

双层金属纳米板界面能密度的尺寸效应¹⁾

王 帅^{*,††} 姚 寅[†] 杨亚政^{†,**} 陈少华^{†,**,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)

[†](北京理工大学先进结构技术研究院, 轻量化多功能复合材料与结构北京市重点实验室, 北京 100081)

^{**}(北京理工大学北京电动车辆协同创新中心, 北京 100081)

^{††}(中国科学院大学工程科学学院, 北京 100049)

摘要 界面能密度是表征纳米复合材料与结构界面力学性质的重要物理量. 采用分子动力学方法计算了不同面心立方金属晶体构成的双材料纳米薄板结构的界面能密度, 分析了界面晶格结构形貌变化及界面效应对原子势能的影响. 结果表明: 双材料纳米薄板界面具有周期性褶皱状疏密相间的晶格结构形貌, 界面上原子势能亦呈现周期性分布特性, 而靠近界面的两侧原子势能与板内原子势能具有明显差异. 拉格朗日界面能密度和欧拉界面能密度均随双层薄板厚度的增加而增加, 最终趋向于块体双材料结构的界面能密度.

关键词 双材料金属界面, 分子动力学, 界面能密度, 尺寸效应, 界面形貌

中图分类号: O485 文献标识码: A doi: 10.6052/0459-1879-17-142

SIZE EFFECT OF THE INTERFACE ENERGY DENSITY IN BI-NANO-SCALED-METALLIC PLATES¹⁾

Wang Shuai^{*,††} Yao Yin[†] Yang Yazheng^{†,**} Chen Shaohua^{†,**,2)}

^{*}(LNM, Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China)

[†](Institute of Advanced Structure Technology, Beijing Key Laboratory of Lightweight Multi-functional Composite Materials and Structures, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China)

^{**}(Collaborative Innovation Center of Electric Vehicles in Beijing, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China)

^{††}(School of Engineering Sciences, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China)

Abstract The interface free energy density is an important quantity characterizing the mechanical property of interface in nanocomposite systems. In this paper, molecular dynamics simulation method is adopted to investigate the interface energy density of different FCC metallic bi-nano-scaled plates. The morphology of the interface crystal structure and the interface effect on the atomic potential are analyzed. It is found that interface atoms have periodically wrinkled rarefied or serried configurations, and the potential energy of interface atoms is also periodically distributed. The potential energy of atoms near the interface is obviously different from that of atoms inside the nano-plates. Both the Lagrange interface energy and the Eulerian one increase with the increase of the thickness of the bi-material, which approach the interface energy of a bulk bi-material finally.

Key words metallic bi-material interface, molecular dynamics, interface energy density, size effect, interface morphology

2017-04-28 收稿, 2017-06-30 录用, 2017-06-30 网络版发表.

1) 国家自然科学基金 (11372317, 11532013, 11402270) 和北京理工大学科研创新计划资助项目.

2) 陈少华, 教授, 主要研究方向: 微纳力学, 表面/界面力学, 仿生材料力学及功能化表面研制. E-mail: shchen@bit.edu.cn

引用格式: 王帅, 姚寅, 杨亚政, 陈少华. 双层金属纳米板界面能密度的尺寸效应. 力学学报, 2017, 49(5): 978-984

Wang Shuai, Yao Yin, Yang Yazheng, Chen Shaohua. Size effect of the interface energy density in bi-nano-scaled-metallic plates.

Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics, 2017, 49(5): 978-984

引言

由于纳米结构材料具有较大的比表/界面面积(表/界面面积与体积之比), 纳尺度的表/界面性质对纳米材料与结构整体力学性能产生不可忽略的影响^[1-3], 即表/界面效应. 纳米复合材料及双材料纳米层合板结构作为典型的多相纳米结构材料, 其内部界面效应导致材料及结构物性表现出宏观复合材料与结构不涉及的尺寸相关性, 这一特性使得在微电子制造、高效节能电池及生物医学等新兴工业领域中广泛应用的纳米复合材料与结构的性能更受关注^[4]. 如何合理表征界面效应, 对于纳米复合材料与结构的设计和应用具有重要的意义.

