

УДК: 539.1

А.С. Кравчук

Московский государственный университет
приборостроения и информатики (Москва)

О МОДЕЛЯХ И РЕШЕНИИ ЗАДАЧ МЕХАНИКИ НАНОКОНТАКТА

Abstract

The article is a survey of the mathematical models of the contact interaction of the deformed solids at the nanoscale level. The molecular quasi-static approach is used. A numerical model of the nano-coating is proposed. Calculations were performed for 1D problem being a homogeneous and heterogeneous (Cu+Ag) chain.

Рассматривается задача об определении усилий контактного взаимодействия деформируемых тел, когда учитывается атомно-молекулярная структура материала вблизи границ контактирующих тел. Актуальность рассматриваемой проблемы обусловлена развитием нанотехнологий в той их части, которая связана с конструированием исполнительных механизмов наномашин и наноманипуляторов, предназначенных для транспортировки (механического перемещения) отдельных атомов, молекул или наноструктур. 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 связей составляет предмет активно развивающегося в настоящее время направления механики деформируемых сред – наномеханики.

Модели поведения материала по мере проникновения в глубь его структуры зависят от характерного размера представительного объема материала. 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» [1] (более детальная классификация предложена

в работе [2]). Наноразмер или наномасштаб – это масштаб порядка 1–100 нм (1 нанометр $\equiv 1 \text{ nm} = 10^{-9} \text{ m}$). Основная идея построения моделей мезомеханики заключается в учете свойств материалов на расстояниях порядка межатомных с применением макрообъектов – поверхностных сил и моментов различных порядков [1].

Прикладные задачи наномеханики можно разделить на две группы, в первой из которых рассматривается проблема расчета и конструирования наноманипуляторов, наномоторов и т.п., – устройств, состоящих из относительно небольшого количества дискретных частиц; примеры можно найти в монографии [3]. Работы второй группы нацелены на решение проблемы описания свойств макрообъектов (чаще всего речь идет о создании новых материалов) на основе закономерностей, управляющих процессами в нано- и микромасштабе.

В обзорной части настоящей статьи приводится краткий обзор публикаций по этим направлениям. Из работ первого направления отобраны те, которые касаются решения задач контактного взаимодействия методами молекулярной квазистатики и динамики. 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 задач касается построения моделей нанокомпозитов. Нанокомпозиты – это материалы, состоящие из матрицы, обеспечивающей передачу усилий от элемента к элементу, и арматуры, в качестве которой выступают как углеродные каркасные структуры, так и всевозможные нанопорошки. Высокая прочность и жесткость нанокомпозитов объясняются как повышенными физико-механическими характеристиками арматуры, так и высокой удельной (по отношению к объему) поверхностью армирующих наночастиц. Попытка теоретического объяснения этих эффектов приводит к задачам, математическое содержание которых близко к содержанию контактных задач в приближении молекулярной квазистатики или динамики. 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, разрушения

и т.п., 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. Впервые такого рода модели были применены в работе Гудиера и Каннинена [4] в 1966 году для исследования процесса трещинообразования. В более поздней работе Синклера и Лауна [5] модель получила название гибридной и также была использована для расчета равновесной конфигурации трещины.

1. Контактные задачи на наноуровне

Рассмотрим задачу о контакте двух устойчивых конфигураций атомов, схематически представленную в двумерном варианте на рис. 1. Взаимное расположение двух типов атомов зависит от вида кристаллической структуры контактирующих тел. Формирование этих структур в памяти компьютера доставляет определенные трудности, способы преодоления которых описаны в [3]. Можно рассматривать также задачи о контакте фуллеренов, нанотрубок и других устойчивых образований.

