

Amirkabir Journal of Mechanical Engineering

Amirkabir J. Mech. Eng., 53(2) (2021) 175-178 DOI: 10.22060/mej.2019.16554.6388

Spherical Lame-Type Problem in Second Strain Gradient Theory

F. Ojaghnezhad*

Engineering Department, Alzahra University, Tehran, Iran

ABSTRACT: Second strain gradient theory is employed to examine the spherical single/double-phase Lame-type problem. Due to the capability of strain gradient theory to capture the effects of the surface, size, and discrete nature of materials, the pertinent relaxed configuration is sought. The theory is written in the spherical coordinate system and the equilibrium equations, stress/strain components, constitutive relations, and tractions are derived. The relaxed configuration is obtained for both the diamond carbon and carbon-coated crystalline silicon shell. Afterwards, the external symmetric loading is applied to the relaxed configuration to analyze the mechanical response. The elastic material parameters are calculated via the quantum computations, lattice dynamics, and material continuum description. The analysis shows that the mechanical response in the augmented theory is significantly different from that in the classical elasticity. For example, in the single-phase problem with an inner and outer radius equal to two and ten lattice parameter, respectively, under a normalized external pressure of about 0.0001, the classic elasticity predicts an approximately constant normalized radial stress of about -0.0001 in the nanoshell. However, in the framework of strain gradient theory, the normalized radial stress is varying from about -0.001 and -0.0002 in the vicinity of the inner and outer boundaries, respectively, to about 0.0003 in the middle of the hollow nanoshell. With increasing the inner radius, the difference between the two results in the middle points decreases.

1. INTRODUCTION

Recently, consideration of the mechanics and physics of nanowires, nanotubes, and nano-particles has been of interest due to their vast applications in electronics, energy conversion, optics, chemical sensing, cancer therapy, and drug delivery, among other fields. In view of the traditional continuum inadequacy in treating the mechanical aspects of nanostructures, resorting to augmented continuum theories especially, Second Strain Gradient Theory (SSGT), seems to be remedial [1-3]. Based on the methodology presented by Shodja et al. [4], the material parameters in SSGT are calculated via quantum computations and lattice dynamics combined with the continuum description of materials. Because of the vast possible applications of the carbon-coated silicon nanospheres in lithium batteries [5, 6], the present work focuses on the physical and mechanical characteristics of these nanostructures. First, The relaxed configuration under the surface effects is obtained. Afterwards, an external symmetric loading is applied to the nanospherical relaxed configuration and SSGT mechanical response is resulted and compared with the pertinent response in the Classic Theory (CT).

2. SECOND STRAIN GRADIENT THEORY IN A MEDIUM WITH SPHERICAL SYMMETRY

The governing equilibrium equation in a medium with

*Corresponding author's email: f.ojaghnezhad@alzahra.ac.ir

Review History:

Received: Jun. 12, 201 Revised: Sep. 20, 2019 Accepted: Nov. 05, 2019 Available Online: Nov. 15, 2019

Keywords:

Second strain gradient theory Size effect Surface effect Spherical Lame-type problem Spherical symmetry

spherical symmetry in SSGT in the spherical coordinate system has the following form [3]:

$$r^{6}u_{r}^{"''''} + 6r^{5}u_{r}^{"'''} - (6r^{4} + p_{1}r^{6})u_{r}^{"''} - 4r^{5}p_{1}u_{r}^{"''} + (4p_{1}r^{4} + p_{2}r^{6})u_{r}^{"'} + 2p_{2}r^{5}u_{r}^{'} - 2p_{2}r^{4}u_{r} = 0,$$
(1)

where p_1 and p_2 depend on Mindlin characteristic lengths $\{\ell_{11}, \ell_{12}, \ell_{21}, \ell_{22}\}$, r is the radial variable in the spherical domain, and u_r is the radial displacement. The corresponding six independent solutions are

$$u_{r}(r) = \mathcal{L}\left\{r, \frac{1}{r}\cosh\frac{r}{\ell_{11}} - \frac{\ell_{11}}{r^{2}}\sinh\frac{r}{\ell_{11}}, \frac{1}{r^{2}}\sinh\frac{r}{\ell_{11}}, \frac{1}{r}\cosh\frac{r}{\ell_{12}} - \frac{\ell_{12}}{r^{2}}\sinh\frac{r}{\ell_{12}}, \frac{1}{r^{2}}, \frac{\ell_{11}+r}{r^{2}}e^{-\frac{r}{\ell_{11}}}, \frac{\ell_{12}+r}{r^{2}}e^{-\frac{r}{\ell_{12}}}\right\}.$$
(2)

Three of the above solutions are undefined at origin (r = 0) and the others are undefined at infinity. The tractions at the boundaries of the spherical domain are obtained in the spherical coordinates, as well. Employing the obtained solution, two problems of spherical Lame-type and coated

Copyrights for this article are retained by the author(s) with publishing rights granted to Amirkabir University Press. The content of this article is subject to the terms and conditions of the Creative Commons Attribution 4.0 International (CC-BY-NC 4.0) License. For more information, please visit https://www.creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/legalcode.







Fig. 2. The spherical coated shell with radii α , β , and ζ under the external pressures p_{in} and p_{out} .

Table 1. Lame constants in terms of $e_{V/A}^{a^3}$ and characteristic lengths in terms of $_{A}^{a}$ for silicon and carbon

	λ	μ	ℓ_{11},ℓ_{12}	ℓ_{21}, ℓ_{22}
Si	0.45	0.62	$0.44 \pm 0.71 i$	1.19±1.35 <i>i</i>
С	0.94	2.94	$0.67 \pm 0.84 i$	$0.87 \pm 1.05 i$



Fig. 3. The average radial strain in the carbon shell due to the surface relaxation versus ξ for two values of γ .

spherical shell are examined. In the Lame-type problem depicted in Fig. 1, with inner and outer radii α and β , the external surface loadings are p_{in} and p_{out} . For this problem, there are six unknown coefficients in the displacement field that are determined via the six traction boundary conditions.

In the coated shell problem, Fig. 2, with two material phases (S_1 and S_2), there are twelve unknown coefficients in u_r determined via nine traction and three displacement boundary conditions. It should be noted that at the boundary of S_1 and S_2 , the radial components of traction and displacement are assumed to be continuous.

3. RESULTS AND DISCUSSION

To give the numerical results, the material parameters in SSGT should be evaluated. Exploiting the results and methodology of Ojaghnezhad and Shodja [2, 7] and Shodja et al. [4], Lame constants and characteristic lengths are computed as summarized in Table 1.



Fig. 4. The normalized radial stress versus η for the carbon shell under external pressure.

In a carbon shell, the surface relaxation implies a radial strain causing a thickness change. The average radial strain is plotted in Fig. 3 versus the normalized thickness, ξ for two normalized radii, γ . It is observed that the average strain tends to zero with increasing ξ .

Applying $p_{in} = p_{out} = 0.0001E_{carbon}$ on the carbon shell ($\gamma = 10, \xi = 10$) relaxed configuration implies radial stress plotted versus radial normalized variable η and compared with that of CT in Fig. 4.

Consider a carbon-coated silicon nanosphere in SSGT to obtain its relaxed configuration under the surface effect. For example, the average radial strain in the silicon shell versus its initial normalized thickness ξ_1 is plotted in Fig. 5 for different values of the normalized inner radius γ and coating normalized thickness ξ_2 .



Fig. 5. The average radial strain in the silicon shell versus ξ_1 for some values of γ and ξ_2 under surface effect.

4. CONCLUSION

The surface effect in spherical domains implies a radial strain field causing the thicknesses change. With increasing the dimensions, the effects tend to zero as predicted by CT. Under an external loading, SSGT predictions are different from those of CT, especially near the boundaries.

REFERENCES

- R.D. Mindlin, Second gradient of strain and surfacetension in linear elasticity, International Journal of Solids and Structures, 1 (1965) 417-438.
- [2] F. Ojaghnezhad, H.M. Shodja, Surface elasticity revisited in the context of second strain gradient theory, Mechanics of Materials, 93 (2016) 220-237.
- [3] F. Ojaghnezhad, H.M. Shodja, Second strain gradient theory in orthogonal curvilinear coordinates: Prediction of the relaxation of a solid nanosphere and embedded spherical nanocavity, Applied Mathematical Modelling, 76 (2019) 669-698.

- [4] H.M. Shodja, H. Moosavian, F. Ojaghnezhad, Toupin-Mindlin first strain gradient theory revisited for cubic crystals of hexoctahedral class: Analytical expression of the material parameters in terms of the atomic force constants and evaluation via ab initio DFT, Mechanics of Materials, 123 (2018) 19-29.
- [5] Y. Yao, M.T. McDowell, I. Ryu, H. Wu, N. Liu, L. Hu, W.D. Nix, Y. Cui, Interconnected silicon hollow nanospheres for lithium-ion battery anodes with long cycle life, Nano Letters, 11 (2011) 2949-2954.
- [6] K. Zhao, M. Pharr, S. Cai, J.J. Vlassak, Z. Suo, Large plastic deformation in high-capacity lithium-ion batteries caused by charge and discharge, Journal of American Ceramic Society, 94 (2011) 226-235.
- [7] F. Ojaghnezhad, H.M. Shodja, A combined first principles and analytical treatment for determination of the surface elastic constants: application to Si(001) ideal and reconstructed surfaces, Philosophical Magazine Letters, 92(1) (2012) 7-19.

HOW TO CITE THIS ARTICLE

F. Ojaghnezhad, Spherical Lame-Type Problem in Second Strain Gradient Theory, Amirkabir J. Mech. Eng., 53(2) (2021) 175-178.

DOI: 10.22060/mej.2019.16554.6388



This page intentionally left blank

نشریه مهندسی مکانیک امیر کبیر

نشریه مهندسی مکانیک امیرکبیر، دوره ۵۳ شماره ۲، سال ۱۴۰۰، صفحات ۷۱۳ تا ۷۳۲ DOI: 10.22060/mej.2019.16554.6388

مساله متقارن کروی در نظریه گرادیان دوم کرنش

فرزانه اجاقنژاد*

دانشکده فنی و مهندسی، دانشگاه الزهرا، تهران، ایران

خلاصه: هدف، حل مساله متقارن کروی یک/دو فازی با استفاده از الاستیسیته گرادیان دوم کرنش و مقایسه با الاستیسیته کلاسیک است. نظر به قابلیت گرادیان دوم کرنش در پیش بینی اثرات سطح، اندازه و ماهیت گسسته مواد، مساله متقارن کروی مدلسازی و تحت اثرات مذکور مطالعه میشود. با تبیین گرادیان دوم کرنش در دستگاه مختصات کروی، معادلات تعادل، میدان تنش و کرنش، روابط آنها و نیروهای سطحی استخراج میشود. بعد از آسایش سطحی، بارگذاری خارجی متقارن روی سازه اعمال و پاسخ مکانیکی بررسی میشود. خواص مکانیکی پوسته تکفازی از بلور الماس و پوسته دوفازی از سیلیکون بلوری با پوشش کربنی مطالعه میشود. مقادیر ثابتهای مواد توسط محاسبات کوانتومی، نظریه دینامیک شبکه و مدلسازی محیط پیوسته محاسبه میشود. مقادیر ثابتهای مواد میدهد که پیش بینی نظریه تقویتیافته از خواص نانوسازه تفاوت چشمگیری با پیش بینی کلاسیک دارد. مثلا، در پوسته کربنی با شعاع داخلی و خارجی به ترتیب ۲ و ۱۰ برابر پارامتر شبکه، تحت بارگذاری فشاری خارجی یکه شده از مقادیر ۱۰۰۰۰، تنش شعاعی کلاسیک یکه، ثابت و حدود ۱۰۰۰/۰- است، در حالی که در گرادیان کرنش، تنش شعاعی یکه از مقادیر ۱۰/۱۰ و زخاری در مرزهای داخلی و خارجی، به ترتیب، به ۲۰۰/۰ در میانه متغیر است. با افزایش متعاع داخلی، اختلاف دو نظریه در میانه محیط کاهش میابد اما در نزدیکی سطوح اختلاف قابل ملاحظه است.

