

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Заиков Г.Е., Маслов С.А., Рубайло В.Л. Кислотные дожди и окружающая среда. – М.: Химия, 1991. – 144 с.
2. Израэль Ю.А., Назаров И.М., Прессман А.Я., Ровинский Ф.Я., Рябошапка А.Г. Кислотные дожди. – Л.: Гидрометеиздат, 1989. – 270 с.
3. Клименко В.В., Клименко А.В. Сокращение выбросов малых парниковых газов как альтернатива снижению эмиссии углекислого газа. Ч. I // Теплоэнергетика. – 2000. – № 6. – С. 6–12.
4. Внуков А.К. Защита атмосферы от выбросов энергообъектов: справочник. – М.: Энергоатомиздат, 1992. – 176 с.
5. Climate Change 1992. The Supplementary Report to the IPCC Scientific Assessment / J.T. Houghton, B.A. Callender, S.C. Varney. Cambridge University Press, 1992.
6. Brendow K. West and East European approaches to sustainable energy // World Energy Council Journal. December. 1993. – P. 41–53.
7. Фелленберг Г. Загрязнение природной среды. Введение в экологическую химию. – М.: Мир, 1997. – 232 с.
8. Грин Х., Лейн В. Аэрозоли – пыли, дымы и туманы. – Л.: Химия, 1969. – 428 с.
9. Терехов В.И., Пахомов М.А. Тепломассоперенос и гидродинамика в газокapельных потоках: монография. – Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2008. – 284 с.
10. Андруз Дж., Бримлекумб П., Дишклез Т. и др. Введение в химию окружающей среды. – М.: Мир, 1999. – 271 с.
11. Роуч П. Вычислительная гидродинамика. – М.: Мир, 1980. – 616 с.
12. Берковский Б.М., Полевиков В.К. Вычислительный эксперимент в конвекции. – Минск: Университетское, 1988. – 167 с.
13. Кнаке О., Странский И.Н. Механизм испарения // УФН. – 1959. – Т. 68. – № 2. – С. 261–305.
14. Лабунцов А.Д. Физические основы энергетики. Избранные труды по теплообмену, гидродинамике, термодинамике. – М.: Изд-во МЭИ, 2000. – 388 с.
15. Пасконов В.М., Полежаев В.И., Чудов Л.А. Численное моделирование процессов тепло- и массообмена. – М.: Наука, 1984. – 288 с.
16. Самарский А.А., Попов Ю.П. Разностные схемы газовой динамики. – М.: Наука, 1975. – 424 с.
17. Кузнецов Г.В., Шеремет М.А. Об одном подходе к математическому моделированию тепловых режимов радиоэлектронной аппаратуры и электронной техники // Микроэлектроника. – 2008. – Т. 37. – № 2. – С. 150–158.
18. Кузнецов Г.В., Шеремет М.А. Сопряженный теплоперенос в замкнутой области с локально сосредоточенным источником тепловыделения // Инженерно-физический журнал. – 2006. – Т. 79. – № 1. – С. 56–63.
19. Гвоздяков Д.В., Губин В.Е., Кузнецов Г.В. Численная оценка формирования условий атмосферного образования серной кислоты в районе расположения тепловой электрической станции // Научно-технические ведомости СПбГПУ. – 2012. – № 2–2. – С. 195–200.
20. Федосов А.А. Математическая модель загрязнения атмосферы выбросами тепловых электрических станций // Альтернативная энергетика и экология. – 2006. – № 9 (41). – С. 98–102.

Поступила 27.05.2013 г.

УДК 532.529.2

## СЕДИМЕНТАЦИЯ ЧАСТИЦ В ФЕРРОКОЛЛОИДАХ С УЧЕТОМ ДИНАМИЧЕСКИХ ГРАНИЧНЫХ УСЛОВИЙ

А.Ф. Глухов, В.А. Демин

Пермский государственный национальный исследовательский университет

E-mail: demin@psu.ru

*Проведено численное исследование процесса осаждения частиц в феррожидкости на основе керосина в тонком вертикальном канале с учетом возможного термодиффузионного перераспределения частиц при неоднородном нагреве. Определены значения термодиффузионного параметра, при которых действие термодиффузии для установленной разности температур на торцах канала становится сопоставимым с седиментационным механизмом расслоения.*

