

PACS numbers: 34.20.Cf, 36.40.Qv, 61.46.-w, 62.25.Jk, 62.25.Mn, 63.22.Kn, 81.07.-b

Моделирование разрыва атомных связей в линейной моноатомной углеродной цепочке в широком интервале температур

С. А. Котречко, Т. И. Мазилова*, И. М. Михайловский*,
Г. П. Зимина, Е. В. Саданов*

*Институт металлофизики им. Г. В. Курдюмова НАН Украины,
бульв. Акад. Вернадского, 36,
03680, ГСП, Киев-142, Украина
*Национальный научный центр
«Харьковский физико-технический институт» НАН Украины,
ул. Академическая, 1,
61108 Харьков, Украина*

На основе результатов молекулярно-динамического моделирования растяжения линейных углеродных цепочек (ЛУЦ) установлена особенность разрушения этих объектов, которая заключается в необходимости реализации коррелированных флуктуаций смещений критической величины соседних атомов. Предложена статистическая модель разрушения цепочек, которая, в отличие от общепринятых моделей, учитывает эту особенность и позволяет прогнозировать температурную зависимость прочности с наперёд заданной вероятностью разрушения. Установлен вид температурной зависимости прочности ЛУЦ, особенность которого проявляется в наличии трёх характерных областей: линейной в координатах «прочность–температура^{1/2}» и двух нелинейных (низкотемпературной и высокотемпературной). Показано, что такие особенности влияния температуры на прочность ЛУЦ обусловлены характером температурной зависимости дисперсии атомных смещений.

За результатами молекулярно-динамічного моделювання розтягу лінійних вуглецевих ланцюжків (ЛВЛ) встановлено особливість руйнування цих об'єктів, яка полягає в необхідності реалізації корельованих флуктуацій зміщень критичної величини сусідніх атомів. Запропоновано статистичну модель руйнування ланцюжків, яка, на відміну від загальноприйнятих моделей, враховує цю особливість і уможливорює прогнозування температурної залежності міцності із заздалегідь заданою ймовірністю руйнування. Встановлено вид температурної залежності міцності ЛВЛ, особливість якого виявляється в наявності трьох характерних областей:

лінійної в координатах «міцність–температура^{1/2}» і двох нелінійних (низькотемпературної та високотемпературної). У межах запропонованої моделі показано, що такі особливості впливу температури на міцність ЛВЛ обумовлені характером температурної залежності дисперсії атомних зміщень.

Based on the results of molecular-dynamics simulation of tension of linear carbon atomic chains (CACs), the feature of failure of these objects, which consists in the necessity to realize correlated fluctuations of critical displacements of the neighbouring atoms, is established. A statistical criterion of fracture of the 1D chains is proposed, which, unlike conventional criteria, accounts for this feature. Presence of three different regions (in ‘strength–temperature^{1/2}’ coordinates), namely, linear and two non-linear (low- and high-temperature) ones, is established. As shown, such features of the temperature influence on CACs strength are caused by the behaviour of a temperature dependence of the atomic-displacements’ variance.

Ключевые слова: углеродные моноатомные цепочки, нанокластеры, предельная прочность, МД-моделирование.

(Получено 19 декабря 2013 г.; окончат. вариант — 27 марта 2014 г.)

1. ВВЕДЕНИЕ

Квантовые провода в последние годы интенсивно исследуются в связи с возможностью их использования в оптике и наноэлектронике. Повышенный интерес к исследованию линейных углеродных цепочек (карбинов) обусловлен, прежде всего, их научной значимостью и нанотехнологическим потенциалом. Продолжающаяся миниатюризация наноэлектронных устройств делает перспективным использование линейных углеродных цепочек (ЛУЦ) с уникальными механическими и электрическими свойствами в качестве межкомпонентных соединений [1–3]. Одной из ключевых особенностей бездефектных наноразмерных кристаллов (кластеров) является то, что возможность реализации их уникальных функциональных свойств в значительной степени контролируется их механическими свойствами. Более того, упругая деформация позволяет кардинально влиять на электрические, магнитные и другие функциональные свойства этих объектов. Наиболее ярко это проявляется на моноатомных линейных цепочках. Классическим примером этому может быть пайерлсовский переход «металл–диэлектрик», который имеет место при 3% деформации бесконечной моноатомной углеродной цепочки [4]. Деформация линейной углеродной цепочки с конечным числом атомов существенно влияет на ширину запрещенной зоны [5]. С другой стороны, предельная величина тока в ЛУЦ, а также их технологический ресурс контролируется термической стабильностью цепочки.

Попытка решить задачу термически активированного разрушения одномерных кристаллов предпринималась в работах [6–8]. В этих работах условие потери стабильности одномерного кристалла формулировалось в общей постановке. При этом авторам не удалось получить выражение для прочности цепочки в аналитическом виде, за исключением частных случаев малых напряжений разрушения и низких температур. На основе выполненных в работе [8] расчетов был сделан вывод, что прочность одномерных кристаллов должна быть всегда ниже прочности трехмерных. Это противоречит результатам экспериментальных данных, полученных на графене [9] и линейных углеродных цепочках [10, 11], а также результатам компьютерного моделирования [12]. В связи с этим, цель работы заключалась в выполнении молекулярно-динамического (МД) моделирования влияния температуры на прочность ЛУЦ и разработке модели термомеханического разрушения одномерных кристаллов.