دریافت: ۱۳۹۸/۰۳/۲۲ بازنگری: ۱۳۹۸/۰۶/۲۹ پذیرش: ۱۳۹۸/۰۸/۱۴ ارائه آنلاین: ۱۳۹۸/۰۸/۲۴

تاريخچه داوري:

کلمات کلیدی: نظریه گرادیان دوم کرنش اثر اندازه اثر سطح لمهگونه کروی تقارن کروی

۱– مقدمه

در سالهای اخیر، نانوسیمها، نانوکرات، نانوتیوبها و نانوذرات به عنوان نانوسازههای متقارن ساخته شده از موادی مانند فلزات، نیمهرساناها، عایقها و مواد طبیعی، بسیار مورد علاقه و بررسی محققین بوده است. دلیل این رویکرد و جهتگیری به سوی این نانوسازهها کاربرد فراوانی است که این نانوشکلها در صنایع مختلف مانند الکترونیک، باتریها، تبدیل انرژی، اپتیک، سنسورهای شیمیایی، درمان سرطان و غیره پیدا کرده است. کاربردهای فراوان مذکور، مطالعه و بررسی، جهت تعیین خواص مکانیکی و فیزیکی نانوسازههای مورد اشاره را اجتنابناپذیر مینماید. لازم به یادآوری است که مهمترین ویژگی این ساختارها نانو مقیاس بودن در یک الی *نویسنده عهدهدار مکاتبات: f.ojaghnezhad@alzahra.ac.ir

سه بعد و داشتن شکل هندسی متقارن است.

بدیهی است که به دلیل وجود اثر سطح به عنوان یک خرابی دوبعدی و همچنین اثر اندازه در نانوساختارها، بررسی دقیق خواص مکانیکی نانوسازهها در چهارچوب نظریه الاستیسیته کلاسیک امکانپذیر نیست و ناگزیر باید از روشهای آزمایشگاهی و عددی برای حل مسایل مکانیکی بهره برد [۳–۱]. همین مساله در حدود سالهای ۱۹۶۰ الی ۱۹۷۵ انگیزهای قوی برای ارائهی نظریههای الاستیسیته تقویتیافته به عنوان یک راهکار محیط پیوسته برای بررسی و مطالعه ویژگیهای مکانیکی نانوسازهها بوده است. به عنوان مثال، لازار [۴] نظریه محیط پیوستهی نابجایی غیرتکین را با استفاده از الاستیسیته گرادیان کرنش بسط و توسعه داده است. در مقالهای دیگر، لازار و آگیاسوفیتو [۵] کمیتهای بنیادی را در الاستیسیته تعمیمیافته و

کو بن المان موافقین به نویسندگان و حقوق ناشر به انتشارات دانشگاه امیرکبیر داده شده است. این مقاله تحت لیسانس آفرینندگی مردمی (Creative Commons License) هر بن المان می المان ا

نظریه نابجایی بلورها ارائه دادهاند. همچنین، از فعالیتهای پژوهشی صورت گرفته در این زمینه میتوان به استخراج تانسور گرین برای نظریه گرادیان اول کرنش غیرهمسانگرد توسط پو و همکاران [۶] اشاره کرد. در فعالیتی دیگر، دلفانی و همکاران [۷] با استفاده از الاستیسیته گرادیان دوم کرنش، مدول برشی موثر را برای مواد مرکب تخمین زدهاند. با توجه به فعالیتهای پژوهشی ذکر شده در زمینه الاستیسیته تعمیمیافته در سالهای اخیر، لازم است تاریخچه مختصری برای نظریه گرادیان کرنش ارائه شود. در نظریه گرادیان اول کرنش، توپین [۸] فرض کرد که چگالی انرژی کرنشی تابعی از تانسور مرتبه دوم کرنش و گرادیان اول آن است. تناظر بین این نظریه با ساختار اتمی ماده توسط توپین و گیزیس [۹] با در نظر گرفتن اندر کنش هر اتم با همسایههای اول و دوم نشان داده شد و آنها دریافتند که لایه نخست اتمی در موادی که تقارن مرکزی ندارند، بر اثر خواص سطحی و بر اساس نظریه گرادیان اول کرنش به سمت داخل یا خارج حرکت میکند. برای اینکه اثر سطح در مواد با تقارن مرکزی نیز مشاهده شود، میندلین [۱۰] چگالی انرژی کرنشی را بهصورت تابعی از تانسور کرنش و گرادیانهای اول و دوم در نظر گرفت. در این نظریه، میندلین پارامتری به نام مدول چسبندگی معرفی می کند که منجر به لحاظ شدن اثر سطح در تحلیل نانوسازهها در چهارچوب این نظریه است [۱۱]. اخیرا، با توجه به توانایی نظریه گرادیان دوم کرنش در احتساب اثر سطح در سازهها، اجاقنژاد و شجاع [١٢] نظریه الاستیسیته سطح گرتین و مرداک [١٣] را در قالب الاستيسيته گراديان دوم كرنش صورتبندى كردند و ارتباط میان پارامترهای الاستیک سطح و ثابتهای میندلین را مورد بررسی قرار دادند.

به منظور استفاده از نظریه گرادیان دوم کرنش برای تحلیل خواص مکانیکی نانوکرات، لازم است که این نظریه در مختصات منحنیالخط متعامد کروی نوشته شود. با استفاده از ابزار ریاضی ارائه شده توسط ارینگن [۱۴] و نماد کریستوفل، این تبدیل دستگاه مختصات صورت می گیرد. جی و همکاران [۱۵] صورتبندی کلی نظریه گرادیان اول کرنش ساده شده توسط ژو و همکاران [۱۶] را در دستگاه منحنیالخط متعامد ارائه کردهاند. اجاقنژاد و شجاع [۱۷] معادلات تعادل، شرایط مرزی و روابط بنیادی تنش-کرنش را در چهارچوب الاستیسیته گرادیان دوم کرنش میندلین در دستگاه مختصات منحنیالخط ارائه

دادهاند. بر این اساس، تحلیل مکانیکی کامپوزیتهای با تقارن کروی در چهارچوب نظریه گرادیان دوم کرنش با توجه به کاربرد وسیعی که این مسایل در صنایع نوین امروزی (به خصوص در صنعت باتری) دارند و همچنین ارائه مثالهای عددی برای نشان دادن اهمیت کاربرد این تئوری در سازههای نانومقیاس مهمترین دستاورد مقاله پیش روست. با استفاده از روش سری فروبینیس معادله تعادل برای محيط با تقارن كروى حل شده، جوابهاى مستقل معادله حاصل می شود. سپس، با اعمال شرایط مرزی مناسب، مکانیک نانومحیط مورد بررسی قرار می گیرد. برای بهدست آوردن نتایج عددی و نمودار کمیتها، داشتن مقادیر عددی ثابتهای مواد لازم و ضروری است. در نظریههای الاستیسیته تعمیمیافته علاوه بر ثابتهای متداول لمه، ثابتهای مواد جدید در تئوری وارد می شود. به عنوان مثال، در تئوری گرادیان دوم کرنش میندلین، شانزده ثابت ماده جدید معرفی می شود. در سالهای اخیر فعالیتهای قابل توجهی در زمینه تعیین مقادیر عددی ثابتهای اضافی مواد در چهارچوب نظریههای گرادیان اول و دوم کرنش صورت گرفته است [۱۱، ۱۲، ۲۱-۱۸].

با توجه به اهمیت و کاربرد وسیع نانوکرات سیلیکونی با پوشش کربنی در افزایش کارایی باتریهای لیتیومی [۳۱–۲۲]، تعیین خواص فیزیکی و مکانیکی این قبیل سازهها در اثر آسایش سطحی'، اثر سطح و اثر اندازه و بارگذاری خارجی متقارن کروی، مساله مهمی به نظر میرسد. در این مطالعه، بر اساس راهکار ارائه شده توسط شجاع و همکاران [۱۹] که برای ماده با ساختار مکعبی در نظریه گرادیان اول کرنش ارائه شده است، ثابتهای لمه و شانزده پارامتر اضافی میندلین، با در نظر گرفتن تئوری دینامیک شبکه و محاسبات اصول اولیه کوانتمی برای عناصر بلوری سیلیکون و کربن که ساختار الماس دارند، محاسبه می شود. با در دست داشتن مقادیر عددی ثابتهای مواد، اثرات سطح و مرز در پیکربندی متعادل^۲ نانوكره توخالي كربني و نانوكره توخالي سيليكوني با پوشش كربني در چهارچوب نظریه گرادیان دوم کرنش مورد بررسی قرار میگیرد. سپس، بارگذاری با تقارن کروی بر سطوح داخلی و خارجی نانوکره توخالی پوششدار و بدون پوشش با پیکربندی متعادل سطحی اعمال می شود و پاسخ مکانیکی نانوسازه با پاسخ کلاسیک مقایسه

¹ Surface Relaxation

² Relaxed Configuration

سوم جابجایی به شکل زیر تعریف می شود [۱۰]: $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}} = \frac{1}{2} (\boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{u} + \boldsymbol{u} \boldsymbol{\nabla}),$ (۱)

$$\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}^2 = \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{u}, \tag{(Y)}$$

$$\hat{\varepsilon} = \nabla \nabla \nabla u. \tag{(7)}$$

برای ماده مافوق کشسان^۱، میدانهای تنش مراتب دوم، سوم و چهارم بهصورت زیر تعریف میشود:

$$\stackrel{1}{\tau} = \frac{\partial W}{\partial \varepsilon},\tag{(f)}$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial W}{\partial t}, \qquad (\Delta)$$

$$\overset{3}{\tau} = \frac{\partial W}{\partial \varepsilon}.$$
(7)

بر اساس تحلیل صورت گرفته توسط میندلین، برای محیط مادی با حجم V که توسط سطح S احاطه شده است، چنانچه نیروی حجمی برابر f باشد، معادله برداری تعادل جسم به شکل زیر استخراج می شود [۱۰]:

$$\boldsymbol{\nabla}.(\boldsymbol{\tau}-\boldsymbol{\nabla}.\boldsymbol{\tau}^{2}+\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{\nabla}:\boldsymbol{\tau}^{3})+\boldsymbol{f}=\boldsymbol{\theta}.$$
(Y)

ضرب اسکالر دو نقطهای در عبارت فوق، بهصورت زیر تعریف می شود:

$$\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{\nabla}: \boldsymbol{\tau}^{3} = \boldsymbol{\tau}_{ijkl,ij}\boldsymbol{e}_{k}\boldsymbol{e}_{l}, \qquad (\lambda)$$

که در رابطه فوق، e_k بردار پایه در جهت k است. همچنین، اگر n بردار واحد برونسو برای سطح S باشد، نیروهای سطحی^۲ در مرز بهصورت زیر بهدست میآید [۱۰]:

