

ЕФЕКТИ ВІД ПОВЕРХНЕВОГО НАТЯГУ СФЕРОЦИЛІНДРИЧНОЇ НАНОПОРИ У ПРУЖНОМУ СЕРЕДОВИЩІ*

Здійснено гранично-інтегральне формулювання тривимірної задачі про наявність у пружному безмежному просторі нанопори неканонічної форми за умови поверхневого натягу на її поверхні. Складну геометрію та фізичні особливості поверхні пори на нанорівні враховано в інтегральних поданнях переміщень і напружень у просторі, а також у крайових умовах, які моделюють цю поверхню як матеріальний об'єкт з власними мембранними властивостями та поверхневим натягом. Проведено числові розрахунки напружено-деформованого стану в околі нанопори у формі короткого циліндра із заокругленими краями у свіжосколотому залізі.

Ключові слова: сфероциліндрична нанопора, модель матеріальної поверхні, метод граничних інтегральних рівнянь, поверхневий натяг.

Різниця між енергією міжатомної взаємодії у безпосередній близькості від поверхні та всередині твердого тіла є причиною виникнення поверхневих деформацій. Вперше модель поверхневих напружень у рамках континуальної теорії в твердому тілі запропоновано у роботі Гіббса [9]. У подальших дослідженнях [2, 3, 14–18, 20] ця модель була розвинута, зокрема, через наділення «матеріальної поверхні» нульової товщини власними механічними властивостями. У роботі [14] показано, що натяг матеріальної поверхні може спричиняти значні об'ємні напруження, які залежать від багатьох факторів [20], ключовими з яких є кривина матеріальної поверхні та контраст між її жорсткісними характеристиками та пружними константами твердого тіла. Оскільки поверхневі та об'ємні пружні константи мають різну розмірність, то неминуче появляється масштабний ефект при визначенні локальних полів напружень. При розв'язуванні макрорівневих крайових задач теорії пружності розмірними ефектами нехтують, проте, коли досліджуються наноструктурні матеріали, їх врахування є невід'ємною частиною моделювання з огляду на велику питому частку поверхонь та інтерфаз в одиниці об'єму. Енергія поверхневої деформації у цих структурах може суттєво впливати на їхню локальну поведінку [21] і нелінійно змінювати макроскопічні властивості наноструктур [8, 24].

На прикладі рівноваги матеріальної поверхні мембранного типу у твердому тілі у роботах М. Е. Gurtin, А. І. Murdoch [10] і Я. С. Підстригача, Ю. З. Повстенка [2, 3, 16, 17] отримано узагальнене рівняння для опису деформування такої поверхні довільної кривини. У роботі [5] доведено теореми існування і єдиності розв'язків статичних крайових задач лінійної теорії пружності з поверхневими напруженнями, що відкрило шлях для математично обґрунтованого застосування сучасних чисельних методів і доведення досліджень до числових результатів з урахуванням неканонічності форм нанонеоднорідностей. Такі числові розрахунки впливу поверхневого натягу і викликаних ним розмірних ефектів набули особливої актуальності у зв'язку із розвитком нанотехнологій і отримали загальну назву «обчислювальна нанотехнологія» [19].

Більшість відомих результатів у цій області відносяться до двовимірних задач із тунельними нанооб'єктами [6, 12, 22] і отримані за допомогою методів комплексної змінної, мультипольних розвинень, методу скінченних

✉ stasyuk.bohdan.m@gmail.com

* Рекомендовано до друку Програмним комітетом 10-ї Міжнародної наукової конференції «Математичні проблеми механіки неоднорідних структур» (17–20 вересня 2019 р., Львів, Україна, <http://iapmm.lviv.ua/mpmns2019>)

елементів, методу граничних елементів. Щодо тривимірних конфігурацій, то вони проаналізовані у припущенні канонічності форми (сферичної, сфероїдальної) нанопор або нановключень з постійною або неперервною кривиною поверхні [7, 23].

У цій статті пропонуємо ефективний числовий інструментарій на основі методу граничних елементів (МГЕ) для аналізу напружено-деформованого стану пружного простору від натягу поверхні наявної у ньому нанопори у вигляді скінченного циліндра із заокругленими краями. Саме така геометрична форма порожнини найбільш зручна для моделювання нанотрубок як найпоширенішого класу наповнювачів нанокомпозитів.

