

NANOMEXANİKA – MÜASİR VƏ GƏLƏCƏK TEXNİKANIN VƏ MAŞINŞÜNASLIĞIN ELMİ ƏSASIDIR

¹VALEH İ. BAXŞƏLİ, ²B.H. İBRAHİMOV

¹Azərbaycan Texniki Universiteti, Mexanika kafedrası,

Bakı, H.Cavid prospekti, 25

²Fransız-Azərbaycan Unicersiteti,

Bakı, AZ-1000, Nizami küç., 183

e-mail: v.bakhshali@aztu.edu.az

Məqalədə nanomexanikanın prinsipləri əsasında materialın daxili quruluşu araşdırılmış və nanohissəciklər arasındakı ara boşluqları nəzərə alınaraq onun mexaniki xassələri nəzəri üsulla tədqiq edilmişdir. Göstərilmişdir ki, elastiklik modulu materialın kristal qəfəslərində hissəciklər arasındakı məsafələrdən (ara boşluqlarından) asılı olaraq dəyişir. Burada materialın izotrop və kəsilməzlik xassələri haqqındakı hipotezlərdən imtina edilmiş, potensialı qüvvə sahəsində nanohissəciyin hərəkətinin diferensial tənlikləri yazılmış, Lennard-Cons potensial funksiyasına əsasən həmin tənliklər həll edilmiş, sahə qüvvəsinin, onun potensialı qüvvə sahəsində gördüyü işin və materialın real elastiklik modulunun tapılması üçün nəzəri praktiki ifadələr çıxarılmışdır.

Açar sözlər: nanomexanika, Lennard-Cons potensialı, mexaniki sistem, hərəkət tənlikləri

GİRİŞ. NANOÖLÇÜLÜ CİSİMLƏR MEXANİKASININ ƏSASLARI

Son 15-20 il müddətində inkişaf edən Mexanikanın ən yeni bölməsi olan Nanomexanikanın elm və texnikada inqilabi dəyişikliklərə səbəb olacağı şübhəsizdir. Burada klassik mexanikanın hipotezlərindən imtina olunmaqla konstruksiya elementlərinin real mexaniki xassələrinin tapılması metodikaları işlənir. Nanomexanika, cismin atom və molekullarının mexaniki hərəkətini öyrənən kvant mexanikası ilə klassik mexanika arasında mövcud olan boşluğu dolduran yeni və mükəmməl bir alətdir. Nanomexanikanın prinsipləri əsasında yaradılan maşın hissələrinin ömürüzunluğunun 10-15 dəfə artırılması ilə yanaşı onların yüksək dəqiqliyə malik olması təmin edilir.

Neft və qaz sənayesində tətbiq olunan maşın və avadanlıqların keyfiyyət və istismar göstəriciləri xeyli dərəcədə onların konstruksiya elementlərinin materiallarının mexaniki-fiziki xassələrindən asılıdır. Konstruksiya elementlərinin materiallarının elastiklik və sərtlik parametrlərinin ənənəvi materiallar müqavimətinin prinsipləri əsasında tapılması və nəzərə alınması bu gün özünü doğrultmur. Odur ki, materialların mexaniki xassələrinin onların nanoölçülü hissəcikləri səviyyəsində araşdırılması və dəqiqləşdirilməsinə ehtiyac duyulur. Materialının nanoölçülü strukturunun mexaniki xassələrinin öyrənilməsi onların xassələrinin real mənzərəsini yaratmaq deməkdir. Real materialların heç bir sadələşdirmə və hipotezlərin qəbul edilmədən mexaniki xassələrinin nəzəri və eksperimental üsullarla öyrənilməsi Nanomexanikanın predmetinə daxildir. Burada konstruksiya elementlərinin materialının kəsilməzliyi haqqındakı fərziyyə, həmçinin nanohissəciklərin mexaniki hərəkətlərinin araşdırılması zamanı bu hissəciklərin trayektoriyaları anlayışı öz əhəmiyyətini itirir və materialın anizotrop xassələrinin araşdırılması üçün onun daxili quruluşunun diskret xassəyə malik olduğu nəzərə alınır. Məsələnin bu cür qoyuluşu və həlli

müasir maşın və mexanizmlərin keyfiyyət göstəricilərinin yüksəldilməsini şərtləndirir.

