

О механических характеристиках наноразмерных объектов

© А.М. Кривцов, Н.Ф. Морозов

Институт проблем машиноведения Российской академии наук,
199178 Санкт-Петербург, Россия

E-mail: krivtsov@AK5744.spb.edu

(Поступила в Редакцию 11 января 2002 г.)

На примере двумерной монокристаллической полосы теоретически исследуется вопрос о зависимости значений модулей упругости от размеров нанокристалла. Показано, что принципиальный произвол в определении размера нанобъекта приводит к неоднозначности в определении многих его механических характеристик. Выявлено, что для наноразмерных объектов видоизменяются соотношения Коши–Грина и нарушается симметрия тензора упругости кристалла. Показано, что размеры и форма нанокристалла вносят дополнительную анизотропию в его механические свойства. Для рассматриваемой системы коэффициент Пуассона убывает, а модуль Юнга возрастает с уменьшением толщины монокристаллической полосы, причем для особо тонких (двухслойных) кристаллических пленок указанные модули могут в 2 раза отличаться от своих макроскопических значений. Дается оценка масштабных эффектов, возникающих при применении континуальной теории упругости к нанобъектам, а также обсуждается влияние масштабных эффектов при использовании метода молекулярной динамики для моделирования макроскопических объектов.

Работа выполнена при поддержке грантов Российского фонда фундаментальных исследований № 99-07-90443 и 00-01-00489.

Интенсивное развитие нанотехнологий в последние годы привело к необходимости построения адекватных аналитических моделей, позволяющих описать физико-механические свойства объектов наноразмерного масштабного уровня. В большинстве существующих моделей подобного рода принимается, что основные механические характеристики нанобъектов совпадают со своими значениями, полученными из макроскопических экспериментов. Однако, когда речь идет о структурах, содержащих всего несколько слоев атомов, не может не сказываться противоречие между очевидной дискретностью рассматриваемого объекта и континуальностью его описания. Несоответствие между значениями модулей упругости, полученных из микро- и макроэкспериментов, отмечалось многими исследователями [1–3]. К сожалению, прямое измерение упругих характеристик нанобъектов невозможно, поэтому для их определения приходится использовать косвенные методы [2,4,5]. В частности, одним из методов определения упругих характеристик нанобъектов является исследование микрорельефа, образующегося при растяжении образца, имеющего ультратонкое покрытие [2,5,6]. Решение эквивалентной континуальной задачи об устойчивости тонкостенной конструкции позволяет из подобных экспериментов определить коэффициент Пуассона и модуль Юнга покрытия [1,6,7]. Однако полученные таким образом значения упругих характеристик обнаруживают существенное расхождение со своими макроскопическими значениями. С одной стороны, это может быть связано со спецификой внутренней структуры материала, полученного в результате напыления. С другой стороны, это может быть обусловлено проявлением дискретности материала на нанометровом масштабном уровне. Исследованию того, насколько подобная дискретность может влиять на значения модулей упругости материала,

и посвящена данная статья, являющаяся развитием и продолжением работы [8].

В качестве модели для исследования влияния масштабного фактора на механические характеристики материала рассматривается двумерная полоса из монокристаллического материала, обладающего гексагональной плотноупакованной (ГПУ) решеткой (треугольной решеткой). Взаимодействие между атомами считается парным. Основные результаты отвечают приближению, при котором в кристалле учитывается взаимодействие только ближайших соседей, однако в конце работы проводится оценка влияния более удаленных атомов. Для определения модулей упругости мы ограничимся рассмотрением задач растяжения-сжатия монокристалла, оставив исследование сдвиговой деформации за рамками данной работы.

