

УДК 539.3

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДЕФОРМАЦИЙ И РАЗРУШЕНИЯ НА НАНОУРОВНЕ

© 2007 А.С. Кравчук, С.В. Карлышков¹

В работе дан краткий обзор публикаций по проблеме исследования усилий, перемещений и возможного разрушения систем, состоящих из конечного числа дискретных элементов (атомов и молекул), взаимодействующих друг с другом на расстоянии в соответствии с потенциалами дальнего действия. Оригинальные результаты представляют собой численные решения для одномерных систем-цепочек и потенциала Морса. Решения квазистатических задач получены по методу Ньютона, для решения динамических задач использован алгоритм Верле. На основании анализа полученных решений предложена гибридная модель, в которой нелинейные эффекты учитываются только вблизи границ, а в объеме материала используются уравнения механики континуума.

Введение

Термин "наномеханика" подразумевает, что при решении задач об определении напряженно-деформированного состояния деформируемых тел учитывается атомно-молекулярная структура материала. Учет структуры на наноуровне — на расстояниях порядка 10^{-9} – 10^{-7} м — подразумевает отказ от гипотезы о сплошности материала — переход к дискретной системе элементов, взаимодействующих друг с другом на расстоянии.

Актуальность задач наномеханики обусловлена в первую очередь развитием нанотехнологий в той их части, которая связана с конструированием исполнительных механизмов наномашин и наноманипуляторов, предназначенных для транспортировки (механического перемещения) отдельных атомов, молекул и их соединений. Кроме того, процессы, происходящие на наноуровне, в конечном итоге определяют то, что можно наблюдать на макроуровне — износ, пластическое деформирование, накопление повреждений и разрушение сплошных деформируемых тел. Выявление такого рода

¹Кравчук Александр Степанович (kravchuk_biocom@mail.ru), Карлышков Сергей Владимирович (karlyshkov@mail.ru), кафедра биомедицинских приборов и информационных технологий Московского государственного университета приборостроения и информатики, 107846, Россия, г. Москва, ул. Стромынка, 20.

связей составляет предмет активно развивающегося в настоящее время направления механики деформируемых сред — наномеханики.

Процесс проникновения вглубь структуры материала является многоуровневым (многомасштабным), хотя зачастую отнести ту или иную теорию (модель) к какому-то определенному выраженному в единицах расстояния масштабу затруднительно. Тем не менее такого рода классификации существуют и являются полезными для оценки областей применимости развитой теории. В качестве примера укажем на так называемое МММ — распределение уровней исследования и соответствующих моделей; аббревиатура "МММ" означает "multiscale materials modelling" и предложена в работе [1]. Данное распределение содержит шесть уровней:

- квантово-механический уровень,
- молекулярная динамика,
- метод статистического моделирования Монте-Карло,
- динамика дислокаций,
- статистическая механика,
- механика континуума.

Квантово-механический расчет опирается на решение уравнения Шредингера относительно волновой функции, зависящей от $3N$ координат конфигурационного пространства всех частиц в системе. Оценки, приведенные в работе [2], показывают, что для кластера из 100 атомов аргона для кулоновского взаимодействия конфигурационное пространство содержит 5700 измерений. Если для каждого измерения произвести разбиение на 100 сегментов, то интегрирование уравнения Шредингера потребует суммирования по 10^{11400} элементам объема. Следовательно, на уровне квантово-механических моделей анализ поведения системы можно провести только для нескольких частиц.

Если отвлечься от проблем, связанных со случайными отклонениями от регулярных структур, и не рассматривать квантовые эффекты, то останется три масштаба — наномасштаб, механика континуума и промежуточный масштаб, получивший название "мезомеханика" [3]. Основная идея построения моделей мезомеханики заключается в учете свойств среды на расстояниях порядка размера кристалла в поликристаллическом материале с применением макрообъектов — поверхностных сил и моментов различных порядков.

Прикладные задачи наномеханики можно разделить на две группы, в первой из которых рассматривается проблема расчета и конструирования нанобъектов, состоящих из относительно небольшого количества дискретных частиц — наноманипуляторов, наномоторов — большое количество примеров дано в монографии [2]. Работы второй группы нацелены на решение проблемы описания свойств макрообъектов (чаще всего речь идет о создании новых материалов) на основе закономерностей, управляющих процессами на нано- и микромасштабе.

В обзорной части статьи из работ первого направления отобраны те,

которые касаются задач контактного взаимодействия на наноуровне. Анализируются задачи, в которых два тела — два объема, заполненные атомами разных типов, сближаются, и требуется найти силы, действующие на каждый атом, и перемещения атомов относительно некоторого начального состояния.

Вторая группа относится к проблеме построения моделей нанокompозитов. Нанокompозиты — это материалы, состоящие из матрицы, обеспечивающей передачу усилий от элемента к элементу, и арматуры, в качестве которой выступают как углеродные каркасные структуры — нанострубки, фуллерены, так и всевозможные нанопорошки. Высокая прочность и жесткость нанокompозитов объясняется как повышенными физико-механическими характеристиками арматуры, так и высокой удельной (по отношению к объему) поверхностью арматуры. Попытка теоретического объяснения этих эффектов приводит к задачам, математическое содержание которых близко к содержанию контактных задач в приближении молекулярной квазистатики или динамики. Новизна результатов применительно к нанокompозитам состоит в использовании продолжений дискретных характеристик дискретной регулярной структуры до непрерывных полей, что позволяет связать наблюдаемые в опытах макрохарактеристики нанокompозита с характеристиками наноразмерных компонентов.