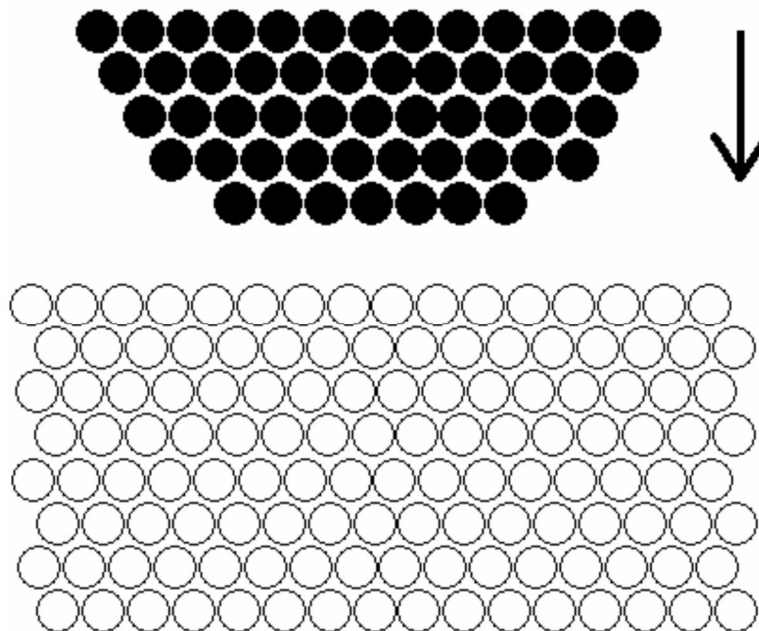


Рис. 1. Расчетная схема

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 математической формулировки задачи об определении напряженно-деформированного состояния и его эволюции необходимо выбрать потенциалы взаимодействия Π_1 , Π_2 , Π_{12} : потенциал Π_1 дает силы взаимодействия между атомами тела «1», Π_2 – между атомами тела «2». Потенциал Π_{12} определяет взаимодействие между атомами первого и второго тел. В молекулярной динамике движение каждого атома описывается уравнениями Ньютона, в которых фигурируют две группы сил. Силы $\mathbf{F}_{\alpha\beta}$ первой группы определяют воздействие на данный атом других атомов этой же группы; силы $\tilde{\mathbf{F}}_{\alpha\beta}$ – воздействие со стороны атомов другой группы. Таким образом, уравнения движения имеют вид:

$$m_\alpha \frac{d^2 \mathbf{u}_\alpha}{dt^2} = \sum_{\gamma=1, \gamma \neq \alpha}^{N_\alpha} \mathbf{F}_{\alpha\gamma} + \sum_{\beta=1}^{N_{(3-\alpha)}} \tilde{\mathbf{F}}_{\alpha\beta}, \quad \alpha = 1, 2, \quad (2.1)$$

где m_α – массы частиц, \mathbf{u}_α – их перемещения, t – время.

К уравнениям (2.1), записанным для всех атомов первой и второй групп, необходимо добавить начальные и граничные условия. Отметим, что при формулировке начальных условий возникает противоречие с фундаментальным принципом квантовой механики – принципом неопределенности Гейзенберга: нельзя одновременно задать и координаты частицы, и ее скорость. Тем не менее в молекулярной динамике этим противоречием пренебрегают и задают и начальные положения частиц, и их скорости. Отметим, что в статике данной проблемы не возникает, однако существует проблема, связанная с тем, что в системе из многих частиц равновесные расстояния между частицами не равны равновесным расстояниям между парой изолированных частиц (речь идет о парном центральном взаимодействии). Поэтому, если учесть нелинейность зависимости силы от расстояния и переход от монотонного роста силы к монотонному убыванию, то может оказаться, что равновесное состояние системы многих частиц зависит от выбора начального приближения в соответствующих итерационных процессах решения нелинейной задачи молекулярной статики.

Отметим также, что при задании на границе перемещений уравнения, соответствующие этим перемещениям в системе (2.1), выпадают. При задании сил на границе (а, возможно, и внутри) часть слагаемых в правых частях системы (2.1) не будет зависеть от перемещений.

Силы контактного взаимодействия являются неизвестными и определяются после решения задачи, поэтому здесь не возникает специфических граничных условий в форме неравенств, с которыми приходится работать в механике континуума.

Чаще всего в молекулярной динамике и молекулярной динамике используется потенциал взаимодействия Леннарда–Джонса:

$$\Pi_{LJ}(r_{ij}) = 4e \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right], \quad (2.2)$$

где e , σ – постоянные, зависящие от материала, r_{ij} – расстояние между атомами с номерами i и j , и потенциал Морса определяется по формуле

$$\Pi_M(r_{ij}) = D \left[\exp(-\alpha r_{ij}) - \exp(-2\alpha r_{ij}) \right] \quad (2.3)$$

в котором D и α – постоянные материала. Другие, более сложные потенциалы можно найти в [3].

Решения плоских и пространственных контактных задач в приведенной постановке описаны в работе [6]. Область «2» – прямоугольник, нижняя и боковые стороны которого закреплены. Введен промежуточный слой атомов для отвода теплоты. Теплота в рассматриваемой постановке определяется как средняя кинетическая энергия движения атомов, возникающего из-за передачи энергии извне. Тело «1» предполагается абсолютно жестким, а его воздействие на деформируемое тело «2» определяется путем задания перемещений верхнего слоя атомов или всех атомов. Основные результаты заключаются в следующем. Во-первых, для меди проникание абсолютно жесткого индентора на расстояние порядка 6 атомных диаметров не вызывает необратимых деформаций, а при больших глубинах внедрения появляются необратимые сдвиги. Эти сдвиги интерпретируются как дислокации, а их развитие и движение – как пластичность. Во-вторых, в задаче о срезании слоя с поверхности путем движения

инструмента параллельно поверхности медь срезается, не теряя своей кристаллической структуры, в то время как стружка кремния полностью теряет начальное кристаллическое строение. Исследованы процесс зарождения трещины в кварцевом стекле и процесс ее распространения. Стекло считается неоднородным материалом, задаются потенциалы взаимодействия между компонентами. Данная работа представляет собой пример применения метода молекулярной динамики в чистом его виде.