NANOMEXANİKANIN YARANMA ZƏRURƏTİ VƏ MÖVCUD ƏDƏBİYYATIN ŞƏRHİ

Qısa tarixə malik Nanomexanika sahəsində materialların nanokristal quruluşlarının tədqiqinə aid xeyli işlər mövcuddur. Kristal qəfəslərin dinamik analizi sahəsində Nobel Mükafatı Laureatı M. Born və digərlərinin klassik işləri mövcuddur [1, 2, 3]. Bu işlərdə M.Born nəzəriyyəsi əsasında ideal kristalların elastiklik xarakteristikalarının tapılması metodları verilmişdir.

Nanomexanikanın prinsiplərinin işlənməsi üçün bir sıra klassik elmi araşdırmaların, o cümlədən Azərbaycan alimi, Nobel Mükafatı Laureatı prof. Lev Landau'nun klassik əsərlərinin [13] böyük əhəmiyyəti olmuşdur. Son dövrlər nanoölçülü obyektlərin mexaniki xassələrinin tədqiqinə bir sıra işlər həsr edilmişdir. N.F.Morozov, A.M.Krivtsov və digərlərinin işlərində ikiölçülü heksaqonal kristal qəfəslərin mexaniki modelinə baxılmışdır [1, 2]. Burada göstərilmişdir ki, cüt momentlərin qarşılıqlı təsiri bu qəfəslərin dayanıqlığını təmin edə bilər. Eksperimental məlumatlarla təsdiqlənən və materialın sərtliklərinin nisbətini tapmaq üçün hissəciklərin qarşılıqlı təsirini ifadə edən ümumiləşmiş momentlər potensialı təklif edilmişdir [3]. T.C. Lim, M.I.Baskes və digərləri tərəfindən real materialların praktiki mexaniki parametrlərinin tapılması üçün vacib olan Lennard-Cons potensialı ilə Morz potensialı arasındakı funksional əlaqələr və real materialların daxili quruluşları araşdırılmışdır [4,5,6,7].

Bir sıra işlərdə nanokristal və nanoölçülü struktur quruluşlu materialların əyilmə sərtliklərinin xüsusiyyətləri tədqiq edilmiş və nanoquruluşların əyilmə sərtliklərinin hesabı zamanı onların moment qarşılıqlı təsirləri təyin edilmişdir [8, 9, 10, 11, 12]. Materialın xətti elastiklik nəzəriyyəsi ilə A.İ. Luryenin əsərində, deformasiya olunan cisimlərin mexaniki xassələrinin tapılması metodları ilə L.D. Landau [13], V.A. Palmov

[14], P.A. Jilin [15] və digərlərinin klassik elmi tədqiqat işlərində tanış olmaq olar.

Riyaziyyat və mexanikanın bugünkü inkişafının müasir texnikaya təsiri şübhəsizdir. Burada qeyri-səlis riyaziyyatın (Fuzzy Mathematics) nəzəri əsaslarını yaratmış Azərbaycan elmi məktəbinin (prof. L. Zadə, prof. R.Ə. Əliyev və b. yaratdıqları elmi nəzəriyyələrin [16]) nailiyyətlərindən istifadə etməklə mexanika sahəsində elmi-texniki inqilabın gələcək perspektivlərini araşdırmaq olar.

NANOMATERIALIN REAL EKVALENT MEXANİKİ XASSƏLƏRİNİN TƏDQIQI

Yuxarıda qeyd edildiyi kimi, real materialın nano strukturunda mövcud olan ara boşluqları (məsamələri) nəzərə alındıqda materialın kəsilməzliyi haqqında hipotez öz əhəmiyyətini itirir. Həmin ara boşluqlarını nano ölçülü hissəciklərlə doldurulması nəticəsində kompozit nano materialların praktikada alınması üsulları işlənmişdir [17]. Alınmış nano kompozit materialın mexaniki xassələrinin tədqiqi müasir mexanikanın qarşısında duran aktual problemlərdən biridir.