Промежуточные модели представляют собой объединение моделей молекулярной динамики и моделей сплошной среды. Целесообразность такого подхода мотивируется тем, что в глубинных слоях материала, достаточно удаленных от граничных поверхностей, взаимные смещения атомов малы и, если не рассматривать процессы накопления повреждений, зарождения и движения дислокаций и разрушения, то можно ограничиться применением модели сплошной среды. В то же время для выяснения тонких деталей контактного взаимодействия на наноуровне, например, при анализе эффекта нанесения сверхтонких покрытий, необходимо учитывать дискретную структуру материала вблизи границы тела.

1. Контактные задачи на наноуровне

Рассмотрим задачу о контакте двух устойчивых конфигураций атомов, схематически представленную в двумерном варианте на рис. 1.

На рисунке показаны кристаллические структуры, контактировать могут также фуллерены или другие устойчивые образования. Атомы первого тела, условно называемого "индентором", показаны более темным цветом и в тексте помечаются индексом "1", атомы второго из контактирующих тел (светлые кружочки) помечаются индексом "2". Для постановки задачи необходимо задать потенциалы взаимодействия Π_1 , Π_2 , Π_{12} . Потенциал Π_1 определяет силы взаимодействия между атомами тела "1", Π_2 определяет силы взаимодействия между атомами тела "2", а потенциал Π_{12} — взаимо-

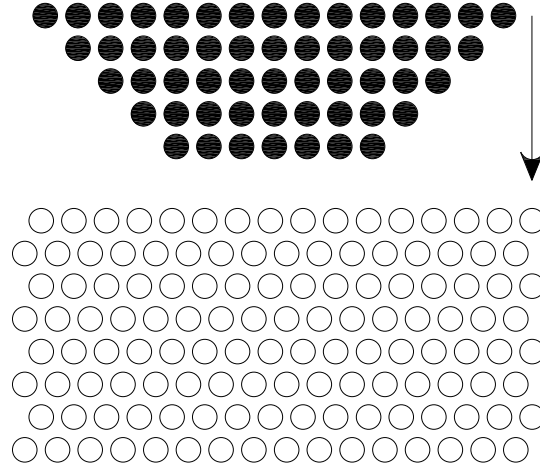


Рис. 1. Расчетная схема

действие между атомами первого и второго тел. Следовательно, каждое из уравнений Ньютона для атомов и первого и второго тел будет содержать две группы слагаемых, первая из которых определяет действующие на данный атом силы $\vec{F}_{\alpha\gamma}$ со стороны таких же атомов, вторая — силы $\vec{F}_{\alpha\beta}$ со стороны атомов другой группы:

$$m_{\alpha} \frac{d^2 \vec{u}_{\alpha}}{dt^2} = \sum_{\gamma=1, \gamma \neq \alpha}^{N_{\alpha}} \vec{F}_{\alpha\gamma} + \sum_{\beta=1}^{N_{(3-\alpha)}} \vec{F}_{\alpha\beta}, \quad \alpha = 1, 2. \quad (1.1)$$

В системе (1.1) величины m_{α} — массы частиц, $\vec{u}_{\alpha}$ — их перемещения, t — время; силы $\vec{F}_{\alpha\gamma}$ равны производным (градиентам) от потенциалов Π_1 , Π_2 , силы $\vec{F}_{\alpha\beta}$ равны производным от потенциала Π_{12} , $\Pi_{12} = \Pi_{21}$.

Отдельную группу уравнений составляют уравнения для частиц, лежащих на границе. Теоретически эти частицы (атомы, молекулы) можно закрепить, задав их положения и скорости, но это противоречит принципу неопределенности Гейзенберга. Тем не менее такой способ используется в большинстве работ по наномеханике: задаются начальные положения и скорости, после чего все параметры рассчитываются из решения соответствующей задачи Коши. Проблемы возникают при попытке задать перемещения части граничных частиц как функции времени или же задать усилия, действующие извне на граничные частицы (сформулировать аналог задания граничных усилий в механике континуума) — передача этих сил может осуществляться только через атомы некоторого третьего тела. Поскольку анализ работы наномеханизмов невозможен без передачи к ним или от них некоторых заданных перемещений или усилий, то применение такого рода граничных условий является приближением, используемым в большинстве работ и в настоящей статье.

Наибольшее количество опубликованных решений относится к двум потенциалам — потенциалу Леннарда–Джонса:

$$\Pi_{LJ}(r_{ij}) = 4e \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right], \quad (1.2)$$

где e , σ — постоянные, зависящие от материала, r_{ij} — расстояние между атомами с номерами i и j , и потенциалу Морса:

$$\Pi_M(r_{ij}) = D \left[\exp(\alpha r_{ij}) - \exp(-2\alpha r_{ij}) \right], \quad (1.3)$$

D и α — постоянные материала.

Примеры решений двумерных и трехмерных контактных задач в приведенной постановке представлены в работе [4]. Заданы краевые условия закрепления на нижней и боковых границах тела "2", введен также промежуточный слой атомов для отвода теплоты. Индентор приводится в движение путем задания перемещений верхнего слоя атомов или всех атомов (в последнем случае индентор является абсолютно жестким). Расчеты, соответствующие двумерной задаче с параметрами потенциалов для меди, показали, что проникание абсолютно жесткого индентора на расстояние порядка 6 атомных диаметров не вызывает необратимых деформаций, для больших расстояний процесс сопровождается появлением необратимых сдвигов, интерпретируемых как дислокации, развитие и движение дислокаций — как пластичность. Аналогичные результаты получены и для трехмерного случая. Отмечено, что небольшое количество атомов выдавливается вне начальной поверхности деформируемого тела. Решена также задача о срезании слоя с поверхности путем движения инструмента параллельно поверхности. Установлено, что медь срезается, почти не теряя своей кристаллической структуры, в то время как стружка кремния является полностью разупорядоченной. Изучены также процесс зарождения трещины в кварцевом стекле и процесс ее распространения путем задания некоторой начальной конфигурации трещины (надреза) и движения ее берегов. Стекло рассмотрено как гетерогенная структура с учетом характера связей между атомами компонентов. Отметим, что данная работа представляет собой пример применения метода молекулярной динамики в чистом его виде.

