

应用 CBR 确定面心立方金属的表面弹性参量¹⁾

刘建云 宋晶如 魏悦广²⁾

(中国科学院力学研究所非线性力学国家重点实验室, 北京 100190)

摘要 首先从能量变分出发基于同时考虑应变梯度效应和表面效应的跨尺度力学理论, 推导出表面能和表面弹性本构等基本关系, 然后基于简单的准连续 Cauchy-Born 法则 (CBR) 建立一种确定表面能密度以及表面弹性参量的方法. 进一步以面心立方 (face-centre-cubic, FCC) 金属为例, 系统地获得了常用 FCC 金属表面弹性参量的数值, 结果与他人应用分子动力学计算得到的结果相吻合.

关键词 跨尺度力学理论, 面心立方金属, Cauchy-Born 法则, 表面能密度, 表面弹性参量

中图分类号: O033 文献标识码: A DOI: 10.6052/0459-1879-12-372

引言

新型材料区别于传统材料的主要特征为新型材料的总体或者局部是从微结构的精细设计制造而成的, 因此新型材料通常具有优异的力学性能. 新型材料的广泛应用, 必将大幅提升产品的质量和寿命. 由于新型材料力学行为的微结构依赖性, 一般来说传统力学理论已不能很好地对其力学行为进行合理的描述, 需要采用有效的能够刻画跨尺度效应的力学理论. 先前人们就此问题的研究主要从 2 个方面独立开展的: 建立应变梯度理论以计及微结构变形引起的应变梯度效应; 建立表/界面理论以计及纳米结构变形的表界面效应. 采用应变梯度理论对微米结构材料强度的尺度效应给出了有效的解释, 即通过考虑高阶应力与应变梯度的贡献, 引入表征材料微结构变形特征的内禀尺度, 有效地表征了微结构材料的力学行为尺度效应^[1]. 截止目前, 对于应变梯度理论的研究工作仍在不断开展^[1-4], 应变梯度理论中的特征尺度参量主要通过拟合得到^[5-6]. 当材料微结构尺度在纳米尺度时, 由于材料的比表面积提高达 $10^6 \sim 10^9 \text{ m}^{-1}$ 的量级^[7], 表面能的大小已上升为与应变能的大小可比较的程度, 这时人们提出了考虑表界面效应的理论以刻画材料力学行为的尺度效应^[7-10], 但该理论所刻画的尺度效应只在很小的尺度 (约 10 nm 以下) 发生. 也有学者通过考虑微极效应来刻画材料微结构引起的尺度效

应^[11]. 从众多发表的研究结果可看出: 仅考虑应变梯度效应不能有效地刻画纳米材料的力学行为; 而仅考虑表界面效应又不能很好地刻画微米结构材料的力学行为. 为此, 提出了应建立同时考虑应变梯度效应和表界面效应的跨尺度力学理论, 并建立了该理论的总体框架及对纳米晶材料力学性能尺度效应的应用^[12].

跨尺度力学理论中表界面能密度被视为不随变形而变化的材料参量. 本文将考虑表面能密度随材料变形而变化, 以此推导出一般情况下的表面弹性本构关系, 发展一种简单的确定表面弹性参量的方法.

从材料物理可知, 表面效应主要是由于位于材料表面的原子所处的环境与其内部原子环境的不同, 造成了两类原子能量的差异, 使得材料表面的性能与体材料不同, 进而对结构整体的力学性能造成了一定的影响. 研究表面效应, 一个最基本的概念就是表面能, 众多学者已对表面效应开展了大量的研究. Gibbs^[13] 给出了表面能的定义, 表面原子与体内原子相比剩余的能量. 目前对于表面能的计算主要通过 3 种方法: 实验、理论和计算机模拟^[14]. 其次, 表面应力也是研究固体表面的一个重要参数^[15]. 与液体表面发生变化不同, 当固体表面发生变化时, 由于固体内部的原子不能够随意移动, 因此会产生表面应力. Shuttleworth^[16] 将表面应力定义为表面能对应变的微分, 表面应力会对纳米结构的性能有一

2012-12-24 收到第 1 稿, 2013-02-20 收到修改稿.

1) 国家自然科学基金资助项目 (11021262, 10932011).