现有纳米材料与结构界面效应的表征理论主要基于 Gurtin 和 Murdoch 提出的表面弹性理论^[5-6]而建立: 即将纳米复合材料与结构的界面视为无厚度层, 但符合线弹性本构关系, 并具有独立的界面弹性常数, 建立了界面应力与界面应变的线弹性关系. Sharma 等^[7], Mogilevskaya 等^[8]将该理论与复合材料细观力学相结合, 给出与纳米夹杂尺寸和界面弹性常数相关的艾雪比 (Eshelby) 张量, 并揭示了界面对纳米复合材料等效刚度的影响. 假设界面具有共格结构(界面变形与邻近体材料变形相同), 可以建立考虑界面弹性的非均质材料细观力学框架^[9-12]. 黄筑平等^[13-15]进一步给出了有限变形框架下的界面应力和界面能密度的拉格朗日和欧拉表述.

基于 Gurtin-Murdoch 模型 (G-M) 的界面效应表征理论的主要特点是引入界面弹性常数作为表征界面特性的关键参数. 然而, 在很多实际应用中, 界面弹性常数的取值无据可依, 极大程度地限制了已有界面效应弹性理论的实际应用^[16]. 即使在已有的多个表面效应弹性理论中, 表面弹性常数的获得也比较困难, 目前只能通过复杂的分子动力学计算给出^[17-18], 且理论模型的无厚度假设与分子动力学模型的原子连续性假设亦存在不一致性, 导致计算结果分散, 甚至不确定性. 为了避免表面弹性常数的引入, 采用原子晶格模型, Chen 等^[19]提出了一种基于表面自由能密度的弹性理论, 主要涉及块体材料的表面能密度和纳米材料的表面晶格弛豫系数; 考虑纳米复合材料的共格界面, 界面能密度仅与纳米相和基体表面的晶格弛豫参数及失配变形相关, 进一步基于界面能密度建立了一种描述共格界面的新弹性理论^[20], 避免了已有界面效应弹性理论中界面弹

性常数的引入.

上述理论中, 界面能密度是表征纳米复合材料界面效应的关键物理量^[21-22]. 随着纳米复合材料特征尺寸的减小, 比表面积增大, 界面区域的能量状态将发生显著变化, 界面能密度表现出尺寸相关性.

为了更直观地从原子尺度理解界面能密度的尺寸相关性, 本文采用分子动力学方法对界面能密度的尺寸效应进行了数值研究和分析. 采用相对简单的面心立方金属晶体构成的双材料纳米薄板系统作为研究对象, 建立分子动力学模型, 计算不同金属双材料界面的拉格朗日界面能密度和欧拉界面能密度, 分析界面处晶格构型形貌及界面原子自由能的分布特征, 最终揭示界面能密度和双材料薄板厚度的尺寸相关性. 本文的研究结果对含不同形式界面的纳米材料界面效应弹性理论建立, 以及对纳米复合材料与结构的设计和应用都具有一定的理论指导意义.

1 分子动力学模型

1.1 双材料纳米薄板

考虑若干面心立方金属晶体构成的双材料纳米薄板系统 (Ag/Cu, Ag/Ni, Au/Cu, Au/Ni 和 Pd/Cu), 建立如图 1 所示的分子动力学模型 (红色和蓝色分别代表不同的金属材料).

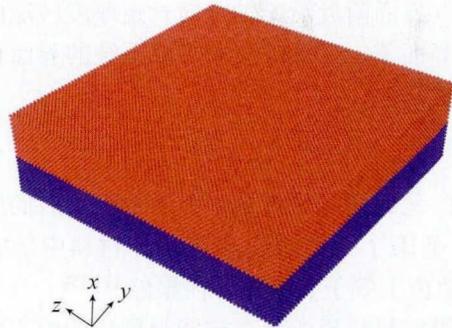


图 1 面心立方金属双材料薄板结构分子动力学模型

Fig.1 Molecular dynamics model of FCC metallic bi-material nano-plates

图 1 中, y 轴和 z 轴方向为周期性边界条件, x 轴方向为非周期性边界条件(为纳米厚度方向, 存在结构的上下表面). 由于界面两侧金属材料的晶格常数并不相同, 需要引入界面失配应变以满足界面区域的几何协调条件^[17]

$$\varepsilon_{mn} = \frac{ma - nb}{(ma + nb)/2} \quad (1)$$

式中, a 和 b 分别表示形成界面的两种金属材料的晶

格常数, m 和 n 表示两种金属在薄板面内方向的晶胞数目, 即形成界面的两种金属材料边长分别是 ma 和 nb . 当界面处残余失配应变足够小时 ($\varepsilon_{mn} \leq 0.05\%$), 该残余应变几乎不会影响界面能密度的变化趋势, 且有 $ma \approx nb$. 由于两种晶体的晶格长度有一定的差别, 界面原子不可能完全一一对应, 在界面上产生一定的位错, 形成半共格界面.