1. Определение модулей упругости

Рассмотрим двумерный монокристалл, изображенный на рис. 1, имеющий бесконечную длину в направлении x и $N \geq 2$ атомарных слоев в направлении y . Каждый атом взаимодействует только с ближайшими соседями по кристаллической решетке, как показано на рис. 1. К атомам на торцах кристалла приложены постоянные растягивающие силы Q . Рассматриваемое деформированное состояние монокристалла полностью определяется расстоянием a между соседними атомами в каждом слое и расстоянием h между слоями. Обозначим символом b расстояние между ближайшими атомами в соседних слоях (рис. 1). Очевидно, что $b^2 = a^2/4 + h^2$. В недеформированном состоянии решетка состоит из равносторонних треугольников с ребром $a = b = a_0$, а торцевая нагрузка отсутствует ($Q = 0$). Пусть $F(r)$ —

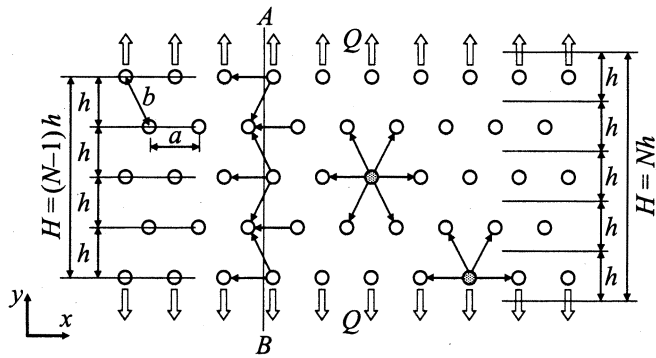


Рис. 1. Рассматриваемая модель: двумерная монокристаллическая полоса.

сила взаимодействия между двумя атомами, разделенными расстоянием r (положительным считается притяжение). Тогда, проецируя на направление y уравнение равновесия атома, находящегося на поверхности кристалла, получим

$$Q = 2 \frac{h}{b} F(b) \rightarrow \sigma_2 \stackrel{\text{def}}{=} \frac{Q}{a} = 2 \frac{h}{ab} F(b). \quad (1)$$

Здесь σ_2 — нормальное напряжение в направлении y . Разрежем теперь мысленно кристалл вертикальной прямой АВ (рис. 1). Суммарная нормальная сила, действующая со стороны одной части кристалла на другую, равна

$$H\sigma_1 = NF(a) + (N - 1) \frac{a}{2b} F(b). \quad (2)$$

Здесь σ_1 — нормальное напряжение в направлении x ; H — толщина кристалла (его протяженность в направлении y). Величина H в принципе не может быть определена однозначно. Например, если положить, что толщина кристалла равна расстоянию между слоями атомов, лежащими на противоположных торцах (рис. 1), то тогда $H = (N - 1)/h$. С другой стороны, вполне естественно определить толщину кристалла как произведение числа слоев на толщину одного слоя, что приводит к формуле $H = Nh$. Поэтому обозначим

$$H \stackrel{\text{def}}{=} N_* h, \quad N - 1 \leq N_* \leq N, \quad (3)$$

где N_* — величина, отражающая произвол в определении H . Из-за малости деформации силы, действующие в кристалле, могут быть приближенно записаны в виде

$$F(a) = C\Delta a, \quad F(b) = C\Delta b, \quad C \stackrel{\text{def}}{=} F'(a_0) > 0, \quad (4)$$

где C имеет смысл жесткости межатомной связи, а Δ означает отклонение величины от ее значения, соответствующего недеформированному кристаллу. Деформации кристалла в направлениях x и y обозначим ε_1 и ε_2 , где

$$\varepsilon_1 \stackrel{\text{def}}{=} \Delta a/a_0, \quad \varepsilon_2 \stackrel{\text{def}}{=} \Delta h/h_0, \quad h_0 \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{3}a_0/2. \quad (5)$$

Подстановка (3)–(5) в (1) и (2) дает соотношения упругости

$$\sigma_1 = C_{11}\varepsilon_1 + C_{12}\varepsilon_2, \quad \sigma_2 = C_{21}\varepsilon_1 + C_{22}\varepsilon_2, \quad (6)$$

где коэффициенты жесткости C_{kn} определяются формулами

$$C_{11} = \frac{3\sqrt{3}}{4} \frac{N - \frac{1}{9}}{N_*} C, \quad C_{12} = \frac{\sqrt{3}}{4} \frac{N - 1}{N_*} C, \\ C_{21} = \frac{\sqrt{3}}{4} C, \quad C_{22} = \frac{3\sqrt{3}}{4} C. \quad (7)$$