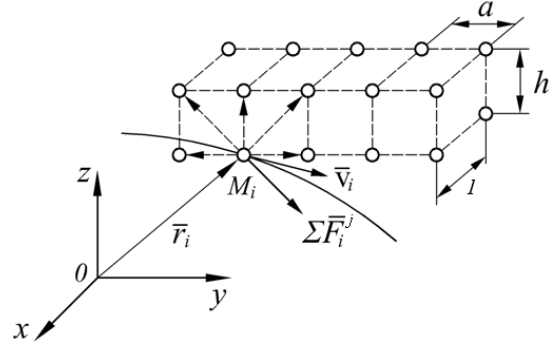
Şəkil 1-də monokristal quruluşa və ya quruluşa ona yaxın olan materialın daxili kristal quruluşunda dünyələrdə nanohissəciklərin yerləşdiyi qüvvə sahəsi kimi göstərilmişdir. Başqa sözlə, onun daxili hissəciklərinin arası qüvvə sahəsinə malik boşluqlardan ibarət olduğu nəzərə alınmışdır. Bu isə öz növbəsində materialın real mənzərəsini yaradır və onun anizotrop xassələrini özündə əks etdirir. Şəkildə materialın daxilində ölçüləri 100 nanometrdən kiçik olan elementar hissəciklərdən ibarət kristal qəfəslər 3-D ölçüdə göstərilmişdir (burada 3-cü ölçü sabit vahid qəbul edilmişdir). Burada materialın daxili kristal quruluşuna potensiallı qüvvə sahəsində hərəkət edən maddi nöqtələrin mexaniki sistemi kimi baxa bilərik. Qeyd edək ki, makro-mexanikada sistemin daxili qüvvələrinin cəmi sıfır qəbul edilir, lakin yuxarıda qeyd etdiyimiz kimi, materialın nanoölçülü hissəciklərinin qarşılıqlı təsirini nəzərə aldıqda daxili qüvvə amili öz ilkin məzmununu dəyişir və sahənin potensial funksiyasından asılı olaraq tapılır. Kristal hissəciklərə xaricdən təsir edən qüvvələri nəzərə almadığımızı görə, göstərilən monokristalın deformatsiya halı hissəciklər arasındakı a və kristal təbəqələr arasındakı b məsafələrindən asılı olur. İki qonşu hissəcik arasındakı qarşılıqlı təsir qüvvəsi potensiallı qüvvə sahəsinin $F(r)$ qüvvəsi kimi tapılır. Bu nöqtə şəkildə

göstəriləndiyi kimi, özünə yaxın olan bütün digər nöqtələrlə (nanohissəciklərlə) qarşılıqlı təmasdadır. Şəkildə ixtiyari M_i nanohissəciyinin Oxyz sistemində hə-

rəkətinə baxaq. Həmin hissəciyin hərəkətinin diferensial tənliyini yazaq:

$$m_i \frac{d^2 r_i}{dt^2} = F_i^e + F_i^j \quad (1)$$

Burada m_i - hissəciyin kütləsi, r_i - hissəciyin tərpənməz O nöqtəsinə nəzərən radius-vektoru, F_i^e və F_i^j isə hissəciyə təsir edən xarici və daxili qüvvələrdir.



Şəkil 1. Nanohissəciklərin potensiallı qüvvə sahəsində hərəkəti.

Məlumdur ki, adətən makro sistemlərdə daxili qüvvələrin əvəzləyicisi 0 (sıfır) qəbul edilir. Lakin, nano sistemin hissəciklərinin mexaniki hərəkəti daxili qüvvələrin təsiri altında baş verir. Odur ki, baxdığımız halda nano sistemə təsir edən xarici qüvvələr nəzərə alınmır və hissəciyə təsir edən daxili qüvvə F_i^j , qüvvə sahəsinin $U(r_i)$ potensialından asılı olaraq tapılır.

Sahənin Lennard-Jons potensialını aşağıdakı klassik ifadədən tapırıq [5, 6]:

$$U(r_i) = D \left[\left(\frac{a}{r_i} \right)^{12} - 2 \left(\frac{a}{r_i} \right)^6 \right] \quad (2)$$

Burada D - rabitənin potensial enerjisi, a - müvazinət vəziyyətində hissəciklər arasındakı məsafədir.

