

## **Влияние длины Ni-нанотрубок на анизотропию их модуля Юнга**

*К.В. Серков*

*Уральский Федеральный Университет, Екатеринбург*

**Аннотация:** В статье исследуется влияние длины Ni-нанотрубок на анизотропию механических свойств нанотрубок на примере модуля Юнга. При этом учитывается влияние на анизотропию как монокристаллической симметрии структуры, так и преимущественного пространственного распределения кристаллографических осей.

**Ключевые слова:** анизотропия механических свойств, упругие постоянные, модуль Юнга, параметр анизотропии.

### **Введение**

Существенный вклад в анизотропию свойств поликристаллов вносит монокристаллическая сингония. Но, необходимо учитывать и влияние кристаллографической текстуры, которая является одним из важнейших факторов, обуславливающих анизотропию эффективных свойств поликристаллических материалов. В современных работах исследуется и подтверждается связь анизотропии механических свойств с кристаллографической текстурой. Современные исследования в области определения эффективных свойств зачастую опираются на полученные экспериментальным путем данные. Довольно много работ посвящено магнитным свойствам выращиваемых Ni-нанотрубок [1-3]. В данной работе акцент сделан на оценку влияния длины Ni-нанотрубок на анизотропию механических свойств нанотрубок на примере модуля Юнга.

### **Метод описания упругих свойств монокристалла кубической симметрии**

Для описания упругих свойств монокристалла Ni, который обладает кубической сингонией, используется метод собственных упругих состояний

[4]. Значения классических упругих постоянных для монокристалла Ni приведены в таблице №1.

Таблица №1.  
Значения упругих постоянных, ГПа

Химический элемент	$C_{1111}$	$C_{1122}$	$C_{1212}$
Ni	245,3	146,1	124,7

Обобщенный закон Гука можно представить в виде линейного преобразования пространства симметричных тензоров второго ранга  $\sigma = C\varepsilon$ . Здесь  $\sigma$  и  $\varepsilon$  – симметричные тензоры напряжений и деформаций;  $C$  – линейный оператор упругости.

В шестимерном пространстве симметричных тензоров второго ранга особую роль имеют тензоры  $\omega$ , удовлетворяющие уравнению  $C\omega = \lambda\omega$ . Эти тензоры определяют собственные упругие состояния. Параметры  $\lambda_k$  ( $k=1,2,\dots,6$ ) есть собственные значения линейного оператора  $C$  [5]. Их называют собственными упругими модулями или модулями Кельвина-Рыхлевского. Собственные упругие модули кубического кристалла выражаются через классические модули упругости равенствами:

$$\lambda_1 = C_{1111} + 2C_{1122} = 537,5 \text{ МПа}$$

$$\lambda_2 = \lambda_3 = C_{1111} - C_{1122} = 99,2 \text{ МПа}$$

$$\lambda_4 = \lambda_5 = \lambda_6 = 2C_{1212} = 249,4 \text{ МПа}$$

Анизотропию упругих свойств можно оценивать с помощью параметра анизотропии  $A$ , который рассчитывается по формуле:

$$A = \frac{\lambda_4}{\lambda_2} = \frac{2C_{1212}}{C_{1111} - C_{1122}} \quad (1)$$

Для изотропных материалов параметр анизотропии равен 1. Для монокристалла Ni параметр анизотропии равен  $A = 2,51$ . Таким образом, можно отнести Ni к сильно анизотропным материалам. По степени анизотропии монокристаллов можно судить и о возможной степени анизотропии текстурированного поликристалла.

### Ориентационные факторы

Преимущественная ориентация кристаллографических осей – кристаллографическая текстура определяющая анизотропию упругих и пластических свойств поликристаллических материалов [6]. Для описания кристаллографической текстуры используют различные подходы [7,8]. В работе предлагается количественно описывать текстуру с помощью интегральных характеристик – ориентационных факторов. Информация о распределении кристаллографических осей в поликристаллическом образце берется из дифрактограмм [9].

Текстура оказывает существенное влияние на анизотропию как упругих, так и пластических свойств. Влияние типа текстуры на анизотропию свойств поликристаллических материалов зачастую основаны на использовании моделей, в которых кристаллографическая текстура описывалась ограниченным набором идеальных ориентаций. При описании текстуры идеальными ориентировками ориентационные факторы могут быть найдены по их значениям для отдельных ориентировок и их доли в объеме текстурированного материала по формуле удельных объемов:

$$\Delta_i = \sum f^{uvw} \Delta_i^{uvw} \quad (2)$$

где  $\Delta_i^{uvw}$  – ориентационный фактор индивидуальной ориентировки  $[uvw]$ ,  $f^{uvw}$  – объемная доля этой ориентировки. Относительные объемные