2) 魏悦广, 研究员, 主要研究方向: 跨尺度力学理论、实验及模拟研究. E-mail: ywei@lnm.imech.ac.cn

定的影响, 比如对只发生有限变形运动的硅纳米线简谐频率的改变^[17]. Maede 等^[18]、Needs^[19] 采用从头算法计算得到了半导体元素、金属元素的表面应力. 另外, 表面弹性常数也是描述表面性能的参数之一, 它描述了表面应力与应变之间的比值, 即表面应力对应变的微分. Shenoy^[20] 对表面弹性常数给出了详细的推导, 得到了表面弹性常数的表达式, 并利用分子模拟得到了一系列的结果. Mi 等^[21] 和 Pahlecani 等^[22] 通过分子动力学也得到了自己的结果.

关于表面弹性本构参数的确定方法, 本文首先通过理论推导, 得到表面应力、表面弹性参数的表达式, 然后采用原子间的作用势来描述原子间的相互作用, 计算得到了原子的能量. 按照表面能密度的定义通过采用纳米板模型计算得到表面能密度; 应用准连续理论——Cauchy-Born 法则, 描述变形后的纳米板的原子构型, 得到表面能密度对变形的依赖关系. 最后根据理论公式计算得到了其他表面参数的数值.

1 表面弹性参量表征

1.1 固体的表面能与总势能的变分表达式

在传统力学理论中, 总势能的变分表达式为

$$\int_V \sigma \delta \epsilon dV - \int_V \bar{f} \delta u dV - \int_S \bar{t} \delta u dS = 0 \quad (1)$$

其中, \bar{f} 为体力, \bar{t} 为面力. 对同时考虑应变梯度效应与表面效应的跨尺度力学理论, 总势能的变分表达式为^[12]

$$\int_V (\sigma \delta \epsilon + \tau \delta \eta) dV + \delta \int_{S'} \gamma dS' - \int_V \bar{f} \delta u dV - \int_S (\bar{t} \delta u + \bar{S}^s \delta \epsilon^s + \bar{r} \cdot (\delta u n \cdot \nabla)) dS = 0 \quad (2)$$

其中 τ, η 为高阶应力和应变梯度, $\tau \delta \eta$ 为应变梯度效应对应变能密度变分的贡献, γ 为表面能密度, $\delta \int_{S'} \gamma dS'$ 为表面能的变分, $\bar{S}^s \delta \epsilon^s$ 为表面残余功, $\bar{r} \cdot (\delta u n \cdot \nabla)$ 为表面高阶应力矩的作用功. 高阶应力与应变梯度在弹性情况的表达式可化简为^[1-3]

$$\eta_{ijk} = \frac{\partial^2 u_k}{\partial x_i \partial x_j}, \quad \tau_{ijk} = 2El^2 \eta_{ijk} \quad (3)$$

式中, l 为材料的特征尺度.

如果固体的代表性构元尺度为微米尺度, 表面效应相对于应变梯度效应很小可忽略; 如果固体的

代表性构元尺度为纳米尺度, 表面效应和应变梯度效应同等重要.

1.2 表面应力及表面弹性参量的表征

下面, 对表面效应展开进一步分析. 对式 (2) 中表面能的变分项 $\delta \int_{S'} \gamma dS'$ 可作进一步分析和推导. 材料变形后的面积 S' 与变形前面积 S 之间的关系如图 1 所示.

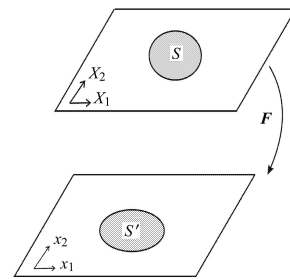


图 1 表面变形示意图

Fig. 1 Schematic of surface deformation

图中, S 为初始构型中的表面面积, 坐标用 X_1, X_2 表示; 经过变形梯度 F 的作用, 面积为 S' , 即时构型中坐标为 x_1, x_2 , 二者之间关系为