Из (7) следует, что рассматриваемый кристалл анизотропен. Напомним, что бесконечный двумерный ГПУ-кристалл изотропен; следовательно, полученная анизотропия — проявление масштабного фактора. Обозначим

$$\nu_1 \stackrel{\text{def}}{=} -\left. \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1} \right|_{\sigma_2=0}, \quad E_1 \stackrel{\text{def}}{=} -\left. \frac{\sigma_1}{\varepsilon_1} \right|_{\sigma_2=0}, \\ \nu_2 \stackrel{\text{def}}{=} -\left. \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} \right|_{\sigma_1=0}, \quad E_2 \stackrel{\text{def}}{=} -\left. \frac{\sigma_2}{\varepsilon_2} \right|_{\sigma_1=0}.$$

Здесь ν_1 и E_1 — коэффициент Пуассона и модуль Юнга при растяжении вдоль оси x , величины ν_2 и E_2 соответствуют растяжению вдоль оси y . Используя соотношения (6), получим

$$\nu_1 = \frac{C_{21}}{C_{22}}, \quad E_1 = C_{11} - \nu_1 C_{12} = \frac{D}{C_{22}}, \\ \nu_2 = \frac{C_{12}}{C_{11}}, \quad E_2 = C_{22} - \nu_2 C_{21} = \frac{D}{C_{11}}, \\ D \stackrel{\text{def}}{=} C_{11}C_{22} - C_{12}C_{21}. \quad (8)$$

Подстановка (7) в (8) дает искомые выражения для модулей упругости

$$\nu_1 = \nu_\infty, \quad E_1 = \frac{N}{N_*} E_\infty, \\ \nu_2 = \frac{N - 1}{N - \frac{1}{9}} \nu_\infty, \quad E_2 = \frac{N}{N - \frac{1}{9}} E_\infty. \quad (9)$$

Здесь $E_\infty = 2C/\sqrt{3}$, $\nu_\infty = 1/3$ — значения модуля Юнга и коэффициента Пуассона, соответствующие бесконечному кристаллу [9,10]. Рассмотрим полученные формулы.

При растяжении вдоль атомарных слоев модуль Юнга E_1 существенно зависит от величины N_* , т.е. от того, как определяется толщина нанокристаллической полосы. Если положить $N_* = N$ (максимальное значение N_*), то при растяжении вдоль атомарных слоев коэффициент Пуассона и модуль Юнга не зависят от числа слоев. Связано это, очевидно, с тем, что в продольном направлении рассматриваемый кристалл бесконечен. Модуль Юнга E_1^{max} , соответствующий минимальному значению $N_* = N - 1$, не постоянен; он увеличивается при уменьшении числа атомарных слоев достигая при $N = 2$

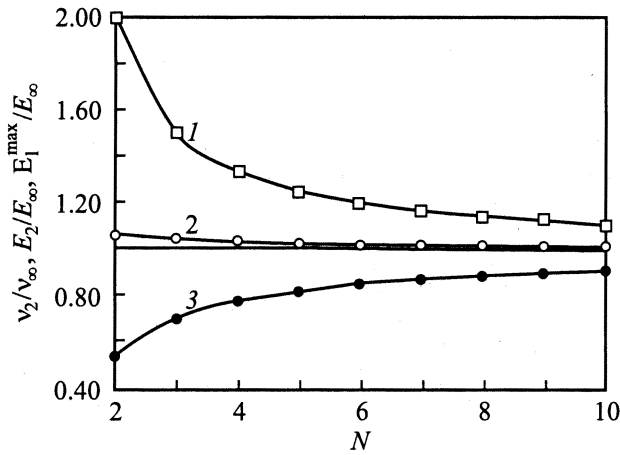


Рис. 2. Зависимости модуля Юнга и коэффициента Пуассона от числа слоев атомов. 1, 2 — модуль Юнга в продольном (E_1^{\max}/E_∞) и поперечном (E_2/E_∞) направлениях соответственно, 3 — относительный коэффициент Пуассона (ν_2/ν_∞) в поперечном направлении.