Розглянемо безмежне безмежне пружне ізо-тропне тіло Ω , що містить нанопорожнину у формі циліндра із заокругленими краями, яка обмежена гладкою поверхнею $S = S_1 \cup S_2 \cup S_3$, де S_2 – циліндрична частина поверхні S , а S_1 та S_3 – її верхня і нижня півсферичні частини, відповідно (рис. 1). Позначимо через $2L$ висоту поверхні S_2 , а через $2H$ – повну висоту поверхні нанопори разом із її півсферичними частинами. Тоді $H = L + R$, де R – радіус поперечного перерізу циліндричної частини нанопори. Вектори $\mathbf{n}(n_1, n_2, n_3)$, $\mathbf{p}(p_1, p_2, p_3)$, $\boldsymbol{\tau}(\tau_1, \tau_2, \tau_3)$ позначають нормальний і дотичні до поверхні ортогональні орти.

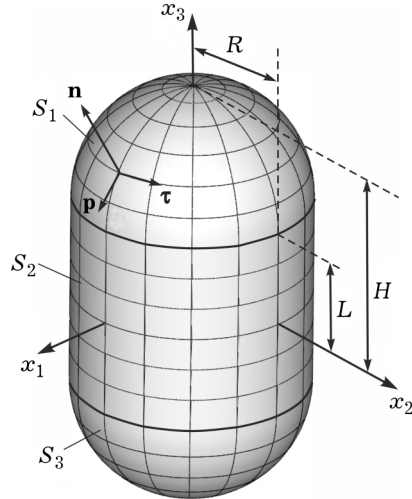


Рис. 1

Механічні властивості тіла визначаємо константами Ляме λ та μ . Поверхневі пружні константи Ляме λ_s та μ_s і задане навантаження у формі поверхневого натягу τ_s з розмірністю [Н/м] характеризують матеріалізовану поверхню нанопори.

Сформульована задача має осьову симетрію, однак для її розв'язання зручно послуговуватись тривимірною постановкою задля спрощення застосованої нижче схеми методу граничних елементів і можливості верифікації числових результатів шляхом перевірки виконання умов осрової симетрії.

Глобальну систему координат виберемо з початком у центрі порожнини так, щоб вісь Ox_3 збігалася з віссю циліндричної частини порожнини, а координатна площина x_1Ox_2 лежала в її серединному поперечному перерізі.

Узагальнене рівняння Гуртіна – Мердока – Підстригача – Повстенка моделі матеріальної поверхні у цьому випадку запишемо у локальній криволінійній системі координат ξ_1, ξ_2, ξ_3 , орієнтованій уздовж ортів \mathbf{p} , $\boldsymbol{\tau}$ та \mathbf{n} відповідно. У рамках цієї моделі значення компонент тензора напружень на поверхні порожнини будуть [7] такими:

$$\sigma_{3'3'}^M = \frac{-1}{h_1 h_2} \left[\frac{\partial(h_2 \sigma_{3'1'}^s)}{\partial \xi_1} + \frac{\partial(h_1 \sigma_{3'2'}^s)}{\partial \xi_2} \right] - \frac{\sigma_{1'1'}^s}{\rho_{1'}} - \frac{\sigma_{2'2'}^s}{\rho_{2'}},$$

$$\sigma_{3'i'}^M = \frac{-1}{h_1 h_2} \left[\frac{\partial(h_{3-i'} \sigma_{i'i'}^s)}{\partial \xi_i} + \frac{\partial(h_{i'} \sigma_{3-i'i'}^s)}{\partial \xi_{3-i}} + \sigma_{3-i'i'}^s \frac{\partial h_{i'}}{\partial \xi_{3-i}} - \sigma_{i'i'}^s \frac{\partial h_{3-i'}}{\partial \xi_i} \right] - \frac{\sigma_{3'i'}^s}{\rho_{i'}}, \quad i' = 1, 2, \quad (1)$$

де штрихами позначено напрямки вздовж локальних координатних осей ($3'$ – напрямком нормалі до поверхні, а $1'$ та $2'$ – дотичні до поверхні напрямки ортів \mathbf{p} та $\mathbf{\tau}$); $h_{i'}$, $i' = 1, 2$, – геометричні константи Ляме поверхні S ; $\rho_{i'}$, $i' = 1, 2$, – локальні радіуси її головних кривин. Наявні у виразах (1) поверхневі напруження $\sigma_{i'j'}^s$ мають вигляд [7]

$$\begin{aligned}\sigma_{i'i'}^s &= \tau_s + (2\mu_s - \tau_s)\varepsilon_{i'i'} + (\lambda_s + \tau_s)(\varepsilon_{1'1'} + \varepsilon_{2'2'}) + \frac{\tau_s}{\rho_{i'}}u_{3'}, \\ \sigma_{3'i'}^s &= \tau_s \left(\frac{1}{h_{i'}} \frac{\partial u_{3'}}{\partial \xi_{i'}} - \frac{u_{i'}}{\rho_{i'}} \right), \\ \sigma_{i'j'}^s &= 2(\mu_s - \tau_s)\varepsilon_{i'j'} + \tau_s u_{i'j'},\end{aligned}\quad (2)$$

де

$$u_{i'j'} = \frac{1}{h_{i'}} \frac{\partial u_{j'}}{\partial \xi_{i'}} - \frac{u_{i'}}{h_{i'} h_{j'}} \frac{\partial h_{i'}}{\partial \xi_{j'}}, \quad i' \neq j', \quad i', j' = 1, 2.$$

Тут $u_{i'}$, $i' = 1, 2, 3$, – межові значення компонент вектора переміщень у локальній системі координат ξ_1, ξ_2, ξ_3 .