$$x_i = F_{ij} X_j \quad (4)$$

应变可以表示为

$$\epsilon_{ij}^s = \frac{1}{2} (F_{ki} F_{kj} - \delta_{ij}) \quad (5)$$

其中 δ_{ij} 为 Kronecker 符号. S 与 S' 之间的关系即可表示为

$$S' = S \det F = S J^s = S \sqrt{\det(\mathbf{I} + 2\epsilon^s)} \quad (6)$$

其中 J^s 为变形矩阵 F 的行列式. 将表面项展开得到

$$\begin{aligned} \delta \int_{S'} \gamma dS' &= \int_S \delta(\gamma J^s) dS = \\ &= \int_S \left[J^s \frac{\partial \gamma}{\partial \epsilon^s} \delta \epsilon^s + \gamma \frac{\partial J^s}{\partial \epsilon^s} \delta \epsilon^s \right] dS = \\ &= \int_S J^s \left[\frac{\partial \gamma}{\partial \epsilon^s} + \gamma (\mathbf{I} + 2\epsilon^s)^{-1} \right] \delta \epsilon^s dS = \\ &= \int_{S'} \left[\frac{\partial \gamma}{\partial \epsilon^s} + \gamma (\mathbf{I} + 2\epsilon^s)^{-1} \right] \delta \epsilon^s dS' \end{aligned} \quad (7)$$

其中, $\partial J^s / \partial \epsilon^s = J^s (\mathbf{I} + 2\epsilon^s)^{-1}$. 同时, 根据表面能还可以表示为表面应力 S^s 在表面做功的积分,

$\delta \int_{S'} \gamma dS' = \int_{S'} S^s \delta \epsilon^s dS'$, 结合式 (7) 推导得到表面应力的表达式

$$S^s = \frac{\partial \gamma}{\partial \epsilon^s} + \gamma (\mathbf{I} + 2\epsilon^s)^{-1} \quad (8)$$

当应变为 0 时, 即可得到表面残余应力

$$\bar{S}^s = \left. \frac{\partial \gamma}{\partial \epsilon^s} \right|_{\epsilon^s=0} + \gamma \mathbf{I} \quad (9)$$

另外根据表面应力 S^s 与表面应变 ϵ^s 之间的关系

$$S^s = \bar{S}^s + D^s \epsilon^s \quad (10)$$

可以得到表面弹性系数 D^s 的表达式

$$D^s = \frac{\partial S^s}{\partial \epsilon^s} \quad (11)$$

其中, D^s 为四阶张量, 由式 (8) 和式 (11) 可以得到分量表达式为^[20]

$$D_{ijkl}^s = \left. \frac{\partial S_{ij}^s}{\partial \epsilon_{kl}^s} \right|_{\epsilon^s=0} = \left(-2\gamma \delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{ij} \frac{\partial \gamma}{\partial \epsilon_{kl}^s} + \frac{\partial^2 \gamma}{\partial \epsilon_{ij}^s \partial \epsilon_{kl}^s} \right) \Bigg|_{\epsilon^s=0} \quad (12)$$

其中 $i, j, k, l = 1, 2$.

2 计算方法

2.1 表面能密度的计算

沿用 Gibbs^[13] 给出的表面能定义, 由于表面原子与体内原子所处环境的不同, 造就了二者能量的差异, 表面原子与体内原子相比剩余的能量即为表面自由能. 通过对比纳米薄板的总能量与同等原子数的体内原子能量之和, 计算得到差异的能量即表面自由能, 表面能密度的表达式为

$$\gamma = \frac{\sum_{i=1}^n E_i - nE_b}{2A} \quad (13)$$

其中, n 表示纳米薄板的原子个数, E_i 为第 i 个原子的能量, E_b 为体内原子的能量, A 为纳米薄板的表面积. 式 (13) 定量地刻画了材料表面性能与体性能的差异. 计算过程中, 计算模型选定为厚度方向 5 倍晶格常数, 面内边长 30 倍晶格常数的方形表面, 面内采用周期性边界条件, 仅考虑面外弛豫情况.

2.2 表面应力与表面弹性系数

本研究以面心立方 (face-centre-cubic, FCC) 金属

的 (100) 和 (111) 晶面为例进行计算. 对于面心立方金属的 (100),(111) 晶面, 表面残余应力 \bar{S}^s 只存在 1 个独立参量, 即 $\bar{S}_{11}^s = S_{22}^s$, $S_{12}^s = 0$, 于是 FCC 金属的表面应力表达式可进一步写为

$$\bar{S}_{11}^s = \left(\gamma + \frac{\partial \gamma}{\partial \epsilon_{11}^s} \right) \Bigg|_{\epsilon^s=0} \quad (14)$$