содержания каждой ориентировки могут меняться произвольным образом, но при этом должно выполняться очевидное условие:

$$\sum f^{uvw} = 1 \quad (3)$$

Ориентационные факторы через индексы Миллера для каждой индивидуальной ориентировки  $[uvw]$  вычисляется по формуле:

$$\Delta_i^{uvw} = \frac{(u^2 v^2 + u^2 w^2 + v^2 w^2)}{(u^2 + v^2 + w^2)^2} \quad (4)$$

Для кубической симметрии структуры существует три таких параметра. В силу симметрии нанотрубок Ni формируется так называемая аксиальная текстура, для которой текстурные параметры связаны между собой соотношением:

$$\Delta_1 = \Delta_2 = \frac{1}{8} (1 + 3\Delta_3) \quad (5)$$

Экспериментальные данные, полученные для нанотрубок длины 3 мкм, 6 мкм, 8 мкм и 12 мкм выдают выборку определенного набора ориентаций с наиболее высокими плотностями:  $[111]$ ,  $[200]$  и  $[220]$ . Для этих идеальных ориентировок рассчитаны ориентационные факторы:

$$\Delta_3^{[111]} = 0,33; \Delta_3^{[200]} = 0; \Delta_3^{[220]} = 0,25$$

Полученной экспериментальным путем количественной информации о преимущественных кристаллографических ориентациях в поликристаллических образцах достаточно, чтобы рассчитать ориентационные факторы Ni-нанотрубок. С учетом плотности появления ориентировок  $[111]$ ,  $[200]$  и  $[220]$  в нанотрубках (таблица №2) проведен расчет ориентационных факторов поликристаллических опытных образцов (таблица №3).

Таблица №2.

Плотность распределения идеальных ориентировок в опытных образцах

Образец	$\Delta_i^{uvw} * f^{uvw}$	Плотность	$f^{uvw}$ (%)
Ni – 3 мкм, [111]	0,238748	679	0,716245
Ni – 3 мкм, [200]	0	193	0,203586
Ni – 3 мкм, [220]	0,020042	76	0,080169
Ni – 6 мкм, [111]	0,247669	983	0,743008
Ni – 6 мкм, [200]	0	246	0,185941
Ni – 6 мкм, [220]	0,017763	94	0,071051
Ni – 8 мкм, [111]	0,241579	2001	0,724737
Ni – 8 мкм, [200]	0	503	0,18218
Ni – 8 мкм, [220]	0,023271	257	0,093082
Ni – 12 мкм, [111]	0,234213	2129	0,70264
Ni – 12 мкм, [200]	0	573	0,189109
Ni – 12 мкм, [220]	0,027063	328	0,108251

Таблица №3.

Ориентационные факторы нанотрубок

Образец	$\Delta_1 = \Delta_2$	$\Delta_3$
Ni – 3 мкм	0,22	0,25879
Ni – 6 мкм	0,224537	0,265432
Ni – 8 мкм	0,224319	0,26485
Ni – 12 мкм	0,222979	0,261276

### Упругие свойства нанотрубок

Обобщенный закон Гука для поликристалла дает связь усредненных по объему образца тензоров напряжений и деформаций  $\langle \sigma \rangle = C^* \langle \varepsilon \rangle$  [10]. Параметры  $\lambda_k^{(0)}$  ( $k = 1, 2, \dots, 6$ ) есть собственные значения линейного оператора  $C^*$ . При этом  $\lambda_1^{(0)}$  – это утроенный объемный модуль, остальные – модули сдвига. Собственные упругие модули нанотрубок, имеющих гексагональную симметрию, определяются по следующим формулам:

$$\lambda_1^{(0)} = \lambda_1,$$

$$\begin{aligned} \lambda_{2,3}^{(0)} &= \lambda_2 \left( 1 - 3\Delta_1 + \Delta_2 - \Delta_3 + 2p_{2,3}(\Delta_2 - \Delta_3) \right) \lambda_4 \left( 3\Delta_1 - \Delta_2 + \Delta_3 - 2p_{2,3}(\Delta_2 - \Delta_3) \right), \\ \lambda_4^{(0)} &= \lambda_2(2\Delta_2 + 2\Delta_3 - 2\Delta_1)\lambda_4(1 - (2\Delta_2 + 2\Delta_3 - 2\Delta_1)), \\ \lambda_5^{(0)} &= \lambda_2(2\Delta_3 + 2\Delta_1 - 2\Delta_2)\lambda_4(1 - (2\Delta_3 + 2\Delta_1 - 2\Delta_2)), \\ \lambda_6^{(0)} &= \lambda_2(2\Delta_1 + 2\Delta_2 - 2\Delta_3)\lambda_4(1 - (2\Delta_1 + 2\Delta_2 - 2\Delta_3)). \\ p_{2,3} &= k \pm \sqrt{k^2 + k + 1}, \quad k = \frac{\Delta_1 - \Delta_2}{\Delta_2 - \Delta_3} \end{aligned} \quad (6)$$

В случае кубической симметрии монокристалла и аксиальной текстуры

$$p_{2,3} = \pm 1$$

Рассчитанные собственные упругие модули Ni нанотрубок представлены в таблице 4.