Використовуючи співвідношення Коші

$$\begin{aligned}\varepsilon_{i'i'} &= \frac{1}{h_{i'}} \frac{\partial u_{i'}}{\partial \xi_{i'}} + \frac{u_{3-i'}}{h_{1'} h_{2'}} \frac{\partial h_{i'}}{\partial \xi_{3-i'}} + \frac{u_{3'}}{\rho_{i'}}, \\ \varepsilon_{i'j'} &= \frac{1}{2} \left[\frac{1}{h_{i'}} \frac{\partial u_{j'}}{\partial \xi_{i'}} + \frac{1}{h_{j'}} \frac{\partial u_{i'}}{\partial \xi_{j'}} - \frac{u_{i'}}{h_{1'} h_{2'}} \frac{\partial h_{i'}}{\partial \xi_{2'}} - \frac{u_{2'}}{h_{1'} h_{2'}} \frac{\partial h_{j'}}{\partial \xi_{1'}} \right], \quad i' \neq j',\end{aligned}\quad (3)$$

і підставляючи (3) у рівняння (2), а отриманий результат – у співвідношення (1), прийдемо до залежностей компонент вектора зусиль на поверхні порожнини $\sigma_{ni'}^M$, $i' = 1, 2, 3$, від переміщень $u_{i'}$.

Для сферичних частин поверхні S_1 та S_3 порожнини переходимо до сферичної системи координат (r, φ, θ) , для якої $h_{1'} = R \sin \theta$, $h_{2'} = R$, $\rho_\varphi = R$, $\rho_\theta = R$, $\frac{\partial h_{1'}}{\partial \theta} = R \cos \theta$, $\frac{\partial h_{1'}}{\partial \varphi} = \frac{\partial h_{2'}}{\partial \varphi} = \frac{\partial h_{2'}}{\partial \theta} = 0$. Тоді межові значення зусиль на поверхні порожнини $\sigma_{ni'}^M = t_{i'}$, $i' = 1, 2, 3$, визначаються диференціальними співвідношеннями:

$$\begin{aligned}t_n &= 2\tau_s + 2(\mu_s + \lambda_s + \tau_s) \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial u_\varphi}{\partial \varphi} + u_\theta \operatorname{ctg} \theta + \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} \right] + \\ &\quad + 2(2\mu_s + 2\lambda_s + \tau_s)u_n - \frac{\tau_s}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 u_n}{\partial \varphi^2} - \tau_s \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial u_n}{\partial \theta} - \tau_s \frac{\partial^2 u_n}{\partial \theta^2}, \\ t_\theta &= -2(\mu_s + \lambda_s + \tau_s) \frac{\partial u_n}{\partial \theta} - \frac{\mu_s}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 u_\theta}{\partial \varphi^2} - \\ &\quad - (2\mu_s + \lambda_s) \left[\frac{\partial^2 u_\theta}{\partial \theta^2} + \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} \operatorname{ctg} \theta \right] - \frac{\mu_s + \lambda_s}{\sin \theta} \frac{\partial^2 u_\varphi}{\partial \theta \partial \varphi} + \\ &\quad + \frac{3\mu_s + \lambda_s}{\sin \theta} \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial u_\varphi}{\partial \varphi} + [\lambda_s + 2\tau_s + (2\mu_s + \lambda_s) \operatorname{ctg}^2 \theta] u_\theta,\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
t_\varphi = & -\frac{2\mu_s + \lambda_s}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 u_\varphi}{\partial \varphi^2} - \frac{\lambda_s + \mu_s}{\sin \theta} \frac{\partial^2 u_\theta}{\partial \theta \partial \varphi} - \\
& - \frac{2(\mu_s + \lambda_s + \tau_s)}{\sin \theta} \frac{\partial u_n}{\partial \varphi} - \frac{3\mu_s + \lambda_s}{\sin \theta} \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial u_\theta}{\partial \varphi} - \\
& - \mu_s \left[\frac{\partial^2 u_\varphi}{\partial \theta^2} + \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial u_\varphi}{\partial \theta} \right] + [\operatorname{ctg}^2 \theta \mu_s - \mu_s + 2\tau_s] u_\varphi. \quad (4)
\end{aligned}$$