1 Hyperelastic

مى شود. پرواضح است كه جواب الاستيسيته كلاسيك براى حالتي که نانوتیوب پوششدار و بدون پوشش بدون هیچ بارگذاری خارجی در نظر گرفته می شود و صرفا تحت اثر سطح آسوده می شود، پاسخ بدیهی (پاسخ صفر) است. این درحالیست که نظریه گرادیان دوم كرنش براى اين مساله پاسخ غيربديهى (غير صفر) دارد. توزيع کرنش شعاعی در این سازهها بعد از آسایش سطحی در بخش نتایج بهصورت نمودار آورده شده است. همچنین، کرنش شعاعی متوسط که برابر تغییر ضخامت در اثر آسایش سطحی به ضخامت اولیه است، برای چند حالت هندسی رسم و مقایسه شده است. به عنوان مثال، برای یک نانوتیوب کربنی با شعاع داخلی ۱۰ برابر پارامتر شبکه و ضخامت ۳ برابر پارامتر شبکه، تغییر ضخامت به ضخامت اولیه حدود ۰/۱- است و برای نانوتیوب با شعاع داخلی ۲ برابر پارامتر شبکه و همان ضخامت، تغییر ضخامت به ضخامت اولیه حدود ۳۱/۰۰-است. بعد از رسیدن به حالت متعادل سطحی، بارگذاری خارجی متقارن روى سطوح داخلى و خارجى سازهها اعمال مىشود و پاسخ حاصل با پاسخ کلاسیک مقایسه می شود. به عنوان مثال، در مساله نانوتیوب سیلیکونی با پوشش کربنی با شعاع داخلی ۱۰ برابر پارامتر شبکه سیلیکون، ضخامت لایه سیلیکون برابر یک برابر پارامتر شبکه سیلیکون، ضخامت لایه کربنی برابر یک برابر پارامتر شبکه کربن و تحت بارگذاری داخلی و خارجی حدود ۰۰۰۰۰۰- برابر مدول یانگ کربن، تغییر ضخامت در پوسته کربنی بر اساس الاستیسیته كلاسيك، افزايشي اما بر اساس نظريه گراديان دوم كرنش، كاهشي است. نکته مهم در این است که در همه مسایل در نظر گرفته شده، با افزایش ابعاد، پاسخ نظریه گرادیان دوم کرنش، مطابق انتظار، به ياسخ الاستيسيته كلاسيك همگرا مي شود.

۲- نظریه گرادیان دوم کرنش

در این بخش، نظریه گرادیان دوم کرنش بهطور مختصر ارائه می شود. بر اساس نظریه ارائه شده توسط میندلین، در یک ماده خطی، الاستیک، همگن و همسانگرد با تقارن مرکزی، چگالی انرژی کرنشی (W) علاوه بر میدان کرنش (\mathbf{s}) به گرادیان دوم میدان بابجایی ((\mathbf{s})) و همچنین گرادیان سوم آن (\mathbf{s}) وابسته است. فرض کنید که میدان جابجایی مربوط به یک نقطه مادی به وسیله بردار \mathbf{u} نشان داده شود، در این صورت میدان کرنش و گرادیانهای دوم و

² Traction Boundary Conditions

$$\tau_{pqr} = \frac{2}{3} b_1 \varepsilon_{iijj} \delta_{pqrs} + \frac{2}{3} b_2 \varepsilon_{jkii} \delta_{jkpqrs} + \frac{1}{6} b_3 ((\varepsilon_{iijk} + \varepsilon_{iikj}) \delta_{jkpqrs} + 2\varepsilon_{jsii} \delta_{jpqr}) + \frac{2}{3} b_4 \varepsilon_{iisj} \delta_{jpqr} + \frac{2}{3} b_5 \varepsilon_{iijs} \delta_{jpqr} + 2b_6 \varepsilon_{pqrs} + (1\Delta)$$

$$\frac{2}{3} b_7 (\varepsilon_{qrsp} + \varepsilon_{rspq} + \varepsilon_{spqr}) + \frac{1}{3} c_1 \varepsilon_{ii} \delta_{pqrs} + \frac{1}{3} c_2 \varepsilon_{ij} \delta_{ijpqrs} + \frac{1}{3} c_3 \varepsilon_{is} \delta_{pqrs} + \frac{1}{3} b_0 \delta_{pqrs},$$

:در روابط فوق δ_{ij} تابع دلتای کرانیکر ٔ است و همچنین

$$\begin{split} \delta_{ijkl} &= \delta_{ij} \delta_{kl} + \delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{jk} \delta_{il}, \\ \delta_{ijklmn} &= \delta_{ik} \delta_{jl} \delta_{mn} + \delta_{ik} \delta_{jm} \delta_{\ln} + \delta_{il} \delta_{jm} \delta_{kn}. \end{split}$$
(19)

با استفاده از روابط تنش-کرنش ارائه شده و تعاریف کرنشهای مرتبه دو، سه و چهار و جایگذاری در معادله (۷) ، معادله تعادل بر حسب میدان جابجایی بهصورت زیر حاصل میشود [۱۰]:

$$(\lambda + 2\mu)(1 - (\ell_{11}^2 + \ell_{12}^2)\nabla^2 + \ell_{11}^2 \ell_{12}^2 \nabla^4) \nabla \nabla . \boldsymbol{u} - \mu(1 - (\ell_{21}^2 + \ell_{22}^2)\nabla^2 + \ell_{21}^2 \ell_{22}^2 \nabla^4) \nabla \times \nabla \times \boldsymbol{u} + \boldsymbol{f} = \boldsymbol{\theta},$$
 (17)

طولهای مشخصه ظاهر شده در عبارت فوق بهصورت زیر برای j = ۱٫۲ تعریف می شود:

$$2(\lambda + 2\mu)\ell_{1j}^2 = \overline{a} - 2\overline{c} \pm \left((\overline{a} - 2\overline{c})^2 - 4\overline{b}(\lambda + 2\mu)\right)^{\frac{1}{2}}, \quad (1\lambda)$$

$$2\mu\ell_{2j}^{2} = \overline{a}' - c_{3} \pm ((\overline{a}' - c_{3})^{2} - 4\overline{b}'\mu)^{\frac{1}{2}}, \qquad (19)$$

$$\overline{a} = 2(a_1 + a_2 + a_3 + a_4 + a_5),
\overline{b} = 2(b_1 + b_2 + b_3 + b_4 + b_5 + b_6 + b_7),
\overline{c} = c_1 + c_2 + c_3,
\overline{a'} = 2(a_3 + a_4),
\overline{b'} = 2(b_5 + b_6).$$
(Y •)

2 Kronecker Delta

$$\overset{1}{t} = \boldsymbol{n}.(\overset{1}{\boldsymbol{\tau}} - \boldsymbol{\nabla}.\overset{2}{\boldsymbol{\tau}} + \boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{\nabla}:\overset{3}{\boldsymbol{\tau}}) + \boldsymbol{L}.(\boldsymbol{n}.\overset{2}{\boldsymbol{\tau}} - \boldsymbol{\nabla}.\overset{3}{\boldsymbol{\tau}}) + \boldsymbol{L}.(\boldsymbol{n}.\overset{3}{\boldsymbol{\tau}}) - (\overset{s}{\boldsymbol{\nabla}}\boldsymbol{n}).(\boldsymbol{n}\boldsymbol{n}:\overset{3}{\boldsymbol{\tau}})), \quad (9)$$

$${t = nn: (\tau - \nabla . \tau) + n.(L.(n.\tau)) + L.(nn:\tau), (1 \cdot)}$$

$$\overset{3}{t} = nnn \vdots \overset{3}{\tau}, \tag{11}$$

در عبارات فوق، عملگرهای گرادیان سطح، $\dot{\nabla}$ و L به صورت $L = n \dot{\nabla} \cdot n - \dot{\nabla}$ و $\dot{\nabla} = \nabla - n n \nabla$ تعریف می شود. با در نظر گرفتن قرارداد جمع اندیسی انیشتن، چگالی انرژی کرنشی را برای ماده الاستیک و همسانگرد می توان به صورت زیر نوشت [۱۰]:

$$W = \frac{1}{2}\lambda\varepsilon_{ii}\varepsilon_{jj} + \mu\varepsilon_{ij}\varepsilon_{ij} + a_{1}\varepsilon_{ijj}\varepsilon_{ikk} + a_{2}\varepsilon_{iik}\varepsilon_{kjj} + a_{3}\varepsilon_{iik}\varepsilon_{jjk} + a_{4}\varepsilon_{ijk}\varepsilon_{ijk} + a_{5}\varepsilon_{ijk}\varepsilon_{kji} + b_{1}\varepsilon_{iijj}\varepsilon_{kkll} + b_{2}\varepsilon_{ijkk}\varepsilon_{ijll} + b_{3}\varepsilon_{iijk}\varepsilon_{jkll} + b_{4}\varepsilon_{iijk}\varepsilon_{llkj} + (17)$$

$$b_{5}\varepsilon_{iijk}\varepsilon_{lljk} + b_{6}\varepsilon_{ijkl}\varepsilon_{ijkl} + b_{7}\varepsilon_{ijkl}\varepsilon_{jkli} + b_{0}\varepsilon_{iijj},$$

$$c$$
 در رابطه ، c_{ijk} ، c_{ijk} ، c_{ijk} ، c_{ijk} ، c_{ij} ، c_{ijk} ، c_{ij} ، c_{ijk} ، c_{ij} ، c_{ijk} ، $c_{$

$$\tau_{pq} = \lambda \varepsilon_{ii} \delta_{pq} + 2\mu \varepsilon_{pq} + c_1 \varepsilon_{iijj} \delta_{pq} + c_2 \varepsilon_{pqii} + \frac{1}{2} c_3 (\varepsilon_{iipq} + \varepsilon_{iiqp}), \qquad (1\%)$$

$$\tau_{pqr} = a_1(\varepsilon_{pii}\delta_{qr} + \varepsilon_{qii}\delta_{pr}) + \frac{1}{2}a_2(\varepsilon_{iip}\delta_{qr} + 2\varepsilon_{rii}\delta_{qp} + \varepsilon_{iiq}\delta_{pr}) + (1\%)$$

$$2a_3\varepsilon_{iir}\delta_{pq} + 2a_4\varepsilon_{pqr} + a_5(\varepsilon_{rqp} + \varepsilon_{rpq}),$$

1 Modulus of Cohesion

همانطور که ملاحظه می شود، علاوه بر ثابتهای لمه متداول در تئوری الاستیسیته، در نظریه گرادیان دوم کرنش برای ماده همگن و همسانگرد، شانزده ثابت ماده جدید در روابط مربوط به معادله تعادل، تنش-کرنش و نیروهای سطحی در مرزها وارد می شود.