Nanohissəciyə təsir edən daxili qüvvə, hissəciklər arasındakı qarşılıqlı təsir qüvvəsinə bərabər olub əks işarə ilə sahə potensialının birinci tərtib törəməsinə bərabərdir:

$$F_i^j = F(r_i) = -U'(r_i) = \frac{12D}{a} \left[\left(\frac{a}{r_i} \right)^{13} - 2 \left(\frac{a}{r_i} \right)^7 \right] \quad (3)$$

Bu ifadəni vektorial formada aşağıdakı kimi yazırıq:

$$\bar{F}(r_i) = F(r_i) \frac{\bar{r}_i}{r_i} = F(r_i) \frac{\bar{r}_i}{a} \frac{a}{r_i} = \frac{12D}{a^2} \left[\left(\frac{a}{r_i} \right)^{14} - \left(\frac{a}{r_i} \right)^8 \right] \bar{r}_i \quad (4)$$

Qeyd edilən potensiallı sahə qüvvəsinin gördüyü elementar işin ifadəsini aşağıdakı kimi yazırıq:

$$dA = \bar{F}(r)d\bar{r}_i = -dU(r_i) = \frac{12D}{a} \left[\left(\frac{a}{r_i}\right)^{13} - \left(\frac{a}{r_i}\right)^7 \right] dr_i. \quad (5)$$

Bu ifadəni inteqrallayıb tam işi tapırıq:

$$A_{01} = U(r_0) - U(r_1) \quad (6)$$

Burada $r_0=a$ və $r_1=h$ hiccəciyin Oxyz koordinat sistemində başlanğıc və son radius-vektorudur.

$$r_1 = h = \sqrt{\frac{a^2}{4} + h^2} \quad (7)$$

Şəkildən üfiqi və şaquli (y və z oxları) istiqamətində yaranan normal gərginlikləri və nisbi deformasiyaları tapaq:

$$\sigma = E\varepsilon, \quad \sigma_1 = \frac{F(a)}{a}, \quad \sigma_2 = \frac{F(r)}{h}, \quad \varepsilon_1 = \frac{\Delta a}{a}, \quad \varepsilon_2 = \frac{\Delta h}{h}. \quad (8)$$

Hissəciklərin x oxu istiqamətində qarşılıqlı təsir qüvvələri:

$$F(a) = c\Delta a \quad (9)$$

Burada c materialın sərtliyidir:

$$c = U''(a) = -F'(a) \quad (10)$$

(9) ifadəsinin hər tərəfini baxılan hissəciyin vahid qalınlığa düşən $V = ah$ həcminə bölək:

$$\frac{F(a)}{ah} = \frac{c\Delta a}{ah} \quad (11)$$

$$\text{və ya} \quad \frac{\sigma}{a} = c \frac{\varepsilon_1}{h}, \quad \text{buradan} \quad \sigma = \frac{ca}{h} \varepsilon_1 \quad (12)$$

(10) və (12) ifadələrini müqayisə etsək alarıq:

$$E = \frac{ca}{h} = -\frac{a}{h} F'(a) = \frac{12D}{ah} \left[13 \left(\frac{a}{r}\right)^{14} - 7 \left(\frac{a}{r}\right)^8 \right] = \frac{12D}{V} \lambda^{-8} [13\lambda^{-6} - 7] \quad (13)$$

Burada $\lambda = \frac{r}{a}$ – hissəciyin üfiqi istiqamətdə yerdəyişmə parametri, $V = ah$ isə vahid qalınlıqlı hissəciyin həcmidir.

İndi xarici qüvvələrin təsirini nəzərə almayaraq (3) ifadəsini (1)-də yerinə yazsaq və hissəciyin hərəkətinin diferensial tənliyini çıxarsaq:

$$m \frac{dv}{dt} = \frac{12D}{a} \left[\left(\frac{a}{r}\right)^{13} - \left(\frac{a}{r}\right)^7 \right] \quad (14)$$

Burada başlanğıc şərtə əsasən $r = 0$ olduqda $v = 0$ qəbul edib $m \frac{dv}{dt} = mv \frac{dv}{dr}$ olduğunu nəzərə alaraq (14) ifadəsini inteqrallayıb aşağıdakı ifadəni alırıq:

$$\frac{v^2}{2} = \frac{2Da^6}{mr^6} - \frac{Da^{12}}{mr^{12}} \quad (15)$$

Buradan tapırıq:

$$D = \frac{mv^2}{2} \frac{1}{2\lambda^6 - 1} \lambda^{12} = \frac{K}{2\lambda^6 - 1} \lambda^{12} \quad (16)$$

Burada $K = \frac{mv^2}{2}$ hissəciyin kinetik enerjisidir. (16)-nı (13)-də yerinə yazsaq, alarıq:

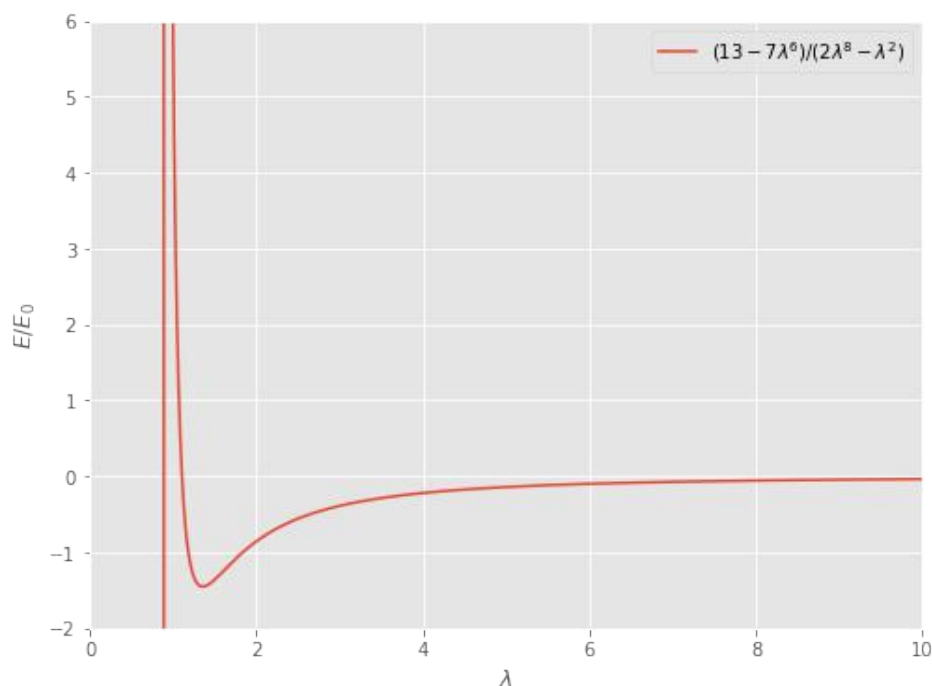
$$E = \frac{12K}{V} \frac{13 - 7\lambda^6}{2\lambda^8 - \lambda^2} \quad (17)$$

Buradan nanomaterialın nisbi elastiklik modulunu tapırıq:

$$E/E_0 = \frac{13 - 7\lambda^6}{2\lambda^8 - \lambda^2} \quad (18)$$

Burada $E_0 = \frac{12K}{V}$ – materialın ilkin dinamik elastiklik moduludur.

Python Packages proqramı əsasında (18) ifadəsi araşdırılmış və diaqramlar qurulmuşdur (şəkil 2).



Şəkil 2. Nanomaterialın nisbi elastiklik modulunun diaqramı.

Tədqiqatlar göstərir ki, materialın elastiklik xassələrini ifadə edən kəmiyyətlərin makro və nano səviyələrdə araşdırılması əsaslı şəkildə fərqlənir.

NƏTİCƏLƏR

Materialın izotrop və kəsilməzlik xassələri haqqındakı hipotezlərdən imtina edilmiş, onun daxili quruluşu nanomexanikanın prinsipləri əsasında araşdırılmış və potensiallı qüvvə sahəsində nanohissəciyin hərəkətinin diferensial tənlikləri yazılmışdır. Lennard-

Cons potensial funksiyasına əsasən həmin tənliklər həll edilmiş, sahə qüvvəsinin, onun potensiallı qüvvə sahəsində gördüyü işin və materialın real elastiklik modulunun tapılması üçün praktiki ifadələr çıxarılmışdır. Bu ifadələrin əsasında materialın elastiklik modulunun ölçüsüz qiymətinin hissəciyin radius vektorundan asılı olaraq praktiki diaqramları qurulmuşdur. Tədqiqatın nəticələri materialın real mexaniki xassələrinin praktikada istifadə olunması üçün faydalı ola bilər.