### Ключевые слова:

*Феррожидкость, седиментация частиц, термодиффузия, динамические граничные условия.*

### Key words:

*Ferrofluid, sedimentation of particles, thermodiffusion, dynamical boundary conditions.*

Большинство задач гидродинамики и тепло-массообмена математически сводятся к краевым задачам. Очевидно, что граничные условия определяют вид решений наравне с уравнениями. Однако степень обоснованности у граничных условий на разные неизвестные величины в гидродинамике неодинаковая. В задачах теплообмена краевые условия на температуру выставляются, как правило, физически строго: на границах расчетных областей температура должна быть непрерывной,

в дополнение нормальная компонента теплотока на поверхности раздела также не должна испытывать скачка [1]. Данное условие на теплоток вытекает фактически из закона сохранения энергии и соответствующим образом модифицируется при наличии фазового перехода, источников тепла, экзо- или эндотермической реакции на поверхности. Граничные условия на поле скорости также неоднократно подвергались обсуждению и существенно модифицировались при решении различных ги-

дродинамических задач. Проблема переработки условия прилипания на твердых границах в эффективные граничные условия разносторонне рассмотрена в научной литературе [2, 3].

С решением задач о движении неоднородных по составу жидкостей и газов складывается иная ситуация. В настоящее время наиболее распространены три типа граничных условий на концентрацию компонентов среды, обоснование применимости которых часто представляется недостаточно строгим. Если смесь соприкасается с твердой нерастворимой поверхностью, то на границе раздела должна обращаться в ноль нормальная компонента вектора плотности потока вещества  $J_{n|T}=0$ .

Другая картина складывается при рассмотрении диффузии вещества от твердого тела, растворяющегося в жидкости. Процесс диффузии в ходе растворения тела в жидкости характеризуется наличием локального равновесия вблизи твердой поверхности [4]. В этом случае концентрация в прилегающей к поверхности тела жидкости равна концентрации насыщенного раствора  $C_0$ . Данное положение является следствием того, что диффузия уже растворенного компонента в этом слое идет медленнее, чем сам процесс растворения. В результате имеет место граничное условие на такой поверхности  $C|_T=C_0$ .

Если на границе раздела происходит поглощение попадающего на нее диффундирующего вещества, то крайевым будет условие равенства концентрации нулю  $C|_T=0$ . Подобная ситуация имеет место, когда на границе раздела происходит химическая реакция с поглощением растворенного компонента [4].

Диффузионные явления часто характеризуются гигантскими временами. В ходе этих процессов условия на границах рассматриваемой области могут меняться с течением времени, что математически сильно усложняет задачу. Проанализируем процесс оседания частиц в неоднородно нагретой феррожидкости. Малые размеры взвешенных частиц позволяют называть феррожидкость наносuspension. В роли несущей жидкости могут выступать разные среды, но наиболее распространенной является керосин. Взвесь представляет собой практически однодоменные магнетитовые частицы, которые обладают магнитными моментами. Частицы покрываются поверхностно-активным веществом, которое предотвращает их слипание и препятствует дальнейшему выпадению кластеров в осадок. Большие значения магнитных моментов при относительно малых размерах частиц и возможность длительного нахождения во взвешенном состоянии в жидкости-носителе приводят к тому, что феррожидкость ведет себя во внешнем магнитном поле как суперпарамагнетик, т. е. парамагнетик с аномально большой магнитной восприимчивостью [5]. Магнетитовые частицы обсуждаемой феррожидкости имеют характерный размер порядка 10 нм. Скорость оседания таких частиц в керосине можно оценить с помощью формулы Стокса

$$U \sim D\Delta\rho V_0 g / k\bar{T} = 10^{-7} \text{ см/с},$$

где  $g$  – ускорение силы тяжести;  $D$  – коэффициент диффузии для феррочастиц в керосине;  $V_0$  – объем коллоидной частицы;  $\Delta\rho$  – разность плотностей магнетита и керосина;  $k$  – постоянная Больцмана;  $\bar{T}$  – средняя абсолютная температура в полости. Для коэффициента диффузии частиц при малых концентрациях справедлива формула Эйнштейна. При радиусе частицы 10 нм получается весьма малое значение этого параметра  $D=2 \cdot 10^{-7} \text{ см}^2/\text{с}$ .