Значительное число работ посвящено исследованию процессов контактного взаимодействия, трения и износа с позиций физической химии — путем рассмотрения атомно–молекулярных структур и характера химических связей между атомами. Обзор полученных здесь результатов дан в [5, 6]. Интерес представляет статья [7] из справочника по трибологии [6], в которой, как и в [2], проведен анализ некоторых принципиальных затруднений, возникающих при численной реализации метода молекулярной динамики. Во-первых, отмечено, что жесткость межмолекулярных связей очень велика, что влечет за собой наличие колебательных процессов с очень высокими частотами. Средняя кинетическая энергия высокочастотных колебаний и есть температура. Следовательно, моделирование температуры на нано-

уровне при реализации шаговых процедур интегрирования уравнений молекулярной динамики требует использования малых шагов по времени — порядка 0,02 периода колебаний. 10^6 таких шагов соответствуют всего 10 наносекундам, что намного меньше, нежели типичные времена проведения экспериментальных измерений. Во-вторых, подвод энергии извне путем задания перемещений наноструктур или приложения к ним усилий приводит к преобразованию этой энергии в энергию высокочастотных колебаний. Возникает проблема "отвода" тепловой энергии, о которой упоминалось выше и которая решается путем помещения исследуемой наносистемы в "термостат"; фактически численно производится коррекция энергии высокочастотных колебаний. Отмечено, что проблема поддержания заданного уровня температуры решается путем введения искусственной вязкости, что приводит к появлению демпфирующей силы в уравнениях движения (1.1). Если рассмотреть атомы только одного типа и ввести дополнительно силы $\tilde{f}_\alpha(t)$, имеющие случайный характер и моделирующие термостат, то уравнение движения будет иметь вид:

$$m_\alpha \frac{d^2 \vec{u}_\alpha}{dt^2} = \sum_{\gamma=1, \gamma \neq \alpha}^{N_\alpha} \vec{F}_{\alpha\gamma} - m_\alpha \Gamma \frac{d\vec{u}_\alpha}{dt} + \tilde{f}_\alpha(t), \quad (1.4)$$

где Γ — коэффициент демпфирования для отдельного атома. Уравнение (1.4) известно как уравнение Ланжевена. При таком подходе возникает проблема подбора величины коэффициента демпфирования [7].

Как и макроскопической теории контакта твердых деформируемых тел, моделирование трения и износа на наноуровне требует рассмотрения структуры поверхностей контактирующих тел. Впервые количественные и качественные результаты в данном направлении были получены Томлинсоном [8]. Модель Томлинсона была обобщена Френкелем и Конторовой [9] на случай учета взаимодействия соседних атомов. Как в той, так и в другой модели межатомные силы дальнего действия заменялись упругими пружинами, что позволило провести асимптотический анализ (по жесткости пружин), выявить влияние совместимости периодов кристаллических решеток контактирующих тел, найти силу трения и дать описание скачкообразного перемещения атомов при сдвиге. Отметим, что модели [8, 9] до сих пор привлекают внимание [10, 11], поскольку позволяют моделировать некоторые важные свойства сухого трения на микро- и наноуровне, имеющие место в чувствительных элементах атомно-силового микроскопа.

Уравнение движения отдельного атома в модели Томлинсона имеет вид:

$$m_\alpha \frac{d^2 u_\alpha}{dt^2} = -f_1 \sin\left(\frac{2\pi u_\alpha}{a}\right) - \Gamma \frac{du_\alpha}{dt} - k(u_\alpha - u_\alpha^0), \quad (1.5)$$

где, как и ранее, Γ — коэффициент демпфирования, u — перемещение вдоль цепочки атомов (в одномерном приближении), первое слагаемое справа представляет силу воздействия на атом со стороны основания (для осно-

вания из многих атомов силы воздействия необходимо суммировать), a — период цепочки (решетки), k — жесткость эквивалентной пружины, множитель при k — удлинение пружины. Видно, что уравнение (1.5) с точностью до обозначений совпадает с уравнением Ланжевена. Пренебрегая в этом уравнении ускорением, можно провести статический (квазистатический) анализ возможных состояний равновесия при сдвиге [7].

Динамическое уравнение Томлинсона в двумерном варианте было с успехом применено для анализа работы чувствительного элемента атомно-силового микроскопа (АСМ) [12–14]. Переход к двумерной модели позволил изучить такой важнейший эффект как зависимость силы сопротивления движению (т.е. силы трения) от направления движения.