采用 EAM 势函数描述原子间的相互作用^[23]

$$E_{\text{tot}} = \sum_{i,j} \phi(r_{ij}) + \sum_i F(n_i) \quad (2)$$

$$n_i = \sum_j \rho(r_{ij}) \quad (3)$$

其中, i, j 分别表示第 i 和第 j 个原子, r_{ij} 表示 i 原子和 j 原子之间的距离, $F(n_i)$ 表示 i 原子上的嵌入能, $\phi(r_{ij})$ 表示 i 原子和 j 原子之间的二体势.

本文采用 LAMMPS^[24] 软件进行分子动力学计算. 从块体双材料系统的界面附近截取纳米厚度双材料薄板, 使用 Nose-Hoover 控温方法令纳米薄板在恒温恒压下充分弛豫, 本文压强为 0, 温度为 1 K. 弛豫计算的时间步长设置为 1 fs, 在经历足够时间的充分弛豫 (500 ps) 后, 系统达到稳定状态. 记录并输出当前状态下各原子的势能及原子坐标信息.

1.2 界面能密度的计算

选取界面附近沿 x 轴方向一定厚度区域内的原子计算界面能, 双材料纳米薄板系统的界面自由能可以写成

$$U_{\text{inf}} = \sum_i (E_i - E_{i0}) \quad (4)$$

其中, E_i 是界面区域内第 i 个原子弛豫后的原子势能. E_{i0} 是第 i 个原子在相应块体材料中的原子势能, 在数值上等于负的原子内聚能^[17,25].

假设双材料界面弛豫前和弛豫后的面积分别是 A_L 和 A_E , 则有 $A_L = L_{10}L_{20}$, $A_E = L_1L_2$. 其中, L_{10} 和 L_{20} 分别表示弛豫前构型 (初始构型) 中界面在 y 轴和 z 轴方向的初始长度. L_1 和 L_2 分别表示弛豫后构型中 (当前构型) 界面在 y 轴和 z 轴方向的当前长度. 拉格朗日界面能密度和欧拉界面能密度可以写为^[17,20,26]

$$\gamma_L = \frac{\sum_i (E_i - E_{i0})}{A_L} \quad (5)$$

$$\gamma_E = \frac{\sum_i (E_i - E_{i0})}{A_E} \quad (6)$$

式中, γ_L 和 γ_E 分别表示双材料纳米薄板界面能密度的拉格朗日描述和欧拉描述.

2 计算结果与讨论

2.1 界面原子结构形貌

由于界面处原子与内部原子的键合状态不同, 界面原子具有大量的不饱和原子键, 界面区域原子的能量和原子平衡状态与内部区域原子相比将发生明显变化. 当两种材料形成半共格界面时, 除了界面处原子的配位不饱和性, 两种材料晶格常数的不同还将导致界面处形成较为复杂的原子结构形貌. 下文以 Ag/Cu 纳米薄板的分子动力学计算为例对界面原子形貌进行详细分析.

图 2 给出纳米薄板发生弛豫后界面原子相对其平均位置的位移, Δx , Δy 和 Δz 分别表示在 x, y 和 z 方向的位移分量. 可以看出 Δx , Δy 和 Δz 在界面内呈周期性分布, 这主要是形成半共格界面的两种材料晶格不匹配引起的: 例如 Ag 表面某一个原子周围的 Ag 原子排布是相同的, 但是该原子周围 Cu 原子的分布却由于晶格不匹配而呈现周期性变化. Ag 和 Cu 原子沿 x 轴的位移始终保持同方向, 即同时凸起或同时凹陷; 而沿 y 或 z 轴的位移则方向相反. 界面原子相对其平均位置的位移最终导致界面形成褶皱状疏密相间的周期性晶格结构形貌. 为了更直观地展示界面原子的微结构形貌, 将 Δx , Δy 和 Δz 分别扩大为原来的 5 倍, 得到如图 3 所示的界面微观形貌图, 可以看出双材料金属纳米板弛豫之后, 界面呈现出褶皱状疏密相间的晶体结构.