Большое количество работ посвящено исследованию процессов контактного взаимодействия, трения и износа с использованием методов физической химии, когда задаются атомно-молекулярная структура материала и потенциалы взаимодействия между атомами. Обзор полученных здесь результатов приведен в работах [7, 8].

Интересными для численного анализа являются результаты, представленные в работе [9], в которой описаны некоторые принципиальные затруднения метода молекулярной динамики. Во-первых, вследствие очень большой жесткости межмолекулярных связей частоты колебаний атомов в решетке являются очень высокими. Поскольку средняя кинетическая энергия высокочастотных колебаний отождествляется с температурой, то учет температуры в наномеханике требует использования очень малых шагов по времени. По оценкам, приведенным в работах [3, 9], 10^6 шагов длиной 0,02 периода колебаний соответствуют всего 10 наносекундам, что намного меньше, нежели типичные времена проведения эксперимента. Во-вторых, задание перемещений на границе наноструктур или задание усилий в динамике приводит к преобразованию этой энергии в энергию высокочастотных колебаний, т.е. к росту температуры. Возникает проблема «отвода» теплоты, которую обычно решают путем помещения исследуемой наносистемы в подходящий «термостат». Проблему поддержания заданной температуры можно решать также путем введения искусственной вязкости, что приводит к появлению демпфирующей силы в уравнениях движения (2.1) и некоторых сил $\vec{f}_\alpha(t)$, имеющих случайный характер, моделирующих термостат. Этот прием приводит к следующим уравнениям движения:

$$m_\alpha \frac{d^2 \mathbf{u}_\alpha}{dt^2} = \sum_{\gamma=1, \gamma \neq \alpha}^{N_\alpha} \mathbf{F}_{\alpha\gamma} - m_\alpha \Gamma_\alpha \frac{d\mathbf{u}_\alpha}{dt} + \mathbf{f}_\alpha(t), \quad (2.4)$$

в которых Γ – коэффициент демпфирования для отдельного атома. Уравнение (2.4) известно как уравнение Ланжевена. При таком подходе возникает проблема подбора величины коэффициента демпфирования, обсуждение которой дано, в частности, в работе [9].

Очевидно, что при моделировании трения и износа на наноразмерном уровне необходимо вводить в рассмотрение структуру поверхностей контактирующих тел и вид поверхностных сил. Первые результаты в данном направлении были получены Томлинсоном [10]. Модель Томлинсона была обобщена Френкелем и Конторовой [11]. Межатомные силы в обеих моделях заменялись упругими пружинами, что позволило исследовать асимптотики решений, выявить влияние совместимости периодов кристаллических решеток контактирующих тел и дать описание скачкообразного перемещения атомов при сдвиге. Отметим, что модели [10] и [11] до сих пор привлекают внимание [12, 13], поскольку позволяют описывать некоторые важные свойства сухого трения на микро- и наноразмерном уровне.

Уравнение Томлинсона движения атома имеет вид

$$m_\alpha \frac{d^2 u_\alpha}{dt^2} = -f_1 \sin\left(\frac{2\pi u_\alpha}{a}\right) - \Gamma \frac{du_\alpha}{dt} - k(u_\alpha - u_\alpha^0), \quad (2.5)$$

где Γ – коэффициент демпфирования, u_α – перемещение атома номер α вдоль цепочки, первое слагаемое – сила воздействия на атом со стороны подложки. Эта сила аппроксимируется синусоидой, и если учитывается реакция многих атомов, то соответствующие силы необходимо суммировать; a – период цепочки (решетки), k – жесткость эквивалентной пружины, множитель при k равен удлинению пружины. Очевидно, уравнение (2.5) совпадает с уравнением Ланжевена в скалярном варианте. Если в (2.5) пренебречь ускорением, можно провести статический (квазистатический) анализ возможных состояний равновесия при сдвиге – это сделано в работе [9].

Динамическое уравнение Томлинсона в двухмерном варианте было с успехом применено для анализа работы чувствительного элемента атомно-силового микроскопа (АСМ) [14–16].

Большое количество работ посвящено исследованию закономерностей трения тел с покрытиями. Покрытия могут образовывать кристаллические структуры, которые могут меняться 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, в которой учитывается взаимодействие соседних атомов. Модель Френкеля–Конторовой обобщена на случай учета демпфирования и зависимости силы сопротивления движению от направления движения в работах [17, 18] и др. Коэффициенты, входящие в обобщенные уравнения Томлинсона и Френкеля–Конторовой, вычислены в работах [17, 19–22].