Большое количество работ посвящено исследованию закономерностей трения тел с покрытиями. Покрытия могут образовывать кристаллические структуры, меняющиеся в зависимости от условий их нагружения. Здесь возникает задача о взаимодействии внедренных в поверхность атомов с атомами основного тела, как, например, в случае соединения электродов с элементами микроэлектронной техники (резонаторами из кварцевого стекла, сенсорами и т.п.). Для решения данной задачи полезной оказалась модель Френкеля–Конторовой, обобщенная на случай учета демпфирования и зависимости силы сопротивления движению от направления движения [15, 16] и др. Ряд работ [15, 17–20] посвящен вычислению коэффициентов, входящих в обобщенные уравнения Томлинсона и Френкеля–Конторовой и используемых для изучения трения тел с покрытиями.

Интерес для механики контактного взаимодействия представляют работы [21–23], в которых изучено влияние упорядоченности поверхностных слоев атомов и совместности контактирующих слоев на закономерности трения, а также работы [24, 25], в которых исследуется влияние предварительной химической обработки поверхностей контактирующих тел.

Особый интерес для трибологии представляют работы [26, 27], в которых изучено контактное взаимодействие одиночного выступа (неровности) с плоской подложкой — упакованных в плоскостях слоев атомов. Для медной подложки наблюдается чередование проскальзывания и сцепления выступа с подложкой. Отслоение атомов от вершины выступа трактуется как пластическое деформирование и износ. В работе [26] изучен также эффект несовместности контактирующих слоев атомов.

Вертикальное (без сдвига) перемещение выступа соответствует наноиндентированию. Обзор моделей наноиндентирования выполнен в работе [24]. Установлено, что пластические деформации возникают обычно в более мягком материале, причем зависимость нормальной силы от расстояния между контактирующими телами из свинца, серебра и никеля силы не является монотонной [28]. Аналогичные исследования для алмазного индентора выполнены в работах [29, 30].

Явление немонотонной зависимости силы от перемещения на макроуровне наблюдается в форме скачкообразного движения гибких контакти-

рующих элементов, в свою очередь сопровождаемых звуками ("дребезгом", звуками смычковых музыкальных инструментов и т.п.). Соответствующие макромодели были предложены в работах [31, 32]. Физический механизм явления заключается в том, что на этапе сцепления упругая энергия накапливается, а после достижения некоторой критической величины – высвобождается путем скачкообразного увеличения перемещений и уменьшения приложенной силы, что в простейшем случае можно понять на модели Томлинсона. Этот эффект изучался на наноуровне применительно к поведению чувствительного элемента АСМ в работе [33]. Микросдвиги на этапе сцепления могут приводить к хаотическим переходам от сцепления к скольжению и обратно [34].

Пластическое течение вблизи некоторой поверхности проскальзывания было изучено в работах [35]. Исследовались атомы меди в прямоугольнике 256×256 атомов (двумерная задача) под давлением. Движение атомов сквозь нижнюю и верхнюю стенки было запрещено, измерялась соответствующая сила трения. Оказалось, что при малых скоростях (менее 10% скорости поперечных волн) граница раздела слоев соединялась (сплавлялась) и система вела себя как единое целое пластически упрочняющееся тело. Проскальзывание имело место на одной из искусственных границ. При высоких скоростях трение было меньше, постепенно уменьшаясь с ростом скорости. Интенсивная пластическая деформация имела место вблизи границы раздела слоев. При не слишком больших временах межслойная структура удовлетворительно моделировалась моделью Френкеля–Конторовой, с ростом времени образовывалась мелкая поликристаллическая структура, которая с ростом времени становилась все более крупной.

Заметим, что, если в законах дальнего действия перейти в нелинейную область — пройти — на кривой зависимости силы от взаимного расстояния между атомами — максимум силы и перейти на ниспадающую ветвь кривой, то можно, используя методы молекулярной квазистатики, описать процессы разрушения и тем самым дать обоснование макроскопическим теориям разрушения. Работ в данном направлении немного, поскольку задача исследования критических точек и закритического поведения (разрушения) сводится к нахождению собственных значений и собственных векторов матриц высокой размерности, меняющихся от шага к шагу нагружения.

2. Построение численных решений

Задачи наномеханики будем формулировать и решать либо как задачи динамики, основанные на уравнениях движения Ньютона, либо как квазистатические задачи, приводимые к системам нелинейных алгебраических уравнений.

Основным преимуществом метода молекулярной динамики является то, что он позволяет избежать применения сложных итерационных процессов

путем использования явных шаговых схем интегрирования по времени [2]. Кроме того, этот метод позволяет ввести в модель температуру, определяемую как среднюю кинетическую энергию случайных движений частиц. Однако характерные времена изменения определяемой таким способом температуры — это несколько пикосекунд. Следовательно (об этом говорилось выше), корректный расчет неізотермических процессов в молекулярной динамике требует огромного числа шагов по времени, при этом возникает проблема сохранения точности расчетов. Кроме того, даже при постоянной температуре период колебаний атомов и молекул обычных конструкционных материалов настолько мал, что порядок времен решения реальных задач оказывается примерно таким же, что и при решении неізотермических задач [2]. Отмеченные недостатки метода молекулярной динамики преодолеваются путем использования многопроцессорных компьютерных систем и методов параллельных вычислений.

Квазистатистические задачи. Рассмотрим одномерную модель нанопокрытия, представляющую собой две последовательно соединенные цепочки атомов (рис. 2).

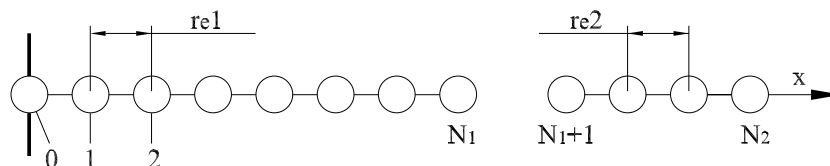


Рис. 2. Одномерная цепочка

Используем для вычислений потенциал Морса (2.3). Занумеруем атомы первой цепочки целыми числами $0, 1, 2, \dots, N_1$, второй — целыми числами $N_1 + 1, \dots, N_1 + N_2$. Обозначим через x координаты начального положения атомов, через u — их перемещения вдоль общей оси Ox .