对于表面弹性常数 D^s , 则存在 3 个独立量, $D_{1111}^s = D_{2222}^s$, $D_{1122}^s = D_{2211}^s$ 和 D_{1212}^s , 其余为零^[20], 具体表达式为

$$D_{1111}^s = \left(-2\gamma + \frac{\partial \gamma}{\partial \epsilon_{11}^s} + \frac{\partial^2 \gamma}{\partial \epsilon_{11}^s{}^2} \right) \Bigg|_{\epsilon^s=0} \quad (15)$$

$$D_{1212}^s = \left(-2\gamma + \frac{\partial^2 \gamma}{\partial \epsilon_{12}^s{}^2} \right) \Bigg|_{\epsilon^s=0} \quad (16)$$

$$D_{1122}^s = \left(\frac{\partial \gamma}{\partial \epsilon_{22}^s} + \frac{\partial^2 \gamma}{\partial \epsilon_{11}^s \partial \epsilon_{22}^s} \right) \Bigg|_{\epsilon^s=0} \quad (17)$$

由于表面能密度 γ 是表面应变 ϵ 的函数, 即 γ 可以写为 ϵ 的多项式

$$\gamma = \gamma^0 + A_1 \epsilon + A_2 \epsilon^2 + A_3 \epsilon^3 + \dots \quad (18)$$

对于 $\bar{S}_{11}^s, D_{1111}^s, D_{1212}^s$ 只与 1 个应变分量有关, 分别对应于单轴拉压变形和剪切变形, 通过不同的应变数值, 可以计算得到一系列的 γ 数值, 利用数据拟合软件, 可以得到具体的 γ 与应变之间的表达式, 即可计算得到相应的参量数值. 而对于 D_{1122}^s 涉及到 2 个应变, 采用双轴拉压变形模式进行模拟, 而 γ 的多项表达式则变为

$$\gamma = \gamma^0 + B_1 \epsilon_{11} + B_2 \epsilon_{22} + B_3 \epsilon_{11} \epsilon_{22} + B_4 \epsilon_{11}^2 + B_5 \epsilon_{22}^2 + \dots \quad (19)$$

计算过程中, 首先确定其中一个应变 ϵ_{11} 的数值, 根据另外一个应变 ϵ_{22} 的变化进行拟合, 对于拟合得到的关于 ϵ_{11} 的表达式再根据 ϵ_{11} 在不同数值下的结果进行拟合, 最终确定 S_{1122} 的数值. 上述提到的单轴拉压、剪切、双轴拉压均可通过 Cauchy-Born 法则^[23] 进行变形描述, 变形梯度分别可以写为

$$\mathbf{F}_1 = \begin{bmatrix} 1 + \epsilon_{11} & \\ & 1 \end{bmatrix} \quad (20)$$

$$\mathbf{F}_2 = \begin{bmatrix} 1 & \epsilon_{12} \\ & 1 \end{bmatrix} \quad (21)$$

$$\mathbf{F}_3 = \begin{bmatrix} 1 + \epsilon_{11} & \\ & 1 + \epsilon_{22} \end{bmatrix} \quad (22)$$

3 计算结果

3.1 势能的选取

本文计算主要采用了 2 种势能, 分别是 Johnson 的嵌入势^[24]和 Sutton 的远程势^[25]. Johnson 势能的表达式为

$$\left. \begin{aligned} E_t &= \sum_i F(\rho_i) + \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} \phi(r_{ij}) \\ \rho_i &= \sum_{j \neq i} f(r_{ij}) \end{aligned} \right\} \quad (23)$$

$$\left. \begin{aligned} f(r) &= f_e \exp[-\beta(r/r_e - 1)] \\ \phi(r) &= \phi_e \exp[-\gamma(r/r_e - 1)] \end{aligned} \right\} \quad (24)$$

$$\left. \begin{aligned} F(\rho) &= -E_c(1 - \ln x)x - 6\phi_e y \\ x &= (\rho/\rho_e)^{\alpha/\beta}, \quad y = (\rho/\rho_e)^{\gamma/\beta} \end{aligned} \right\} \quad (25)$$

其中, $f_e, \phi_e, E_c, \alpha, \beta, \gamma$ 均为可查的参数^[21], ρ_e 为当原子处于平衡态时的电子密度.

Sutton 势为

$$E = \varepsilon \left[\frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} V(r_{ij}) - c \sum_i \rho_i^{1/2} \right] \quad (26)$$

$$V(r) = \left(\frac{a}{r}\right)^n, \quad \rho_i = \sum_{j \neq i} \left[\frac{a}{r_{ij}}\right]^m \quad (27)$$

其中, ε, c, m, n 均为可查的参数^[25].

