

УДК 539.3+539.2

© А. В. Вахрушев, А. А. Шушков  
makaveli.lcf@gmail.com, postmaster@ntm.udm.ru

## МОДЕЛИРОВАНИЕ УПРУГОЙ РЕАКЦИИ НАНОЧАСТИЦ НА СИЛОВОЕ ВОЗДЕЙСТВИЕ

**Ключевые слова:** модуль упругости Юнга, упругие свойства, наночастица, наноэлемент.

**Abstract.** The calculation technique of structural nanoelements elastic constants is developed. The technique is based on the agreement of nanoelement displacements fields are obtained by the method of molecular dynamics with elastic calculation. The agreement of displacements is realized by elastic modulus variation. The calculation dependences of elastic modulus from diameter of nanoparticles are obtained.

### Введение

На сегодняшний день зависимость упругих свойств наноэлементов от их размера, структуры и формы является неизученной и находится на стадии исследования [1]. Существует несколько экспериментальных способов определения упругих характеристик наноэлементов [2;3]. Они являются технически сложными и весьма трудоемкими, вследствие малости размеров данных объектов. Целью настоящей работы являлось создание методики расчета модуля упругости Юнга наночастиц и анализ его изменения в зависимости от диаметра наночастицы.

Методика расчета модуля упругости наноэлементов (в том числе и наночастиц) основана на согласовании перемещений составляющих их атомов с полями перемещений упругих «эквивалентных» элементов при различных видах нагружения. Постановка данной задачи подробно описана авторами [4].

## § 1. Результаты расчетов

Расчеты равновесной конфигурации наночастиц показали, что данные частицы имеют форму близкую к сферической. Поэтому в качестве упругого эквивалентного элемента принят шар.

Рассмотрим результаты численного исследования влияния размера наночастицы, нагруженной осевыми растягивающими (сжимающими) силами, на величину ее модуля упругости. Исследование выполнено для пяти типов материалов: цинка, цезия, магния, кальция и калия.

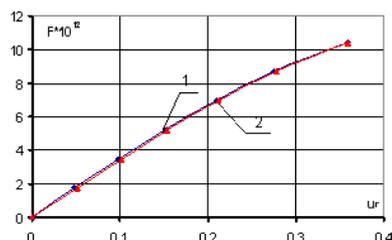


Рис. 1.1: Зависимость силы  $F$  (Н) от перемещений  $u_r$  (А) в точке действия силы при растяжении наночастицы калия, состоящей из 343 атомов: 1- нагружение, 2- разгрузка

Расчет нагружения и разгрузки наночастицы показал, что наночастица деформируется линейно и упруго, так как кривые нагружения и разгрузки совпадают (рис. 1.1).

На рис. 1.2а-1 сплошной линией представлена зависимость перемещений от расстояния до центра «эквивалентного» упругого элемента для модуля Юнга  $E = 9,5 * 10^{10}$  (Па) и коэффициента Пуассона  $\nu = 0,21$ . На этом же графике (рис. 1.2а-2) приведена зависимость радиальных перемещений атомов  $u$  от расстояния до центра масс наночастицы цинка  $r$ . Видно, что указанные зависимости не совпадают. Поэтому, изменяя модуль Юнга, добиваемся слияния данных кривых (рис. 1.2б). Критерием этого является среднеквадратичная ошибка.

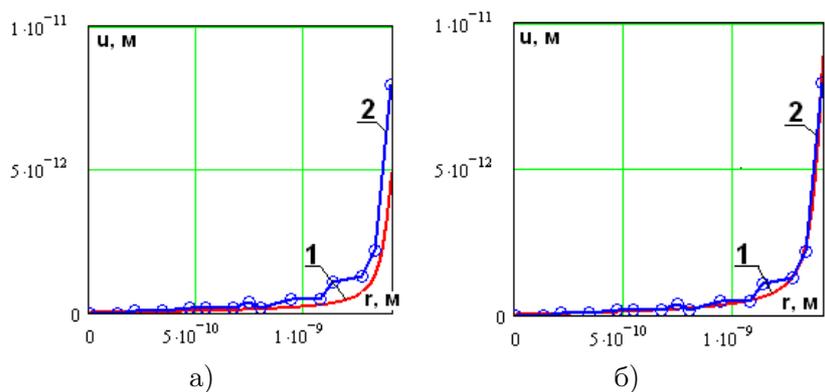


Рис. 1.2: Зависимость перемещений  $u$  от радиуса  $r$ : 1 – для упругого шара, 2 – для наночастицы цинка, состоящей из 2197 атомов; а)  $E = 9,5 \cdot 10^{10}$  (Па), б)  $E = 5,25 \cdot 10^{10}$  (Па)

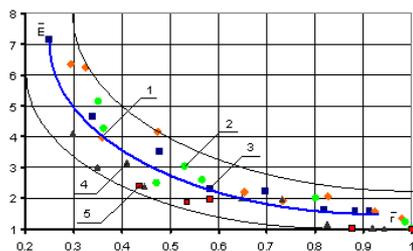


Рис. 1.3: Зависимость относительного модуля Юнга  $\bar{E}$  от относительного радиуса  $\bar{r}$  для наночастиц из различных материалов: 1-цезий, 2-кальций, 3-цинк, 4-магний, 5-калий

Следует особо отметить, что зависимости модуля упругости Юнга от радиуса наночастицы, нагруженной осевыми растягивающими или сжимающими силами, совпадают. По аналогичной методике построены расчетные зависимости модуля Юнга от радиуса наночастиц цезия, магния, кальция и калия.

Рис. 1.3 иллюстрирует общую тенденцию увеличения модуля Юнга, однако у различных материалов она неодинакова. Относительный модуль цинка увеличивается более чем в 7 раз, а модуль калия только в 2,5 раза.

## **Выводы**

Разработана методика определения модуля Юнга упругих констант наночастиц. Проведенные расчеты позволили выявить основные закономерности зависимости модуля Юнга от размера наночастиц. Численные расчеты показали, что при уменьшении размера наночастиц цинка, цезия, магния, кальция, калия модуль Юнга увеличивается.

## **Список литературы**

1. Гусев А.И., Ремпель А.А. Нанокристаллические материалы. М.: Физматлит, 2001. 224с.
2. Боярская Ю.С., Грабко Д.З., Кац М.С. Физика процессов микроиндентирования. Кишинев: Штиинца, 1986. 234 с.
3. Булычев С.И., Алехин В.П. Испытание материалов непрерывным вдавливанием индентора. М.: Машиностроение, 1990. 224 с.
4. Вахрушев А.В., Шушков А.А. Методика расчета упругих параметров нанозаэментов // Химическая физика и мезоскопия. Т. 7, №3. 2005. С. 277-285.