2. МЕТОДИКА

Для компьютерного моделирования использовалось программное обеспечение, которое было разработано на основе, предложенной в работе [5] методики МД-моделирования. В процессе моделирования к свободному концу углеродной цепочки из 9 атомов прикладывалась сила F , которая была направлена вдоль оси цепочки. После достижения механического равновесия «включался» термостат, который обеспечивал поддержание заданной температуры T . В соответствии с предложенным в работе [5] протоколом, три компоненты скорости атома задавались через каждые $n \cdot 10^{-15}$ с (где n — численный множитель, равный ≈ 10) как случайные числа в соответствии с распределением Максвелла для заданной температуры T . Максимальное время нагрузки составляло 177 пс, что примерно соответствует 100000 временных шагов моделирования. Такая продолжительность численного эксперимента была достаточной для получения статистических характеристик разрушения цепочки, кроме того, такие короткие временные интервалы нагрузки ЛУЦ реализуются в реальных технологических процессах высокополевого их формирования в сильных электрических полях [13].

Одной из проблем моделирования больших деформаций и разрыва углеродных цепочек является выбор потенциала межатомного взаимодействия. Так, например, в работе [14] при моделировании процесса анравелинга (вытягивания) линейной моноатомной цепочки атомов углерода из нанотрубки, использовался оригинальный вариант потенциала Бреннера [15], что привело более чем к трехкратному завышению прочности цепочки. Как показано в [16], это обусловлено тем, что потенциал Бреннера позволяет корректно описать межатомное взаимодействие при деформациях, не превы-

шающих 15%.

Этот недостаток практически не ощущается при расчете равновесной атомной структуры и термодинамических характеристик углеродных материалов, однако имеет принципиальное значение при моделировании разрушения. В связи с этим в данной работе использовался модифицированный потенциал Бреннера. Он в области деформаций до 15% совпадает с оригинальным потенциалом Бреннера [14], однако дает корректное описание межатомного взаимодействия при критической и закритической деформациях. Этот потенциал, в частности, был апробирован в работах [16, 17]. Радиус обрезания в таком потенциале составляет $R = 2,8 \text{ \AA}$. Равновесное межатомное расстояние — $1,39 \text{ \AA}$ (рис. 1). Этот потенциал дает значение величины максимальной силы межатомного взаимодействия

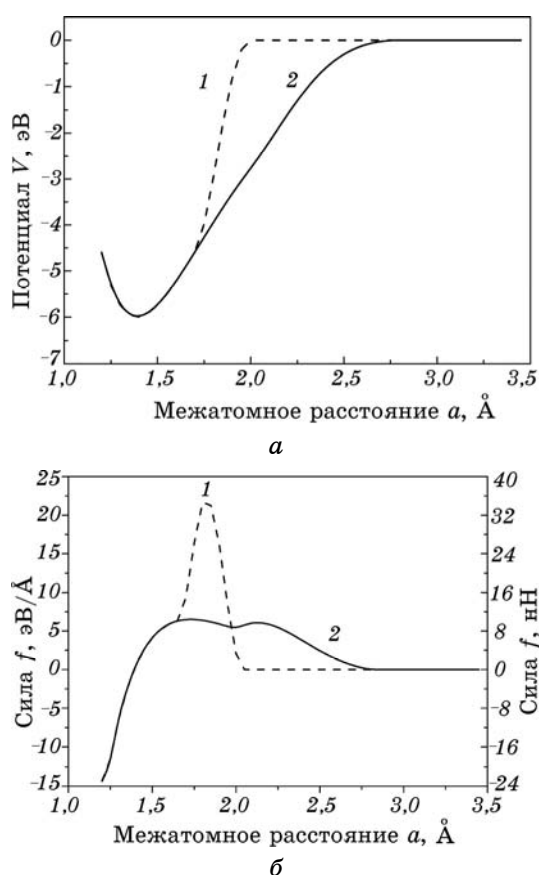


Рис. 1. Зависимость энергии межатомного взаимодействия $V(a)$ и силы $f(b)$ от межатомного расстояния a : 1 — оригинальный потенциал Бреннера; 2 — модифицированная версия потенциала Бреннера.

(критическая сила потери устойчивости связи) равно $F_c = 10,466$ нН ($6,533$ эВ/Å) при значении деформации 24% (межатомное расстояние $1,73$ Å). Значение критической деформации разрыва межатомной связи равно 101% (межатомное расстояние $2,80$ Å). Необходимо отметить, что используемый потенциал имеет особенность в окрестности деформации $\cong 44\%$, что является следствием сохранения брэннеровского формализма при описании межатомного взаимодействия. Однако, как показали выполненные в настоящей работе расчеты, в первом приближении влиянием этой особенности на закономерности разрушения цепочек можно пренебречь. Аналитическое выражение для энергии межатомного взаимодействия имеет вид:

$$E_b = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j>i} [V^R(r_{ij}) - B_{ij}V^A(r_{ij})], \quad (1)$$

где r_{ij} — расстояние между атомами i и j , V^R и V^A — энергии парного центрального взаимодействия для отталкивания и притяжения, B_{ij} — параметр, учитывающий эффект многочастичного (many-body) взаимодействия между атомами.