3.2 计算结果

以采用 Sutton 势能对 Au(100) 晶面的计算为例, 对于未发生弛豫的构型与弛豫之后的构型都进行了计算. 变形为单轴拉压, 应变范围 (-0.3%,

0.3%), 计算得到的表面能密度与应变之间的关系如图 2 所示. 从图中可以看出, 二者之间呈一种单调递增的变化趋势, 近似于线性关系, 而在实际数据的拟合中, 二者反应为拟合度非常完美的二次项非线性关系. 由表面能密度与应变之间的关系, 应用式 (14)~ 式 (17) 即可拟合得到表面应力、表面弹性系数.

FCC 金属表面参数的计算结果详见表 1~ 表 4. 计算结果表中, 包括未进行弛豫和弛豫后的构型的计算结果, “U” 表示未进行弛豫的构型, “R” 表示弛豫后的构型. 分别采用 2 种势能进行计算, 并将 2 种势能的计算结果分别与他人通过分子动力学计算得到的结果进行了对比. 结果中第 1 行是本研究中采用 Cauchy-Born 变形法则计算得到的结果, 第 2 行为他人分子动力学的计算结果^[21-22]. 采用 Johnson 势能对 Au, Cu, Pd, Pt 4 种金属进行了计算, Sutton 增加了 Al 的计算结果.

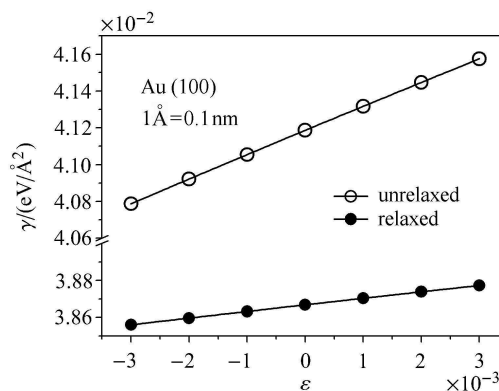


图 2 Au(100) 晶面表面能密度对应变的依赖
Fig. 2 The dependence of surface energy density on the strain of Au (100)

表 1 Johnson 势, FCC(100) 晶面的表面参数 (第 1 行), 并与文献 [21] 的结果 (第 2 行) 对比

Table 1 Surface elastic parameters of the (100) free surface calculated for FCC metals using the Johnson EAM potential (the first row), the next row represents the corresponding results extracted from Ref.[21]

FCC	γ		\bar{S}_{11}^s		D_{1111}^s		D_{1212}^s		D_{1122}^s		eV/Å ²
	U	R	U	R	U	R	U	R	U	R	
	Au	0.054	0.051	0.222	0.089	-1.326	-0.510	-0.387	-0.301	-0.703	
	0.054	0.051	0.220	0.093	-1.192	-0.443	-0.282	-0.198	-0.758	-0.354	
Cu	0.078	0.078	0.105	0.068	-0.628	-0.418	-0.224	-0.232	-0.005	-0.122	
	0.077	0.076	0.118	0.088	-0.557	-0.395	-0.079	-0.084	-0.070	-0.036	
Pd	0.090	0.090	0.203	0.090	-1.467	-0.726	-0.360	-0.349	-0.703	-0.643	
	0.087	0.086	0.212	0.124	-1.310	-0.757	-0.188	-0.177	-0.720	-0.481	
Pt	0.096	0.093	0.320	0.146	-2.022	-0.917	-0.590	-0.501	-1.163	-0.861	
	0.097	0.092	0.322	0.157	-1.835	-0.827	-0.403	-0.320	-1.054	-0.581	

表 2 Johnson 势, FCC(111) 晶面的表面参数 (第 1 行), 并与文献 [21] 的结果 (第 2 行) 对比

Table 2 Surface elastic parameters of the (111) free surface calculated for FCC metals using the Johnson EAM potential (the first row), the next row represents the corresponding results extracted from Ref.[21]