۳- محیط مادی با تقارن کروی

محیط پیوستهای را در نظر بگیرید که دارای تقارن کروی در هندسه و بارگذاری است. در این صورت، تنها مولفه غیرصفر میدان جابجایی مولفه $u_r(r)$ است که در آن r متغیر فاصله از مرکز محیط با تقارن کروی است. در این حالت، با نوشتن معادلات تعادل، در دستگاه مختصات کروی و اعمال تقارن کروی مساله، معادله تعادل در چهارچوب نظریه گرادیان دوم کرنش بر حسب مولفههای تنش بهصورت زیر خواهد بود:

$$\begin{aligned} \tau_{rr,r} - \tau_{rrr,rr} + \tau_{rrrr,rrr} + & (2\tau_{rr} - 2\tau_{\theta\theta} - 4\tau_{rrr,r} + \\ & 4\tau_{r\theta\theta,r} + 2\tau_{\theta\thetar,r} + 6\tau_{rrrr,rr} - 6\tau_{rr\theta\theta,rr} - 6\tau_{r\theta\thetar,rr}) / r \\ & + & (-2\tau_{rrr} + 8\tau_{r\theta\theta} + 4\tau_{\theta\theta r} + 6\tau_{rrrr,r} - 24\tau_{rr\theta\theta,r} - \\ & 24\tau_{r\theta\theta r,r} + 6\tau_{\theta\theta\theta\theta,r} + 6\tau_{\theta\theta\phi\phi,r}) / r^2 \\ & - & (12\tau_{rr\theta\theta} + 12\tau_{r\phi\phi r} - 6\tau_{\theta\phi\phi\theta} - 6\tau_{\phi\phi\phi\phi}) / r^3 = 0, \end{aligned}$$

$$r^{6}u_{r}^{''''''} + 6r^{5}u_{r}^{''''''} - (6r^{4} + p_{1}r^{6})u_{r}^{''''} - 4r^{5}p_{1}u_{r}^{'''} + (4p_{1}r^{4} + p_{2}r^{6})u_{r}^{''} + 2p_{2}r^{5}u_{r}^{'} - 2p_{2}r^{4}u_{r} = 0,$$
(YY)

$$p_1 = \frac{\ell_{11}^2 + \ell_{12}^2}{\ell_{11}^2 \ell_{12}^2}, \qquad p_2 = \frac{1}{\ell_{11}^2 \ell_{12}^2}. \tag{(YT)}$$

معادله دیفرانسیل (۲۲) یک معادله دیفرانسیل مرتبه ۶ خطی همگن است. با در نظر گرفتن جواب معادله فوق بهصورت سری فروبینیس'، جواب عمومی این معادله دیفرانسیل یک ترکیب خطی 1 Frobenius series

از توابع زیر خواهد بود:

$$u_{r}(r) = L \{r, \frac{1}{r} \cosh \frac{r}{\ell_{11}} - \frac{\ell_{11}}{r^{2}} \sinh \frac{r}{\ell_{11}}, \frac{1}{r} \cosh \frac{r}{\ell_{12}} - \frac{\ell_{12}}{r^{2}} \sinh \frac{r}{\ell_{12}}, \frac{1}{r^{2}}, \frac{\ell_{11} + r}{r^{2}} e^{-\frac{r}{\ell_{11}}}, \frac{\ell_{12} + r}{r^{2}} e^{-\frac{r}{\ell_{12}}} \}.$$
(74)

از شش جواب مستقل معادله دیفرانسیل مذکور، سه جواب در صفر و سه جواب در بینهایت تعریف نشده هستند. همچنین، با استفاده از روابط (۹) تا (۱۱) مولفههای غیر صفر نیروهای سطحی در روی سطوح فضای مورد نظر که تقارن کروی دارد، به صورت زیر استخراج خلاصه می شود:

$$\begin{split} & \frac{1}{t_{r}} = -\frac{2b_{0}}{r^{2}} + (\frac{2\lambda}{r} - \frac{4(a_{4} + a_{5} + \overline{a} - 2c_{2} - 2c_{3})}{r^{3}} \\ & -\frac{8(\overline{b} - 2b_{1} + 4b_{6} + 4b_{7})}{r^{5}})u_{r} \\ & + (\lambda + 2\mu + \frac{4(a_{4} + a_{5} + \overline{a} + c_{1}) - 10\overline{c}}{r^{2}} + \\ & \frac{8(\overline{b} - 2b_{1} + 4b_{6} + 4b_{7})}{r^{4}})u_{r,r} \\ & + (\frac{4\overline{c} - 2\overline{a} + 2c_{1}}{r} + \frac{8(b_{2} + b_{3} + b_{4} + b_{5})}{r^{3}})u_{r,rr} + \\ & (2\overline{c} - \overline{a} - \frac{10\overline{b}}{r^{2}})u_{r,rrr} + \frac{4\overline{b}u_{r,rrrr}}{r} + \overline{u}_{r,rrrrr}, \end{split}$$

$${}^{2}_{tr} = \frac{2b_{0}}{r} + \left(\frac{4(a_{1} + a_{2} + a_{3}) + 4c_{1} + 2\overline{c}}{r^{2}} + \frac{8(\overline{b} - 2b_{1} + 4b_{6} + 4b_{7})}{r^{4}}\right)u_{r} + \left(\frac{4(a_{1} + a_{2} + a_{3})}{r} - \frac{8(\overline{b} - 2b_{1} + 4b_{6} + 4b_{7})}{r^{3}}\right)u_{r,r}$$

$$+ (\overline{a} - \overline{c} + \frac{12\overline{b} - 8(b_{2} + b_{3} + b_{4} + b_{5})}{r^{2}})u_{r,rr} - \frac{2\overline{b}}{r}u_{r,rrr} - \overline{b}u_{r,rrrr},$$
(YF)

$$\begin{split} & \overset{3}{t_{r}} = b_{0} + (\frac{2c_{1}}{r} + \frac{8(b_{2} + b_{3} + b_{4} + b_{5})}{r^{3}})u_{r} + (\overline{c} - \frac{8(b_{2} + b_{3} + b_{4} + b_{5})}{r^{2}})u_{r,r} \\ & + (\frac{2\overline{b} + 4b_{1} - 4b_{6} - 4b_{7}}{r})u_{r,rr} + \overline{b}u_{r,rrr}, \end{split}$$

با در دست داشتن جواب معادله دیفرانسیل برای مساله با تقارن کروی، همچنین روابط تنش-کرنش و نیروهای سطحی روی مرز محیط مورد نظر، در ادامه مساله لمه کروی و مساله دو پوسته کروی بررسی و مطالعه می شود.



Fig. 1. The spherical Lame-type problem with inner and outer radii α and β under the external pressures p_{in} and p_{out} . $p_{out} \ _{out} \ _$

۱–۳– مساله لمه

با محاسبه نیروهای سطحی بر حسب میدان جابجایی از روابط (۲۵) تا (۲۷) و (۲۸) و حل معادلات جبری (۲۹) ضرایب مجهول بر حسب تا (۲۷) و (۲۸) و p_{out} و p_{out} و p_{in} ، β ، α به دست می آید. با در دست داشتن ضرایب A_6 الی A_6 ، میدان تنش مرتبه دوم در ماده از روابط زیر محاسبه می شود:

$$\begin{aligned} \tau_{rr} &= A_{1}(3\lambda + 2\mu) + \\ A_{2}(-2\ell_{11}r(c_{2} + c_{3} + 2\ell_{11}^{2}\mu)\cosh(\frac{r}{\ell_{11}}) + \\ ((c_{1} + \lambda\ell_{11}^{2})r^{2} + (c_{2} + c_{3} + 2\ell_{11}^{2}\mu)(2\ell_{11}^{2} + r^{2})) \\ \sinh(\frac{r}{\ell_{11}})) / (\ell_{11}^{3}r^{3}) + \\ A_{3}(-2\ell_{12}r(c_{2} + c_{3} + 2\ell_{12}^{2}\mu)\cosh(\frac{r}{\ell_{12}}) \qquad (("\cdot) \\ + ((c_{1} + \lambda\ell_{12}^{2})r^{2} + \\ (c_{2} + c_{3} + 2\ell_{12}^{2}\mu)(2\ell_{12}^{2} + r^{2})) \\ \sinh(\frac{r}{\ell_{12}})) / (\ell_{12}^{3}r^{3}) - \frac{4A_{4}\mu}{r^{3}} \\ -A_{5}e^{-\frac{r}{\ell_{11}}}((c_{2} + c_{3} + 2\ell_{11}^{2}\mu)(2\ell_{11}^{2} + 2\ell_{11}r + r^{2}) \\ + r^{2}(c_{1} + \ell_{11}^{2}\lambda)) / (\ell_{11}^{3}r^{3}) \\ -A_{6}e^{-\frac{r}{\ell_{12}}}((c_{2} + c_{3} + 2\ell_{12}^{2}\mu)(2\ell_{12}^{2} + 2\ell_{12}r + r^{2}) \\ + r^{2}(c_{1} + \ell_{12}^{2}\lambda)) / (\ell_{12}^{3}r^{3}), \end{aligned}$$

مساله لمه کروی با استفاده از یک محیط با تقارن کروی که شعاع
داخلی و خارجی آن به ترتیب با نمادهای
$$\alpha$$
 و β نمایش داده می شود
و تحت فشار داخلی و خارجی p_{in} و p_{out} قرار دارد، مطابق شکل
۱ در نظر گرفته می شود.
میدان جابجایی این مساله بر اساس الاستیسیته گرادیان دوم
کرنش با استفاده از رابطه (۲۴) به صورت زیر نوشته می شود:

$$u_{r}(r) = A_{1}r + A_{2}\left(\frac{1}{r}\cosh\frac{r}{\ell_{11}} - \frac{\ell_{11}}{r^{2}}\sinh\frac{r}{\ell_{11}}\right) + A_{3}\left(\frac{1}{r}\cosh\frac{r}{\ell_{12}} - \frac{\ell_{12}}{r^{2}}\sinh\frac{r}{\ell_{12}}\right) + \frac{A_{4}}{r^{2}} + A_{5}\frac{\ell_{11}+r}{r^{2}}e^{-\frac{r}{\ell_{11}}} + A_{6}\frac{\ell_{12}+r}{r^{2}}e^{-\frac{r}{\ell_{12}}},$$
(7A)

که ضرایب A_1 الی A_6 در رابطه فوق، با استفاده از شرایط مرزی مساله بهدست میآید. شرایط مرزی مساله لمه با استفاده از مقادیر نیروهای سطحی (روابط ، و) به صورت زیر نوشته می شود:

$$t_{r}^{1}(r = \alpha) = -p_{in},$$

$$t_{r}^{2}(r = \alpha) = 0,$$

$$t_{r}^{3}(r = \alpha) = 0,$$

$$t_{r}^{1}(r = \beta) = -p_{out},$$

$$t_{r}^{2}(r = \beta) = 0,$$

$$t_{r}^{3}(r = \beta) = 0,$$
(Y9)

کروی معرفی می شود. با توجه به شکل ۲، در این مساله یک محیط کروی با شعاعهای β , α و ζ در نظر گرفته می شود که تحت فشار p_{in} و p_{out} و داخلی قرار دارد. در این مساله نیز، مشابه مساله لمه، میدان جابجایی مطابق رابطه (۲۸) برای محیطهای S_1 و S_2 به صورت جداگانه نوشته می شود. به این ترتیب دوازده ضریب نامعلوم در این مساله وجود دارد که با استفاده از شرایط مرزی به دست می آید.

شرایط مرزی مربوط به نیروهای سطحی در این مساله بهصورت زیر در نظر گرفته میشود:

$$u_{r}^{S_{2}}(r = \beta) = u_{r}^{S_{1}}(r = \beta),$$

$$u_{r,r}^{S_{2}}(r = \beta) = u_{r,r}^{S_{1}}(r = \beta),$$

$$u_{r,rr}^{S_{2}}(r = \beta) = u_{r,rr}^{S_{1}}(r = \beta),$$

(*\Delta)

که در روابط فوق، بالانویس S_1 و S_2 بیانگر نیروی سطحی یا جابجایی به ترتیب، در فضای پوسته داخلی و پوسته خارجی است. با استفاده از دوازده شرط مرزی بالا، دوازده ضریب مجهول مربوط به دو محیط مادی در نظر گرفته شده، محاسبه می شود.