Моделирование выполнялось для двух условий нагрузки: (i) при постоянной скорости деформации цепочки (абсолютно жесткое нагружение) и (ii) при постоянной силе нагружения (абсолютно мягкое нагружение). Эти две крайние схемы нагружения позволяют проанализировать весь диапазон особенностей кинетики деформации и разрушения ЛУЦ. Анализировались закономерности изменения деформации всей цепочки e и деформации отдельной межатомной связи ε (относительного изменения расстояния между соседними атомами).

3. РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

3.1. Кинетика термоактивированного разрыва углеродных цепочек

Рисунок 2 иллюстрирует закономерности изменения длины межатомной связи в процессе деформации ЛУЦ в широком интервале температур. На этих графиках горизонтальными линиями показаны значения расстояний между атомами, при которых имеет место потеря стабильности межатомной связи a_c и ее разрыв a_f . В соответствии с полученными результатами, даже в условиях жесткой схемы нагружения, деформация цепочки протекает существенно неоднородно. Это проявляется в локализации деформации в пределах одной межатомной связи. Причиной этой локализации является флуктуация межатомных расстояний, которая обусловлена тепловыми колебаниями атомов.

Так, например, даже при низких температурах ($T = 77$ К) разрыв цепочки наблюдается при деформации всей цепочки $e_f = 19,6\%$, при этом деформация ε разрыва межатомной связи почти на порядок

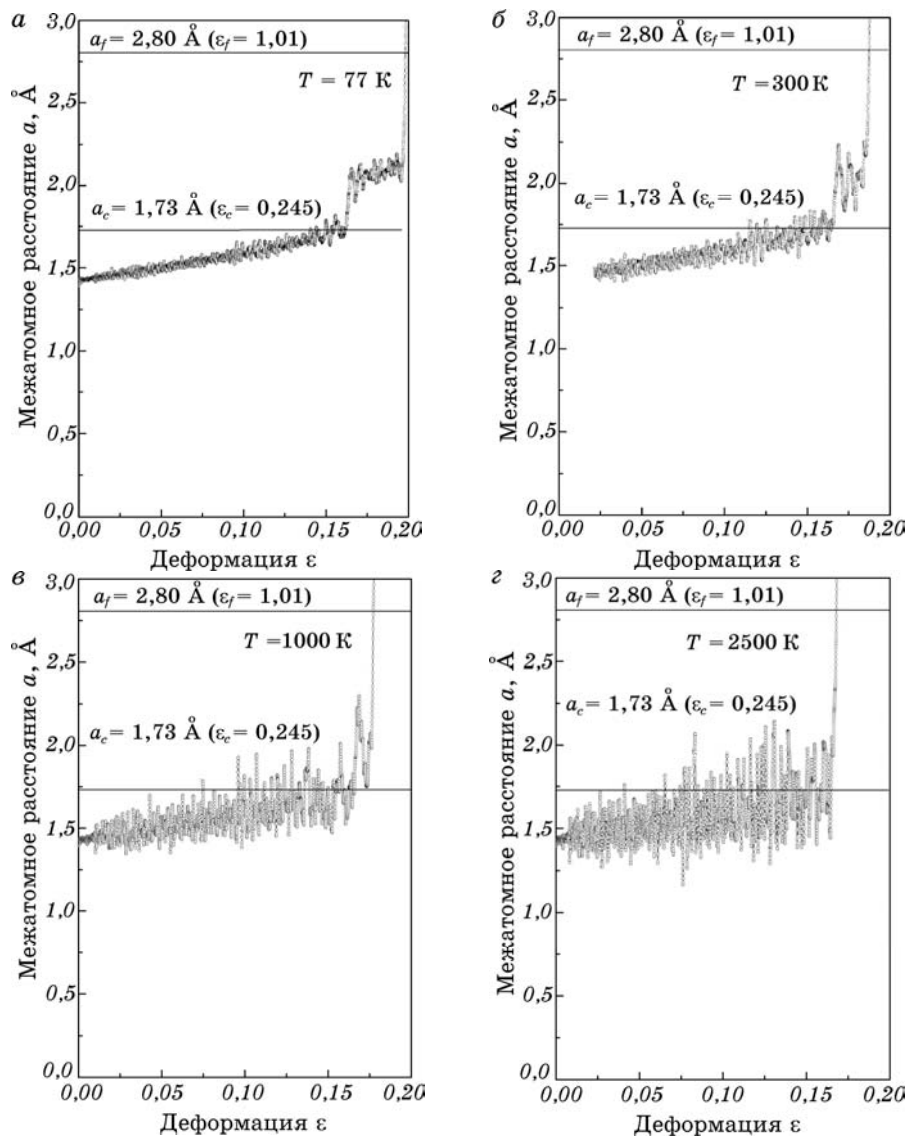


Рис. 2. Зависимость межатомного расстояния a от деформации $\Delta a/a_0$ цепочки для $T = 77$ К (а), $T = 300$ К (б), $T = 1000$ К (в), $T = 2500$ К (г): a_c и a_f — значения межатомных расстояний потери стабильности и разрыва межатомных связей соответственно; ε_c и ε_f — критические деформации потери устойчивости и разрыва межатомной связи.