значения, которое в 2 раза превышает E_∞ (рис. 2). Таким образом, неоднозначность в определении модуля Юнга оказывается весьма существенной для малых N .

При растяжении перпендикулярно атомарным слоям и коэффициент Пуассона, и модуль Юнга зависят от N , причем при уменьшении числа слоев коэффициент Пуассона убывает, а модуль Юнга возрастает (рис. 2). Из графиков видно, что коэффициент Пуассона ν_2 значительно сильнее меняется с изменением N , чем модуль Юнга E_2 . Так, если при $N = 2$ отклонение в значении модуля Юнга от E_∞ не превышает 6%, то коэффициент Пуассона в этом случае почти в 2 раза меньше ν_∞ .

При $N \rightarrow \infty$ упругие модули стремятся к соответствующим бесконечному кристаллу значениям, которые не зависят от направления деформирования. Отметим, что использованием макроскопических значений упру-

Таблица 1. Зависимость модулей упругости нанокристалла от числа атомарных слоев

N	E_1^{\max}/E_∞	ν_2	ν_2/ν_∞	E_2/E_∞
2	2.00	0.18	0.53	1.06
3	1.50	0.23	0.69	1.04
4	1.33	0.26	0.77	1.03
5	1.25	0.27	0.82	1.02
10	1.11	0.30	0.91	1.01
20	1.05	0.32	0.96	1.01
50	1.02	0.33	0.98	1.00
100	1.01	0.33	0.99	1.00

Примечание. E_1^{\max} , E_2 , E_∞ — модули Юнга соответственно для полосы (в продольном и поперечном направлении) и для бесконечного кристалла, ν_2 , ν_∞ — коэффициенты Пуассона соответственно для полосы (в поперечном направлении) и для бесконечного кристалла.

гих моделей приводит к максимальной относительной погрешности, приближенно равной $100\%/N$. Так, согласно табл. 1, при $N = 10$ отклонение E_1^{\max} и ν_2 от своих макроскопических значений составляет 11%, а при $N = 100$ это отклонение составляет лишь 1%.

2. Энергия деформирования

Рассмотрим соотношения упругости (6). Согласно макроскопической теории упругости, напряжения σ_k и модули упругости C_{kn} связаны с удельной энергией деформирования соотношениями Коши–Грина

$$\sigma_k = \frac{\partial U}{\partial \varepsilon_k}, \quad C_{kn} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial \sigma_k}{\partial \varepsilon_n} = \frac{\partial^2 U}{\partial \varepsilon_k \partial \varepsilon_n}, \quad (10)$$

где U — энергия деформирования, отнесенная к единице объема. Здесь, как и ранее, рассматриваем только линейную теорию упругости. Из формулы (10), в частности, следует, что $C_{kn} = C_{nk}$. Выясним, выполняется ли это соотношение для нанокристалла. Согласно (7),

$$\frac{C_{12}}{C_{21}} = \frac{N-1}{N_*}. \quad (11)$$

Следовательно, если использовать определение $N_* = N$, которое по результатам предыдущего раздела казалось наиболее предпочтительным, то тогда $C_{12} \neq C_{21}$. Означает ли это, что возникает противоречие с энергетическими соображениями? Для того чтобы разобраться в этом вопросе, рассмотрим изменение потенциальной энергии достаточно протяженного в направлении атомарных слоев участка кристалла при его деформировании перпендикулярно атомарным слоям. Имеем

$$dE_\Pi = N_x Q dy, \quad (12)$$

где E_Π — полная потенциальная энергия кристалла, Q — внешняя сила, действующая на атомы на поверхности кристалла (рис. 1), dy — малое перемещение верхней поверхности кристалла (нижнюю будем считать неподвижной), N_x — число сил Q , действующих на верхнюю грань рассматриваемого участка кристалла. Величину N_x будем считать достаточно большой для того, чтобы всеми масштабными эффектами, связанными с ее конечностью, можно было пренебречь. Определим удельную потенциальную энергию, приходящуюся на единицу объема, формулой

$$U \stackrel{\text{def}}{=} E_\Pi / (N_x a_0 N_* h_0). \quad (13)$$

Величина, стоящая в скобках, представляет собой полный объем кристалла. Произведение $N_x a_0$ определяет его размер в направлении x , а произведение $N_* h_0$ — размер кристалла в направлении y (его толщину). Как указывалось в предыдущем разделе, последняя величина определяется неоднозначно, а следовательно, эта неоднозначность проявляется и при определении удельной