Интерес для механики контактного взаимодействия представляют работы [23–25], в которых изучено влияние упорядоченности поверхностных слоев атомов и совместимости контактирующих слоев на закономерности трения. В работах [26, 27] исследуется влияние предварительной химической обработки поверхностей контактирующих тел. Особую ценность для трибологии представляют работы [28, 29], 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 [28] изучен также эффект несовместимости контактирующих слоев атомов. Вертикальное (без сдвига) перемещение выступа соответствует наноиндентированию. Обзор моделей наноиндентирования дан в работе [26]. Установлено, что пластические деформации возникают обычно в более мягком материале, причем зависимость нормальной силы от расстояния между контактирующими телами из свинца, серебра и никеля не является монотонной [30]. Аналогичные исследования для алмазного индентора выполнены в работах [31, 32].

Немонотонная зависимость силы от перемещения на макроуровне в динамике приводит к скачкообразному движению гибких контактирующих элементов, сопровождаемых звуками («дребезгом», звуками смычковых музыкальных инструментов и т.п.). Соответствующие макромодели были предложены в работах [33, 34]. 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 [35]. Микросдвиги на этапе сцепления могут приводить к хаотическим переходам от сцепления к скольжению и обратно [36].

Пластическое течение вблизи некоторой поверхности проскальзывания было изучено в работе [37]. Исследовались атомы меди в прямоугольнике: 256×256 атомов в двухмерном приближении. 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 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 максимум силы и перейти на ниспадающую ветвь диаграммы, 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 критического поведения (разрушения) сводится к нахождению собственных значений и собственных векторов матриц высокой размерности, меняющихся от шага к шагу нагружения [40].

2. Численное решение некоторых задач наноконтакта

Задачи наномеханики будем формулировать и решать либо как задачи динамики, основанные на уравнениях движения Ньютона, либо как квазистатические задачи, когда силами инерции будем пренебрегать.

Основным преимуществом метода молекулярной динамики является то, что он позволяет избежать применения сложных итерационных процессов путем использования явных шаговых схем интегри-

рования по времени [3]. 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 неизотермических 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 неизотермических задач [3]. Отмеченные недостатки метода молекулярной динамики преодолеваются путем использования многопроцессорных компьютерных систем и методов параллельных вычислений.

Таким образом, в тех случаях, когда влиянием температурных изменений можно пренебречь, а размерность задачи (число искомых функций) невелика, имеет смысл применить квазистатическую постановку задачи.

В качестве примера рассмотрим одномерную модель нанопокрывтия, представляющую собой две последовательно соединенные цепочки атомов (рис. 2). Используем для вычислений потенциал Морса (2.3). Занумеруем атомы первой цепочки целыми числами « $0, 1, 2, \dots, N_1$ », второй – целыми числами « $N_1 + 1, N_1 + 2, \dots, N_1 + N_2$ ». Обозначим через x (с соответствующим индексом) координаты начального положения атомов, через u – их перемещения вдоль общей оси Ox .

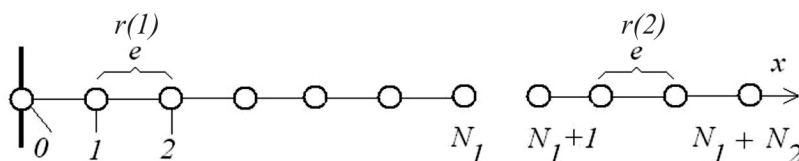


Рис. 2. Одномерная решетка (цепочка)

Пренебрегая силами инерции, из уравнений (2.1) получим выражения для сил, действующих на любой атом с номером « i » первой цепочки; сила, действующая на данный атом со стороны атомов, расположенных справа, определяется как

$$\begin{aligned}
 F_i^R = & 2D_1\alpha_1 \sum_{p=i+1}^{N_1} \left\{ \exp\left[-\alpha_1(x_p - x_i - r_e^{(1)} + u_p - u_i)\right] - \right. \\
 & \left. - \exp\left[-2\alpha_1(x_p - x_i - r_e^{(1)} + u_p - u_i)\right] \right\} + \\
 & + \sum_{q=N_1+1}^{N_1+N_2} \left\{ \exp\left[-\alpha_{12}(x_q - x_i - r_e^{(12)} + u_q - u_i)\right] - \right. \\
 & \left. - \exp\left[-2\alpha_{12}(x_q - x_i - r_e^{(12)} + u_q - u_i)\right] \right\}.
 \end{aligned} \tag{3.1}$$

Сила, действующая на атом « i » слева, определяется по формуле

$$\begin{aligned}
 F_i^L = & 2D_1\alpha_1 \sum_{p=0}^{i-1} \left\{ \exp\left[-\alpha_1(x_i - x_p - r_e^{(1)} + u_i - u_p)\right] - \right. \\
 & \left. - \exp\left[-2\alpha_1(x_i - x_p - r_e^{(1)} + u_i - u_p)\right] \right\}.
 \end{aligned} \tag{3.2}$$