- [1] *M. Born, K. Haug.* Dynamical Theory of Cristal Lattices, Oxford University Press, Oxford, 1954.
- [2] *N. Morozov, Y. Petrov.* Dynamics of Fracture. Springer-Verlag. Berlin, Heidelberg, New York, 2000.
- [3] *E.A. Ivanova, A.M. Krivtsov, N.F. Morozov.* Bending stiffness calculation for nanosize structure. Fatigue and Fracture of Engineering Mater. and Structures, 2003, v. 26, p. 715–718
- [4] *A.M. Krivtsov.* Molecular dynamics simulation of impact fracture in polycrystalline materials. Meccanica. 2003. V. 38, № 1. P. 61–70.
- [5] *T.C. Lim.* The Relationship between Lennard-Jones (12-6) and Morse Potential Functions. Verlag der Zeitschrift fur Naturforschung, Tubingen, 2003, pp. 615-617
- [6] *M.İ. Baskes.* Many-body effects in fcc metals: A Lennard-Jones embedded-atom potential. Phys.Rev.Letters. 1999, v. 83, № 13, p. 2592–2595.
- [7] *V.V. Zhakhovskii, S.V. Zybin, K. Nishihara, S.I. Anisimov.* Shock Wave Structure in Lennard-Jones Crystal via Molecular Dynamics. Phys. Rev. Letters. 1999, v. 83, № 6. p. 1175–1178.
- [8] *H. Gao, Y. Huang, F.F. Abraham.* Continuum and atomistic studies of intersonic crack propagation. J. Mech. Phys. Sol., 2001, v. 49, p. 2113-2132. Link to PDF file(288K).
- [9] *J. Schiotz, T. Rasmussen, K. W. Jacobsen, O.H. Nielsen.* Mechanical deformation of nanocrystalline materials. Philosoph. Mag. Letters. 1996, v. 4, № 5, p. 339–344.
- [10] *C.S. Becqart, D. Kim, J.A. Rifkin, P.C. Clapp.* Fracture Properties of Metals and Alloys from Molecular Dynamics Simulations. Mat. Sci., Eng., 1993, № 170, p. 87–94.
- [11] *F. Ercolessi, F.D. Di Tolla, E. Tosatti.* The microscopic origin of nonmelting and surface overheating at close-packed metal surfaces. Surface Rev. and Letters 1997, v. 4, № 5, p. 833–837.
- [12] *S.J. Zhou, P.S. Lomdahl, A.F. Voter, B.L. Holian.* Three-dimensional fracture via large-scale molecular dynamics. Engineering Fracture Mechanics. 1998, v. 61, № 1, p. 173–187.
- [13] *Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц.* Теоретическая физика. Механика, М.: Наука, 1988, 216 с.
- [14] *A.K. Belyaev, V.A. Palmov.* Thermodynamic derivation of the heat conduction equation and

- the dynamic boundary value problem for thermoelastic materials and fluids. *Acta Meccanica*. 1996, v. 114, № 1–4. p. 27–37.
- [15] *H. Altenbakh, P.A. Zhilin*. General theory of elastic simple covers. *Advances in mechanics*. Warszawa, Polska. 1988. № 4. p. 107- 48.
- [16] *R.A. Aliev*. *Fundamentals of the Fuzzy Logic-Based Generalized Theory of Decisions*. Springer-Verlag, Berlin - Heidelberg, 2013.

Valeh I. Bakhshali, B.G. Ibragimov

NANOMECHANICS IS THE SCIENTIFIC BASIS OF MODERN AND FUTURE TECHNOLOGY AND MACHINE SCIENCE

Based on the principles of Nanomechanics, the mechanical properties of materials are studied with taking into account their nanostructures. It is shown that the modulus of elasticity depends on the distances of the elementary particles of the crystal lattice of the material. Ignoring the hypothesis of isotropy and continuity of the material, differential equations of motion of nanoparticles in a potential field are deduced. Using the potential Lennard-Jones function, these equations are solved and practical expressions are derived to determine the real modulus of elasticity of the material.

Валех И. Бахшали, Б.Г. Ибрагимов

НАНОМЕХАНИКА - НАУЧНАЯ ОСНОВА СОВРЕМЕННОЙ И БУДУЩЕЙ ТЕХНИКИ И МАШИНОВЕДЕНИЯ

На основе принципов наномеханики в работе исследованы механические свойства материалов с учетом их наноструктур. Показано, что модуль упругости зависит от расстояний элементарных частиц кристаллической решетки материала. Игнорируя гипотезу изотропности и сплошности материала, выведены дифференциальные уравнения движения наночастиц в потенциальном поле. С помощью потенциальной функции Леннард-Джонс, эти уравнения решены и выведены практические выражения для определения реального модуля упругости материала.