2.2 原子势能

界面处原子排布和内部原子不同, 必然导致界面区域原子的能量和原子平衡状态与内部相比呈现出明显的不同. 如图 4 所示, 对应界面的周期性褶皱结构, 界面原子的势能 (原子自由能) 变化也呈现周期性分布. 为进一步了解界面原子势能与体内原子势能的差异, 图 5 给出原子势能沿纳米薄板厚度方向的分布, 图示表明表面原子势能明显高于体内原子势能, 而界面区域, 即在 $x = 0$ 位置附近, 原子势能与体内原子势能亦不相同. 在远离表/界面处, 纳米板内部原子的原子势能迅速趋于块体材料中的原子势能, 这与已有的理论研究一致^[26-27].

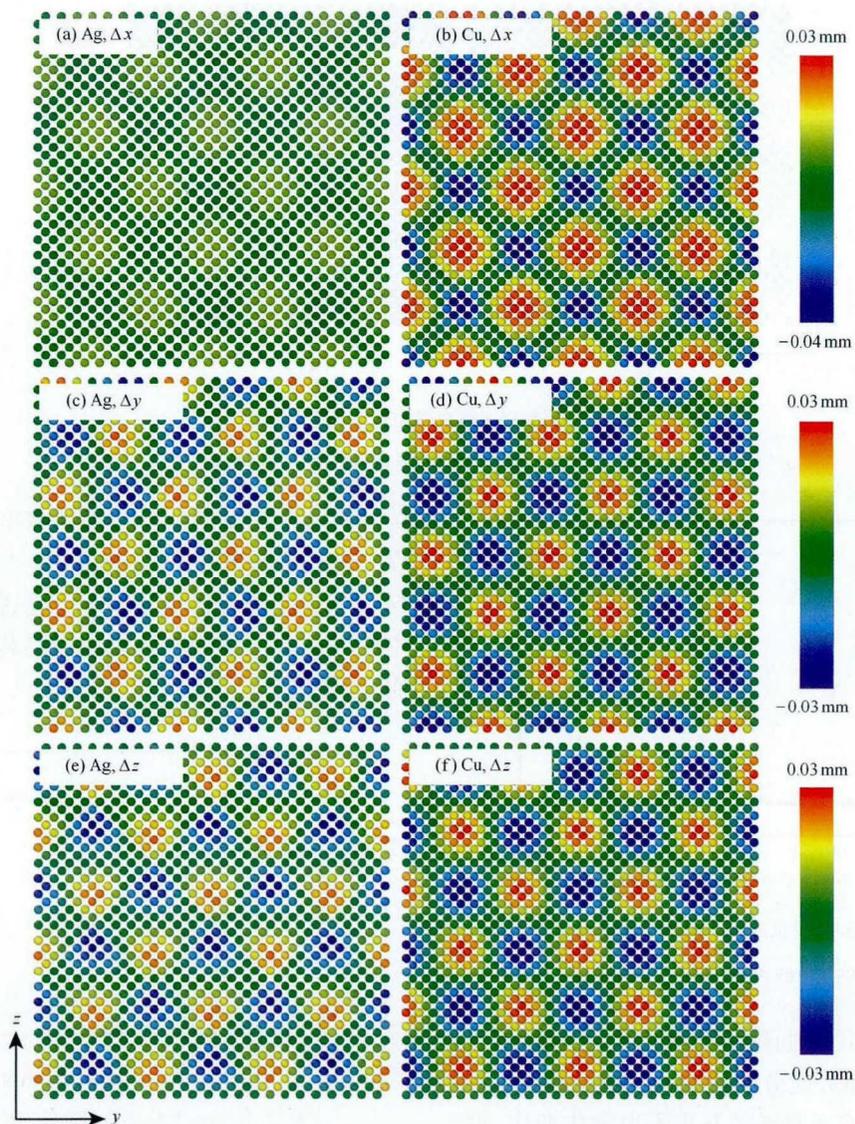


图 2 Ag/Cu 双材料纳米薄板界面原子相对平均位置的位移分布云纹图

Fig. 2 Contour plots of displacement of atoms from their average positions at the Ag/Cu nano-plate interface