Аналогичным способом строится выражение для сил, действующих на любой атом « j » второй цепочки:

$$\begin{aligned}
 F_j^R = & 2D_2\alpha_2 \sum_{q=j+1}^{N_1+N_2} \left\{ \exp\left[-\alpha_2(x_q - x_j - r_e^{(2)} + u_q - u_j)\right] - \right. \\
 & \left. - \exp\left[-2\alpha_2(x_q - x_j - r_e^{(2)} + u_q - u_j)\right] \right\},
 \end{aligned} \tag{3.3}$$

$$\begin{aligned}
 F_j^L = & \sum_{q=N_1+1}^{j-1} \left\{ \exp\left[-\alpha_2(x_j - x_q - r_e^{(2)} + u_j - u_q)\right] - \right. \\
 & \left. - \exp\left[-2\alpha_2(x_j - x_q - r_e^{(2)} + u_j - u_q)\right] \right\} + \\
 & + 2D_{12}\alpha_{12} \sum_{q=0}^{N_1} \left\{ \exp\left[-\alpha_{12}(x_q - x_j - r_e^{(12)} + u_q - u_j)\right] - \right. \\
 & \left. - \exp\left[-2\alpha_{12}(x_q - x_j - r_e^{(12)} + u_q - u_j)\right] \right\}.
 \end{aligned} \tag{3.4}$$

Величина $r_e^{(12)}$ выражается через $r_e^{(1)}, r_e^{(2)}$; для используемого в вычислениях потенциала Морса $r_e^{(12)} = (r_e^{(1)} + r_e^{(2)})/2$; так же подсчитываются постоянные D_{12}, α_{12} (см. [3]).

Будем предполагать, что атом номер «0» первой цепочки закреплен, а атом номер « $N_1 + N_2$ » второй цепочки перемещается из положения $x_{N_1+N_2} - U_{\min}$ в положение $x_{N_1+N_2} + U_{\max}$ с некоторым шагом h . 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 номер $N_1 + N_2$ 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 атомов с номерами $i = 1, 2, \dots, N_1$; $j = N_1 + 1, \dots, N_1 + N_2 - 1$. Разрешающая система уравнений получается приравниванием нулю разности выражений (3.1) и (3.2) для $i = 1, 2, \dots, N_1$ и разности выражений (3.3) и (3.4) для $j = N_1 + 1, N_1 + 2, \dots, N_1 + N_2 - 1$. 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 [3]. 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 P на конце цепочки от задаваемого перемещения атома справа, полученная для 800 шагов по перемещениям, меняющимся от $U_{\min} = -1,154$ до $U_{\max} = 25$. Значение $-1,154$ соответствует равновесному состоянию цепочки, когда сила P 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 [3]). Поскольку в качестве нулевого приближения на очередном шаге выбирается решение 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 (рис. 5).

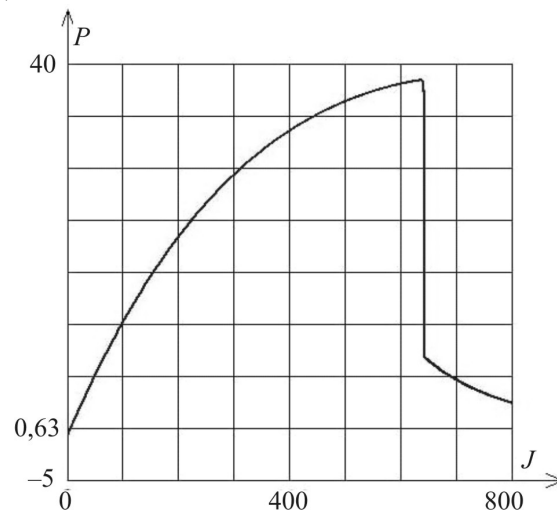


Рис. 3. Зависимость силы на конце цепочки от перемещения атома справа

Заметим, что для однородной цепочки в квазистатике картина распределений усилий по атомам симметрична относительно концов цепочки. Распределение перемещений по атомам для двух значений заданных справа перемещений – сплошная линия соответствует $U_{\max}=25$, пунктир соответствует значению $(U_{\max} - U_{\min})/2$ – показано на рис. 4; I – номер атома, P_1 – сила, действующая на данный атом справа. Распределение усилий показано на рис. 5: сплошная линия – распределение перемещений для $(U_{\max} - U_{\min})/2$, штриховая линия

соответствует $U_{\max}=25$, пунктирная кривая была получена без использования специального приема прохождения особой точки, соответствующей максимуму силы. Этот специальный прием заключался в том, что при обнаружении быстрого роста усилий межатомного взаимодействия итерации прекращались и, как было упомянуто выше, за решение принималась интерполяция решения, полученного на предыдущем шаге.