Эволюция распределения концентрации частиц при отсутствии конвективного переноса подчиняется уравнению [6]:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D(\Delta C + \alpha \Delta T) + U \nabla C \cdot \vec{\gamma}. \quad (1)$$

Здесь  $T$ ,  $C$  – это поля температуры и концентрации частиц;  $\Delta$  – оператор Лапласа;  $\vec{\gamma}$  – единичный вектор, направленный вертикально вверх;  $\alpha$  – параметр, описывающий явление термодиффузии в коллоиде;  $U$  – скорость оседания частиц. В уравнении учтены три механизма перераспределения частиц в жидкости-носителе: диффузия, термодиффузия и седиментация, т. е. предполагается, что поток вещества определяется формулой

$$J = -\rho D(\nabla C + \alpha \nabla T) + \rho C U.$$

Изотермическая задача об оседании частиц феррожидкости в тонком вертикальном канале без учета термодиффузии экспериментально и теоретически была рассмотрена в [7]. С другой стороны, для количественного описания перераспределения наночастиц в неоднородно нагретой несущей жидкости все чаще используется подход, основанный на добавлении в выражение для потока вещества дополнительного феноменологического слагаемого по аналогии с тем, как это делается для описания явления термодиффузии в молекулярных смесях. А именно, предполагается, что поток частиц в несущей жидкости пропорционален градиенту температуры с некоторым кинетическим коэффициентом [8]. Удивительной является величина используемого параметра разделения смеси и знак термодиффузии. Так, для описания конвективных процессов в наножидкости Hуflon MFA при плотности частиц  $2,15 \text{ г/см}^3$  и их среднем размере 25 мкм потребовалось предположить, что в рассматриваемой среде имеет место отрицательная термодиффузия с параметром разделения смеси  $\psi=-7,5$ . Однако при таких размерах частиц на фоне внешнего градиента температуры должен действовать классический термофоретический механизм перераспределения взвеси. В этом случае частицы под действием термофоретической силы должны перемещаться из нагретых областей в холодные, что соответствует положительной термодиффузии. Таким образом, вопрос о знаке термодиффузии и величине параметра разделения смеси остается открытым и требует детального экспериментального и теоретического изучения.

При неоднородном нагреве зависимость от времени распределения температуры вдоль вертикального канала в безконвективном приближении описывается стандартным уравнением теплопроводности

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \chi \Delta T, \quad (2)$$

где  $\chi$  – температуропроводность смеси. Перекрестными эффектами в выражении для потока тепла в дальнейшем будем пренебрегать. Для одномерного случая, когда температура зависит только от вертикальной координаты, точное решение этого уравнения записывается в виде ряда. Выпишем сначала решение в случае подогрева снизу для реализуемого в опыте набора граничных и начальных условий:

$$T(0, t) = 1, \quad T(l, t) = 0, \quad T(x, 0) = 0,$$

где  $l$  – длина вертикального канала. Распределение температуры в каждый момент времени имеет вид

$$T(x, t) = 1 - \frac{x}{l} + \sum_{n=1}^{\infty} \left( -\frac{2}{\pi n} \right) \times \exp \left\{ -\frac{\pi^2 n^2}{l^2} \chi t \right\} \sin \left( \frac{\pi n}{l} x \right). \quad (3)$$

Подогреву сверху соответствует другой набор граничных и начальных условий

$$T(0, t) = 0, \quad T(l, t) = 1, \quad T(x, 0) = 0.$$

Уравнение теплопроводности (2) дает следующее решение

$$T(x, t) = \frac{x}{l} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2(-1)^n}{\pi n} \times \exp \left\{ -\frac{\pi^2 n^2}{l^2} \chi t \right\} \sin \left( \frac{\pi n}{l} x \right). \quad (4)$$