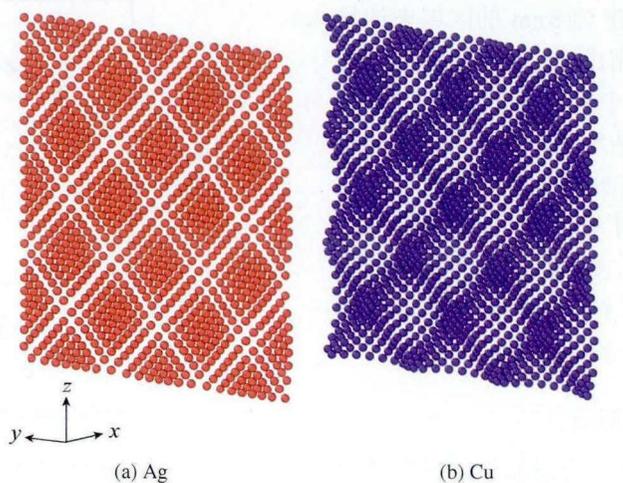


图 3 Ag/Cu 双材料纳米薄板界面原子形貌图

Fig. 3 The morphology of lattice structures at the Ag/Cu nano-plate interface

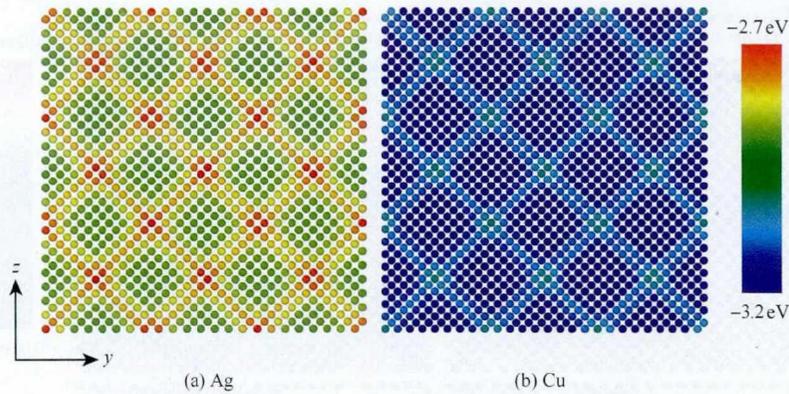


图 4 Ag/Cu 双材料纳米薄板界面处原子势能分布云纹图

Fig. 4 Potential energy of atoms at the Ag/Cu interface

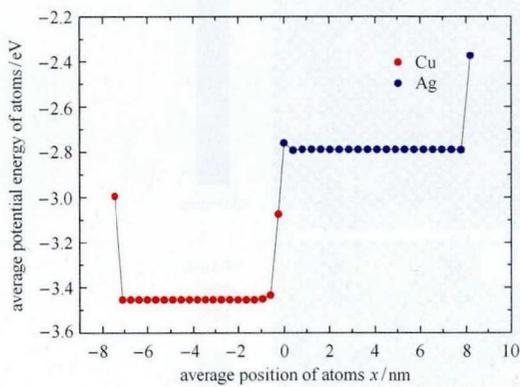


图 5 Ag/Cu 双材料纳米薄板原子势能沿厚度方向的变化

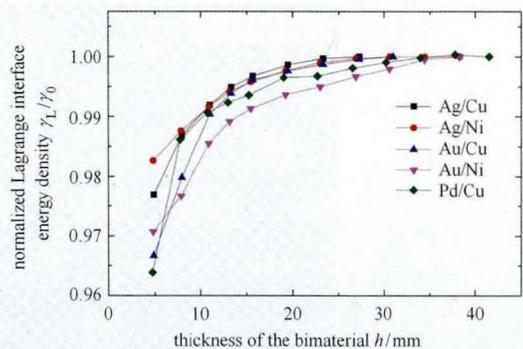
Fig.5 Variation of the free energy of atoms in the thickness direction