FCC	γ		$\overline{S_{11}^s}$		D_{1111}^s		D_{1212}^s		D_{1122}^s	
	U	R	U	R	U	R	U	R	U	R
Au	0.046	0.045	0.195	0.149	-1.031	-0.808	-0.260	-0.228	0.083	-0.906
	0.046	0.044	0.193	0.104	-0.918	-0.509	-0.392	-0.192	-0.166	-0.106
Cu	0.072	0.072	0.067	0.057	-0.212	-0.182	-0.214	-0.210	-1.44	-0.196
	0.071	0.070	0.079	0.059	-0.155	-0.100	0.075	0.093	-0.076	-0.066
Pd	0.081	0.080	0.167	0.127	-1.020	-0.827	-0.295	-0.275	-0.144	-0.970
	0.078	0.077	0.174	0.115	-0.878	-0.614	-0.432	-0.286	-0.135	-0.105
Pt	0.084	0.083	0.275	0.211	-1.463	-1.162	-0.417	-0.375	0.814	0.661
	0.084	0.081	0.275	0.165	-1.297	-0.803	-0.521	-0.283	-0.250	-0.177

表 3 Sutton 势, FCC(100) 晶面的表面参数 (第 1 行), 并与文献 [22] 的结果 (第 2 行) 对比

Table 3 Surface elastic parameters of the (100) free surface calculated for FCC metals using the Sutton potential (the first row), the next row represents the corresponding results extracted from Ref.[22]

FCC	γ		$\overline{S_{11}^s}$		D_{1111}^s		D_{1212}^s		D_{1122}^s	
	U	R	U	R	U	R	U	R	U	R
Au	0.041	0.039	0.173	0.074	-1.133	-0.371	-0.442	-0.323	-0.557	-0.319
	0.041	0.038	0.172	0.094	-1.092	-0.474	-0.361	-0.262	-0.645	-0.336
Al	0.037	0.037	0.126	0.110	-0.639	-0.513	-0.241	-0.221	-0.342	-0.398
	0.037	0.032	0.126	0.084	-0.603	-0.296	-0.169	-0.126	-0.383	-0.218
Cu	0.072	0.072	0.135	0.081	-0.928	-0.528	0.023	-0.304	-0.087	-0.054
	0.074	0.067	0.142	0.135	-0.855	-0.528	-0.170	-0.134	-0.398	-0.368
Pd	0.071	0.070	0.146	0.100	-1.258	-0.843	-0.375	-0.364	-0.503	-0.200
	0.071	0.068	0.145	0.127	-1.186	-0.991	-0.235	-0.216	-0.478	-0.402
Pt	0.069	0.065	0.289	0.124	-1.901	-0.622	-0.743	-0.542	-1.383	-0.244
	0.069	0.063	0.290	0.157	-1.835	-0.784	-0.605	-0.444	-1.082	-0.624

表 4 Sutton 势, FCC(111) 晶面的表面参数 (第 1 行), 并与文献 [22] 的结果 (第 2 行) 对比

Table 4 Surface elastic parameters of the (111) free surface calculated for FCC metals using the Sutton potential (the first row), the next row represents the corresponding results extracted from Ref.[22]

FCC	γ		$\overline{S_{11}^s}$		D_{1111}^s		D_{1212}^s		D_{1122}^s	
	U	R	U	R	U	R	U	R	U	R
Au	0.035	0.035	0.154	0.109	-0.908	-0.650	-0.291	-0.241	-0.013	0.169
	0.039	0.036	0.154	0.138	-0.876	-0.832	-0.276	-0.207	-0.223	-0.166
Al	0.033	0.032	0.114	0.080	-0.568	-0.404	-0.161	-0.145	-0.876	2.32
	0.034	0.022	0.114	0.101	-0.539	-0.458	-0.213	-0.183	-0.106	-0.086
Cu	0.067	0.067	0.113	0.094	-0.656	-0.565	-0.264	-0.250	-2.302	-0.151
	0.068	0.051	0.112	0.093	-0.591	-0.412	-0.218	-0.141	-0.130	-0.092
Pd	0.064	0.064	0.121	0.101	-0.791	-0.681	-0.310	-0.293	-0.706	-0.168
	0.064	0.055	0.140	0.127	-0.730	-0.659	-0.343	-0.237	-0.183	-0.162
Pt	0.059	0.058	0.258	0.187	-1.522	-1.112	-0.492	-0.410	-0.669	-0.344
	0.060	0.047	0.258	0.223	-1.472	-0.736	-0.464	-0.336	-0.375	-0.270