Для циліндричної частини поверхні S_2 застосуємо вирази у циліндричній системі координат (r, φ, z) з геометричними параметрами $h_1 = R$, $h_2 = 1$, $\rho_\varphi = R$, $\rho_z = \infty$, $\frac{\partial h_{i'}}{\partial \xi_{j'}} = 0$, $i', j' = 1, 2$. З урахуванням цих співвідношень матимемо

$$\begin{aligned}
t_n = & \tau_s + (2\mu_s + \lambda_s + \tau_s) \frac{\partial u_\varphi}{\partial \varphi} + (2\mu_s + \lambda_s) u_n - \\
& - \tau_s \frac{\partial^2 u_n}{\partial \varphi^2} + (\lambda_s + \tau_s) \frac{H}{R} \frac{\partial u_z}{\partial z} - \tau_s \left(\frac{H}{R} \right)^2 \frac{\partial^2 u_n}{\partial z^2}, \\
t_z = & -(\lambda_s + \tau_s) \frac{H}{R} \frac{\partial u_n}{\partial z} - \mu_s \frac{\partial^2 u_z}{\partial \varphi^2} - \\
& - (2\mu_s + \lambda_s) \left(\frac{H}{R} \right)^2 \frac{\partial^2 u_z}{\partial z^2} - (\mu_s + \lambda_s) \frac{H}{R} \frac{\partial^2 u_\varphi}{\partial z \partial \varphi}, \\
t_\varphi = & -(2\mu_s + \lambda_s) \frac{\partial^2 u_\varphi}{\partial \varphi^2} - (\lambda_s + \mu_s) \frac{H}{R} \frac{\partial^2 u_\theta}{\partial z \partial \varphi} - \\
& - (2\mu_s + \lambda_s + \tau_s) \frac{\partial u_n}{\partial \varphi} - \mu_s \left(\frac{H}{R} \right)^2 \frac{\partial^2 u_\varphi}{\partial z^2} + \tau_s u_\varphi. \quad (5)
\end{aligned}$$

На контурах переходу сферичних і циліндричної частин поверхні нанопори повинні виконуватися також умови сумісності деформацій матеріальної поверхні: рівність переміщень і кутів повороту, що виникають внаслідок деформування.

Гранична рівновага безмежного пружного тіла, яке містить порожнину, за умови відсутності зовнішніх навантажень описується такою системою трьох однорідних граничних інтегральних рівнянь (ГІР) [4] у глобальній декартовій системі координат (x_1, x_2, x_3) :

$$\begin{aligned}
u_i(\mathbf{x}) - \sum_{j=1}^3 \iint_S T_{ij}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\eta}) [u_j(\boldsymbol{\eta}) - u_j(\mathbf{x})] dS_\boldsymbol{\eta} + \sum_{j=1}^3 \iint_S U_{ij}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\eta}) t_j(\boldsymbol{\eta}) dS_\boldsymbol{\eta} = 0, \\
\mathbf{x} \in S, \quad i = 1, 2, 3, \quad (6)
\end{aligned}$$

де $u_j(\boldsymbol{\eta})$, $t_j(\boldsymbol{\eta})$, $\boldsymbol{\eta} \in S$, – значення компонент векторів переміщень і зусиль на поверхні порожнини з боку нормалі \mathbf{n} . Ядра T_{ij} та U_{ij} – відомі фундаментальні розв'язки задач 3D теорії пружності, які при наближенні точки \mathbf{x} до точки інтегрування $\boldsymbol{\eta}$ мають порядок особливості $|\mathbf{x} - \boldsymbol{\eta}|^{-1}$ та $|\mathbf{x} - \boldsymbol{\eta}|^{-2}$, відповідно, і які залежать від механічних констант Ляме λ та μ .

Поеднанням ГІР (6) і диференціальних рівнянь (4), (5) приходимо до замкнутої системи з шести рівнянь відносно невідомих компонент векторів

переміщень і зусиль на поверхні порожнини, враховуючи їх зв'язок у декартовій і сферичній та циліндричній системах координат. Для числового розв'язування цих рівнянь покриваємо поверхню S неперервною сіткою чотирикутних (восьмивузлових) криволінійних граничних елементів (рис. 1). Дискретизуємо систему ГР (6), розкладаючи інтеграл по кожній області на суму інтегралів по відповідних граничних елементах і подаючи невідомі функції через білінійну інтерполяцію за їхніми значеннями у кутових вузлах граничних елементів.