因此, 可以采用界面附近区域内原子势能计算界面能密度. 由前述势能分布可知, 当离开界面超过三层原子以后, 其原子势能就几乎不再发生变化. 进一步研究表明, 针对足够厚的双材料, 在界面附近 2 nm 厚的区域与更厚区域计算的界面能密度差别很小. 在实际计算中, 采用厚度为 8 nm 的区域来计算双材料纳米结构的界面能密度. 而对于厚度较小的双材料, 界面区厚度取为整个双材料厚度的一半 (例如, 厚度为 5 nm 的双材料纳米板, 则采用 2.5 nm 厚度内的原子来计算界面能密度), 这样可以尽可能减小表面原子对界面能密度计算的影响. 而对于厚度更小的双材料结构, 由于其表面原子和界面原子距离较小, 表面的存在必将对界面能密度产生非常明显的影 响, 本文未考虑该种情况.

2.3 双层纳米薄板的界面能密度

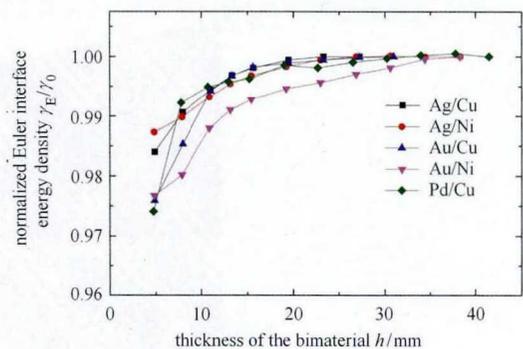
本文计算了多种面心立方金属晶体材料构成的半共格界面的拉格朗日界面能密度和欧拉界面能密度. 图 6 给出界面能密度随纳米薄板厚度的变化趋

势, 可以看出拉格朗日界面能密度和欧拉界面能密度均随薄板厚度的增大而增大, 并逐渐趋于块体双材料系统中的界面能密度 γ_0 . 这说明纳米复合材料中的界面效应影响将随材料或结构特征尺寸的增大而逐渐减弱.



(a) 拉格朗日界面能密度

(a) Lagrangian interface energy density



(b) 欧拉界面能密度

(b) Eulerian interface energy density

图 6 双材料金属纳米薄板结构的界面能密度

Fig. 6 Interface energy density of metallic bi-material nano-plates

理论上, 纳米材料界面能密度具有如下形式^[28]

$$\gamma_L = \gamma_L^{\text{chem}} + \gamma_L^{\text{stru}} \quad (7)$$

其中, γ_L^{chem} 表示界面区域原子键能与内部原子键能差异引起界面能密度变化的化学部分, γ_L^{stru} 表示界面弛豫变形引起界面能密度变化的结构部分. 在双材料薄板结构弛豫过程中, 界面弛豫应变相对较小, 界面能密度结构部分的变化并不大, 化学部分成为影响界面能密度的主要因素. Ouyang 等^[28-29] 从热力学出发对界面能密度化学部分的尺寸效应进行研究, 发现 γ_L^{chem} 随着材料特征尺度的增加而增加, 最终导致材料的界面能密度随双材料薄板板厚的增加而增加, 与本文计算结果趋势一致.

本文计算模型中, 由于双材料纳米薄板存在上下表面, 当双材料薄板厚度较小时 (小于 5 nm), 表面和界面较为接近, 表面附近原子的配位不饱和状态将对界面能密度产生一定影响; 但当板厚较大时, 更接近块体双材料板结构, 表面和界面相距较远, 彼此之间的影响可以忽略. 如图 6 所示, 板厚小于 5 nm 时, 拉格朗日界面能密度和欧拉界面能密度的变化曲线表现出一定波动; 而当板厚超过 10 nm 时, 拉格朗日界面能密度和欧拉界面能密度的变化曲线相对光滑. 说明结构特征尺寸较小时, 表面会对界面能密度产生一定的影响.