выше и составляет $\varepsilon_f = 101\%$. С ростом температуры этот эффект усиливается. Об этом свидетельствует не только уменьшение величины критической деформации разрыва цепочки и уменьшение наклона зависимости a от e , но в первую очередь, появление значительных («гигантских») флуктуаций перемещений атомов. При этом следует подчеркнуть, что при флуктуациях межатомного расстояния, превышающих значение критической величины a_c , необходимой для потери устойчивости межатомной связи, разрыва цепочки не наблюдается. Этот эффект обусловлен двумя основными факторами, а именно: (i) жесткой схемой нагружения ($\dot{e} = \text{const}$), которая не способствует «перекачке» накопленной в цепочке потенциальной энергии в область, где межатомное взаимодействие ослаблено, а также (ii) необходимостью реализации скоррелированной флуктуации перемещений соседних атомов (корреляционный эффект).

Необходимо отметить, что при увеличении межатомного расстояния до 2 \AA (рис. 2, *a*, и рис. 2, *б*) наблюдаются особенности на зависимости межатомного расстояния от величины деформации цепочки, что обусловлено наличием «выступа» на ниспадающей ветви используемого потенциала (рис. 1, *б*). С повышением температуры эти особенности практически исчезают (рис. 2, *в* и рис. 2, *б*).

Ангармонизм колебаний является одним из факторов, оказывающим влияние на кинетику тепловых колебаний атомов. Закономерности флуктуаций межатомных расстояний и локальных сил взаимодействия первого и второго атома в цепочке при гармонических (приложенная сила — $4,81 \text{ нН}$) и ангармонических колебаниях (растягивающая сила — $8,01 \text{ нН}$) продемонстрированы на рис. 3 и рис. 4. В соответствии с этими данными, при переходе в область ангармонических колебаний ($F = 8,01 \text{ нН}$) амплитуда колебаний атомов увеличилась примерно на 70% , однако флуктуация силы взаимодействия в цепочке наоборот уменьшилась на $\cong 10\%$.

Закономерности флуктуации значений локальной деформации связи между 3 и 4 атомами цепочки и локальных усилий, действующих между этими атомами при постоянной нагрузке $F = 9,2 \text{ нН}$ и температуре $T = 289 \text{ К}$, приведены на рис. 4. В соответствии с результатами МД-моделирования, разрушение ЛУЦ в этих условиях произошло по связи между 3 и 4 атомами через 40 пс после нагружения цепочки. Характерной особенностью кинетики разрыва цепочки при постоянной величине нагрузки и $T = 289 \text{ К}$ и выше является то, что задолго до разрыва цепочки в целом величина локальной силы межатомного взаимодействия f достигает критического значения f_c , при котором происходит потеря стабильности межатомной связи ($f_c = 10,464 \text{ нН}$) (рис. 4, *б*). А величина деформации отдельной межатомной связи — критического значения ε_c (рис. 4, *a* и рис. 5).

Таким образом, даже в условиях постоянного значения действу-

ющего усилия на цепочку, потеря стабильности отдельной меж-
атомной связи еще не означает разрыва цепочки в целом.

Для нарушения целостности цепочки необходимо, чтобы это
условие одновременно выполнялось для соседней связи. Это свиде-