Числове інтегрування по граничному елементу здійснимо шляхом його відображення на плоску область квадратної форми, використовуючи апроксимацію по всіх вузлах елемента. Якщо точка \mathbf{x} не належить до області граничного елемента, по якому інтегрують, то інтеграл у рівняннях (6) є регулярними і обчислюються за допомогою формули Гаусса – Лежандра. Для обчислення сингулярних інтегралів перед застосуванням формули Гаусса – Лежандра необхідно виконати числову регуляризацію методом відображень [1], який полягає у розбитті області інтегрування на трикутні підобласті та застосуванні до них відображень, якобіан яких перетворюється в нуль у сингулярних точках.

Похідні від компонент вектора переміщень у диференціальних рівняннях (4), (5) апроксимуємо скінченими різницями через значення цих функцій у кутових вузлах граничних елементів. Зауважимо, що для інтерполяції похідних від шуканих функцій другого порядку необхідно використати їхні значення як мінімум у трьох кутових вузлах, що належать двом сусіднім граничним елементам.

Застосовуючи таку процедуру та задовольняючи рівняння (4)–(6) колокаційно у всіх вузлових точках гранично-елементного розбиття області S , отримаємо їхні дискретні аналоги у вигляді системи лінійних алгебраїчних рівнянь відносно значень компонент векторів переміщень та зусиль у кутових вузлах граничних елементів на поверхні S . Через ці значення з використанням інтегральних подань Сомільяно [1, 4] знаходимо поле напружень поза порожниною за формулою

$$\sigma_{ij}(\mathbf{x}) = \sum_{m=1}^3 \left[\iint_S D_{ijm}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}) t_m(\boldsymbol{\xi}) dS_{\boldsymbol{\xi}} - \iint_S L_{ijm}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}) u_m(\boldsymbol{\xi}) dS_{\boldsymbol{\xi}} \right],$$

$$\mathbf{x} \in \Omega, \quad i, j = 1, 2, 3, \quad (7)$$

де ядра D_{ijm} та L_{ijm} отримуємо диференціюванням фундаментальних розв'язків U_{ij} та T_{ij} , відповідно, і їх явні вирази наведено в роботі [1].

Верифікацію запропонованого методу та стійкості числових процедур проводимо шляхом порівняння отриманих результатів з відомим у літературі аналітичним розв'язком задачі поверхневого натягу сферичної нанопорожнини у безмежному пружному тілі, коли напруження задаються співвідношеннями [11]

$$\sigma_{rr}(r) = -2\sigma_{\theta\theta}(r) = -2\sigma_{\phi\phi}(r) = \frac{2\mu\tau_s}{\mu R + \lambda_s + \mu_s + \tau_s/2} \left(\frac{R}{r} \right)^3, \quad r \geq R, \quad (8)$$

де R – радіус нанопорожнини, r – відстань від початку системи координат до точки спостереження.

У табл. 1 наведено значення напружень $\sigma_{rr} R/\tau_s$ на поверхні сферичної порожнини з радіусом $R = 5$ нм. Тут і надалі використовуємо дані для матеріалу зі свіжосколотого заліза («freshly cleaved iron») з такими механічними об'ємними та поверхневими характеристиками: $\mu = 70$ ГПа, $\lambda = 80$ ГПа, $\mu_s = 2.5$ Н/м, $\lambda_s = -8$ Н/м за умови поверхневого натягу величиною $\tau_s = 1.7$ Н/м [11]. Результати числового моделювання подано у табл. 1 для різної густини сітки граничних елементів, коли $L = 0$, $H = 2R$.

Таблиця 1

Кількість граничних елементів	Числові результати	Аналітичний розв'язок за формулою (8)
288	2.02488	2.02693
384	2.02520	
512	2.02631	

На рис. 2 з дотриманням відносного геометричного масштабу показано 3D діаграму розподілу модуля вектора зусиль на поверхні сфероциліндричної нанопори з видовженням $H/R = 3$ та розмірами $R = 2$ нм, $H = 6$ нм (рис. 2а) і $R = 5$ нм, $H = 15$ нм (рис. 2б).