由上可见, 双材料纳米板界面能密度随厚度的变化趋势与单一金属纳米薄板表面能密度的尺寸效应有一定的差别. 已有结果显示: 在金属纳米板 (100) 面上, 拉格朗日表面能密度随纳米板厚度的增大而增大, 而欧拉表面能密度则随纳米板厚的增大而减小^[25]. 本文得到的拉格朗日界面能密度及欧拉界面能密度都随双层板厚的增大而逐渐增大. 该现象可以通过分析拉格朗日界面能密度和欧拉界面能密度的关系来加以理解^[17,20,26]. 弛豫后界面表观面积可以写为

$$A_E = L_1 L_2 = (1 + \varepsilon_1^L)(1 + \varepsilon_2^L) L_{10} L_{20} = \lambda_1 \lambda_2 A_L \quad (8)$$

式中 ε_1^L 和 ε_2^L 分别表示界面弛豫引起面内两个主方向发生的应变, λ_1 和 λ_2 表示两个主方向的界面弛豫参数, 即 y 和 z 方向当前构型和初始构型边长的比值. 本文中有 $\lambda_1 = \lambda_2$. 联立方程 (5) ~ 方程 (7) 可得

$$\gamma_E = \frac{\gamma_L}{\lambda_1 \lambda_2} \quad (9)$$

可见, 欧拉界面能密度与拉格朗日界面能密度和界面弛豫参数相关. 图 6(a) 与图 7 对比发现, 随着

板厚的增大, 界面弛豫参数的变化相对较小, 而拉格朗日界面能密度的增大更为明显, 从而使欧拉界面能密度呈现随厚度增大而增大的整体变化趋势. 而在金属纳米板表面能密度的研究中, 拉格朗日表面能密度和表面弛豫参数虽然也同时随纳米板厚的增大而增大, 但拉格朗日表面能密度的变化相比表面弛豫参数的变化较小, 从而使得欧拉表面能密度呈现随厚度增大而减小的趋势^[25]. 这也说明双材料间的相互约束, 使得界面弛豫变形相比单一纳米板表面的弛豫变形要小.

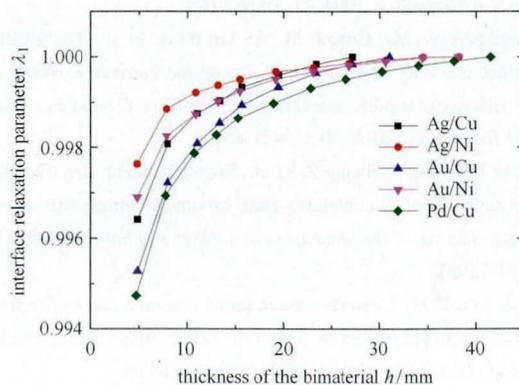


图 7 双材料界面弛豫参数随厚度的变化

Fig. 7 The interface relaxation parameter of bi-nano-plates as a function of the structure's thickness

3 结论

本文采用分子动力学方法, 研究了多种面心立方金属晶体构成的双材料纳米薄板的界面微结构、原子势能、界面弛豫变形等界面性质, 计算了拉格朗日界面能密度和欧拉界面能密度. 结果表明: 不同面心立方金属晶体形成的半共格界面, 其界面处原子具有周期性排布, 界面呈现周期性褶皱状疏密相间的形貌. 界面处原子配位和分布与内部原子的差异导致平衡状态下界面原子的能量与内部原子存在较大差异, 引起纳米尺度的界面效应. 双材料纳米薄板的拉格朗日界面能密度和欧拉界面能密度都随双层板厚的增大而增大, 并最终趋于宏观双材料结构中的界面能密度.

参 考 文 献

- 1 Gleiter H. Nanostructured materials: Basic concepts and microstructure. *Acta Materialia*, 2000, 48(1): 1-29
- 2 Müller P, Saúl A. Elastic effects on surface physics. *Surface Science Reports*, 2004, 54(5-8): 157-258

