

УДК 539.534.9:53.072.23

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ИМПУЛЬСНЫХ ПУЧКОВ ИОНОВ С МЕТАЛЛАМИ

© 2020 г. И. В. Пузынин^а, Т. П. Пузынина^а, И. Г. Христов^б, Р. Д. Христова^а,
З. К. Тухлиев^а, *, З. А. Шарипов^а

^аОбъединенный институт ядерных исследований, Дубна, 141980 Россия

^бСофийский университет “Св. Климент Охридски”, София, 1504 Болгария

*e-mail: zafar@jinr.ru

Поступила в редакцию 14.01.2020 г.

После доработки 10.02.2020 г.

Принята к публикации 14.02.2020 г.

Методом молекулярной динамики проведено моделирование процессов взаимодействия импульсных пучков ионов с металлическими мишенями. Основными параметрами импульсного пучка ионов, взаимодействующего с мишенью, являются энергия ионов, длительность импульса и плотность заряда на единицу площади мишени. При использовании усредненных значений этих параметров ионных пучков, опубликованных для различных типов ускорителей, выполнено численное исследование зависимости от них динамики тепловых и структурных процессов в облучаемых мишенях при изменении размеров и неоднородностей структуры. Моделирование процессов облучения и оценки распределения ионов пучка в объеме проведены в диапазоне значений энергии ионов 1–2 кэВ в рамках концепции ударной волны. Результаты важны для развития модели импульсного пучка ионов и классификации типов структурных изменений облучаемого материала в зависимости от параметров модели.

Ключевые слова: моделирование, метод молекулярной динамики, импульсные пучки ионов, разрушение мишени, ударная волна.

DOI: 10.31857/S1028096020120249

ВВЕДЕНИЕ

Экспериментальные и теоретические исследования в таких направлениях радиационной физики, как стойкость конструкционных материалов к радиоактивному облучению и целенаправленное изменение свойств материалов путем их облучения пучками частиц, проводятся в России более 40 лет. Использование в экспериментах в качестве источников облучения мощных импульсных пучков (МИП) ионов [1–5] может, несмотря на различия механизмов взаимодействия материалов с другими источниками, значительно сократить время получения целевых результатов исследований. Это возможно при адекватном теоретическом описании основных механизмов взаимодействия МИП с мишенью и их зависимости от параметров пучка. Основными параметрами импульсного пучка ионов, взаимодействующего с мишенью, являются энергия ионов, длительность импульса и плотность заряда на единицу площади мишени. Используя эти параметры, можно приближенно оценить количество ионов, падающих на единицу площади поверхности мишени, в зависимости от времени, и это яв-

ляется важной информацией для математического моделирования. Однако распределение ионов пучка в объеме — не полностью определяемая информация на основе параметров МИП, которая может влиять на результаты теоретических расчетов. Под распределением частиц в пространстве на выходе ускорителя в общем случае понимают число частиц, приходящихся на единицу объема, в зависимости от трех координат: продольной Z , совпадающей с направлением пучка, и двух поперечных X и Y [6–8]. Таким образом, необходимо более точно оценить количество ионов в импульсе пучка, взаимодействующего с мишенью. Отметим, что теоретические и экспериментальные характеристики различных материалов отличаются иногда на порядки. Например, теоретические и экспериментальные прочностные свойства металлов и некоторых сплавов различаются на два–три порядка [9, 10]. Это в основном связано с тем, что теоретические расчеты основаны на структуре идеальных кристаллов, а реальные кристаллы могут содержать примеси и различные дефекты. Следовательно, теоретические исследования необходимо выполнять с учетом возможных нару-

шений идеальной структуры мишени до ее облучения.

В настоящее время в связи с развитием высокопроизводительных вычислительных систем и технологий параллельного программирования математическое моделирование на основе метода молекулярной динамики (МД) [11, 12] становится актуальным в широких областях науки и техники, в том числе и для решения обсуждаемых здесь задач. Целью настоящей работы было получение информации для развития модели импульсного пучка ионов путем моделирования методом МД взаимодействия МИП ионов с энергией 1–2 кэВ с металлическими мишенями в зависимости от распределения пучка в объеме, а также моделирование облучения мишени с дефектом структуры.