Из приведенных результатов можно сделать вывод о том, что нелокальность взаимодействия атомов сказывается только вблизи концов цепочки – имеет место «краевой эффект». Вне области краевого эффекта можно применять уравнение, описывающее растяжение сплошного стержня, т.е. использовать аксиоматику сплошной среды.

Вследствие симметрии отрыв происходит в двух точках: атом номер 1 отрывается от атома номер 0, атом номер N отрывается от атома номер $N-1$. Отметим, что, моделируя дефекты нанесения покрытия путем введения в расчетную схему некоторого начального зазора, можно получить отрыв в точке, в которой имеет место зазор. Аналогичный эффект можно получить для цепочки, состоящей из двух типов атомов, как показано на рис. 2.

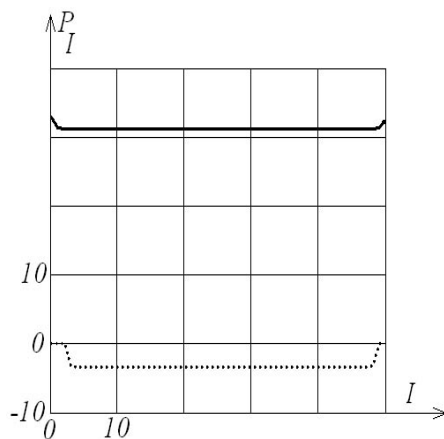


Рис. 4. Распределение усилий по атомам для двух значений заданных справа перемещений:

— $U_{\max} = 25$,
 $(U_{\max} - U_{\min})/2$

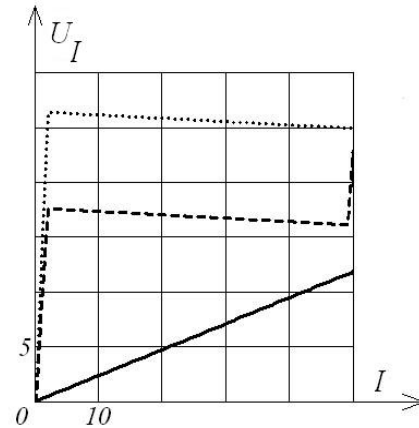


Рис. 5. Распределение перемещений по атомам для двух значений заданных справа перемещений:

- - $U_{\max} = 25$,
 получено без использования приема прохождения особой точки,
 — $(U_{\max} - U_{\min})/2$

Некоторые результаты расчетов для неоднородной цепочки, в которой первые 40 атомов – это медь, второй участок из 10 атомов – серебро ($D = 53,24$, $\alpha = 1,369$, $r_e = 3,115$), показаны на рис. 6–7; $U_{\min} = 0, U_{\max} = 25$, зазор равен 1. На рис. 6 показано распределение перемещений по цепочке, на рис. 7 – распределение усилий; количество шагов по заданным на правом конце перемещениям равно 2000, число итераций равно 100. Сплошные линии соответствуют шагу № 1000, пунктир – шагу № 2000. Штриховая соответствует зазору, равному 0,1.

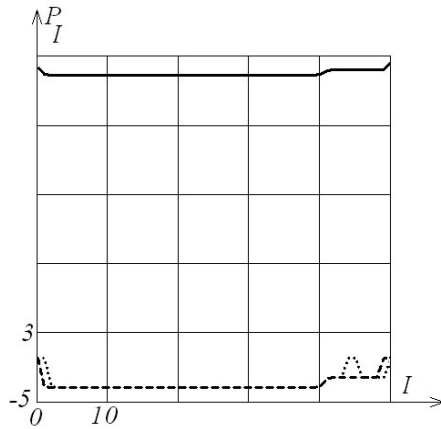


Рис. 6. Распределение усилий по цепочке атомов:
 — шаг № 1000,
 шаг № 2000

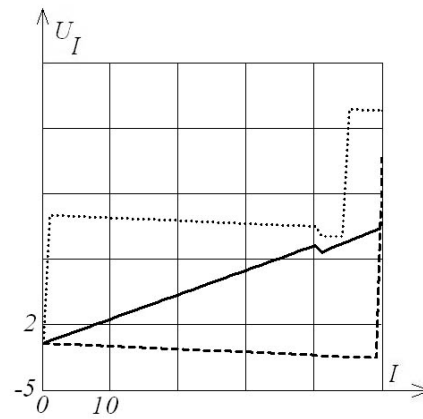


Рис. 7. Распределение перемещений по атомам для двух значений заданных справа перемещений:
 — шаг № 1000,
 шаг № 2000,
 - - зазор равен 0,1

Видно, что изменение зазора качественно меняет характер разрушения: для небольших значений зазора отрывается последний атом в цепочке, для зазора, равного 1, отрывается первый атом, а также происходит отрыв второго участка цепочки от первого – «отслоение покрытия».