Легко увидеть, что в канале длиной  $l=5$  см линейный профиль температуры в среде с температуропроводностью  $\chi=0,7 \cdot 10^{-3}$  см<sup>2</sup>/с устанавливается за характерное время

$$\tau_{\chi} \sim l^2 / \pi^2 \chi \approx 1 \text{ ч.}$$

Это много меньше аналогичного диффузионного времени

$$\tau_D \sim l^2 / \pi^2 D \approx 150 \text{ сут.}$$

Далее в зависимости от условий подогрева одно из распределений температуры (3), (4) подставлялось в уравнение (1), которое вследствие нетривиальности граничных условий решалось численно методом конечных разностей. При дискретизации мгновенного поля температуры в ходе суммирования соответствующего ряда учитывалось до 1000 гармоник. Алгоритм для расчета поля концентрации был разработан в соответствии с явной схемой решения уравнений в частных производных [9, 10]. При аппроксимации производных по времени и производных по координатам использо-

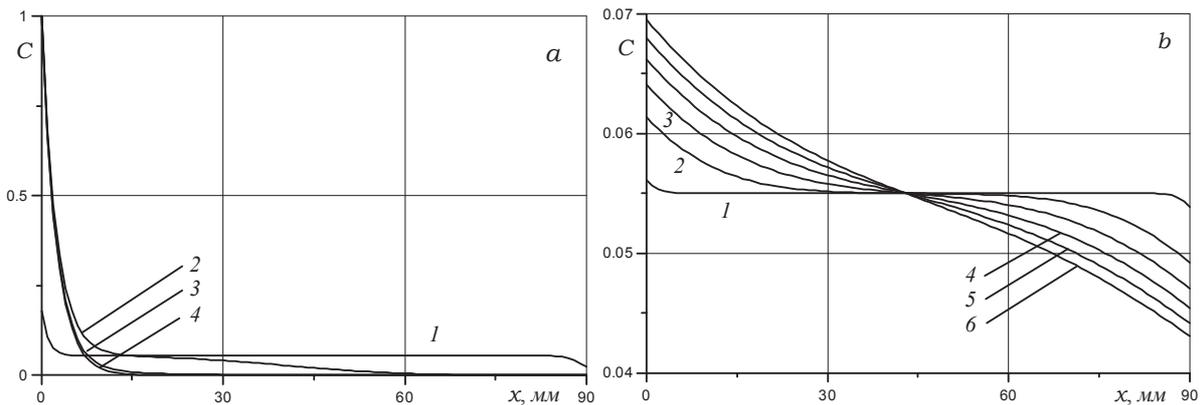
вались, соответственно, односторонние и центральные разности. Рабочее количество узлов вдоль канала варьировалось в интервале 91...101. Вычислительная процедура подразумевала использование различных граничных условий для концентрации частиц на разных этапах процесса седиментации. В начале процесса

$$J_n(0, t) = J_n(l, t) = 0, \quad C(x, 0) = C_0.$$

Для физически больших значений скорости седиментации при достижении концентрации на нижней границе максимального значения  $C=1$  вводился запрет на ее дальнейшее увеличение. В этом случае предполагалось, что за счет быстрого осаждения частиц на нижней границе устанавливалось насыщение, и в дальнейшем внизу использовалось условие  $C(0, t)=1$ . На верхней границе концентрация не может иметь отрицательные значения, поэтому, когда концентрация при  $x=l$  достигала нуля, во все последующие моменты времени накладывалось условие  $C(l, t)=0$ .

Результаты расчетов в предельном случае  $\alpha=0$  хорошо согласуются с данными эксперимента [7], в ходе которого изучался процесс расслоения магнитного коллоида в гравитационном поле в однородных по температуре условиях при малых скоростях оседания. Распределение концентрации по высоте пробирки измерялось индукционным датчиком. Сенсор представлял собой однослойную катушку из медного провода внутренним диаметром 4,6 и длиной 30 мм. Методика измерения распределения концентрации частиц вдоль канала основывалась на установлении связи между величиной индуктивности и динамической магнитной восприимчивостью образца на частоте  $\sim 500$  кГц. Далее по магнитной восприимчивости определялась концентрация частиц. Наблюдения за процессом расслоения проводились в течение  $1,7 \cdot 10^4$  часов. Отметим, что подобная конструкция датчика была использована в [11] при изучении агрегативной устойчивости ферроколлоида. В ходе сравнения с [7] расчеты проводились для следующего набора параметров:  $\chi=7,0 \cdot 10^{-4}$  см<sup>2</sup>/с,  $D=1,9 \cdot 10^{-7}$  см<sup>2</sup>/с,  $l=9$  см,  $C_0=0,055$ ,  $U=1,6 \cdot 10^{-8}$  см/с. Выбранное значение  $C_0$  отвечает 5,5 % массовой концентрации частиц в жидкостеносителе (рис. 1). Вычислялись мгновенные профили концентрации частиц вдоль канала и средние значения концентрации вблизи дна и верхней границы в зависимости от времени. Осреднение проводилось по  $1/5$  длины канала сверху и снизу и моделировало интегральное измерение концентрации индуктивным датчиком.