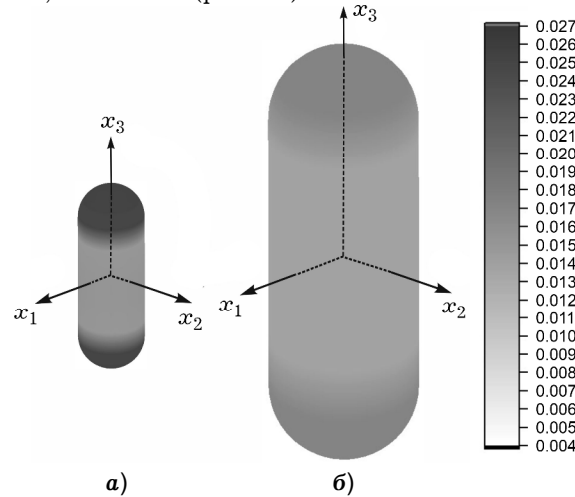


Рис. 2

Як видно з діаграм на рис. 2, поверхневий натяг викликає різкий ріст напружень при переході з циліндричної до сферичної частин поверхні нанопори, який зумовлений стрибком кривини поверхні (від $1/\rho_z = 0$ до $1/\rho_0 = 1/R$). Порівняння результатів для нанопор різного розміру показує істотний розмірний ефект збільшення напружень на поверхні нанопори більш ніж у 2 рази при зменшенні її розміру в 2.5 рази. Впливом поверхневого натягу на напружений стан пружного тіла зі сфероциліндричною порожниною за її характерних розмірів, більших ніж 30 нм, можна знехтувати.

На рис. 3, 4 і 5 показано залежності відносних нормальних напружень $\bar{\sigma}_{rr} = \sigma_{rr}R/\tau_s$, $\bar{\sigma}_{zz} = \sigma_{zz}R/\tau_s$ і $\bar{\sigma}_{\phi\phi} = \sigma_{\phi\phi}R/\tau_s$, відповідно, для нанопори з радіусом $R = 5$ нм для різних значень її видовження ($H/R = 1.0, 1.2, 1.4, 2.0$) від відносної радіальної координати r/R у серединній площині $z = 0$. Додатково круглими маркерами позначено результати точного аналітичного розв'язку (8) для сферичної нанопори ($H/R = 1$).

Зафіксовано хорошу збіжність запропонованого методу та його добре узгодження з аналітичними розв'язками тестових задач (див. табл. 1, рис. 3–5, криві для $H/R = 1$).

На рис. 3–5 спостерігаємо плавне зменшення абсолютних величин напружень при віддаленні від поверхні нанопори. Зауважимо, що напруження $\bar{\sigma}_{zz}$ і $\bar{\sigma}_{\phi\phi}$ у площині серединного перерізу нанопори є від'ємними, що створює ефект зміцнення нанопористого матеріалу за рахунок поверхневого натягу. На відстані, більшій ніж $r = 2.5R$, криві напружень для різних співвідношень геометричного параметра H/R сходяться в одну криву, що свідчить про зведення нанівель впливу форми порожнини у зазначеній зоні, і ефект поверхневого натягу визначається лише її розміром.

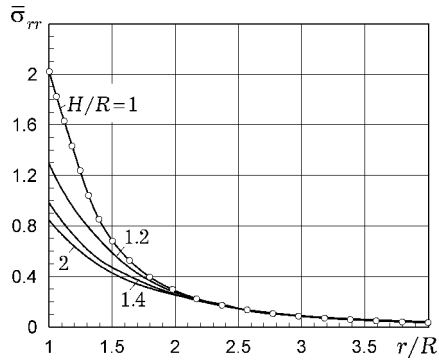


Рис. 3

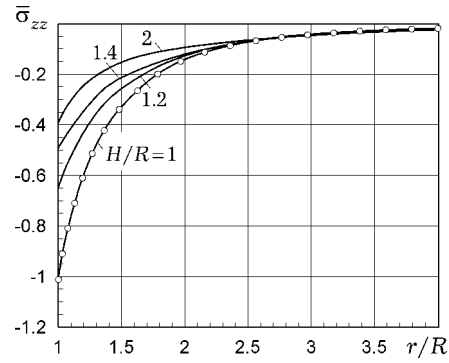


Рис. 4

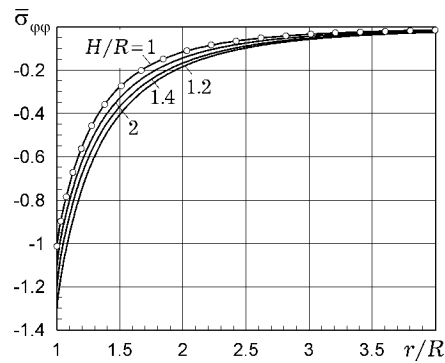


Рис. 5

Зі збільшенням відносної висоти нанопори до певної межі значення напружень $\bar{\sigma}_{rr}$ і $\bar{\sigma}_{zz}$ зменшуються по модулю, а напруження $\bar{\sigma}_{\varphi\varphi}$, навпаки, зростають. Протилежні тенденції зміни напружень $\bar{\sigma}_{zz}$ та $\bar{\sigma}_{\varphi\varphi}$ при збільшенні висоти нанопори пояснюються ростом впливу кривини циліндричної частини її поверхні з одночасним зменшенням впливу кривини сферичних частин. Коли $H/R > 2$, то напруження у площині серединного перерізу нанопори не залежить від її відносної висоти через мінімізацію впливу сферичних частин поверхні S . У цих випадках нанопору умовно можна вважати «базею» по висоті і ефекти поверхневого натягу можна досліджувати з розв'язків відповідної плоскої задачі

Розроблений метод розв'язування задачі дозволяє узагальнити розрахунки на випадок комбінованого впливу віддаленого навантаження на простір із нанопорою складної форми та поверхневим натягом, а також на моделі матеріалізованих поверхонь вищого порядку [13].