Используя потенциал Морса (1.3), вычислим силы действующие на любой атом цепочки со стороны всех остальных атомов. Пренебрегая силами инерции, из уравнений (2.1) получим нелинейные алгебраические уравнения для перемещений. Будем предполагать, что атом с номером "0" первой цепочки закреплён, а атом с номером $N_1 + N_2$ второй цепочки перемещается из положения в положение с некоторым шагом. Заметим, что, в принципе, можно задать силу, действующую на атом $N_1 + N_2$ второй цепочки. В этом случае надо использовать особые методы прохождения точки, в которой рост силы с ростом перемещений сменяется падением силы при дальнейшем росте перемещений. Аналогичная проблема возникает при задании перемещений атома с номером $N_1 + N_2$ и применении метода Ньютона для решения системы разрешающих нелинейных уравнений, поскольку в методе Ньютона необходимо обращать матрицу производных, определитель которой в особых точках обращается в нуль.

Задача ставится таким образом: зная текущее значение перемещения атома $N_1 + N_2$, найти перемещения всех остальных атомов цепочки. Для ре-

шения используем метод последовательных приближений Ньютона в классической его формулировке. Рассмотрим сначала однородную цепочку, составленную из атомов меди, для которой $D = 54.94$, $\alpha = 1.3588$, $r_e = 2.866$; система единиц измерений выбрана так, как это предложено в [2]. Вычисления были проведены для 50 атомов в цепочке. Число шагов нагружения равно варьировалось от 100 до 800, количество итераций было фиксировано и равно 200, что приводило к погрешности приближенного решения, вычисляемого как евклидова норма разности двух последовательных приближений порядка 10^{-11} – 10^{-15} .

На рис.3 показана зависимость силы на конце цепочки от задаваемого перемещения атома справа, полученная для 800 шагов по перемещениям, меняющимся от $U_{\min} = -1.154$ до $U_{\max} = 25$.

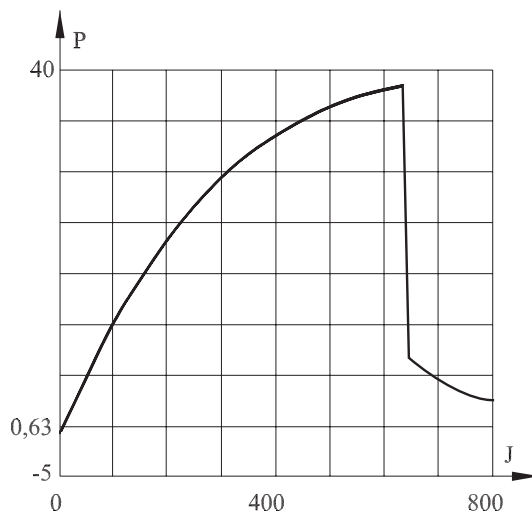


Рис. 3. Зависимость силы от перемещений

Значение $-1,154$ соответствует равновесному состоянию цепочки, когда сила P , действующая на цепочку справа, равна нулю; номер шага обозначен J . Особая точка соответствует шагу номер 641, когда заданное перемещение равно 19.773 и соответствует максимальной силе $P_{\max} = 36,992$. Отметим, что если при решении задачи и вычислении максимума растягивающей силы не предпринимать специальных мер, то итерационный процесс может или разойтись, или же привести к неверным значениям для силы. В рассматриваемом варианте сила в особой точке в случае, когда не предпринималось никаких мер, предупреждающих расходимость, имела порядок 10^{38} (все время используется специальная система единиц измерения, предложенная в [2]). Поскольку в качестве нулевого приближения на очередном шаге выбираются решения на предыдущем шаге, то эффект сильного роста усилий взаимодействия между атомами (в пределе — до переполнения) приводит к отрыву 1-го атома от левого края. Если же при прохождении особой точки применить подходящую интерполяцию вперед

(приводимые ниже результаты соответствуют линейной интерполяции), то симметрия сохранится и после прохождения особой точки — разрыв связи произойдет в двух точках.

Приведем некоторые результаты решения задачи в динамической постановке. Во-первых, как и в квазистатике, место разрыва цепочки зависит от начального состояния, в данном случае — от начальных условий. Возможных ситуаций здесь намного больше, чем в квазистатике, поскольку концентрация напряжений зависит от взаимодействия волн напряжений. Во-вторых, при введении вязкости процесс постепенно стабилизируется, стремясь к квазистатическому решению. Этот процесс был изучен для однородной цепочки из атомов меди для двух случаев — постепенного увеличения перемещений к крайнему атому справа и при постепенном увеличении приложенных к данному атому усилий.

Установившееся распределение сил, действующих на атомы справа (именно эти силы определяют момент разрушения) для случая заданных перемещений, показано на рис. 4. Оно такое же, как и в квазистатике при равных значениях перемещений атома справа. Распределение перемещений в установившемся состоянии показано на рис. 5.