Профили концентрации, представленные на рис. 1, показывают, что именно вблизи дна и в верхней части канала изменения концентрации с течением времени наиболее существенны и могут быть зарегистрированы экспериментально. При относительно малых скоростях седиментации (рис. 2, а, кривые 3, 4) даже на временах порядка года концентрация частиц на нижней границе не достигает единицы и коллоид находится в состоя-

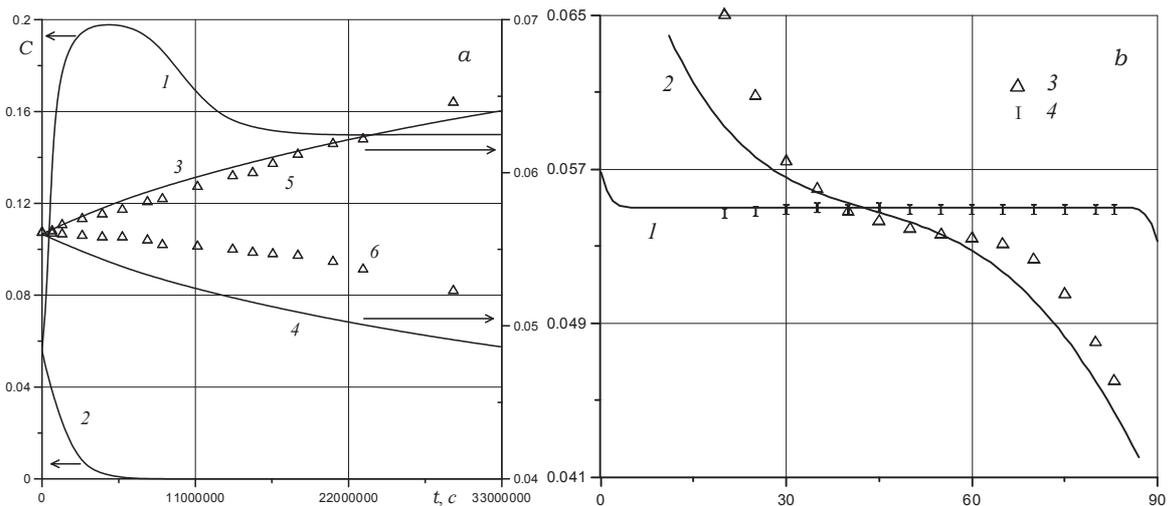


**Рис. 1.** Профили концентрации частиц вдоль канала в разные моменты времени при отсутствии термодиффузии при разных скоростях седиментации: а)  $U=7,6 \cdot 10^{-7}$  см/с, кривые 1-4 отвечают моментам времени  $t=40, 1800, 3700, 5500$  ч; б)  $U=1,6 \cdot 10^{-8}$  см/с, кривые 1-6 соответствуют  $t=40, 1800, 3656, 5500, 7300, 9100$  ч

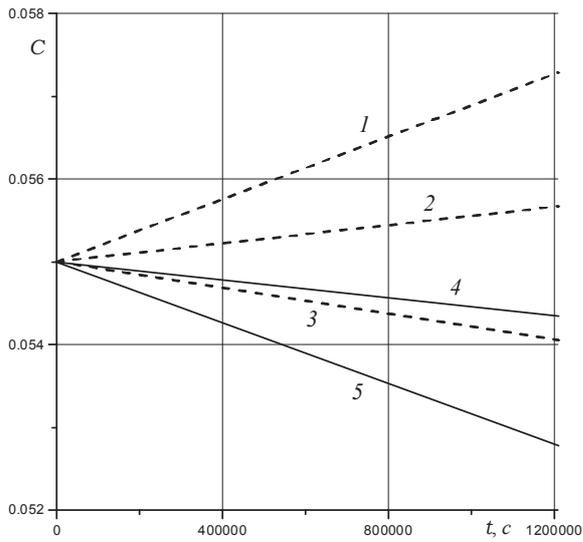
нии далеко от равновесия. Увеличение скорости осаждения приводит к появлению максимума на графике зависимости средней концентрации вблизи дна канала от времени (рис. 2, а, кривая 1). Этот результат является следствием осреднения концентрации по длине и относительно быстрого стремления суспензии к равновесному состоянию.