Таблица №4.

Собственные значения модулей упругости Ni нанотрубок, МПа

Образец	$\lambda_1^{(0)}$	$\lambda_2^{(0)}$	$\lambda_3^{(0)} = \lambda_6^{(0)}$	$\lambda_4^{(0)} = \lambda_5^{(0)}$
Ni – 3 mkm	537,5	202,94	177,22	154,76
Ni – 6 mkm	537,5	206,70	177,76	152,88
Ni – 8 mkm	537,5	206,37	177,72	153,04
Ni – 12 mkm	537,5	204,34	177,42	154,06

Усредненные модули упругости в классической форме представления, не обладающие физическим смыслом, могут быть записаны через собственные упругие модули:

$$\begin{aligned} c_{1111}^{(0)} &= c_{2222}^{(0)} = \frac{1}{6} \left( 2\lambda_1^{(0)} + \lambda_2^{(0)} + 2\lambda_3^{(0)} \right), \\ c_{3333}^{(0)} &= \frac{1}{3} \left( \lambda_1^{(0)} + 2\lambda_2^{(0)} \right), \\ c_{1122}^{(0)} &= \frac{1}{6} \left( 2\lambda_1^{(0)} + \lambda_2^{(0)} - \lambda_3^{(0)} \right), \\ c_{3311}^{(0)} &= c_{2233}^{(0)} = \frac{1}{3} \left( \lambda_1^{(0)} - \lambda_2^{(0)} \right), \\ c_{1212}^{(0)} &= \frac{1}{3} \lambda_6^{(0)}, \quad c_{1313}^{(0)} = c_{2323}^{(0)} = \frac{1}{2} \lambda_5^{(0)} \end{aligned} \quad (7)$$

Таблица №5.  
 Модули упругости Ni нанотрубок

Образец	$c_{1111}^{(0)} = c_{2222}^{(0)}$	$c_{3333}^{(0)}$	$c_{1313}^{(0)} = c_{2323}^{(0)}$	$c_{1122}^{(0)}$	$c_{1313}^{(0)} = c_{2323}^{(0)}$	$c_{1212}^{(0)}$
Ni – 3 mkm	301,60	314,46	111,52	124,38	77,38	88,61
Ni – 6 mkm	302,50	316,97	110,27	124,74	76,44	88,88
Ni – 8 mkm	302,42	316,74	110,38	124,70	76,52	88,86
Ni – 12 mkm	301,93	315,39	111,06	124,51	77,03	88,71

### Модуль юнга

Модуль Юнга  $E(\vec{k})$  в направлении  $\vec{k}$  определяется соотношением

$$E(\vec{k})^{-1} = \sum_{n=1}^6 \frac{(\vec{k}\omega^n\vec{k})^2}{\lambda_n^{(0)}} = \sum_{n=1}^6 \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \frac{(k_i k_j \omega_{ij}^n)^2}{\lambda_n^{(0)}} \quad (8)$$

Данная формула допускает построение трехмерной модели, визуализирующей анизотропию модуля Юнга нанотрубок, в базисе из собственных упругих состояний.

### Заключение

Результаты числовых экспериментов по обработке имеющихся данных о Ni-нанотрубках позволяют сделать вывод об адекватности предлагаемых методов представления упругих свойств в терминах собственных упругих состояний и количественного описания текстуры с помощью ориентационных факторов – интегральных характеристик распределения кристаллографических осей в поликристаллическом образце для описания усредненных по объему механических свойств нанотрубок.