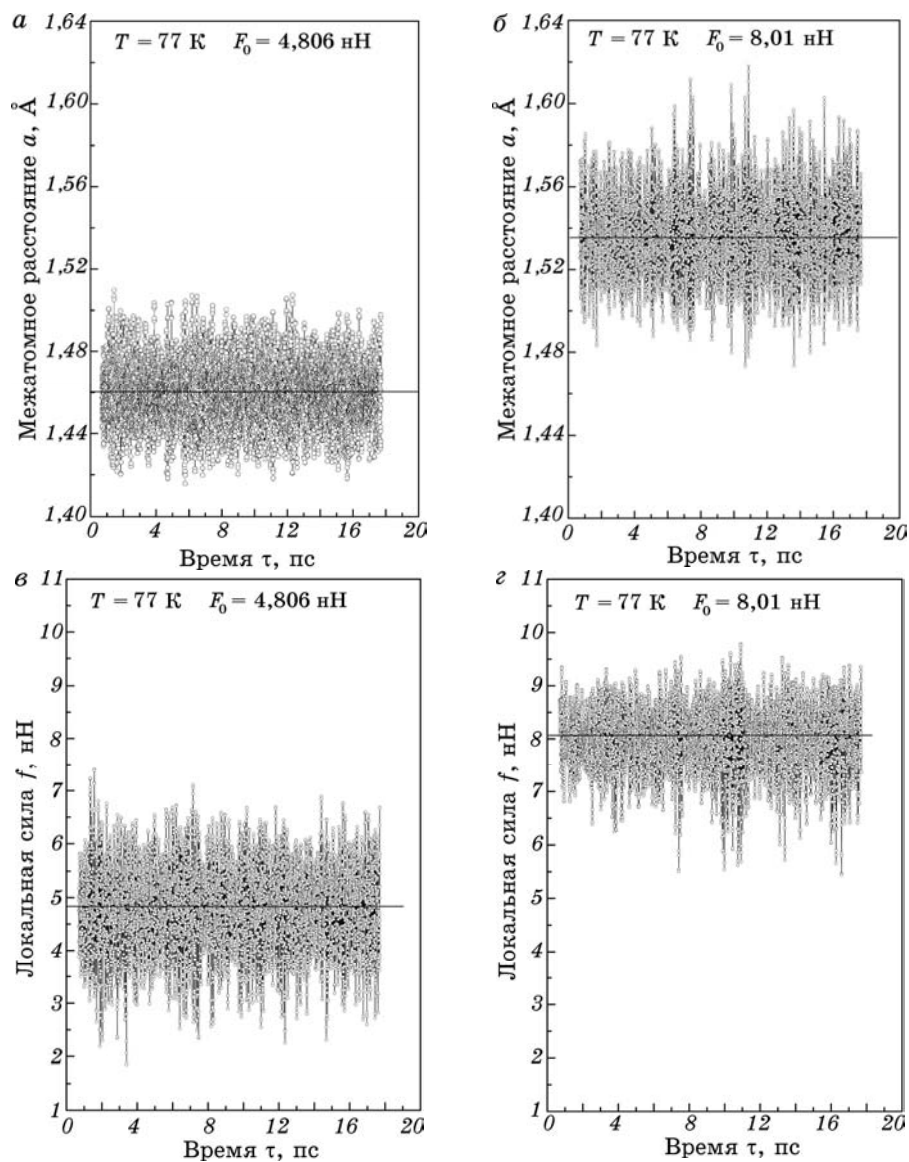


Рис. 3. Флуктуации межатомных расстояний (*a*, *б*) и локальных сил f (*в*, *г*) в ЛУЦ при $T = 77$ К и двух уровнях нагружения цепочки: $F = 4,81$ нН (*a*, *в*), $F = 8,01$ нН (*б*, *г*).

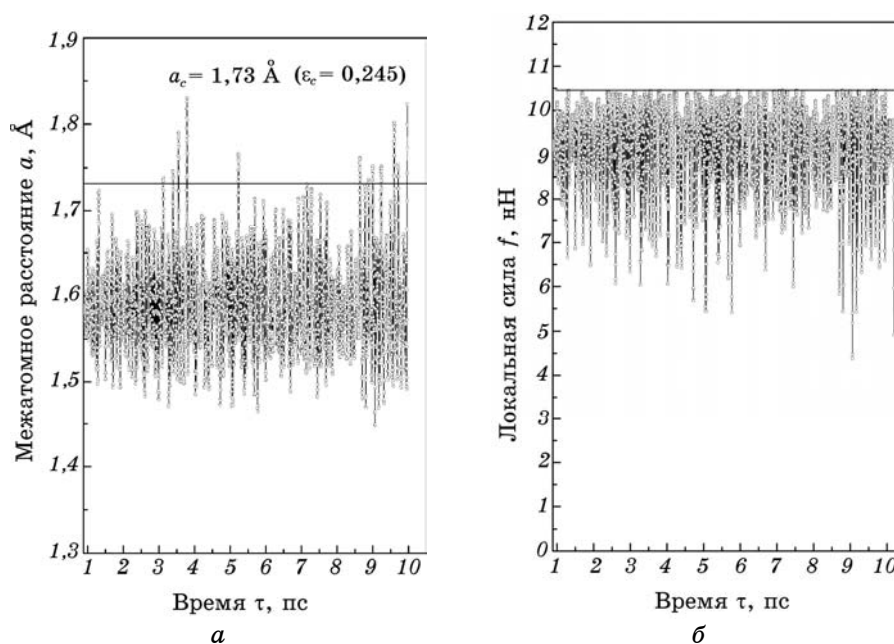


Рис. 4. Флуктуации межатомного расстояния (а) и локальной силы (б) для ЛУЦ при $T = 289 \text{ К}$ и нагрузке разрыва цепочки $F = 9,2 \text{ нН}$.

тельствует об определяющей роли корреляционных эффектов, связанных с закономерностями перераспределения деформаций и усилий в окрестности связи, утратившей стабильность.

3.2. Температурная зависимость прочности

Термофлуктуационный механизм разрыва межатомных связей в ЛУЦ является причиной зависимости прочности цепочек от температуры. Для установления закономерностей влияния температуры на прочность цепочки выполнялось компьютерное моделирование разрыва ЛУЦ в широком интервале значений температур от 0 К до 6000 К при постоянном значении приложенной нагрузки. На рисунке 6 приведены температурные зависимости величины нагружения разрушения F_c при значениях среднего времени до разрушения 4 пс и 40 пс . На этом же графике нанесена шкала напряжений, которые определены из расчета, что эффективный диаметр, через который передается силовое взаимодействие между атомами ЛУЦ, составляет 2 \AA [10, 17]. В соответствии с результатами моделирования, в интервале температур $0\text{--}6000 \text{ К}$ прочность ЛУЦ уменьшается более чем в 4 раза. При температурах нагружения, меньших 300 К , изменение времени нагружения на порядок практически не влияет

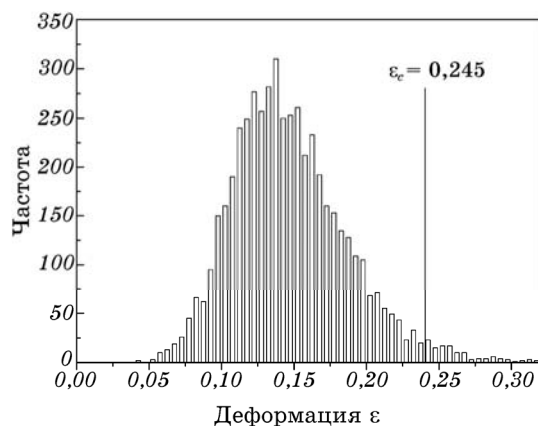


Рис. 5. Гистограмма распределения относительной величины межатомных перемещений $\varepsilon = \Delta a/a_0$ для ЛУЦ при $T = 289$ К и нагрузке $F = 9,2$ нН.