- 3 Ibach H. The role of surface stress in reconstruction, epitaxial growth and stabilization of mesoscopic structures. *Surface Science Reports*, 1997, 29(5-6): 195-263
- 4 张玉龙. 纳米复合材料手册. 北京: 中国石化出版社, 2005 (Zhang Yulong. Handbook of Nano-composites. Beijing: China Petrochemical Press, 2005 (in Chinese))
- 5 Gurtin ME, Murdoch AI. Surface stress in solids. *International Journal of Solids and Structures*, 1978, 14(6): 431-440
- 6 Gurtin ME, Murdoch AI. A continuum theory of elastic material surfaces. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, 1975, 57(4): 291-323
- 7 Sharma P, Ganti S. Size-dependent Eshelby's tensor for embedded nano-inclusions incorporating surface/interface energies. *Journal of Applied Mechanics*, 2004, 71(5): 663-671
- 8 Mogilevskaya SG, Crouch SL, La Grotta A, et al. The effects of surface elasticity and surface tension on the transverse overall elastic behavior of unidirectional nano-composites. *Composites Science and Technology*, 2010, 70(3): 427-434
- 9 Duan H, Wang J, Huang Z, et al. Size-dependent effective elastic constants of solids containing nano-inhomogeneities with interface stress. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2005, 53(7): 1574-1596
- 10 Li Z, Lim C, He L. Stress concentration around a nano-scale spherical cavity in elastic media: Effect of surface stress. *European Journal of Mechanics-A/Solids*, 2006, 25(2): 260-270
- 11 Li P, Wang Q, Shi S. Differential scheme for the effective elastic properties of nano-particle composites with interface effect. *Computational Materials Science*, 2011, 50(11): 3230-3237
- 12 Dai M, Gao C-F. Non-circular nano-inclusions with interface effects that achieve uniform internal strain fields in an elastic plane under anti-plane shear. *Archive of Applied Mechanics*, 2016, 86(7): 1295-1309
- 13 Huang Z, Wang J. A theory of hyperelasticity of multi-phase media with surface/interface energy effect. *Acta Mechanica*, 2006, 182(3-4): 195-210
- 14 Wang Z-Q, Zhao Y-P, Huang Z-P. The effects of surface tension on the elastic properties of nano structures. *International Journal of Engineering Science*, 2010, 48(2): 140-150
- 15 Gao X, Huang Z, Qu J, et al. A curvature-dependent interfacial energy-based interface stress theory and its applications to nano-structured materials: (I) General theory. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2014, 66: 59-77
- 16 Miller RE, Shenoy VB. Size-dependent elastic properties of nano-sized structural elements. *Nanotechnology*, 2000, 11(3): 139
- 17 Mi C, Jun S, Kouris DA, et al. Atomistic calculations of interface elastic properties in noncoherent metallic bilayers. *Physical Review B*, 2008, 77(7): 075425
- 18 Paliwal B, Cherkaoui M. Atomistic-continuum interphase model for effective properties of composite materials containing nano-inhomogeneities. *Philosophical Magazine*, 2011, 91(30): 3905-3930
- 19 Chen S, Yao Y. Elastic theory of nanomaterials based on surface-energy density. *Journal of Applied Mechanics*, 2014, 81(12): 121002
- 20 Yao Y, Chen S, Fang D. An interface energy density-based theory considering the coherent interface effect in nanomaterials. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2017, 99: 321-337
- 21 Shuttleworth R. The surface tension of solids. *Proceedings of the Physical Society. Section A*, 1950, 63(5): 444
- 22 Cammarata R. Surface and interface stress effects on interfacial and nanostructured materials. *Materials Science and Engineering: A*, 1997, 237(2): 180-184
- 23 Johnson R. Alloy models with the embedded-atom method. *Physical Review B*, 1989, 39(17): 12554
- 24 Plimpton S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics. *Journal of Computational Physics*, 1995, 117(1): 1-19
- 25 Zhang C, Yao Y, Chen S. Size-dependent surface energy density of typically fcc metallic nanomaterials. *Computational Materials Science*, 2014, 82(3): 372-377
- 26 Dingreville R, Qu J. Interfacial excess energy, excess stress and excess strain in elastic solids: planar interfaces. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2008, 56(5): 1944-1954
- 27 Spearot D, Capolungo L, Qu J, et al. On the elastic tensile deformation of $\langle 100 \rangle$ bicrystal interfaces in copper. *Computational Materials Science*, 2008, 42(1): 57-67
- 28 Ouyang G, Liang L, Wang C, et al. Size-dependent interface energy. *Applied Physics Letters*, 2006, 88(9): 091914
- 29 Jiang Q, Li J, Chi B. Size-dependent cohesive energy of nanocrystals. *Chemical Physics Letters*, 2002, 366(5): 551-554