۴- نتايج

به منظور ارائه نتایج عددی برای خواص مکانیکی نانوسازه، ابتدا باید مقادیر عددی ثابتهای مواد در نظریه گرادیان دوم کرنش تعیین شود. مطابق راهکار ارائه شده توسط اجاقنژاد و شجاع [۱۱ و ۱۲] و شجاع و همکاران [۱۹]، ثابتهای لمه و طولهای مشخصه میندلین به وسیله محاسبات کوانتومی اصول اولیه، توصیف محیط پیوسته مواد و نظریه دینامیک شبکه تعیین میشود. بعلاوه، از معادل کردن چگالی انرژی کرنشی حاصل از دیدگاه دینامیک شبکه با چگالی انرژی کرنشی حاصل از توصیف محیط پیوسته روابط زیر حاصل میشود:

$$\begin{aligned} \tau_{\theta\theta} &= \tau_{\phi\phi} = A_{1}(3\lambda + 2\mu) + \\ A_{2}(\ell_{11}r(c_{2} + c_{3} + 2\ell_{11}^{2}\mu)\cosh(\frac{r}{\ell_{11}}) + (c_{1}r^{2} - \ell_{11}^{2}(c_{2} + c_{3} + 2\ell_{11}^{2}\mu - \lambda r^{2})) \\ &= h(\frac{r}{\ell_{11}}) / (\ell_{11}^{3}r^{3}) + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &= A_{3}(\ell_{12}r(c_{2} + c_{3} + 2\ell_{12}^{2}\mu)\cosh(\frac{r}{\ell_{12}}) \\ &+ (c_{1}r^{2} - \ell_{12}^{2}(c_{2} + c_{3} + 2\ell_{12}^{2}\mu - \lambda r^{2})) \\ &= h(\frac{r}{\ell_{12}})) / (\ell_{12}^{3}r^{3}) + \frac{2A_{4}\mu}{r^{3}} \\ &+ A_{5}e^{-\frac{r}{\ell_{11}}}((c_{2} + c_{3} + 2\ell_{11}^{2}\mu)\ell_{11}(\ell_{11} + r) \\ &- r^{2}(c_{1} + \ell_{11}^{2}\lambda)) / (\ell_{11}^{3}r^{3}) \\ &+ A_{6}e^{-\frac{r}{\ell_{12}}}((c_{2} + c_{3} + 2\ell_{12}^{2}\mu)\ell_{12}(\ell_{12} + r) \\ &- r^{2}(c_{1} + \ell_{12}^{2}\lambda)) / (\ell_{12}^{3}r^{3}). \end{aligned}$$

$$u_r(r) = B_1 r + \frac{B_2}{r^2},$$
 (°T)

$$\begin{split} \tau_{rr} &= \frac{p_{out}(r^{3} - \alpha^{3})\beta^{3} + p_{in}(\beta^{3} - r^{3})\alpha^{3}}{r^{3}(\alpha^{3} - \beta^{3})}, \\ \tau_{\theta\theta} &= \tau_{\phi\phi} = \frac{p_{out}(2r^{3} + \alpha^{3})\beta^{3} - p_{in}(\beta^{3} + 2r^{3})\alpha^{3}}{2r^{3}(\alpha^{3} - \beta^{3})}. \end{split}$$

همانطور که ملاحظه میشود میدان تنش در چهارچوب نظریه گرادیان دوم کرنش به مشخصههای طولی در ماده که منعکس کننده ساختار اتمی و گسسته محیط است، بستگی دارد.

۲-۳- مساله دویوستهای

در این قسمت مساله دوپوستهای به عنوان دومین مساله با تقارن

¹ Double-Shell



Fig. 2. The spherical coated shell with radii α , β , and ζ under the external pressures p_{in} and p_{out} $p_{out} p_{in} \rho_{in} \beta$, β , $\alpha \in \beta$, $\alpha \in \beta$, α و ک تحت فشار داخلی و خارجی $p_{in} \rho_{in} \rho_{in}$

جدول ۱: ثابتهای لمه بر حسب الکترون-ولت بر آنگستروم به توان ۳، طولهای مشخصه حجمی بر حسب آنگستروم، طول مشخصه سطح بر حسب آنگستروم، مدول چسبندگی بر حسب الکترون-ولت بر آنگستروم و پارامتر شبکهای بر حسب آنگستروم برای سیلیکون و کربن بلوری با ساختار الماس

Table 1. Lame constants in terms of eV/A, bulk and surface characteristic lengths in terms of Å, modulus of cohesion in terms of eV/A, and lattice parameter in terms of Å for crystalline silicon and carbon with diamond structure

a_0	b_0	ℓ_{10}	ℓ_{21},ℓ_{22}	ℓ_{11},ℓ_{12}	μ	λ	عنصر
۵/۴۶	-•/YY	۱/۵۱	1 <i>i</i> /1±۳۵/19	$\cdot i$ /• ± ٧١/۴۴	• /۶۲	۰/۴۵	سيليكون
٣/۵٩	٣/٩١	١/٩۴	$i/\cdot\pm\cdot$ ۵/۸۷	$\cdot i/\cdot \pm \lambda$ ۴/۶۷	7/94	۰/٩۴	كربن

آنگستروم محاسبه شده است.

در جدول ۱، طولهای مشخصه حجمی، $\ell_{21}, \ell_{21}, \ell_{22}, \ell_{21}$ از روابط(۱۸) و (۱۹) محاسبه می شود. همچنین، طول مشخصه سطحی بر اساس رابطه $(\lambda + \tau \mu)$ تعریف و تعیین می شود.

۱–۴– مساله لمه

در این قسمت، یک نانوکره توخالی کربنی با جداره نازک، ابتدا تحت اثر سطح در چهارچوب نظریه گرادیان دوم کرنش مورد بررسی قرار میگیرد. در این حالت، بارگذاری خارجی صفر در نظر گرفته میشود. در نتیجه اثر سطح، و البته تقارن کروی فضا، نظریه گرادیان دوم کرنش پیشبینی میکند که یک کرنش شعاعی در فضای کروی القا شود و تغییر ضخامت در نانوکره توخالی کربنی به وجود آید. سپس، بارگذاری به صورت فشار داخلی و خارجی برابر به وجود آید. سپس، بارگذاری به صورت فشار داخلی و خارجی برابر با روزاری متقارن کروی اعمال شده بر نانوکره توخالی، کرنش شعاعی بارگذاری متقارن کروی اعمال شده بر نانوکره توخالی، کرنش شعاعی

$$a_{1} = a_{2} = a_{5},$$

$$2a_{3} = a_{4},$$

$$2c_{1} = c_{2} = c_{3},$$

$$4b_{1} = 2b_{2} = b_{3} = 4b_{4} = 2b_{7},$$

$$2b_{5} = 3b_{6}.$$
(79)

با بهرهگیری از روابط ارائه شده برای انرژی سطح و تنش سطح توسط اجاقنژاد و شجاع [۱۲] و داشتن مقادیر عددی این کمیتها با استفاده از راهکار ارائه شده توسط اجاقنژاد و شجاع [۳۳] و استفاده از محاسبات کوانتومی، تمام ثابتهای اضافی میندلین مطابق جدول ۱ محاسبه میشود. با استفاده از محاسبات اصول اولیه' مقدار انرژی سطح برای (۱۰۰) و Si(۰۰۱) به ترتیب برابر ۲۰۷۹ و ۲۲/۰ الکترون-ولت بر مجذور آنگستروم و مقدار تنش سطح برای (۱۰۰) و (۱۰۰) به ترتیب برابر ۲۰۵۳ و ۲۰/۰۰ الکترون-ولت بر مجذور

¹ Ab Initio Calculations



Fig. 3. The average radial strain in the carbon shell due to the surface relaxation versus ξ for two values of $\gamma = 2,10$ in second strain gradient theory.

شکل ۳: کرنش شعاعی متوسط ایجاد شده در اثر سطح در نانوکره توخالی کربنی بر حسب گخ بر اساس نظریه گرادیان دوم کرنش برای دو حالت هندسی ۲٫۱۰ = γ

جدیدی به وجود می آید و تغییر ضخامت القا می شود. به منظور ارائه نتایج، پارامترهای ۲ و گم که بیانگر شعاع داخلی و ضخامت اولیه نانوکره توخالی به صورت بی بعد هستند، بر حسب پارامتر شبکهای کربن به صورت زیر تعریف می شوند:

$$\begin{aligned} \alpha &= \gamma a_0^c, \\ \beta - \alpha &= \xi a_0^c, \end{aligned} \tag{(YY)}$$

که a_0^c پارامتر شبکهای بلور کربن با ساختار الماس است. به منظور بررسی اثر سطح در تغییر ضخامت نانوکره توخالی کربنی به نسبت ضخامت اولیه، که بهصورت کرنش متوسط شعاعی قابل تعبیر است، پارامتر γ برابر ۲ و ۱۰ در نظر گرفته شده، کرنش شعاعی متوسط در نانوکره کربنی بر حسب کم در شکل ۳ رسم شده است. همانطور که ملاحظه می شود، کرنش شعاعی متوسط با افزایش کم به سمت صفر میل می کند و اثر سطح در کاهش ضخامت نانوکره توخالی با افزایش γ ، مطابق انتظار، کاهش پیدا می کند.

توزیع کرنش شعاعی القا شده در شعاع نانوکره توخالی برای مقادیر ۱۰ = γ و ۲,۱۰,۵۰ = ξ به ترتیب در شکلهای ۴ (الف) تا ۴ (ج) بر حسب پارامتر η که بهصورت $\zeta a_0^c + \zeta a_0^c$ تعریف شده است، نشان داده شده است. پارامتر η در ضخامت نانوکره از مقدار صفر در جدار داخلی تا مقدار یک در جدار خارجی تغییر میکند.

همانطور که ملاحظه می شود، کرنش شعاعی القایی در اثر سطح در نزدیکی سطوح داخلی و خارجی نانو کره زیاد است و هر چه ضخامت نانو کره توخالی افزایش می یابد، بخش وسیعی از نواحی داخلی دارای کرنش شعاعی نزدیک به صفر خواهد بود و اثر سطح به همسایگی سطوح داخلی و خارجی محدود خواهد بود.

بعد از محاسبه اثر سطح توسط نظریه گرادیان دوم کرنش (بعد از آسایش سطحی)، بارگذاری خارجی به صورت فشاری (یا کششی) روی سطوح داخلی و خارجی نانوکره توخالی به صورت مساوی ($p_{in} = p_{out}$) عمال می شود. درصد تغییر ضخامت نسبت به ضخامت اولیه نانوکره (ضخامت نانوکره بعد از آسایش سطحی و فضامت اولیه نانوکره (ضخامت نانوکره بعد از آسایش سطحی و قبل از اعمال بار خارجی)، بر حسب درصد بارگذاری فشاری (یا کششی) روی سطوح داخلی و خارجی (یکه شده نسبت به مدول یا کششی) روی سطوح داخلی و خارجی (یکه شده نسبت به مدول نیک کربن) برای دو هندسه مختلف در شکلهای ۵ (الف) و (ب) رسم شده است. در این اشکال، درصد تغییر ضخامت، به ترتیب، برای نظریه گرادیان دوم کرنش و نظریه الاستیسیته کلاسیک⁷ رسم شده است. همانطور که ملاحظه می شود، در حالتی که ضخامت نانوکره نوخالی کم است، پاسخ گرادیان دوم کرنش و نظریه الاستیسیته کلاسیک⁷ رسم شده است. همانطور که ملاحظه می شود، در حالتی که ضخامت نانوکره بای توخالی کم است، پاسخ گرادیان دوم کرنش تفاوت چشمگیری با

¹ Second Strain Gradient Theory (SSGT)

² Classic Theory of Elasticity (CT)



Fig. 4. The radial distribution of the radial strain versus η due to the surface effect in the carbon shell for $\gamma = 10$ and a) $\xi = 2$, b) $\xi = 10$, and c) $\xi = 50$ in second strain gradient theory.