对比 4 个计算结果表中的数据, 可以发现, 采用 Cauchy-Born 变形法则计算得到的结果与他人采用分子动力学的计算结果, 二者的符合程度还是很好的. 表面能密度的计算结果符合最为良好, 表面

应力其次, 表面弹性系数的数值稍有差别. 这种差异从物理结构上反映为, 当结构发生变形时, 物理粒子的运动并不是规则的运动, 分子动力学能够更为真实地反应粒子的运动轨迹进而计算得到较为精确

的结果,而这所需要的计算规模也是很大的.本研究中采用 Cauchy-Born 变形法则来描述原子的运动,按整体结构的变形梯度定义原子的运动轨迹,将原子的变形运动定义为一种规则的简单的方式,计算量得到了大量的减少,而这种简化也势必会给计算结果带来一定的影响.而通过两种结果的对比,简单的 Cauchy-Born 法则得到表面参数的数值与分子动力学的计算结果差别并不大,说明这种简单的变形法则可以为更多的定性预测与描述纳米结构的性能提供便利.

通过表 1 与表 2 的对比,可以看出,弛豫对表面能密度的数值的影响并不明显,而对于表面应力、表面弹性系数的影响则明显很多.表面应力与表面弹性系数分别为表面能密度的一阶导数与二阶导数,对变形的初始构型依赖更为明显.其中表面应力数值一般为正,而表面弹性系数则多为负值.同时还可以发现,对于面心立方金属,(111)面的表面能密度小于(100)面,这也反应了(111)面是 FCC 金属的密排面,而表面应力则不具有这种规律.另外对于(111)面的 D_{112}^s 部分数值与他人结果差异较大,究其物理原因可能为对于结构致密的表面在变形时其原子的运动更为复杂,应用简单的 Cauchy-Born 变形法则描述带来的误差会变大.表 3 和表 4 是采用 Sutton 势能计算得到的结果,同样与他人结果符合较好.另外,通过表 1 与表 3、表 2 与表 4 的对比,可以发现势能的选取对表面能量的计算结果有非常大的影响,不同的势能计算结果不同.

4 结论

本文对跨尺度力学理论中的表面效应进行了系统的研究,确定了表面能密度、表面应力、表面弹性系数等表面参量.首先从跨尺度理论的变分方程出发通过对表面能的变分进行理论推导,得到了表面应力以及表面弹性参量的表达式.然后采用原子间的作用势: Johnson 的嵌入势与 Sutton 的远程势,刻画了 FCC 金属原子间的相互作用;应用 Cauchy-Born 法则,刻画变形后纳米板的原子构型,得到表面能密度对变形的依赖关系,基于此关系系统地计算并获得了常规 FCC 金属的表面能密度.最后根据表面能密度与变形之间的关系,应用推导得到的理论公式系统地计算并得到了常见面心立方金属表面应力和表面弹性参量的数值.计算结果与他人分子动力学结果数值符合较好,说明了采用简单的 Cauchy-Born

法则同样可计算得到有效的表面弹性参量,其计算结果也具有一定的准确度,而且计算规模很小,方法简便,不失为一种研究表面性能的有效方法.