внутренней энергии. Величины Q и du связаны с напряжением и деформацией кристалла формулами

$$Q = \sigma_2 a \approx \sigma_2 a_0, \quad dy = (N-1)dh = (N-1)h_0 d\varepsilon_2. \quad (14)$$

Подстановка (13) и (14) в (12) дает

$$\sigma_2 = \frac{N-1}{N_*} \frac{\partial U}{\partial \varepsilon_2}. \quad (15)$$

Таким образом, макроскопические соотношения Коши–Грина (10) оказываются неверными для конечных N . Можно, разумеется, привести формулу (15) к виду (10), положив $N_* = N - 1$. Тогда, согласно (11), соотношение $C_{12} = C_{21}$ будет выполнено. Однако напомним, что в этом случае модуль Юнга E_1 будет существенно зависеть от N , что не наблюдается при $N_* = N$ (см. (9)). Это еще раз подтверждает принципиальную невозможность однозначного определения размера нанокристалла, а следовательно, и всех зависящих от этих размеров физических величин. Определение, которое было бы удобно в одном случае, оказывается неудобным в другом. Таким образом, получаем, что соотношения Коши–Грина (10) в рассматриваемом случае должны быть модифицированы следующим образом:

$$\sigma_1 = \frac{\partial U}{\partial \varepsilon_1}, \quad \sigma_2 = \frac{N-1}{N_*} \frac{\partial U}{\partial \varepsilon_2}, \quad C_{kn} = \frac{\partial \sigma_k}{\partial \varepsilon_n}. \quad (16)$$

Для σ_1 сохраняется макроскопическая формула, так как в направлении x кристалл бесконечен.

Прямой подсчет числа межатомных связей, приходящихся на единицу длины монокристаллической полосы, позволяет получить явную формулу для удельной потенциальной энергии взаимодействия U

$$U = \frac{1}{N_* a_0 h_0} (N\Pi(a) + 2(N-1)\Pi(b)), \quad (17)$$

где $\Pi(r)$ — потенциальная энергия взаимодействия двух атомов, разделенных расстоянием r . Вычисления по формулам (16) для удельной энергии (17) приводят в точности к тем же значениям коэффициентов жесткости C_{kn} , что и в предыдущем разделе (см. (7)).

3. Учет атомов второй координационной сферы

Выше учитывалось взаимодействие атома только с ближайшими соседями по кристаллической решетке — атомами первой координационной сферы. Учет следующих координационных сфер сильно усложняет задачу расчета упругих модулей, так как в этом случае равновесному состоянию кристалла будет отвечать искаженная в результате поверхностных явлений кристаллическая решетка. Это, с одной стороны, усложняет расчет чисто технически, а с другой — увеличивает произвол в определении размеров нанокристалла (нет

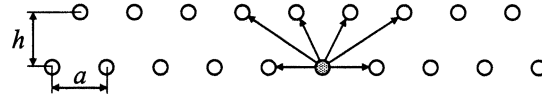


Рис. 3. Двухслойный кристалл.

фиксированного шага решетки). Последнее обстоятельство в свою очередь приводит к дополнительной неоднозначности в определении всех величин, зависящих от размеров нанокристалла (таких как модуль Юнга). Еще одно усложнение состоит в том, что при учете воздействия удаленных атомов механические характеристики существенно зависят от функционального вида потенциала взаимодействия (при взаимодействии ближайших соседей коэффициент Пуассона не зависит от вида взаимодействия, а модуль Юнга определяется только одной характеристикой взаимодействия — жесткостью связи). Все вышперечисленное приводит к тому, что точное аналитическое решение рассматриваемой задачи получено быть не может. Однако, если сила межатомного взаимодействия достаточно быстро убывает с расстоянием, с успехом могут применяться приближенные методы, в которых влияние удаленных атомов рассматривается как возмущение к задаче, рассмотренной в предыдущих разделах. Подробное обсуждение этих вопросов выходит за рамки данной работы. Рассмотрим только один частный случай, позволяющий представить влияние атомов второй координационной сферы на результаты, полученные выше.