1. Михаськів В. В., Стасюк Б. М. Упругое состояние включения в форме короткого волокна при скользящем контакте с трехмерной матрицей // Прикл. механика. – 2015. – **51**, № 6. – С. 42–51.
 The same: Mikhas'kiv V. V., Stasyuk B. M. Elastic state of a sliding short fiber inclusion in a three-dimensional matrix // Int. Appl. Mech. – 2015. – **51**, No. 6. – P. 640–647. – <https://doi.org/10.1007/s10778-015-0720-8>.
2. Повстенко Ю. З. Напружений стан в твердому тілі, зумовлений лапласівським навантаженням у від'ємному кристалі // Мат. методи и физ.-мех. поля. – 1991. – Вып. 34. – С. 69–73.
 The same: Povstenko Yu. Z. The stressed state in a rigid body caused by Laplacian loads in a negative crystal // J. Sov. Math. – 1993. – **66**, No. 6. – P. 2615–2619. – <https://doi.org/10.1007/BF01097869>.
3. Подстригач Я. С., Повстенко Ю. З. Введение в механику поверхностных явлений в деформируемых твердых телах. – Киев: Наук. думка, 1985. – 200 с.

4. Стасюк Б. М. Вплив газонаповненої порожнини складної форми на напруження в околі сусідньої тріщини // Фіз.-хім. механіка матеріалів. – 2013. – **49**, № 6. – С. 28–35.
Te same: *Stasyuk B. M.* Influence of a gas-filled cavity of complex shape on stresses in the vicinity of a neighboring crack // *Mater. Sci.* – 2014. – **49**, No. 6. – P. 734–742. – <https://doi.org/10.1007/s11003-014-9668-9>.
5. *Altenbach H., Eremeyev V. A., Lebedev L. P.* On the existence of solution in the linear elasticity with surface stresses // *Z. Angew. Math. Mech.* – 2010. – **90**, No. 3. – P. 231–240. – <https://doi.org/10.1002/zamm.200900311>.
6. *Dong C. Y., Pan E.* Boundary element analysis of nanoinhomogeneities of arbitrary shapes with surface and interface effects // *Eng. Anal. Bound. Elem.* – 2011. – **35**, No. 8. – P. 996–1002. – <https://doi.org/10.1016/j.enganabound.2011.03.004>.
7. *Dong C. Y., Zhang G. L.* Boundary element analysis of three dimensional nanoscale inhomogeneities // *Int. J. Solids Struct.* – 2013. – **50**, No. 1. – P. 201–208. – <https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2012.09.012>.
8. *Duan H. L., Yi X., Huang Z. P., Wang J.* A unified scheme for prediction of effective moduli of multiphase composites with interface effects. Part II: – Application and scaling laws // *Mech. Mater.* – 2007. – **39**, No. 1. – P. 94–103. – <https://doi.org/10.1016/j.mechmat.2006.02.010>.
9. *Gibbs J. W.* The scientific papers of J. Willard Gibbs: In two volumes. – Vol. 1. Thermodynamics. – London etc.: Longmans, Green & Co., 1906. – xxviii+434 p.
10. *Gurtin M. E., Murdoch A. I.* A continuum theory of elastic material surfaces // *Arch. Rational Mech. Anal.* – 1975. – **57**, No. 4. – P. 291–323.
11. *He L. H., Li Z. R.* Impact of surface stress on stress concentration // *Int. J. Solids Struct.* – 2006. – **43**, No. 20. – P. 6208–6219. – <https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2005.05.041>.
12. *Mogilevskaya S. G., Crouch S. L., Stolarski H. K.* Multiple interacting circular nano-inhomogeneities with surface/interface effects // *J. Mech. Phys. Solids.* – 2008. – **56**, No. 6. – P. 2298–2327. – <https://doi.org/10.1016/j.jmps.2008.01.001>.
13. *Mogilevskaya S. G., Kushch V. I., Zemlyanova A. Y.* Displacements representations for the problems with spherical and circular material surfaces // *Q. J. Mech. Appl. Math.* – 2019. – **72**, No. 4. – P. 449–471. – <https://doi.org/10.1093/qjmam/hbz013>.
14. *Murr L. E.* Interfacial phenomena in metals and alloys. – Reading, MA: Addison-Wesley Publ. Co., 1975. – 376 p.
15. *Orowan E.* Surface energy and surface tension in solids and liquids // *Proc. Roy. Soc. London. A.* – 1970. – **316**, No. 1527. – P. 473–491. – <https://doi.org/10.1098/rspa.1970.0091>.
16. *Povstenko Y. Z.* Generalization of Laplace and Young equation involving couples // *J. Colloid Interface Sci.* – 1991. – **144**, No. 2. – P. 497–506.
17. *Povstenko Y. Z.* Theoretical investigation of phenomena caused by heterogeneous surface tension in solids // *J. Mech. Phys. Solids.* – 1993. – **41**, No. 9. – P. 1499–1514. – [https://doi.org/10.1016/0022-5096\(93\)90037-G](https://doi.org/10.1016/0022-5096(93)90037-G).
18. *Shuttleworth R.* The surface tension of solids // *Proc. Phys. Soc. A.* – 1950. – **63**, No. 5. – P. 444–456. – <https://doi.org/10.1088/0370-1298/63/5/302>.
19. *Srivastava D., Atluri S. M.* Computational nanotechnology: a current perspective // *Comput. Model. Eng. Sci.* – 2002. – **3**, No. 5. – P. 531–538. – <https://doi.org/10.3970/cmesc.2002.003.531>.
20. *Sun C. Q.* Thermo-mechanical behavior of low-dimensional systems: The local bond average approach // *Progr. Mater. Sci.* – 2009. – **54**, No. 2. – P. 179–307. – <https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2008.08.001>.
21. *Wang J., Duan H. L., Huang Z. P., Karihaloo B. L.* A scaling law for properties of nano-structured materials // *Proc. Roy. Soc. London. A.* – 2006. – **462**, No. 2069. – P. 1355–1363. – <https://doi.org/10.1098/rspa.2005.1637>.
22. *Wang W., Zeng W., Ding J.* Finite element modeling of two-dimensional nanoscale structures with surface effects // *WASET: Int. J. Civil & Environmental Eng.* – 2010. – **4**, No. 12. – P. 426–431. – Version 1354. Dec. 20, 2010. – <https://doi.org/10.5281/zenodo.1055040>.
23. *Yang F. Q.* Size-dependent effective modulus of elastic composite materials: spherical nanocavities at dilute concentrations // *J. Appl. Phys.* – 2004. – **95**, No. 7. – P. 3516–3520. – <https://doi.org/10.1063/1.1664030>.
24. *Zhang T. Y., Wang Z. J., Chan W. K.* Eigenstress model for surface stress of solids // *Phys. Rev. B.* – 2010. – **81**, No. 19. – Art. 195427. – 12 p. – <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.81.195427>.

