smaller body sizes, the smaller the elastic moduli are. The values of the shear modulus for copper specimens of sizes from 10 nm up to 1 cm were calculated. The obtained results may be used in more precise estimations of mechanical properties of nanoparticles, for which the elastic law is shown to be anisotropic, and the elastic moduli depend on particle sizes.

Keywords: FCC and BCC monocrystals, direct calculation of elastic moduli, cubical anisotropy, Lennard–Jones potential's parameters, dependence of elastic moduli on body size.