Вычислим коэффициент Пуассона в направлении атомарных слоев при учете атомов второй координационной сферы. Для простоты ограничимся случаем, когда кристалл имеет только два слоя атомов. Рассматриваемая система изображена на рис. 3. Стрелки указывают на атомы, с которыми взаимодействует выделенный атом. Удельная потенциальная энергия кристалла может быть записана в виде

$$U = \frac{1}{V_0} \left(P(a^2) + P\left(\frac{1}{4}a^2 + h^2\right) + P\left(\frac{9}{4}a^2 + h^2\right) \right), \quad (18)$$

где $P(r^2) \stackrel{\text{def}}{=} \Pi(r)$ — потенциальная энергия взаимодействия атомов, представленная как функция квадрата расстояния, V_0 — объем кристалла, приходящийся на одну частицу. Конкретное значение V_0 определяется неоднозначно, но для дальнейших выкладок оно не понадобится. Последнее слагаемое в (18) описывает взаимодействие с атомами второй координационной сферы; оно отсутствовало в (17). Коэффициент Пуассона в направлении x может быть вычислен по формулам (8), (16)

$$\nu_1 = -\frac{C_{21}}{C_{22}} = -\frac{\partial^2 U}{\partial \varepsilon_1 \partial \varepsilon_2} \left(\frac{\partial^2 U}{\partial \varepsilon_2 \partial \varepsilon_2} \right)^{-1}. \quad (19)$$

Подстановка (18) в (19) дает

$$\nu_1 = -\frac{a^2}{4h^2} \frac{P''\left(\frac{1}{4}a^2 + h^2\right) + 9P''\left(\frac{9}{4}a^2 + h^2\right)}{P''\left(\frac{1}{4}a^2 + h^2\right) + P''\left(\frac{9}{4}a^2 + h^2\right)}. \quad (20)$$

Таблица 2. Коэффициент Пуассона в направлении атомарных слоев

	Учет атомов первой координационной сферы	Учет атомов второй координационной сферы	
		приближенный	точный
Коэффициент Пуассона	0.333	0.320	0.318
Отклонение от ν_∞ , %	0	4.1	4.5
Расчетные формулы	(9)	(22)	(20), (21)

При этом величины a и h должны определиться из уравнений равновесия $\partial U/\partial a = \partial U/\partial h = 0$, которые с использованием формулы (18) могут быть приведены к виду

$$P'(a^2) + 2P' \left(\frac{1}{4} a^2 + h^2 \right) = 0,$$

$$P' \left(\frac{1}{4} a^2 + h^2 \right) + P' \left(\frac{9}{4} a^2 + h^2 \right) = 0. \quad (21)$$

Решение системы уравнений (21) с подстановкой полученных значений a и b в (20) дает искомое значение коэффициента Пуассона. Если потенциал взаимодействия достаточно быстро убывает с расстоянием, то может быть использована приближенная формула

$$\nu_1 \approx \frac{1}{3} \left(1 + 8 \frac{P''(3a_0^2)}{P'''(a_0^2)} \right), \quad (22)$$

полученная из (20) подстановкой вместо a и h их значений для недеформированной решетки, с дальнейшим разложением в ряд по малому параметру $P''(3a_0^2)/P'''(a_0^2)$. Рассмотрим эту формулу. Напомним, что при взаимодействии только ближайших соседей было показано, что коэффициент Пуассона ν_1 не зависит от числа слоев и в точности равен своему макроскопическому значению $1/3$. Из формулы (22) следует, что при учете второй координационной сферы значение ν_1 отклоняется от $1/3$, однако это отклонение невелико для потенциалов взаимодействия, быстро убывающих с расстоянием. Для примера рассмотрим потенциал взаимодействия Леннарда–Джонса

$$\Pi(r) = P(r^2) = \Pi_* \left[\left(\frac{a_0}{r} \right)^{12} - 2 \left(\frac{a_0}{r} \right)^6 \right],$$