ЭФФЕКТЫ ОТ ПОВЕРХНОСТНОГО НАТЯЖЕНИЯ СФЕРОЦИЛИНДРИЧЕСКОЙ НАНОПОРЫ В УПРУГОМ ПРОСТРАНСТВЕ

Осуществлена гранично-интегральная формулировка трехмерной задачи о наличии в упругом безграничном пространстве нанопоры неканонической формы при условии поверхностного натяжения на ее поверхности. Сложная геометрия и физические особенности поверхности поры на наноуровне учтены в интегральных представлениях перемещений и напряжений в пространстве, а также в граничных условиях, моделирующих эту поверхность как материальный объект с собственными мембранными свойствами и поверхностным натяжением. Проведены численные расчеты напряженно-деформированного состояния в окрестности нанопоры в форме короткого цилиндра с закругленными краями в свежесколотом железе.

Ключевые слова: сфероцилиндрическая нанопора, модель материальной поверхности, метод граничных интегральных уравнений, поверхностное натяжение.

EFFECTS DUE TO SURFACE TENSION OF THE SPHERICAL-CYLINDRICAL NANOPORE IN THE ELASTIC MEDIUM

The boundary-integral formulation of a three-dimensional problem of the presence of a non-canonical nanopore in an infinite elastic medium under the surface tension on its surface is performed. The complex geometry and physical features of the pore surface at the nanoscale are taken into account in the integral representations of displacements and stresses in a medium, as well as in the boundary conditions modeling this surface as a material object with its own membrane properties and surface tension. Numerical calculations of the stress-strain state in the vicinity of a nanopore in the form of a short cylinder with rounded edges in freshly cleaved iron are carried out.

Key words: spherical-cylindrical nanopore, material surface model, boundary integral equation method, surface tension.

Нац. ун-т «Львівська політехніка», Львів,
Ін-т прикл. проблем механіки і математики
ім. Я. С. Підстригача НАН України, Львів

Одержано
28.10.19