### Литература

1. Мазалова В. Л., Положенцев О. Е., Дорошева А. А., Чуб Д. С., Чайников А. П., Бугаев А. Л., Солдатов М. А., Гуда А. А., Хаишбашев Г. А. Исследование локальной атомной и электронной структуры наностержней AlN:Fe методами XANES и DFT // Инженерный вестник Дона. 2013. №4.  
URL: [ivdon.ru/ru/magazine/archive/n4y2013/1923](http://ivdon.ru/ru/magazine/archive/n4y2013/1923)
2. Краснов Д. О., Женса А. В., Кольцова Э. М., Магнитные свойства хиральных медных нанотрубок // Computational nanotechnology. 2022. vol. 9, no. 3, с. 68-72.
3. Шпак А. А., Куликова И. В., Методика расчета эквивалентных механических параметров мембран сложной топологии для элементов микросистемной техники // Инженерный вестник Дона. 2013. №2.  
URL: [ivdon.ru/ru/magazine/archive/n2y2013/1648](http://ivdon.ru/ru/magazine/archive/n2y2013/1648)
4. Берестова С. А. Описание свойств текстурированных поликристаллов в терминах собственных упругих состояний// ХИВ Международная конференция "Механика, ресурс и диагностика материалов и конструкций": сборник материалов (Екатеринбург, 09-13 ноября 2020 г.). - Екатеринбург: ИМАШ УрО РАН. 2020. - С. 183-184.
5. Остапович К. В., Трусков П. В., Вычислительная механика сплошных сред. 2019. 12(1), с.67–79.
6. Лобанов М. Л., Юровских А. С., Кардолина Н. И., Русаков Г. М., Методы исследования текстур в материалах, Екатеринбург, Издательство Уральского Федерального университета. 2014. 116 с. — ISBN 978-5-7996-1107-1



7. Мокрова С. М., Петров Р. П., Милич В. Н., Бюллетень Удмуртского Университета. Компьютерные науки. 2016. 26(3), с. 336–344.
8. Здоровец М.В., Боргеков Д.Б., Козловский А.Л., Серков К.В., Хлебников Н.А. «Направленная модификация наноструктур с помощью ионизирующего излучения» Монография / Екатеринбург, - Изд. Урал. Ун-та. 2018. 131с. ISBN: 978-5-7996-2476-7
9. Гхорбанхоссеини С., Ферештех-Саниее Ф., Сонболи А., Экспериментальное исследование влияния высокотемпературного прессования на микроструктуру, механические свойства, анизотропию и текстуру листов Al. Журнал сплавов и соединений. 2020. 817, 152763.
10. Келлер И.Э., Механика сплошной среды: учеб. пособие. – Пермь: Изд-во Перм. нац. исслед. политехн. ун-та, 2022. - 260с.

### **References**

1. Mazalova V. L., Polozhencev O. E., Dorosheva A. A., Chub D. S., Chajnikov A. P., Bugaev A. L., Soldatov M. A., Guda A. A., Haishbashev G. A., Inzhenernyj vestnik Dona. 2013. №4. URL: [ivdon.ru/ru/magazine/archive/n4y2013/1923](http://ivdon.ru/ru/magazine/archive/n4y2013/1923)
2. Krasnov D. O., Zhensa A. V., Kol'cova J. M., Computational nanotechnology. 2022. vol. 9, no. 3, pp. 68-72.
3. Shpak A. A., Kulikova I. V. Inzhenernyj vestnik Dona. 2013. №2. URL: [ivdon.ru/ru/magazine/archive/n2y2013/1648](http://ivdon.ru/ru/magazine/archive/n2y2013/1648)
4. Berestova S. A. HIV Mezhdunarodnaja konferencija "Mehanika, resurs i diagnostika materialov i konstrukcij": sbornik materialov (Ekaterinburg, 09-13 november 2020), Ekaterinburg: IMASh UrO RAN. 2020. pp.183-184.

5. Ostapovich K. V., Trusov P. V., Vychislitel'naja mehanika sploshnyh sred [Computational continuum mechanics]. 2019. 12(1), pp.67–79.
6. Lobanov M. L., Jurovskikh A. S., Kardonina N. I., Rusakov G. M., Metody issledovanija tekstur v materialah [Research methods texture on materials], Ekaterinburg, Izdatel'stvo Ural'skogo Federal'nogo universiteta. 2014. 116p. ISBN 978-5-7996-1107-1.
7. Mokrova S. M., Petrov R. P., Milich V. N., Bjulleten' Udmurtskogo Universiteta. Komp'juternye nauki, 2016. 26(3), pp. 336–344.
8. Zdorovec M.V., Borgekov D.B., Kozlovskij A.L., Serkov K.V., Hlebnikov N.A. Napravlenaja modifikacija nanostruktur s pomoshh'ju ionizirujushhego izluchenija Monografija [Directed modification of the zinc nanostructures with ion beams ] Ekaterinburg, Izd. Ural. Universiteta. 2018. 131p. ISBN: 978-5-7996-2476-7
9. Ghorbanhosseini S., Fereshteh-Saniee F., Sonboli A., Journal of Alloys and Compounds. 2020. 817, 152763.
10. I.Ie. Keller, Mehanika sploshnoj sredy [Continuum mechanics] Perm': Izdatelstvo Perm. nac. issled. Politehn. universiteta. 2022. 260p.