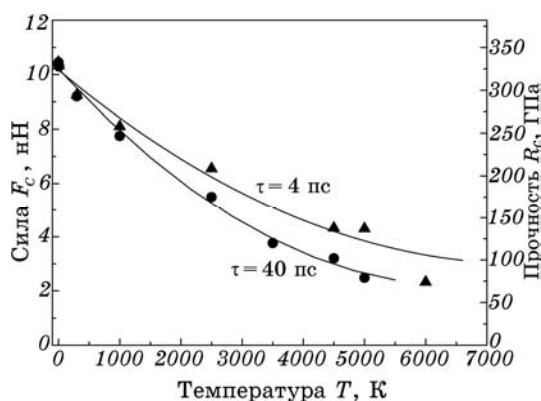


Рис. 6. Температурные зависимости прочности ЛУЦ для двух значений среднего времени до разрушения: 4 и 40 пс. Значение прочности R_c получено в предположении, что диаметр цепочки равен 2 \AA [10, 17].

на уровень прочности цепочки. В то же время, при температуре 5000 К при росте времени нагружения от 4 до 40 пс прочность падает почти в 2 раза.

4. МОДЕЛЬ ТЕРМОАКТИВИРОВАННОГО РАЗРУШЕНИЯ ОДНОМЕРНЫХ КРИСТАЛЛОВ

Общепринятый подход к анализу процесса термофлуктуационного разрушения основывается на теории реакций Аррениуса [18]. В соответствии с этим подходом для разрыва межатомной связи вели-

чина флуктуации энергии атома должна быть достаточной для преодоления энергетического барьера, высота которого, в свою очередь, корректируется приложенным напряжением. При этом, в принципе, не учитываются корреляционные эффекты, поскольку постулируется достаточность появления одной критической флуктуации для разрушения кристалла. В случае линейных моноатомных цепочек это означает, что при их деформации при постоянной нагрузке и малой ее величине такой подход переоценивает прочность цепочки.

Наиболее благоприятными для разрушения являются нагружения, при которых цепочка растягивается при постоянной величине прикладываемого усилия F . При таких условиях прочность достигает своего минимального уровня и в наибольшей степени зависит от температуры и времени нагружения. В соответствии с результатами МД первое приближение для вероятности P_f разрушения цепочки может быть сформулировано следующим образом:

$$P_f \approx P(\varepsilon > \varepsilon_c; \varepsilon' > \varepsilon_c), \quad (2)$$

где $P(\varepsilon > \varepsilon_c; \varepsilon' > \varepsilon_c)$ — вероятность того, что величины деформаций ε и ε' двух соседних межатомных связей превысят значение критической деформации ε_c потери стабильности межатомной связи. В этом случае:

$$P(\varepsilon > \varepsilon_c; \varepsilon' > \varepsilon_c) = \int_{\varepsilon_c}^{\varepsilon_{\max}} \int_{\varepsilon_c}^{\varepsilon_{\max}} g(\varepsilon, \varepsilon') d\varepsilon d\varepsilon'. \quad (3)$$

В первом приближении функция $g(\varepsilon, \varepsilon')$ может быть аппроксимирована двумерным нормальным распределением:

$$P(\varepsilon > \varepsilon_c; \varepsilon' > \varepsilon_c) = \frac{1}{2\pi\sqrt{D(1-r^2)}} \int_{\varepsilon_c}^{\varepsilon_{\max}} \int_{\varepsilon_c}^{\varepsilon_{\max}} \left[-\frac{\delta\varepsilon^2 - 2r\delta\varepsilon\delta\varepsilon' + (\delta\varepsilon')^2}{2D(1-r^2)} \right] d\varepsilon d\varepsilon', \quad (4)$$

где $\delta\varepsilon = \varepsilon - e$, а $\delta\varepsilon' = \varepsilon' - e$ ($\varepsilon, \varepsilon'$ — деформации двух соседних межатомных связей соответственно, e — средняя величина этих деформаций), r — коэффициент корреляции локальных деформаций ε и ε' , D — дисперсия деформации межатомных связей.

Значение этого интеграла нельзя выразить в элементарных функциях, однако его величина однозначно задается величиной параметра Z_c :

$$Z_c = \sqrt{\frac{\delta\varepsilon_c^2 - 2r\delta\varepsilon_c\delta\varepsilon_c + \delta\varepsilon_c^2}{D(1-r^2)}}, \quad (5)$$

где $\delta\varepsilon_c = \varepsilon_c - e$, ε_c — критическая деформация потери стабильности межатомной связи, e — средняя деформация межатомной связи.