۱۰ (ب) شکل ۴: توزیع شعاعی کرنش شعاعی ناشی از اثر سطح در نانوکره توخالی کربنی بر اساس نظریه گرادیان دوم کرنش به ازای $\gamma = 1$ و (الف) $\xi = \zeta$ ، (ب) ۱۰ $\xi = \zeta$ ، (ب) ۱۰ η .



Fig. 5. The thickness change normalized with respect to the initial thickness in the carbon shell under the equal inner and outer external pressure (tension) normalized with respect to the carbon Young's modulus for a) $\gamma = 10, \xi = 2$ and b) $\gamma = 10, \xi = 10$ in second strain gradient as well as classic elasticity.

شکل ۵: درصد تغییر ضخامت نانوکره توخالی کربنی آسوده نسبت به ضخامت اولیه تحت بارگذاری فشاری (یا کششی) برابر روی سطوح داخلی و خارجی بر حسب درصد بارگذاری نسبت به مدول یانگ کربن برای الف) ۱۰ = ۲، ۲ = گخ و ب) ۱۰ = ۲، ۱۰ = گخ بر اساس نظریه گرادیان دوم کرنش و الاستیسیته کلاسیک.

حالت کلاسیک دارد به گونهای که پیشبینی دو نظریه در خصوص در حالی است که با افزایش ضخامت نانوکره توخالی این دو پاسخ به انقباض یا انبساط نانوکره در اثر بارگذاری بر عکس یکدیگر است. این یکدیگر همگرا می شود.



Fig. 6. The stress a) τ_{rr} and b) $\tau_{\theta\theta} = \tau_{\varphi\varphi}$ normalized with respect to the carbon Young's modulus in the carbon shell versus η under the external pressure $p_{in} = p_{out} = 0.0001 E_{carbon}$ for $\gamma = 10, \xi = 2$ in second strain gradient as well as classic elasticity.

شکل ۶: توزیع مولفه تنش الف) au_{rr} و ب) $au_{ heta heta} = au_{ heta heta}$ یکه شده بر حسب مدول یانگ کربن، در محیط نانو کره کربنی تو خالی بر حسب η در اثر بار گذاری خارجی فشاری (۲۰۰۱ منفریه گرادیان دوم کرنش و نظریه الاستیسیته کلاسیک. فشاری (۲۰۰۰ = E_{carbon}



Fig. 7. The stress a) τ_{rr} and b) $\tau_{\theta\theta} = \tau_{\varphi\varphi}$ normalized with respect to the carbon Young's modulus in the carbon shell versus η under the external pressure $p_{in} = p_{out} = 0.0001E_{carbon}$ for $\gamma = 10, \xi = 10$ in second strain gradient as well as classic elasticity. شکل ۷: توزیع مولفه تنش الف) τ_{rr} و $\varphi_{\theta\theta} = \tau_{\varphi\varphi}$ یکه شده بر حسب مدول یانگ کربن، در محیط نانوکره کربنی تو خالی بر حسب η در اثر بارگذاری خارجی فشاری ۱۰ - $\xi = 10$ in second strain gradient as well as classic elasticity.

شده است.

همانطور که ملاحظه می شود، در این حالت بارگذاری، توزیع مولفه های تنش در ضخامت نانو کره در نظریه کلاسیک بر خلاف نظریه گرادیان دوم کرنش یکنواخت است. این درحالی است که بر اساس نظریه گرادیان دوم کرنش و برای ضخامت های کوچک نانو کره توخالی، توزیع مولفه های تنش در ضخامت بسیار متغیر است. با افزایش ضخامت نانو کره توزیع این مولفه های تنش در نقاط داخلی به جواب کلاسیک نزدیک می شود، در حالی که در نقاط نزدیک به سطوح همچنین، در اثر بارگذاری پیکربندی آسوده نانوکره توخالی، مولفههای تنش τ_{rr} و $\tau_{\varphi\varphi} = \tau_{\theta\varphi}$ در محیط نانوکره توخالی کربنی مولفههای تنش بهصورت شعاعی توزیع میشود. به عنوان مثال، توزیع مولفههای تنش یکه شده نسبت به مدول یانگ کربن در اثر بارگذاری خارجی فشاری یکه شده نسبت به مدول یانگ کربن در اثر بارگذاری خارجی فشاری $\gamma = \gamma_{rr}$ در شکلهای $\gamma = \gamma_{rr}$ (الف) و (ب) و $\gamma = \gamma_{rr}$ ، $\gamma = \xi$ در شکلهای γ (الف) و (ب) و $\gamma = \gamma_{rr}$ در این اشکال نیز، ترکیهای γ این از نظریه کلاسیک مقایسه نتایج حاصل از نظریه گرادیان دوم کرنش با نظریه کلاسیک مقایسه



Fig. 8. The normalized thickness change in the a) carbon coating $\frac{\delta(\zeta-\beta)}{\zeta-\beta}$ and b) inner silicon shell $\frac{\delta(\beta-\alpha)}{\beta-\alpha}$ versus ξ_1 due to the surface and size effect for the different geometries $\gamma = \xi_2 = 1$, $\gamma = 10, \xi_2 = 1$, $\gamma = 10, \xi_2 = 4$ in second strain gradient theory.

۱۱ شکل ۸: تغییر ضخامت الف) پوسته کربنی خارجی $\frac{\delta(\beta-\alpha)}{\beta-2}$ و ب) پوسته سیلیکونی داخلی $\frac{\delta(\beta-\alpha)}{\beta-\alpha}$ بر حسب $\frac{1}{2}$ در اثر سطح و اندازه به ازای مقادیر مختلف ۱۱ شکل ۸: تغییر ضخامت الف) پوسته کربنی خارجی $\gamma=1$ و $\gamma=1$ و $\gamma=1$ و $\gamma=1$ و $\gamma=1$



Fig. 9. The radial strain distribution under the surface and size effect in the spherical double shell versus η for a) $\gamma = 10, \xi_1 = 5, \xi_2 = 1$ and b) $\gamma = 10, \xi_1 = 5, \xi_2 = 5$ in second strain gradient theory.

۵، $\gamma = 1$ ، (خین شعاعی حاصل از اثر سطح و اثر اندازه در فضای دو پوسته کروی بر حسب η برای الف) ۱۰ = γ ، ۵ = $\zeta_1 = 3$ ، ۷ = γ ، ۵ شکل η : توزیع کرنش شعاعی حاصل از اثر سطح و اثر اندازه در فضای دو پوسته کروی بر حسب η برای الف) ۱۰ = γ ، ۵ = $\zeta_1 = \beta$ ، $\zeta_2 = 3$ بر اساس نظریه گرادیان دوم کرنش.

۲-۴- مساله دوپوستهای

در این قسمت، نتایج مربوط به مساله دو پوستهای، با فرض یک پوسته سیلیکونی با پوشش کربنی در نظر گرفته و ارائه میشود. پارامترهای بیبعد هندسی برای این مساله بهصورت $\alpha^{si}_{0} = \gamma a_{0}^{si}$, $a_{0}^{c} = \beta - \beta = \xi_{2} a_{0}^{c} = \beta - \lambda$ تعریف میشود که $\beta^{si}_{0} = \alpha^{si}_{0}$ و پارامترهای شبکهای سیلیکون و کربن بلوری با ساختار الماس است.

اگر این ساختار تحت اثر سطح و بدون اعمال بارگذاری خارجی در چهارچوب نظریه گرادیان دوم کرنش مورد بررسی قرار گیرد، یک میدان جابجایی شعاعی غیربدیهی در فضای کروی دو پوسته القا میشود و درنتیجه یک تغییر شعاعی در ابعاد هندسی به دلیل اثر سطح و اثر اندازه به وجود میآید. به منظور نشان دادن پیشبینی گرادیان دوم کرنش در مورد اثر سطح، در شکل ۸-الف، میزان تغییر ضخامت پوسته داخلی سیلیکونی در اثر سطح و اندازه به ازای ضخامت اولیه این پوسته که با پارامتر بیبعد $\frac{2}{3}$ نمایش داده

 γ می شود، برای مقادیر مختلف شعاع حفره داخلی (پارامتر بی بعد) و ضخامت پوسته خارجی کربنی (پارامتر بیبعد ξ_2) ترسیم شده است. همچنین، در شکل ۸-ب، تغییر ضخامت پوسته کربنی خارجی در اثر سطح و اندازه نسبت به ضخامت اولیه این پوسته برای مقادیر مختلف γ و ξ_2^{2} بر حسب ξ_1^{2} رسم شده است. پرواضح است که در چهارچوب نظریه کلاسیک الاستیسیته، میدان جابجایی به وجود آمده در اثر سطح و اندازه و در غیاب بارگذاری خارجی جواب بدیهی صفر خواهد بود. همانطور که در شکل ۸-الف ملاحظه می شود، اثر اندازه و اثر سطح منجر به افزایش بعد شعاعی پوسته داخلی سیلیکونی می شود این در حالی است که بر اساس نتایج نشان داده شده در شکل ۸-ب، اثر سطح و اندازه منجر به کاهش بعد شعاعی پوسته خارجی کربنی میشود. میزان این افزایش یا کاهش در بعد شعاعی پوستههای داخلی یا خارجی با افزایش γ و/یا ζ_2^{2} کاهش پیدا می کند. همچنین، مطابق انتظار، با افزایش ξ_1 تغییر در ضخامت پوسته داخلی به سمت صفر و تغییر در ضخامت پوسته خارجی به سمت یک عدد ثابت میل می کند. همچنین، از مقایسه شکلهای ۸-الف و ب نتیجه می شود که حساسیت تغییر ضخامت پوسته داخلی به پارامتر ξ_1 بیشتر از حساسیت تغییر ضخامت پوسته خارجی به این پارامتر است که البته این نتیجه نیز منطقی به نظر میرسد.

علاوه بر این، توزیع میدان مولفه شعاعی کرنش حاصل از اثر سطح و اندازه در فضای دو پوسته در شکلهای ۹ (الف) و (ب) بر حسب η برای دو حالت هندسی ۱۰ = γ ، ۵ = ξ_1 ۹ = ξ_2 و

۱۰ = γ , $\Delta = \frac{3}{2}$, $\Delta = \frac{3}{2}$, به ترتیب، رسم شده است. در این اشکال، توزیع میدان کرنش شعاعی در پوسته سیلیکونی با رنگ قرمز و خط پر و کرنش شعاعی در پوسته کربنی با رنگ آبی و خطچین نمایش داده شده است. همانطور که در این اشکال مشاهده می شود، میدان کرنش شعاعی در داخل محیط کروی و دور از سطوح مرزی حدود صفر و در نقاط نزدیک به مرز غیر مفر است و با افزایش ضخامت پوسته خارجی تغییرات در مولفه شعاعی کرنش زیادتر می شود.