где a_0 — равновесное расстояние для системы из двух атомов, Π_* — энергия связи. Для потенциала Леннарда–Джонса величина $P''(3a_0^2)$ составляет всего 0.5% от $P'''(a_0^2)$. Подстановка этого соотношения в формулу (22) показывает, что отклонение в значении коэффициента Пуассона, вызванное учетом второй координационной сферы, составляет 4%. Результаты вычисления коэффициента Пуассона по точным формулам (20) и (21) (численное решение) и приближенной формуле (22) приведены в табл. 2.

Таким образом, учет следующих координационных сфер приводит к изменению значений упругих модулей, однако для взаимодействий, быстро убывающих с расстоянием, это влияние незначительно. Отметим, что нами был рассмотрен случай $N = 2$, при котором влияние масштабного фактора наиболее заметно; для больших N влияние удаленных атомов еще менее существенно. Впрочем в трехмерном кристалле это влияние может усилиться. Так, для гранцентрированной кубической решетки расстояние до второй координационной сферы равно $\sqrt{2}a_0$ (вместо $\sqrt{3}a_0$ для двумерного случая), а соответствующее этому значение $P''(2a_0^2)$ при взаимодействии Леннарда–Джонса составляет уже 3% от $P'''(a_0^2)$ (вместо 0.5% для двумерного случая).

4. Обсуждение результатов

Результаты данной работы получены на основании рассмотрения двумерных кристаллов с ГПУ-решеткой, бесконечно протяженных в одном направлении и имеющих конечное число атомарных слоев в другом. Обсудим полученные результаты и оценим, насколько они могут быть распространены на другие типы кристаллов.

Прежде всего, выше было установлено, что в определении размера нанобъекта существует принципиальный произвол, приводящий к неоднозначности многих макроскопических характеристик, таких как напряжение, модуль Юнга, удельная объемная энергия деформирования. Выбрать универсальное определение для размера нанобъекта не удастся: если добиваться того, чтобы модули упругости были максимально близки к своим макроскопическим значениям, видоизменяются соотношения Коши–Грина и нарушается симметрия тензора упругости кристалла. Если, напротив, выполнить соотношения Коши–Грина, то значительно усиливается масштабный эффект. Отметим, что для величин, явно не зависящих от способа определения размера нанобъекта, данная неоднозначность не проявляется. Это относится, например, к коэффициентам Пуассона и энергии деформирования, отнесенной к единице массы.

Из результатов данной работы следует, что форма и размеры нанокристалла вносят анизотропию в его упругие свойства. Механические свойства бесконечной кристаллической решетки, как правило, анизотропны, однако для нанокристалла на анизотропию, связанную с видом кристаллической решетки, накладывается еще одна анизотропия, вызванная его размерами и формой.

В рассмотренной задаче при уменьшении толщины нанокристалла коэффициент Пуассона убывает, а модуль Юнга возрастает. Для особо тонких нанокристаллических пленок указанные модули могут в 2 раза отличаться от своих макроскопических значений. Данный вывод находится в хорошем соответствии с результатами, полученными при определении упругих модулей по экспериментальным данным [1], согласно которым значение модуля Юнга для тонкой пленки возрастает

при уменьшении ее толщины. Однако для выяснения универсальности этого вывода необходима его дополнительная проверка для других типов кристаллических решеток, прежде всего трехмерных.

В работе было получено, что при учете взаимодействия только с атомами первой координационной сферы коэффициент Пуассона не зависит от вида взаимодействия, а модуль Юнга определяется одной характеристикой взаимодействия — жесткостью связи. Учет взаимодействия с атомами второй координационной сферы приводит к усилению масштабного эффекта, особенно в трехмерном случае. При этом функциональный вид взаимодействия существенно влияет на значения упругих модулей. Эти свойства, очевидно, должны выполняться для всех простых кристаллических решеток, как двумерных так и трехмерных. Однако для взаимодействий, быстро убывающих с расстоянием, учет дальнейших соседей вносит лишь незначительную поправку.