Рабочей феррожидкостью является суспензия с частицами, скорость осаждения которых равна  $U=1,6 \cdot 10^{-8}$  см/с, поэтому дальнейшие результаты расчетов будут представлены именно для этого значения параметра седиментации. При нагреве снизу положительная термодиффузия должна препятствовать седиментации, а отрицательная стремится ускорить процесс осаждения примеси на дно сосуда. В случае нагрева сверху термодиффузионный механизм перераспределения частиц работает противо-

положным образом. На измерении характеристик по разнице в оседании частиц при подогреве сверху и снизу может быть основана экспериментальная методика определения термодиффузионного коэффициента для частиц в феррожидкости. Влияние термодиффузии на процесс перераспределения феррочастиц становится заметным даже на относительно малых временах. На рис. 3 представлены зависимости средней концентрации частиц на торцах канала от времени. Вычисления проведены для модельного значения термодиффузионного параметра при разности температур 1 К и скорости  $U=1,6 \cdot 10^{-8}$  см/с. Кривые 1, 2 и 3 демонстрируют, что за время, равное приблизительно 14 суткам, на дне сосуда в зависимости от знака термодиффузии должна накапливаться разница в концентрации частиц, равная приблизительно 3 %.



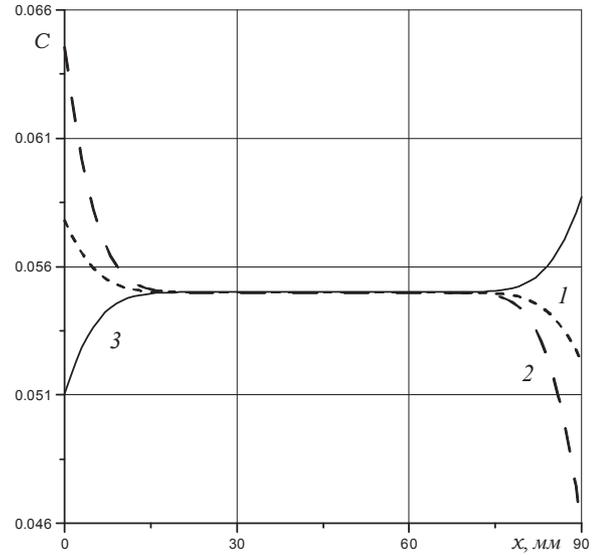
**Рис. 2.** Осредненное значение концентрации частиц на торцах канала в зависимости от времени при отсутствии термодиффузии при разных скоростях седиментации: а) 1, 2 –  $U=7,6 \cdot 10^{-7}$  см/с (шкала слева), 3, 4 –  $U=1,3 \cdot 10^{-8}$  см/с (шкала справа);  $C_0=0,056$ . Кривые 1, 3 – средняя концентрация вблизи дна; 2, 4 – концентрация вблизи верхнего торца канала. Символы 5, 6 – концентрация вблизи нижнего и верхнего торцов в опытах [7]; б) профили концентрации в разные моменты времени  $t$ : 1 – 40; 2 – 6700 ч; 3, 4 – экспериментальные данные



**Рис. 3.** Средняя концентрация частиц на торцах канала в зависимости от времени для разных значений термодиффузионного параметра: штриховые линии 1-3 соответствуют расчету вблизи дна при  $\alpha = -0,1, 0, 0,1 \text{ K}^{-1}$ , сплошные линии 4-6 отвечают концентрации вблизи верхней крышки сосуда при тех же значениях термодиффузионного параметра