Подчеркнем, что обнаруженная неединственность решения в конце нагружения является следствием зависимости состояния системы от истории нагружения. Кроме того, энергия системы как функция параметров ее состояния (в данном случае – функция перемещений атомов) имеет много локальных экстремумов, поэтому

точка, в которую приводит итерационный процесс, зависит и от выбора нулевого приближения и, как только что было отмечено, от истории нагружения.

В областях с линейным распределением перемещений и, стало быть, постоянными деформациями и усилиями можно использовать линейные теории, получающиеся аппроксимацией потенциалов дальнего действия квадратичными функциями. Более того, в таких областях можно перейти к моделям сплошной среды – к уравнениям линейной теории упругости. Если учесть, что области, характерный размер которых 1 мм, содержат (в цепочке) порядка $2 \cdot 10^6$ атомов меди, то переход к модели сплошной среды позволяет резко сократить порядок разрешающих систем уравнений, сохранив при этом возможность моделирования разрушения средствами молекулярной динамики или квазистатики. Такой подход был предложен и реализован в работах [41, 42].

Таким образом, из приведенного обзора видно, какое большое внимание уделяется в настоящее время исследованию и моделированию процессов, происходящих на поверхности соприкосновения деформируемых материалов с учетом их атомно-молекулярной структуры. Нелинейность и неоднозначность зависимости усилий взаимодействия от взаимных перемещений приводят к разнообразным механическим эффектам, на основании которых можно дать обоснование наблюдаемым в макроопытах закономерностям контактного взаимодействия – разрушения, трения, адгезии, износа.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке грантов РФФИ № 05–01–00591, 07–08–00269 и научной школы № НШ–1245.2006.1.

Библиографический список

1. Физическая мезомеханика и компьютерное конструирование материалов / В.Е. Панин. – Новосибирск: Наука; СО РАН, 1995. – Том 1. – 297 с.; Том 2. – 317 с.
2. Multiscale modelling of nanomechanics and micromechanics: an overview / N.M. Ghoniem, E.P. Busso, N. Kioussis, H. Huang // Phil. Magazine. – 2003. – Vol. 83. – № 31–34. – P. 3475–3528.
3. Рит М. Наноконструирование в науке и технике. Введение в мир нанорасчета / М. Рит. – М. – Ижевск: RCD, 2005. – 159 с.

4. Гудьер Дж. Математическая теория равновесных трещин / Дж. Гудьер // Разрушение. Том 2. – М.: Мир, 1975. – С. 13–82.
5. Дайнис Г. Моделирование трещин с помощью вычислительных машин / Г. Дайнис, А. Пэскин // Атомистика разрушения. Сер. «Механика». Новое в зарубежной науке. – Том 40. – С. 177–212.
6. Belak J. Nanotrybology / J. Belak // ETR. – 1994. – September. – P. 13–24.
7. Handbook of Micro / Nanotrybology (Brushan B., ed.). CRC Press, 1999.
8. Handbook of Modern Trybology (Brushan B., ed.). CRC Press, 2001.
9. Robbins M.O. Computer simulations of Friction, Lubrication and Wear / M.O. Robbins, H. Muser // Handbook of Modern Trybology (Brushan B., ed.). CRC Press. 2001.
10. Tomlinson G.A. A molecular theory of friction / G.A. Tomlinson // Phil. Mag. Series. – 1929. – Vol. 7. – P. 935–939.
11. Френкель Ю.И. О теории пластических деформаций и двойникования / Ю.И. Френкель, Т. Конторова // ЖЭТФ. – 1938. – Т. 8. – С. 1340.
12. Weiss M. Dry Friction in the Frenkel–Kontorova–Tomlinson Model: Static Properties / M. Weiss, F.J. Elmer // Phys. Rev. – 1996. – B53. – P. 7539–7549.
13. Kawaguchi T. Anomalous Pinning Behavior in an Incommensurate Two-Chain Model of Friction / T. Kawaguchi, H. Matsukawa // Phys. Rev. – 1998. – B58. – P. 15866–15877.
14. Gyalog T. Mechanism of Atomic Friction / T. Gyalog // Europhys. Lett. – 1995. – 31. – P. 269–274.
15. Simulation of the scan process in friction force microscopy / H. Holscher [et al.] // Material Research Society Symposia Proceeding. Ed. by B. Brushan. Kluwer, Dordrecht. – 1997. – P. 379–384.
16. Rajasekaran E. Frictional anisotropy and the role of lattice relaxation in molecular trybology of cristalline interfaces / E. Rajasekaran // Material Research Society Symposia Proceeding. Ed. by B. Brushan. – Kluwer, Dordrecht. – 1997.
17. Smith E.D. The Friction of absorbed monolayers / E.D. Smith, M. Cieplak, M.O. Robbins // Phys. Rev. – 1996. – B54. – P. 8252–8260.
18. Persson B.N.J. Sliding Friction: Physical Principles and Applications / B.N.J. Persson. – Springer, 1998.