После преобразования получим:

$$Z_c = \delta \varepsilon_c / \sqrt{D(1+r)/2}. \quad (6)$$

Зависимость (6) позволяет получить выражение для e_c :

$$e_c = \varepsilon_c - Z_c \sqrt{D(1+r)/2}. \quad (7)$$

В первом приближении величина средней деформации межатомной связи e_c равна деформации всей цепочки e_f . Соответственно, выражение для критического значения прочности F_f цепочки:

$$F_f = \bar{E} \left[\varepsilon_c - Z_c \sqrt{D(1+r)/2} \right], \quad (8)$$

где \bar{E} — секущий модуль (согласно данным на рис. 1, при $F \cong 4-5$ ГПа, величина \bar{E} примерно совпадает со значением модуля растяжения E ; при больших F его величина меньше E и зависит от значения деформации e_f).

Параметр Z_c характеризует вероятность разрыва цепочки. При этом увеличение значения параметра Z_c означает уменьшение вероятности разрушения и наоборот. В условиях нагружения цепочки постоянным усилием вероятность разрушения задает время до момента разрыва связи. Величина дисперсии D деформаций межатомных связей зависит от температуры нагружения цепочки. Таким образом, предложенная модель позволяет описать влияние на прочность одномерных кристаллов двух определяющих факторов: температуры и времени нагружения.

В общем случае зависимость дисперсии D от температуры является нелинейной [19, 20]. В области низких температур ($T < \theta_D$, где θ_D — температура Дебая) D нелинейно растет с увеличением температуры T . При $T \geq \theta_D$ величина D пропорциональна температуре T и при предплавильных температурах снова наблюдается нелинейный участок, обусловленный ангармонизмом колебаний. С учетом (8) такой характер температурной зависимости дисперсии D хорошо согласуется с результатами МД-моделирования разрыва ЛУЦ в широком интервале температур (рис. 7). В соответствии с этими данными на температурной зависимости « $F_c - T^{1/2}$ » можно выделить три области: I — низкотемпературная область ($0 \text{ К} < T \leq 400 \text{ К}$), где наблюдается отклонение от линейной зависимости в этих координатах; II — область, где наблюдается линейная зависимость ($400 \text{ К} \leq T \leq 3000 \text{ К}$) и III — высокотемпературная нелинейная область ($T > 3000 \text{ К}$). Следует заметить, что наряду с изменением величины дисперсии D дополнительный вклад в температурную зависимость прочности может давать влияние температуры на величину параметров \bar{E} и r .

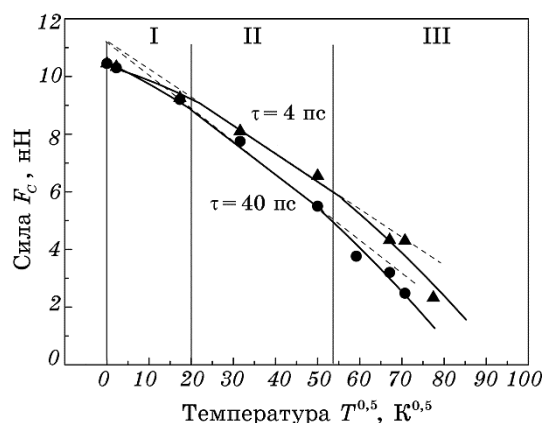


Рис. 7. Зависимости прочности цепочки от корня квадратного из температуры при двух значениях среднего времени до разрушения: 4 пс и 40 пс. I, II, III — три характерные области.

5. ВЫВОДЫ

1. При термоактивированном разрыве линейных атомных цепочек ключевую роль играет корреляционный эффект, который проявляется в том, что разрыв цепочки наступает только при согласованной (одновременной) потере стабильности соседних связей.

2. В отличие от классических моделей, предложенная статистическая модель разрыва линейных атомных цепочек учитывает ключевую особенность процесса разрушения цепочки — корреляционный эффект, а также позволяет прогнозировать температурную зависимость прочности цепочки с наперед заданной вероятностью ее разрыва.

3. Характерной особенностью температурной зависимости прочности F_f линейной углеродной цепочки является наличие трех характерных областей: нелинейных в координатах «прочность–температура^{1/2}» при низких ($T \leq 400$ К) и высоких ($T \geq 3000$ К) температурах, а так же линейной в области промежуточных ($400 \text{ К} \leq T \leq 3000$ К) температур. Основным фактором, который обуславливает такой характер температурной зависимости прочности, является влияние температуры на величину флуктуации атомных перемещений в цепочке.

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. M. Bianchetti, P. F. Bounsante, F. Ginnelli, H. E. Roman, R. A. Broglia, and F. Alasia, *Phys. Rep.*, **357**: 459 (2002).
2. F. J. Riberto, D. J. Roundy, and M. L. Cohen, *Phys. Rev. B*, **65**: 153401 (2002).