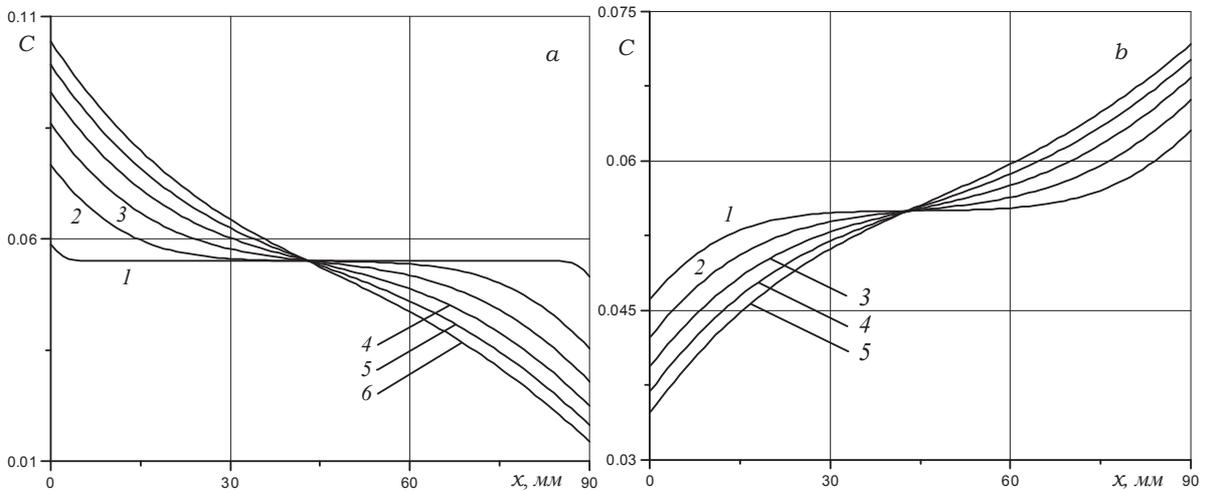
При отсутствии термодиффузии ( $\alpha=0$ ) средняя концентрация частиц у дна растет практически по линейному закону, что хорошо согласуется с точным решением [7], описывающим оседание частиц в безграничном сосуде. Практически в той же мере концентрация частиц на верхней границе канала уменьшается. Близкий к линейному закон изменения средней концентрации на обоих концах канала сохраняется при создании разности температур на теплообменниках для всех четырех возможных вариантов седиментационного поведения. Наличие четырех разных ситуаций обуславливается двумя вариантами подогрева снизу или сверху и разными возможными знаками термодиффузион-

ного коэффициента  $\alpha$  в уравнении (1) для концентрации.



**Рис. 4.** Распределение концентрации частиц в канале через  $t=14$  суток для разных знаков термодиффузии: 1, 2, 3 -  $\alpha=0; -0,1; 0,1 \text{ K}^{-1}$

Расчеты демонстрируют принципиально разное действие термодиффузии в смеси на любых временах. Сравним продольные распределения концентрации при положительной и отрицательной термодиффузии, анализируя рис. 5. Численное моделирование показывает, что действие термодиффузии на перераспределение частиц в жидкости-носителе становится сопоставимым с седиментацией уже при значениях термодиффузионного коэффициента  $\alpha \sim 0,1 \text{ K}^{-1}$  вне зависимости от знака этого параметра. Для перепада температуры всего  $0,11 \text{ K/cm}$  действие термодиффузии при указанных значениях термодиффузионного параметра не может остаться незамеченным в эксперименте.



**Рис. 5.** Распределение концентрации частиц вдоль канала в разные моменты времени. Кривые 1-6 соответствуют  $t=40; 1800; 3700; 5500; 7300; 9100$  ч для разных знаков термодиффузии: а)  $\alpha = -0,1 \text{ K}^{-1}$ ; б)  $\alpha = 0,1 \text{ K}^{-1}$

**Выводы**

Результаты расчетов показывают возможность экспериментального измерения термодиффузионного коэффициента для феррожидкости на основе керосина с размерами частиц порядка 10 нм. Разработанная методика позволяет распространить ее на другие коллоидные растворы

для частиц различных размеров с произвольной плавучестью.