19. 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.
20. Persson B.N.J. Theory of friction and boundary lubrication / B.N.J. Persson // *Phys. Rev.* – B48. – P. 18140–158.
21. Cieplak M. Molecular Origin of Friction: The Force of an Adsorbed Layers / M. Cieplak, E.D. Smith, M.O. Robbins // *Science.* – 1994. – 265. – P. 1209–1212.
22. 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.
23. Hirano M. Atomistic Locking and Friction / M. Hirano, K. Shinjo // *Phys. Rev.* – 1990. – B41. – P. 11837–11851.
24. Shinjo K. Dynamics of Friction: Superlubric State / K. Shinjo, M. Hirano // *Surface Science.* – 1993. – 283. – P. 473–478.
25. Hirano M. Observation of superlubricity by scanning tunneling microscopy / M. Hirano // *Phys. Rev. Lett.* – 1997. – 78. – P. 1448–1451.
26. Harrison J.A. Atomic Scale Simulation of Tribological and Related Phenomena / J.A. Harrison, S.J. Stuart, D.W. Brenner // *Handbook of Micro / Nanotribology* (Brushan B., ed.). – CRC Press. – 1999. – P. 525–594.
27. McClelland G.M. Friction at the Atomic Scale. In: *Fundamentals of Friction: Macroscopic and Microscopic Processes* / G.M. McClelland, J.N. Glosli (Singer I.L. and Pollock H.M., eds). – 1992. – Kluwer. – Dordrecht. – P. 405–422.
28. Sorensen M.R. Simulation of Atomic Scale Sliding friction / M.R. Sorensen, K.W. Jakobsen, P. Stoltze // *Phys. Rev.* – 1996. – B53. – P. 2101–2113.
29. Stevens M.J. Simulation of shear–induced melting and ordering / M.J. Stevens, M.O. Robbins // *Phys. Rev.* – 1993. – E48. – P. 3778–3792.
30. Landman U. Atomistic mechanisms of adhesive contact formation and interfacial processes / U. Landman // *Wear.* – 1992. – 153. – P. 3–30.
31. Harrison J.A. Nanoscale Investigation of Indentation Adhesion and Fracture of Diamond (111) Surfaces / J.A. Harrison // *Surf. Sci.* – 1992. – P. 57–67.

32. Harrison J.A. Molecular-Dinamic Simulations of Atomic-Scale Friction of Diamond Surfaces / J.A. Harrison // *Phys. Rev.* – 1992. – B46. – P. 9700–9708.
33. Rabinowicz E. Friction and Wear of Materials / E. Rabinowicz. – Wiley. – New York, 1965.
34. Bowden F.P. The Friction and Lubrication of Solids / F.P. Bowden, D. Tabor. – Clarendon Press. – London, 1986.
35. Carpick R.W. Scratching the Surface: Fundamental Investigations of Trybology with Atomic Force Microscopy / R.W. Carpick, M. Salmeron // *Chem. Rev.* – 97. – P. 1163–1194.
36. Heslot F. Creep, stick-slip, and dry friction dynamics: Experiments and a heuristic model / F. Heslot // *Phys. Rev.* – 1994. – E49. – P. 4973–4988.
37. Rigney D.A. Unlubricated Sliding of Metals / D.A. Rigney, J.E. Hammerberg // *MRS Bull.* 1998. – 23 (6). – P. 32–36.
38. Shenoy V.B. Quasicontinuum models of interfacial structure and deformation / V.B. Shenoy // *Phys. Rev. Lett.* – 1998. – 80 (4). – P. 742–745.
39. Rudd R.E. Concurrent coupling of length scales in solids state systems / R.E. Rudd, J.Q. Broughton // *Phys. State Sol.* – 2000. – B217. – P. 251–291.
40. Коробейников С.Н. Применение метода конечных элементов к решению нелинейных задач по деформированию и потере устойчивости атомных решеток: препринт Института гидродинамики им. М.А. Лаврентьева СО РАН / С.Н. Коробейников. – Новосибирск, 1997. – № 1–97. – 33 с.
41. Kohlhoff S. Crack propagation in bcc crystals studied with a combined finite-element and atomistic model / S. Kohlhoff // *Philos. Mag.* – 1991. – A64 (4). – P. 851–878.
42. Miller R.E. A study of nanoindentation using coupled atomistic and discrete dislocation (CADD) modeling / R.E. Miller, L. Shilkrot, W.A. Curtin // *Second MIT Conference on Computational Fluid and Solid Mechanics*. Bathe K.J., ed. 2003. – Elsevier. – P. 455–459.

Получено 15.05.2007