Распределение усилий для второго варианта граничного условия справа в установившемся состоянии показано на рис. 6, перемещений — на рис. 7. Анализируя кривые на рис. 4–7, можно сделать вывод о том, что влияние краевых условий сказывается только вблизи границ цепочки. Внутри области, занятой атомами, распределение перемещений линейное, усилия практически постоянны. Этот результат позволяет сделать вывод о том, что внутри области можно применять уравнения линейной теории упругости, и только вблизи границ (и точек разрыва) необходимо применять уравнения молекулярной квазистатики или динамики. Если речь идет об анализе поведения систем, содержащих сотни тысяч или миллионы атомов, то предлагаемый подход позволяет резко сократить объемы вычислений, не прибегая при этом к суперкомпьютерам.

Отметим также, что в свободной цепочке силы, действующие на атомы справа внутри области (вдали от границ), не равны нулю. Это объясняется тем, что константы потенциала Морса определяются для бесконечной цепочки, в то время как конечная свободная цепочка сжимается (по сравнению с соответствующей цепочкой такой же длины в бесконечной цепочке) из-за влияния сил дальнего действия. Это, в частности, служит причиной увеличения наблюдаемого модуля Юнга композита, армируемые элементы в котором являются наночастицами, фуллеренами, нанотрубками.

Заключение

Таким образом, показано, какое большое внимание уделяется в настоящее время исследованию и моделированию процессов, происходящих