*Работа поддержана грантом РФФИ «Колебательные конвективные процессы в нано- и микрожидкостях в микрофлюидических системах: анализ и контроль» в рамках регионального конкурса инициативных проектов «Урал-а». Код проекта 13-01-96010.*

**СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ**

1. Гершуни Г.З., Жуховицкий Е.М. Конвективная устойчивость несжимаемой жидкости. – М.: Наука, 1972. – 392 с.
2. Шлихтинг Г. Теория пограничного слоя. – М.: Наука, 1974. – 712 с.
3. Gershuni G.Z., Lyubimov D.V. Thermal vibrational convection. – NY: Wiley&Sons, 1998. – 358 p.
4. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Курс теоретической физики. Т. VI. Гидродинамика. – М.: Физматлит, 2001. – 736 с.
5. Розенцвейг Р. Феррогидродинамика. – М.: Мир, 1989. – 356 с.
6. Shliomis M.I., Smorodin B.L. Onset of convection in colloids stratified by gravity // Phys. Rev. E. – 2005. – V. 71. – P. 036312 (6).
7. Глухов А.Ф., Путин Г.Ф. Установление равновесного барометрического распределения частиц в магнитной жидкости // Сб.

- Гидродинамика. – Пермь: Изд-во Перм. ун-та, 1999. – Вып. 12. – С. 92–103.
8. Смородин Б.Л., Черепанов И.Н. Волновые режимы течения наножидкости в замкнутой полости // Вестн. Пермск. ун-та. Сер. Физика. – 2012. – Вып. 3 (21). – С. 1–5.
9. Самарский А.А. Теория разностных схем. – М.: Наука, 1989. – 616 с.
10. Тарунин Е.Л. Вычислительный эксперимент в задачах свободной конвекции. – Иркутск: Изд-во Иркут. ун-та, 1990. – 225 с.
11. Peterson E.A., Kruger D.A. Field induced agglomeration in magnetic colloids // J. Colloid and Interface Science. – 1977. – V. 62. – № 1. – P. 24–33.

Поступила 02.01.2013 г.

УДК 538.911, 539.32

## ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПОСОБ РАСЧЕТА УПРУГИХ МОДУЛЕЙ ОБРАЗЦОВ КОНЕЧНЫХ РАЗМЕРОВ С ГПУ-РЕШЕТКОЙ

И.Ю. Зубко, М.В. Симонов

Пермский национальный исследовательский политехнический университет  
E-mail: zoubko@pstu.ru

На основе разработанного ранее алгоритма теоретического исследования упругих свойств металлических микро- и нано-монокристаллов с кубическими решетками [1, 2] вычисляются упругие модули образцов конечных размеров с гексагональной плотноупакованной решеткой. Форма образца согласована с симметрией решетки [3]. В качестве потенциала выбирается степенной потенциал Ми. Для исследования упругих свойств используется подход атомарной статики. Задается вид деформационного градиента и определяется текущая конфигурация кристалла. Для расчета упругих модулей в текущей конфигурации кристалла вычисляется полная потенциальная энергия образца, отнесенная к его объему. Приравнивая квадратичные слагаемые в ее разложении в степенной ряд по параметрам деформирования упругому потенциалу, определяются упругие модули образца. Показано, что гексагональная плотноупакованная решетка, состоящая из двух простых подрешеток, не может при заданной аффинной кинематике деформироваться однородно. Для обеспечения минимума потенциальной энергии гексагонального плотноупакованного кристалла в текущей конфигурации необходимо задавать относительное смещение подрешеток, зависящее от параметров деформирования. Получено, что упругие модули гексагонального плотноупакованного кристалла зависят от размеров образца. Эта зависимость имеет горизонтальную асимптоту, соответствующую макроскопическому монокристаллическому телу с известными упругими свойствами, что позволяет провести идентификацию параметров потенциала взаимодействия атомов. Все вычисления в работе выполнены в символьном виде с помощью пакета Wolfram Research «Mathematica».

**Ключевые слова:**

ГПУ-решетка, микро- и нанокристаллы, вычисление упругих модулей, идентификация параметров потенциала взаимодействия атомов, зависимость механических свойств от размеров тела.

**Key words:**

HCP-lattice, micro- and nanocrystals, elastic module computation, identification of interatomic potential parameters, dependence of mechanical properties on specimen size.

**Аффинное деформирование ГПУ-монокристалла**

Для металлов наряду с гранецентрированной (ГЦК) и объемцентрированной кубической (ОЦК) кристаллической решеткой одним из наиболее

распространенных типов является гексагональная плотноупакованная (ГПУ) решетка [4]. Такое строение имеют титан, цинк, цирконий, бериллий, магний и ряд других металлов. Используя изобра-