Подводя итог всему вышеизложенному, можно сделать вывод, что понятия классической механики сплошной среды, и в том числе теории упругости, должны использоваться с большой осторожностью при их применении к нанобъектам. Обязательно следует учитывать изменение механических характеристик при приближении масштабов рассматриваемого объекта к нанометровым. Особое внимание необходимо уделять величинам, принципиально неоднозначным на наноуровне (таким как модуль Юнга). При их использовании следует четко определять, что именно понимается под указанными величинами в применении к нанобъектам. Однако все сказанное не означает, что классическая теория упругости полностью неприменима на наноуровне. Просто она должна использоваться с учетом масштабных эффектов, а адекватность континуального подхода следует оценивать при рассмотрении конкретных задач. Отметим, что, согласно приведенным выше расчетам, масштабные эффекты особенно существенны, если число слоев атомов в рассматриваемом объекте исчисляется единицами; масштабный фактор оказывает некоторое влияние для десятков и пренебрежимо мал для сотен атомарных слоев.

Вопрос о влиянии дискретности атомарного описания на значения механических характеристик имеет еще одно важное прикладное значение. В настоящее время метод молекулярной динамики начинает интенсивно применяться для моделирования макроскопических процессов в твердых телах [11–15]. Возникает естественный вопрос: какое минимальное количество частиц должно использоваться для достижения заданной точности расчетов. Согласно результатам настоящей работы, погрешность, вызванная заменой континуальной среды ее атомарным аналогом, приближенно равна $1/N$, где N — отношение характерного линейного размера модели к среднему межатомному расстоянию. Из данной оценки следует, что для достижения погрешности в 1% при одномерном моделировании требуется 100 частиц,

в двумерном случае — 10^4 частиц, в трехмерном — 10^6 . Расчет подобных систем вполне доступен для современных компьютеров, что свидетельствует о принципиальной возможности применения метода молекулярной динамики в макроскопической области.

Список литературы

- [1] Д.Л. Быков, Д.Н. Коновалов. Тр. XXXVI Междунар. сем. „Актуальные проблемы прочности“. Витебск (2000). С. 428.
- [2] Ю.П. Байдаровцев, Г.Н. Савенков, В.А. Тарасенко. Высокомолекуляр. соединения **A41**, 8, 1302 (1999).
- [3] J.J. Kim, H.A. Marzouk, C.C. Eloi, J.D. Robertson. J. Appl. Phys. **78**, 1, 245 (1995).
- [4] В.И. Николаев, В.В. Шпейзман, Б.И. Смирнов. ФТТ **42**, 3, 428 (2000).
- [5] А.Л. Волынский, И.В. Чернов, Н.Ф. Бакеев. ДАН **355**, 4, 491 (1997).
- [6] С.Л. Баженов, А.Л. Волынский, Е.Е. Воронина, Н.Ф. Бакеев. ДАН **367**, 1, 75 (1999).
- [7] Д.Л. Быков, Д.Н. Коновалов. Вестн. Тамб. ун-та **5**, 2–3, 224 (2000).
- [8] А.М. Кривцов, Н.Ф. Морозов. ДАН **381**, 3, 825 (2001).
- [9] А.М. Кривцов. Тр. СПбГТУ **443**, 9 (1992).
- [10] A.M. Krivtsov. Z. Angew. Math. Mech. **79**, S2, 419 (1999).
- [11] И.Ф. Головнев, Е.И. Головнева, А.А. Конев, В.М. Фомин. Физ. мезомеханика **2**, 21 (1998).
- [12] В.А. Лагунов, А.Б. Синани. ФТТ **43**, 4, 644 (2001).
- [13] F.F. Abraham, D. Brodbeck, W.E. Rudge, J.Q. Broughton, D. Schneider, B. Land, D. Lifka, J. Gerner, M. Rosenkrantz, J. Skovira, H. Gao. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering. **6**, 5, 639 (1998).
- [14] B.L. Holian, P.S. Lomdahl. Science **280**, 5372, 2085 (1998).
- [15] A.M. Krivtsov. Int. J. Impact. Eng. **23**, 1, 477 (1999).