参 考 文 献

- 1 Fleck NA, Hutchinson JW. A reformulation of strain gradient plasticity. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2001, 49: 2245-2271
- 2 Wei YG. Particulate size effects in the particle-reinforced metal-matrix composites. *Acta Mechanica Sinica (English Series)*, 2001, 17: 45-58
- 3 Wei YG, Hutchinson JW. Steady-state crack growth and work of fracture for solids characterized by strain gradient plasticity. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 1997, 45: 1253-1273
- 4 Lazopoulos KA, Lazopoulos AK. On the torsion problem of strain gradient elastic bars. *Mechanics Research Communications*, 2012, 45: 42-47
- 5 Stolken JS, Evans AG. A microbend test method for measuring the plasticity length scale. *Acta Materialia*, 1998, 46: 5109-5115
- 6 Begley MR, Hutchinson JW. The mechanics of size-dependent indentation. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 1998, 46: 2049-2068
- 7 Chen XL, Ma HS, Liang LH, et al. A surface energy model and application to mechanical behavior analysis of single crystals at sub-micron scale. *Computational Materials Science*, 2009, 46: 723-727
- 8 Duan HL, Wang J, Karihaloo BL, et al. Nanoporous materials can be made stiffer than non-porous counterparts by surface modification. *Acta Materialia*, 2006, 54: 2983-2990
- 9 Gao W, Yu SW, Huang GY. Finite element characterization of the size-dependent mechanical behavior in nanosystems. *Nanotechnology*, 2006, 17: 1118-1122
- 10 Wang GF, Feng XQ, Wang TJ, et al. Surface effects on the near-tip stresses for mode-I and mode-III cracks. *Journal of Applied Mechanics*, 2008, 75: 011001
- 11 Ma HS, Hu GK. Eshelby tensors for an ellipsoidal inclusion in a micropolar material. *International Journal of Engineering Science*, 2006, 44: 595-605
- 12 Wu B, Liang LH, Ma HS, et al. A trans-scale model for size effects and intergranular fracture in nanocrystalline and ultra-fine polycrystalline metals. *Computational Materials Science*, 2012, 57: 2-7
- 13 Gibbs JW. The Scientific Papers of J. Willard Gibbs, Volume. I: Thermodynamics. New York: Longmans-Green, 1906
- 14 付宝勤. 基于固体与分子经验电子理论的表面能分析及计算.[博士论文]. 北京: 北京化工大学, 2010 (Fu Baoqin, Analysis and calculation of surface energy with the empirical electron theory in solid and molecule. [PhD Thesis]. Beijing: Beijing University of Chemical Technology, 2010 (in Chinese))
- 15 Gibbs JW. The Collected Works of J Willard Gibbs. Volume I, Thermodynamics. New York: Longmans, Green, and Company, 1928
- 16 Shuttleworth R. The surface tension of solids. *Proc Phys Soc A*, 1950, 63: 444-457
- 17 Park HS. Quantifying the size-dependent effect of the residual surface stress on the resonant frequencies of silicon nanowires if finite

- deformation kinematics are considered. *Nanotechnology*, 2009, 20: 206102
- 18 Meade RD, Vanderbilt D. Origins of stress on elemental and chemisorbed semiconductor surfaces. *Physical Review Letter*, 1989, 63: 1404
- 19 Needs RJ. Calculations of the surface stress tensor at aluminum (111) and (110) surface. *Physical Review Letter*, 1987, 58: 53
- 20 Shenoy VB. Atomistic calculations of elastic properties of metallic fcc crystal surfaces. *Physical Review B*, 2005, 71: 094104
- 21 Mi CW, Jun S, Kouris DA. Atomistic calculations of interface elastic properties in noncoherent metallic bilayers. *Physical Review B*, 2008, 77: 075425
- 22 Pahlevani L, Shodja HM. Surface and interface effects on torsion of eccentrically two-phase fcc circular nanorods: determination of the surface/interface elastic properties via an atomistic approach. *Journal of Applied Mechanics*, 2011, 78: 011011
- 23 Steinmann P, Elizondo A, Sunyk R. Studies of validity of the Cauchy-Born rule by direct comparison of continuum and atomistic modelling. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2007, 15: S271-S281
- 24 Johnson RA. Alloy models with the embedded-atom method. *Physical Review B*, 1989, 37: 12554
- 25 Rafii-Tabar H, Sutton AP. Long-range Finnis-Sinclair potentials for fcc metallic alloys. *Philosophical Magazine Letters*, 1991, 63: 217-224

(责任编辑: 周冬冬)

DETERMINATIONS OF SURFACE ELASTIC PARAMETERS OF FCC-METALS BY USING THE CAUCHY-BORN RULE¹⁾

Liu Jianyun Song Jingru Wei Yueguang²⁾

(LNM, Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China)

Abstract First, fundamental relations on the surface energy density and surface elastic constitutive equations are derived based on the trans-scale mechanics theory considering both strain gradient and surface effects through energy variation. Second, a new method to determine both surface energy density and surface elastic parameters is developed based on a simple quasi-continuity scheme, Cauchy-Born rule. Furthermore, taking the face-centre-cubic (FCC) metals as examples, we systematically obtain the values of the surface elastic parameters for typical fcc metals which are consistent with others results by using the molecular dynamic simulations.

Key words trans-scale mechanics theory, FCC metals, Cauchy-Born rule, surface energy density, surface elastic parameter

Received 24 December 2012, revised 20 February 2013.

1) The project was supported by the National Natural Science Foundation of China (11021262, 10932011).

2) Wei Yueguang, professor, research interests: trans-scale mechanics, experiment and scale effect. E-mail: ywei@lnm.imech.ac.cn