حال بعد از آسایش سطحی، اگر دو پوسته کروی تحت بارگذاری خارجی $p_{in} = p_{out}$ قرار گیرد، تغییر در ابعاد آسوده دو پوسته به وجود میآید. درصد تغییر ضخامت نسبت به ضخامت اولیه (ضخامت بعد از آسایش سطحی) در هر پوسته بر حسب درصد بارگذاری فشاری یا کششی p_{in} روی سطوح داخلی و خارجی که نسبت به مدول یانگ کربن یکه شده است، برای حالتهای ۱۰ = γ ، نه مدول یانگ کربن یکه شده است، برای حالتهای ۱۰ = γ ، $1 = 5^2 = 1^2$, $1 = 1^2$, $1 = 1^2$, $1 = 5^2$, $1 = 7^2$, $1 = 5^2$ $1 = 5^2 = 1^2$, $1 = 1^2$, $1 = 1^2$, $1 = 5^2$, $1 = 7^2$, $1 = 5^2$ $1 = 5^2 = 1^2$, $1 = 1^2$, $1 = 1^2$, $1 = 5^2$, $1 = 5^2$ $1 = 5^2$ و $1 = 5^2 = 1^2 = 7$ به ترتیب در شکلهای ۱۰ الی ۱۳ بر اساس نظریههای کلاسیک و گرادیان دوم کرنش نمایش داده شده است. مشاهده میشود که در حالتی که ضخامت هر دو پوسته کوچک است (شکل ۱۰)، اختلاف پیشبینی دو نظریه کلاسیک و گرادیان دوم کرنش در تغییر ضخامت هر دو پوسته چشمگیر است و حتی پیشبینی دو نظریه در مورد تغییر ضخامت پوسته خارجی عکس خارجی زیاد است (شکل ۱۱)، اختلاف پیشبینی دو نظریه دو نظریه در تعییر خارجی زیاد است (شکل ۱۱)، اختلاف پیشبینی دو نظریه دو نظریه در تغییر



Fig. 10. The thickness change normalized with respect to the relaxed dimensions in the a) carbon coating and b) silicon inner shell versus the external loading normalized with respect to the carbon Young's modulus for $\gamma = 10$, $\xi_1 = \xi_2 = 1$ in second strain gradient as well as classic elasticity.





Fig. 11. The thickness change normalized with respect to the relaxed dimensions in the a) carbon coating and b) silicon inner shell versus the external loading normalized with respect to the carbon Young's modulus for $\gamma = 10$, $\xi_1 = 1$, $\xi_2 = 10$ in second strain gradient as well as classic elasticity.

شکل ۱۱: تغییر ضخامت یکه شده نسبت به ابعاد بعد از آسایش سطحی در الف) پوسته خارجی کربنی و ب) پوسته داخلی سیلیکونی بر حسب بارگذاری خارجی یکه شده نسبت به مدول یانگ کربن برای ۱۰ $\gamma = \gamma$ ، ۱ = $\zeta_1 = \gamma$ ، ۷ = ζ_2 بر اساس نظریههای کلاسیک و گرادیان دوم کرنش.



Fig. 12. The thickness change normalized with respect to the relaxed dimensions in the a) carbon coating and b) silicon inner shell versus the external loading normalized with respect to the carbon Young's modulus for $\gamma = 10, \xi_1 = 10, \xi_2 = 1$ in second strain gradient as well as classic elasticity.

شکل ۱۲: تغییر ضخامت یکه شده نسبت به ابعاد بعد از آسایش سطحی در الف) پوسته خارجی کربنی و ب) پوسته داخلی سیلیکونی بر حسب بارگذاری خارجی یکه شده نسبت به مدول یانگ کربن برای ۱۰ = γ ، ۱۰ = ξ_1 = ۱۰ ، ξ_2 = ۱ ، فارجی یکه شده نسبت به مدول یانگ کربن برای کرنش.



ب)

الف)

Fig. 13. The thickness change normalized with respect to the relaxed dimensions in the a) carbon coating and b) silicon inner shell versus the external loading normalized with respect to the carbon Young's modulus for $\gamma = \xi_1 = \xi_2 = 10$ in second strain gradient as well as classic elasticity.

شکل ۱۳: تغییر ضخامت یکه شده نسبت به ابعاد بعد از آسایش سطحی در الف) پوسته خارجی کربنی و ب) پوسته داخلی سیلیکونی بر حسب بارگذاری خارجی یکه شده نسبت به مدول یانگ کربن برای ۱۰ = $\xi_1 = \xi_2 = \gamma$ بر اساس نظریههای کلاسیک و گرادیان دوم کرنش.

علاوه بر این، توزیع مولفههای تنش τ_{rr} و $\tau_{\varphi\varphi} = \tau_{\varphi\varphi}$ یکه شده در فضای دو پوسته سیلیکونی و کربنی در اثر بارگذاری خارجی فشاری $p_{in} / E_{carbon} = p_{out} / E_{carbon} = 0$ روی سطوح فشاری $p_{in} / E_{carbon} = p_{out} / E_{carbon} = 0$ روی سطوح داخلی و خارجی بر حسب موقعیت شعاعی یکه شده η ، برای چهار حالت هندسی مختلف ۱۰ = γ ، ۱ = $\xi_2 = 1$, $\gamma = 1$, $\gamma = 1$, $\xi_1 = \xi_2$. $\zeta_1 = -\gamma$, ا $\xi_1 = -\zeta_2$ به حالت هندسی مختلف ۱۰ = γ ، $\gamma = 1$, $\xi_1 = -\zeta_2$ و $\gamma = 1$, $\zeta_2 = -\gamma$ به مالت هندسی مختلف ۱۰ = $\zeta_1 = -\zeta_2$ و $\zeta_1 = -\zeta_2$ به معند مخلف کارسیک معایی در شکلهای ۱۴ الی ۱۷ نمایش داده شده و با پاسخ کلاسیک رنگهای متفاوت ترسیم شدهاند. همانطور که در این اشکال دیده میشود، جواب الاستیسیته کلاسیک در هر دو پوسته و در تمام حالات

ضخامت پوسته داخلی زیاد و در تغییر ضخامت پوسته خارجی کم است اما در هر دو پوسته پیش بینی دو نظریه همسو است. در شکل ۱۲، ضخامت پوسته داخلی زیاد و ضخامت پوسته خارجی کم است و بنا بر انتظار تفاوت پیش بینی دو نظریه در تغییر ضخامت پوسته داخلی و خارجی، به ترتیب کم و زیاد است. اما، این پیش بینیها در مورد تغییر ضخامت پوسته خارجی عکس یکدیگر است. در نهایت، زمانی که ضخامت هر دو پوسته زیاد باشد (شکل ۱۳)، پیش بینی نظریه گرادیان دوم کرنش در مورد تغییر ضخامت هر دو پوسته، هم از نظر مقدار و هم از نظر جهت به پیش بینی نظریه کلاسیک میل می کند.



Fig. 14. The stress components a) τ_{rr} and b) $\tau_{\theta\theta} = \tau_{\varphi\varphi}$ normalized with respect to the carbon Young's modulus in the carbon and silicon double shell .in second strain gradient as well as classic elasticity $\gamma = 10, \xi_1 = \xi_2 = 1$ versus η for η حسب مدول یانگ کربن یکه شده است، بر حسب η er η : توزیع مولفه های تنش الف) τ_{rr} (و ب) $\tau_{rr} = \xi_2 = 1$ بر اساس نظریه های کلاسیک و گرادیان دوم کرنش.



Fig. 15. The stress components a) τ_{rr} and b) $\tau_{\theta\theta} = \tau_{\varphi\varphi}$ normalized with respect to the carbon Young's modulus in the carbon and silicon double shell versus η for $\gamma = 10, \xi_1 = 1, \xi_2 = 10$ in second strain gradient as well as classic elasticity.

 η شکل ۱۵: توزیع مولفههای تنش الف) au_{r_r} و ب) $au_{ heta heta heta}$ در فضای دو پوسته سیلیکونی و کربنی که بر حسب مدول یانگ کربن یکه شده است، بر حسب η شکل ۱۵: توزیع مولفههای تنش الف) برای au_{r_r} و با $au_{ heta heta heta}$ در فضای دو پوسته سیلیکونی و کرادیان دوم کرنش.



Fig. 16. The stress components a) τ_{rr} and b) $\tau_{\theta\theta} = \tau_{\varphi\varphi}$ normalized with respect to the carbon Young's modulus in the carbon and silicon double shell versus η for $\gamma = 10, \xi_1 = 10, \xi_2 = 1$ in second strain gradient as well as classic elasticity.

 η شکل ۱۶: توزیع مولفه های تنش الف) au_{rr} و ب) $au_{ heta heta} = au_{ heta heta}$ در فضای دو پوسته سیلیکونی و کربنی که بر حسب مدول یانگ کربن یکه شده است، بر حسب η **(علب 19)** au_{rr} و با اساس نظریه های کلاسیک و گرادیان دوم کرنش. برای ۲۰ = ۲۰ ($eta_1 = 1 \cdot (\gamma = 1)$ برای ۲۰ ($eta_2 = 1 \cdot (\gamma = 1)$ ($eta_2 = 1 \cdot (\gamma = 1)$ ($eta_2 = 1 \cdot (\gamma = 1)$)



Fig. 17. The stress components a) τ_{rr} and b) $\tau_{\theta\theta} = \tau_{\varphi\varphi}$ normalized with respect to the carbon Young's modulus in the carbon and silicon double shell versus η for $\gamma = \xi_1 = \xi_2 = 10$ in second strain gradient as well as classic elasticity.

شکل ۱۷: توزیع مولفههای تنش الف) au_{rr} و ب) $au_{ heta heta} = au_{ heta heta}$ در فضای دو پوسته سیلیکونی و کربنی که بر حسب مدول یانگ کربن یکه شده است، بر حسب η برای η خطب η برای $\eta = \eta_{
hop} = 1$ و برا

در خصوص این اشکال این است که مرز دو پوسته در نظریه گرادیان دوم کرنش محلی غیر از مرز دو پوسته در نظریه کلاسیک است که این مساله نیز به اثر سطح و جواب غیربدیهی نظریه گرادیان دوم کرنش در خصوص اثر سطح و اندازه است که منجر به آسایش سطحی قبل از بارگذاری خارجی در نظریه گرادیان دوم کرنش می شود.

۵- نتیجهگیری

در این مقاله مساله لمه گونه کروی در الاستیسیته گرادیان دوم

تقریبا در ضخامت ثابت است. این در حالی است که پاسخ مربوط به نظریه الاستیسیته تقویت شده در نزدیکی مرزها به شدت متغیر است و چنانچه ضخامت پوسته کم باشد، در کل تغییرات چشمگیر در میدان تنش ملاحظه می شود. همچنین، تنش τ_{rr} در پاسخ کلاسیک در مرز دو پوسته پیوسته است در حالی که مولفههای $\varphi_{\phi\phi} = \tau_{\phi\phi}$ در مرز گسسته است. این در حالی است که در پاسخ گرادیان دوم کرنش همه مولفههای تنش در مرز گسسته است که با توجه به صورتبندی همه مولفههای تنظریه، این مساله قابل پیشبینی بوده است.