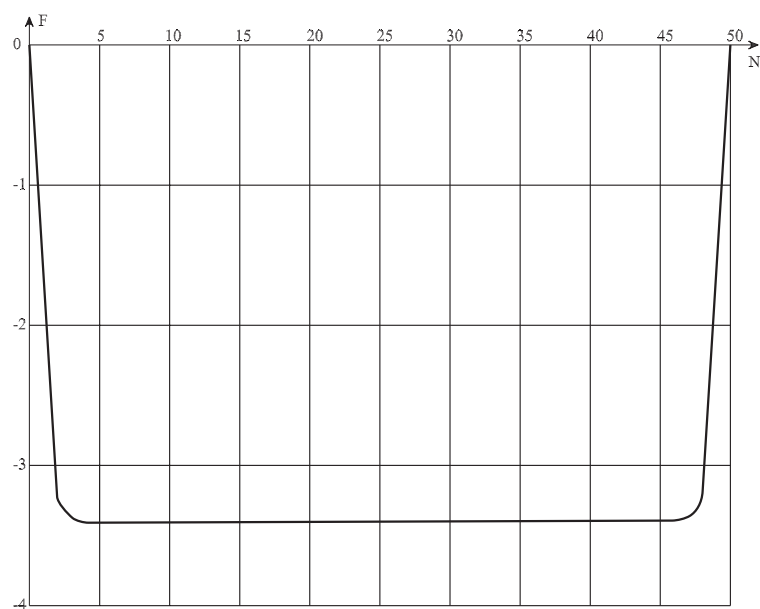


Рис. 4. Распределение сил при заданных справа перемещениях

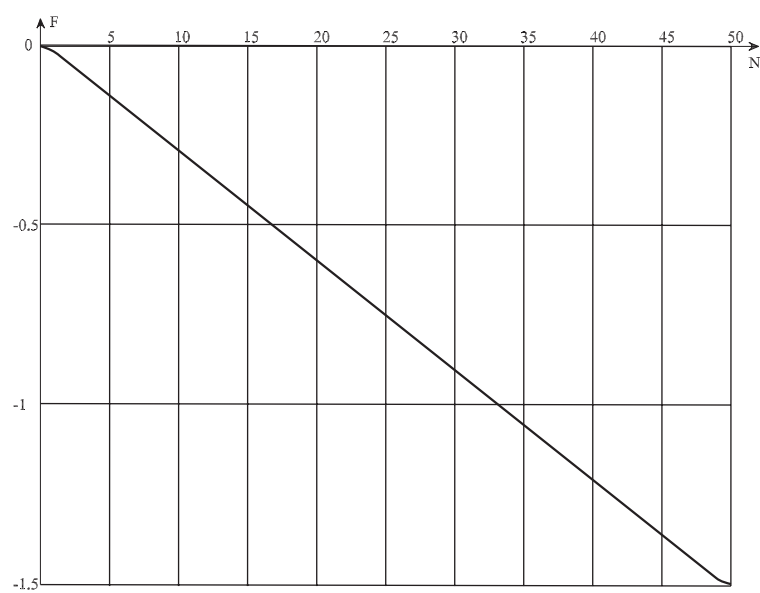


Рис. 5. Распределение перемещений

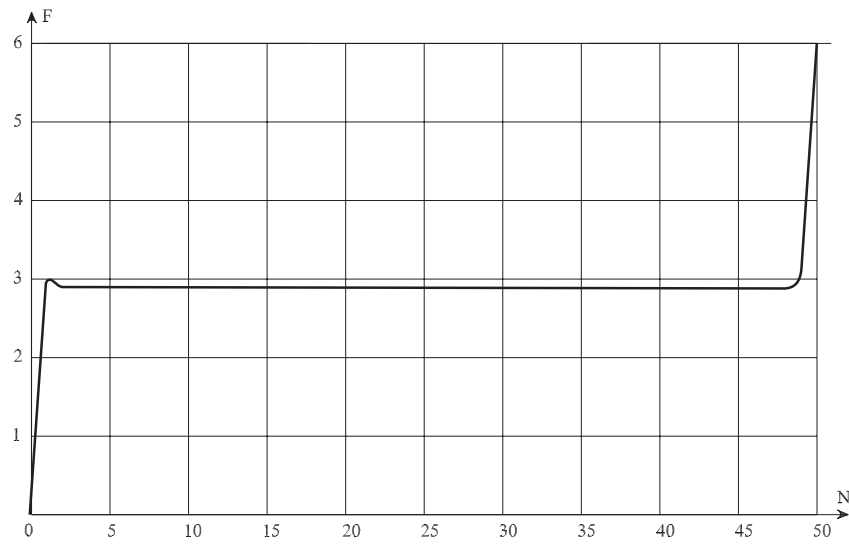


Рис. 6. Распределение сил в цепочке при заданной справа растягивающей силе

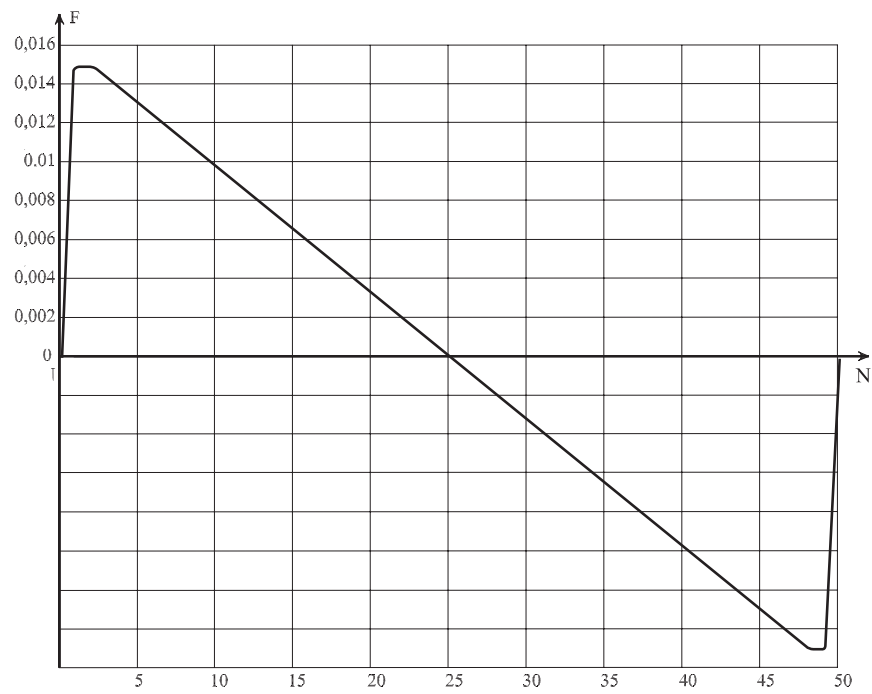


Рис. 7. Распределение перемещений

на поверхности соприкосновения деформируемых материалов с учетом их атомно-молекулярной структуры. Из анализа численных решений сделан вывод о том, что нелинейность и неоднозначность зависимости усилий взаимодействия от взаимных перемещений частиц приводят к разнообразным механическим эффектам, на основании которых можно дать обоснование наблюдаемым в макроопытах закономерностям различных процессов. Работа выполнена при частичной финансовой поддержке грантов РФФИ №05-01-00591, 07-08-00269 и научной школы №НШ-1245.2006.1.

Литература

- [1] Multiscale modelling of nanomechanics and micromechanics: an over-view / N.M. Ghoniem [et al.] // *Phil. Magazine*. – 2003. – Vol. 83. – No. 31-34. – P. 3475–3528.
- [2] Рит М. Наноконструирование в науке и технике. Введение в мир нанорасчета / М.Рит. – М.; Ижевск: RCD, 2005. – 159 с.
- [3] Панин, В.Е. Физическая мезомеханика и компьютерное конструирование материалов / В.Е.Панин. – Новосибирск: Наука, СО РАН, 1995. – Т. 1. – 297 с.; Т. 2. – 317 с.
- [4] Belak, J. Nanotribology / J.Belak // *ETR*. – 1994. – September. – P. 13–24.
- [5] Handbook of Micro/Nanotribology (B.Bhushan, ed.). – CRC Press, 1999.
- [6] Handbook of Modern Tribology (B.Bhushan, ed.). CRC Press. 2001.
- [7] Robbins, M.O. Computer simulations of Friction, Lubrication and Wear / M.O.Robbins, H.Muser // *Handbook of Modern Tribology* (B.Bhushan, ed.). – CRC Press, 2001.
- [8] Tomlinson, G.A. A molecular theory of friction / G.A.Tomlinson // *Phil. Mag. Series*. – 1929. – V. 7. – P. 935–939.
- [9] Конторова, Т. О теории пластических деформаций и двойникования / Т.Конторова, Ю.И.Френкель // *ЖЭТФ*. – 1938. – Т. 8. – С. 1340.
- [10] Weiss, M. Dry Friction in the Frenkel-Kontorova-Tomlinson Model: Static Properties / M.Weiss, F.J.Elmer // *Phys. Rev.* – 1996. – B53. – P. 7539–7549.
- [11] Kawaguchi, T. Anomalous Pinning Behavior in an Incommensurate Two-Chain Model of Friction / T.Kawaguchi, H.Matsukawa // *Phys. Rev.* – 1998. – B58. – P. 15866–15877.
- [12] Gyalog, T. Mechanism of Atomic Friction / T.Gyalog // *Europhys. Lett.* – 1995. – V. 31. – P. 269–274.
- [13] Simulation of the scan process in friction force microscopy / H.Holscher [et al.] // *Material Research Society Symposia Proceeding*. – (B.Bhushan, ed.) Kluwer; Dordrecht, 1997. – P. 379–384.