3. N. D. Lang and P. Avouris, *Nano Lett.*, **3**: 737 (2003).
4. V. I. Artyukhov and M. Liu, *arXiv:1302.7250v2* [cond-mat.mtrl-sci], June 1, 2013.
5. Y. Wang, X.-J. Ning, Z.-Z. Lin, P. Li, and J. Zhuang, *Phys. Rev. B*, **76**: 165423 (2007).
6. K. Nishioka, S. Nakamura, T. Shimamoto, and H. Fujiwara, *Scr. Metallurgica*, **14**: 497 (1980).
7. В. Л. Гиляров, А. Б. Пахомов, *Физика твёрдого тела*, **23**, № 6: 1569 (1981).
8. В. Л. Гиляров, *Физика твёрдого тела*, **25**, № 3: 944 (1983).
9. Ch. Lee, X. Wei, J. W. Kysar, and J. Hone, *Science*, **321**: 385 (2008).
10. I. M. Mikhailovskij, E. V. Sadanov, S. Kotrechko, V. Ksenofontov, and T. I. Mazilova, *Phys. Rev. B*, **87**: 045410 (2013).
11. S. Kotrechko, I. Mikhailovskij, T. Mazilova, and O. Ovsjannikov, *Key Engineering Materials*, **592–593**: 301 (2014).
12. S. Bahn and K. W. Jacobsen, *Phys. Rev. Lett.*, **87**: 266101 (2001).
13. E. V. Sadanov, T. I. Mazilova, I. M. Mikhailovskij, V. A. Ksenofontov, and A. A. Mazilov, *Phys. Rev. B*, **84**: 035429 (2011).
14. T. Ragab and C. Basaran, *J. Electronic Packaging*, **133**: 020903 (2011).
15. D. W. Brenner, O. A. Shenderova, J. A. Harrison, S. J. Stuart, B. Ni, and S. B. Sinnott, *J. Phys.: Condens. Matter*, **14**: 783 (2002).
16. T. Belytschko, S. P. Xiao, G. C. Schatz, and R. S. Ruoff, *Phys. Rev. B*, **65**: 235430 (2002).
17. T. I. Mazilova, S. Kotrechko, E. V. Sadanov, V. A. Ksenofontov, and I. M. Mikhailovskij, *Int. J. Nanoscience*, **9**, No. 3: 151 (2010).
18. В. Штиллер, *Уравнение Аррениуса и неравновесная кинетика* (Москва: Мир: 2000).
19. Г. Лейбфрид, *Микроскопическая теория механических и тепловых свойств кристаллов* (Москва: ГИФМЛ: 1963).
20. C. G. Rodrigues, J. N. Teixeira Rabelo, and V. I. Zubov, *Brazilian Journal of Physics*, **36**, No. 2B: 592 (2006).

REFERENCES

1. M. Bianchetti, P. F. Bounsante, F. Ginnelli, H. E. Roman, R. A. Broglia, and F. Alasia, *Phys. Rep.*, **357**: 459 (2002).
2. F. J. Riberto, D. J. Roundy, and M. L. Cohen, *Phys. Rev. B*, **65**: 153401 (2002).
3. N. D. Lang and P. Avouris, *Nano Lett.*, **3**: 737 (2003).
4. V. I. Artyukhov and M. Liu, *arXiv:1302.7250v2* [cond-mat.mtrl-sci], June 1, 2013.
5. Y. Wang, X.-J. Ning, Z.-Z. Lin, P. Li, and J. Zhuang, *Phys. Rev. B*, **76**: 165423 (2007).
6. K. Nishioka, S. Nakamura, T. Shimamoto, and H. Fujiwara, *Scr. Metallurgica*, **14**: 497 (1980).
7. V. L. Gilyarov and A. B. Pahomov, *Fizika Tverdogo Tela*, **23**, No. 6: 1569 (1981) (in Russian).
8. V. L. Gilyarov, *Fizika Tverdogo Tela*, **25**, No. 3: 944 (1983) (in Russian).
9. Ch. Lee, X. Wei, J. W. Kysar, and J. Hone, *Science*, **321**: 385 (2008).
10. I. M. Mikhailovskij, E. V. Sadanov, S. Kotrechko, V. Ksenofontov, and T. I. Mazilova, *Phys. Rev. B*, **87**: 045410 (2013).

11. S. Kotrechko, I. Mikhailovskij, T. Mazilova, and O. Ovsjannikov, *Key Engineering Materials*, **592–593**: 301 (2014).
12. S. Bahn and K. W. Jacobsen, *Phys. Rev. Lett.*, **87**: 266101 (2001).
13. E. V. Sadanov, T. I. Mazilova, I. M. Mikhailovskij, V. A. Ksenofontov, and A. A. Mazilov, *Phys. Rev. B*, **84**: 035429 (2011).
14. T. Ragab and C. Basaran, *J. Electronic Packaging*, **133**: 020903 (2011).
15. D. W. Brenner, O. A. Shenderova, J. A. Harrison, S. J. Stuart, B. Ni, and S. B. Sinnott, *J. Phys.: Condens. Matter*, **14**: 783 (2002).
16. T. Belytschko, S. P. Xiao, G. C. Schatz, and R. S. Ruoff, *Phys. Rev. B*, **65**: 235430 (2002).
17. T. I. Mazilova, S. Kotrechko, E. V. Sadanov, V. A. Ksenofontov, and I. M. Mikhailovskij, *Int. J. Nanoscience*, **9**, No. 3: 151 (2010).
18. W. Stiller, *Uravnenie Arrheniusa i Neravnovesnaya Kinetika (Arrhenius Equation and Non-Equilibrium Kinetics)* (Moscow: Mir: 2000) (in Russian).
19. G. Leibfried, *Microscopicheskaya Teoriya Mekhanicheskikh i Teplovykh Svoystv Kristallov (Microscopic Theory of the Mechanical and Thermal Properties of Crystals)* (Moscow: GIFML: 1963) (in Russian).
20. C. G. Rodrigues, J. N. Teixeira Rabelo, and V. I. Zubov, *Brazilian Journal of Physics*, **36**, No. 2B: 592 (2006).