پیشبینی میکند. با افزایش شعاع حفره داخلی در حالت ۱۰ = γ ، $I = \frac{z}{2}$ این تغییر حدود ۵۰ درصد کاهش مییابد. بعد از رسیدن به آسایش سطحی، بارگذاری خارجی متقارن اعمال میشود. به عنوان مثال، برای بارگذاری خارجی یکه حدود ۲۰۰۰/۰۰ تنش شعاعی یکه در دوپوسته برای حالت هندسی ۱۰ = γ ، $I = \frac{z}{2} = \frac{z}{2}$ تقریبا در هر دو فاز ثابت و حدود ۲۰۰۰/۰۰ است؛ این در حالی است که بر اساس گرادیان دوم کرنش، تنش شعاعی یکه در مرز پیوسته نیست و مثلا در فاز کربن و در مجاورت مرز دو فاز حدود ۲۰۰/۰۰-است.

منابع

- H. Hatami, M. Hosseini, Elastic-plastic analysis of bending moment-axial force interaction in metallic beam of T-section, J. Applied Comp. Mech., 5 (2019) 162-173.
- [2] H. Hatami, M. Hosseini, A.K. Yasuri, Perforation of thin Aluminum targets under hypervelocity impact of aluminum spherical projectiles, Materials Evaluation, 77 (2019) 411-422.
- [3] M. Shariati, H. Hatami, H.R. Eipakchi, H. Yarahmadi, H. Torabi, Experimental and numerical investigations on softening behavior of POM under cyclic strain-controlled loading, Polymar-Plastics Technology and Engineering, 50 (2011) 1576-1582.
- [4] M. Lazar, Dislocations and Cracks in Generalized Continua. Encyclopedia of Continuum Mechanics, Springer-Verleg GmbH, Germany, 2018.
- [5] M. Lazar, E. Agiasofitu, Fundamentals in generalized elasticity and dislocation theory of quasicrystals: Green tensor, dislocation key-formulas and dislocation loops, Philosophical Magazine, 94(35) (2014) 4080-4101.
- [6] G. Po, N.C. Admal, M. Lazar, The Green tensor of Mindlin's anisotropic first strain gradient elasticity, Materials Theory, 3(1) (2019) 3.
- [7] M.R. Delfani, S. Shojaeimanesh, V. Bagherpour, Effective shear modulus of functionally graded fibrous composites in second strain gradient elasticity, Journal of Elasticity, 137(1) (2018) 43-62.
- [8] R.A. Toupin, Theories of elasticity with couple-stress, Archive for Rational Mechanics and Analysis, 17(2)

کرنش در دو حالت تکفازی و دوفازی مورد بررسی قرار میگیرد. در گرادیان دوم کرنش میندلین، چگالی انرژی کرنشی در محیط پیوسته بهصورت تابعی از تانسور کرنش و گرادیانهای مرتبه اول و دوم آن نوشته می شود و علاوه بر ثابت های لمه، شانزده ثابت ماده جدید شامل مدول چسبندگی و همچنین چهار طول مشخصه حجمی و یک طول مشخصه سطحی معرفی می شود. به دلیل وجود مدول چسبندگی در صورتبندی میندلین، امکان تعادل محیط پیوسته تحت اثرات سطح و اندازه توسط نظریه گرادیان دوم کرنش فراهم می شود. به منظور حل مساله لمه گونه با تقارن کروی، ابتدا این نظریه در دستگاه مختصات کروی نوشته می شود و معادلات تعادل، شرایط مرزی نیرویی و جابجابی و روابط بنیادین تنش و کرنش در این دستگاه مختصات استخراج می شود. با لحاظ کردن تقارن کروی در مساله لمه گونه، معادله تعادل یک معادله دیفرانسیل مرتبه شش خطی می شود که با استفاده از سری فروبینیوس حل شده، جوابهای معادله حاصل می شود. در این مقاله، نانوکره توخالی کربنی به عنوان مساله لمه گونه تکفازی و نانوکره توخالی سیلیکونی با پوشش کربنی به عنوان مساله لمه گونه دوفازی مورد مطالعه قرار می گیرد. به منظور بهدست آوردن نتایج عددی، مقادیر عددی ثابتهای مواد و طول مشخصههای آنها با استفاده از نظریه شبکه و محاسبات کوانتمی برای سیلیکون و کربن بلوری با ساختار الماس تعیین می شود. برای هر دو مساله، ابتدا آسایش سطحی در نتیجه اثرات سطح و اندازه مورد بررسی قرار می گیرد و میدان جابجایی و کرنش حاصل از آن تعیین می شود. سیس، هر دو مساله تحت بارگذاری خارجی قرار گرفته، میدان تنش و تغییرات شعاعی در آنها محاسبه و ارائه می شود. برخی نتايج ارائه شده با نتايج الاستيسيته كلاسيك مقايسه مىشود. اثرات سطح و اندازه در هر دو مساله لمه گونه و دوپوسته منجر به القای کرنشهای شعاعی و در نتیجه تغییر ابعاد در محیطهای مادی مورد بحث مى شود. اين در حالى است كه الاستيسيته كلاسيك، كرنش شعاعی ناشی از اثرات سطح و اندازه را پیشبینی نمی کند. هنگامی که اندازه شعاع فازها بسیار کوچک باشد، اثر سطح و اندازه بر نتایج قابل ملاحظه است. با افزایش شعاع فازها نتایج دو نظریه تعمیمیافته و کلاسیک به یکدیگر همگرا می شود. به عنوان مثال، در مساله دو پوسته، اثر سطح و اندازه در گرادیان دوم کرنش، تغییر ضخامت به ضخامت اولیه را در فاز سیلیکون حدود ۰/۰۳ برای ۳ = $\xi_1 = \gamma = \zeta_2$ crystals of hexoctahedral class: Analytical expression of the material parameters in terms of the atomic force constants and evaluation via ab initio DFT, Mechanics of Materials, 123 (2018) 19-29.

- [20] H.M. Shodja, F. Ojaghnezhad, A. Etehadieh, M. Tabatabaei, Elastic moduli tensors, ideal strength, and morphology of stanene based on an enhanced continuum model and first principles, Mechanics of Materials, 110 (2017) 1-15.
- [21] H.M. Shodja, A. Zaheri, A. Tehranchi, Ab initio calculations of characteristic lengths of crystalline materials in first strain gradient elasticity, Mechanics of Materials, 61 (2013) 73-78.
- [22] Q. He, M. Ashuri, K. Zhang, S. Emani, M.S. Sawicki, J.S. Shamie, L.L. Shaw, Synthesis of carbon-coated hollow silicon nanospheres for Lithium-ion battery application, in: Materials Science & Technology, Pittsburgh, PA, USA, 2014.
- [23] B. Li, F. Yao, J.J. Bae, J. Chang, M.R. Zamfir, D.T. Le, D.T. Pham, Y. Hongyan, Y.H. Lee, Hollow carbon nanospheres/ silicon/alumina core-shell film as an anode for lithiumion batteries, Scientific Reports, 5 (2015).
- [24] A. Mukhopadhyay, B.W. Sheldon, Deformation and stress in electrode materials for Li-ion batteries, Progress in Materials Science, 63 (2014) 58-116.
- [25] X. Su, Q. Wu, J. Li, X. Xiao, A. Lott, W. Lu, B.W. Sheldon,J. Wu, Silicon-based nanomaterials for lithium-ion batteries: A review, Advanced Energy Materials, (2013).
- [26] L. Xue, G. Xu, Y. Li, S. Li, K. Fu, Q. Shi, X. Zhang, Carboncoated Si nanoparticles dispersed in carbon nanotube networks as anode material for Lithium-ion batteries, ACS Applied Materials & Interfaces, 5(1) (2013) 21-25.
- [27] C. Yang, Y. Zhang, J. Zhou, C. Lin, F. Lv, K. Wang, J. Feng, Z. Xu, J. Li, S. Guo, Hollow Si/SiO nanosphere/nitrogendoped carbon superstructure with a double shell and void for high-rate and long-life lithium-ion storage, Journal of Materials Chemistry A, 6(17) (2018) 8039-8046.
- [28] Y. Yao, M.T. McDowell, I. Ryu, H. Wu, N. Liu, L. Hu, W.D. Nix, Y. Cui, Interconnected silicon hollow nanospheres for lithium-ion battery anodes with long cycle life, Nano

(1964) 85-112.

- [9] R.A. Toupin, D.C. Gazis, Surface effects and initial stress in continuum and lattice models of elastic crystals, in: Wallis (Ed.) International Conference on Lattice Dynamics, Pergamon press, Copenhagen, 1963, pp. 597-602.
- [10] R.D. Mindlin, Second gradient of strain and surfacetension in linear elasticity, International Journal of Solids and Structures, 1 (1965) 417-438.
- [11] F. Ojaghnezhad, H.M. Shodja, A combined first principles and analytical determination of the modulus of cohesion, surface energy, and the additional constants in the second strain gradient elasticity, International Journal of Solids and Structures, 50(24) (2013) 3967-3974.
- [12] F. Ojaghnezhad, H.M. Shodja, Surface elasticity revisited in the context of second strain gradient theory, Mechanics of Materials, 93 (2016) 220-237.
- [13] M.E. Gurtin, A.I. Murdoch, A continuum theory of elastic material surfaces, Archive for Rational Mechanics and Analysis, 57 (1975) 291-323.
- [14] A.C. Eringen, Mechanics of continua, Robert E. Krieger publishing compan, New York, 1980.
- [15] X. Ji, A.Q. Li, S.J. Zhou, The strain gradient elasticity theory in orthogonal curvilinear coordinates and its applications, Journal of Mechanics, 34(3) (2016) 311-323.
- [16] S. Zhou, A. Li, B. Wang, A reformulation of constitutive relations in the strain gradient elasticity theory for isotropic materials, International Journal of Solids and Structures, 80 (2016) 28-37.
- [17] F. Ojaghnezhad, H.M. Shodja, Second strain gradient theory in orthogonal curvilinear coordinates: Prediction of the relaxation of a solid nanosphere and embedded spherical nanocavity, Applied Mathematical Modelling, 76 (2019) 669-698.
- [18] H.M. Shodja, F. Ahmadpoor, A. Tehranchi, Calculation of the additional constants for fcc materials in second strain gradient elasticity: behavior of a nano-size Bernoulli-Euler beam with surface effects, ASME Journal of Applied Mechanics, 79 (2012) 021008-021015.
- [19] H.M. Shodja, H. Moosavian, F. Ojaghnezhad, Toupin-Mindlin first strain gradient theory revisited for cubic

- [31] X. Zhou, A. Cao, L. Wan, Y. Guo, Spin-coated silicon nanoparticle/grapheme electrode as a binder-free anode for high-performance lithium-ion batteries, Nano Research, 5 (2012) 845-853.
- [32] F. Ojaghnezhad, H.M. Shodja, A combined first principles and analytical treatment for determination of the surface elastic constants: application to Si(001) ideal and reconstructed surfaces, Philosophical Magazine Letters, 92(1) (2012) 7-19.

Letters, 11 (2011) 2949-2954.

- [29] K. Zhao, M. Pharr, S. Cai, J.J. Vlassak, Z. Suo, Large plastic deformation in high-capacity lithium-ion batteries caused by charge and discharge, Journal of American Ceramic Society, 94 (2011) 226-235.
- [30] K. Zhao, M. Pharr, L. Hartle, J.J. Vlassak, Z. Suo, Fracture and debonding in lithium-ion batteries with electrodes of hollow core-shell nanostructures, Journal of Power Sources, 218 (2012) 6-14.

برای ارجاع به این مقاله از عبارت زیر استفاده کنید: F. Ojaghnezhad, Spherical Lame-Type Problem in Second Strain Gradient Theory, Amirkabir J. Mech. Eng., 53(2) (2021) 713-732.

DOI: 10.22060/mej.2019.16554.6388



بی موجعه محمد ا