- [14] Rajasekaran, E. Frictional anisotropy and the role of lattice relaxation in molecular tribology of cristalline interfaces / E. Rajasekaran // Material Research Society Symposia Proceeding. (B. Bhushan, ed.). – Kluwer; Dordrecht, 1997.
- [15] Smith, E.D. The Friction of absorbed monolayers / E.D. Smith, M. Cieplak, M.O. Robbins // Phys. Rev. – 1996. – B54. – P. 8252–8260.
- [16] Persson, B.N.J. Sliding Friction: Physical Principles and Applications / B.N.J. Persson. – Berlin: Springer-Verlag, 1998.
- [17] Persson, B.N.J. Linear sliding friction: On the origin of the microscopic friction for Xe on silver / B.N.J. Persson, A. Nitzan // Surf. Sci. – 1996. – 367. – P. 261–275.
- [18] Persson, B.N.J. Theory of friction and boundary lubrication / B.N.J. Persson // Phys. Rev. – 1993. – B48. – P. 18140–158.
- [19] Cieplak, M. Molecular Origin of Friction: The Force of an Adsorbed Layers / M. Cieplak, E.D. Smith, M.O. Robbins // Science. – 1994. – V. 265. – P. 1209–1212
- [20] Krim, J. Nanotribology of a Kr Monolayer: A Quartz–Crystal Microbalance Study of Atomic-Scale Friction / J. Krim, D.H. Solina, R. Chiarello // Phys. Rev. Lett. – 1991. – 66. – P. 181–184.
- [21] Hirano, M. Atomistic Locking and Friction / M. Hirano, K. Shinjo // Phys. Rev. – 1990. – B41. – P. 11837–11851.
- [22] Shinjo K. Dynamics of Friction: Superlubric State / M. Hirano, K. Shinjo // Surface Sci. – 1993. – 283. – P. 473–478.
- [23] Hirano, M. Observation of superlubricity by scanning tunneling microscopy / M. Hirano // Phys. Rev. Lett. – 1997. – 78. – P. 1448–1451.
- [24] Harrison, J.A. Atomic Scale Simulation of Tribological and Related Phenomena / J.A. Harrison, S.J. Stuart, D.W. Brenner // Handbook of Micro/Nanotribology (Bhushan B., ed.). – CRC Press, 1999. – P. 525–594.
- [25] McClelland, G.M. Friction at the Atomic Scale / G.M. McClelland, J.N. Glosli // Fundamentals of Friction: Macroscopic and Microscopic Processes. (I.L. Singer and H.M. Pollock, eds). – Kluwer; Dordrecht, 1992. – P. 405–422.
- [26] Sorensen, M.R. Simulation of Atomic Scale Sliding friction / M.R. Sorensen, K.W. Jakobsen, P. Stoltze // Phys. Rev. – 1996. – B53. – P. 2101–2113.
- [27] Stevens, M.J. Simulation of shear-induced melting and ordering / M.J. Stevens, M.O. Robbins // Phys. Rev. – 1993. – E48. – P. 3778–3792.
- [28] Landman, U. Atomistic mechanisms of adhesive contact formation and interfacial processes / U. Landman // Wear. – 1992. – 153. – P. 3–30.
- [29] Harrison, J.A. Nanoscale Investigation of Indentation Adhesion and Fracture of Diamond od (111) Surfaces / J.A. Harrison // Surf. Sci. – 1992. – P. 57–67.

- [30] Harrison, J.A. Molecular-Dinamic Simulations of Atomic-Scale Friction of Diamond Sur-faces / J.A.Harrison // Phys. Rev. – 1992. – B46. – P. 9700–9708.
- [31] Rabinowicz, E. Friction and Wear of Materials / E.Rabinowicz. – Wiley. – New York. – 1965.
- [32] Bowden, F.P. The Friction and Lubrication of Solids / F.P.Bowden, D.Tabor. – Clarendon Press. – London. – 1986.
- [33] Carpick R.W. Scratching the Surface: Fundamental Investigations of Tribology with Atomic Force Microscopy / R.W.Carpick, M.Salmeron // Chem. Rev. – 97. – P. 1163–1194.
- [34] Creep, stick-slip, and dry friction dynamics: Experiments and a heuristic model / F.Heslot // Phys. Rev. – 1994. – E49. – P. 4973–4988.
- [35] Rigney, D.A. Unlubricated Sliding of Metals / D.A.Rigney, J.E.Hammerberg // MRS Bull. – 1998. – 23(6). – P. 32–36.

Поступила в редакцию 15/V/2007;
в окончательном варианте — 15/V/2007.

NUMERICAL MODELLING OF THE DEFORMATION AND DESTRUCTION PROCESSES AT THE NANO-SCALE

© 2003 A.S.Kravchuk, A.S.Karlyshkov²

In the paper a brief review of the works on the problem of studying the displacements, forces and breakdown of systems composed from the finite number of particles (atoms and molecules) interacting on the long distance is given. New results consist of the numerical solutions of one-dimensional systems – chains with Morse’s potential. A quasi-static problems are solved by the traditional Newton’s method. The Verle’s method is used for solution of some dynamic problem. An analysis of the numerical solutions which permits to propose a hybrid model is given. This model takes into account the non-linear phenomena near the boundaries and failure surfaces, and the continuum equations are used inside the domain.

Paper received 15/V/2007.

Paper accepted 15/V/2007.

²Kravchuk Alexander Stepanovich (kravchuk_biocom@mail.ru), Karlyshkov Sergey Vladimirovich (karlyshkov@mail.ru), Dept. of Biomedical Devices and Informatics, Moscow State University of Electronic Devices and Informatics, Moscow, 107846, Russia.