ПАРАМЕТРЫ МОДЕЛИ И ПОЛУЧЕННЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Как было указано выше, основными параметрами МИП для моделирования взаимодействия пучка с мишенью в рамках метода МД являются энергия ионов, длительность импульса и плотность заряда на единицу площади мишени. Эти параметры для различных типов ускорителей приведены в [6–8]. Средние значения параметров МИП в импульсе для модификации поверхности мишеней следующие: плотность мощности пучка $P = 10^6 - 10^{10}$ Вт/см², энергия ионов $E_0 = 100 - 1000$ кэВ, длительность импульса $\tau = 10^{-8} - 10^{-6}$ с, площадь облучения $S = 10 - 50$ см² [5]. Используя эти данные, в настоящей работе проводили моделирование облучения металлической мишени импульсными пучками ионов с энергией 1–2 кэВ, так как при этой энергии в основном происходят упругие потери энергии ионов, налетающих на мишень, а неупругими потерями энергии можно пренебречь.

Ранее [13–15] авторы моделировали процессы в мишени из меди при облучении нанокластерами меди, поэтому в настоящей работе использованы медная мишень и ионы меди, а также аналогичная модель пучка. В одном импульсе пучка моделируются одновременные взаимодействия двух–четырех атомов иона меди в различных областях поверхности мишени. Параметры импульсных пучков ионов при моделировании: энергия ионов 1–2 кэВ, плотность частиц $10^{13} - 10^{14}$ атом/см² (0.1–1 атом/нм²). При энергии ионов 1–2 кэВ их пробег в мишени составляет несколько десятков нанометров, а площадь облучения – несколько квадратных сантиметров, и это дает возможность использовать при моделировании периодические граничные условия. Использование периодических граничных условий позволяет изменить плотность частиц при изменении размера мишени вдоль осей x и y [16, 17]. При моде-

лировании размер мишени в форме параллелепипеда выбирали из диапазона $(2-10) \times (2-10) \times (40-80)$ нм с периодическими граничными условиями в направлениях x и y , облучение проводили в направлении z , где мишень граничит с вакуумом. Моделирование проводили с использованием пакета LAMMPS [18], а в качестве межатомного потенциала брали EAM (Embedded Atom Model) [19] – потенциал для меди, встроенный в пакет LAMMPS. Результаты расчета визуализировали с помощью программы OVITO [20]. Они представлены как визуализация структуры мишени, в которой цвет частицы соответствует ее энергии в различные моменты времени. На первом этапе моделирование проводили для идеальных кристаллических решеток. На рис. 1 в качестве примера показаны результаты, полученные при моделировании облучения мишени из меди импульсным пучком, состоящим из четырех атомов меди с энергией 1 кэВ. При облучении ионы движутся по одной линии вдоль оси z , и расстояние между ними 20 нм. Показано изменение во времени тепловых процессов и структуры мишени при распространении в ней ударной волны, а также структурные изменения вблизи поверхности.

На рис. 2 представлены результаты, полученные при моделировании облучения мишени из меди импульсным пучком меди, состоящим из четырех атомов меди с энергией 2 кэВ. Результаты отображают динамику разрушения края мишени при облучении пучком с импульсом четырех ионов с энергией 2 кэВ. Это происходит вследствие отражения ударной волны от края образца, при отражении ударная волна – волна сжатия – становится волной растяжения. Когда амплитуда этой волны превышает предел прочности мишени, на ее краю происходит структурное разрушение типа “откол” (рис. 2). Этот эффект имеет место для тонких мишеней при соответствующей энергии – в данном случае при энергии 2 кэВ. При облучении тонкой мишени пучком четырех ионов с энергией 1 кэВ такие разрушения не происходят. При увеличении толщины мишени, чтобы наблюдать разрушение типа “откол”, необходимо увеличивать энергию и плотность облучения. На практике облучают поверхности объемных мишеней, и возникающая ударная волна уходит вглубь мишени. Если мишень – идеальная кристаллическая решетка, структурные изменения в ней не происходят. На практике обычно эксперименты проводят с мишенями, которые являются реальными кристаллическими решетками, содержащими различные примеси, дефекты типа вакансии, дислокации и поры. Так как ударная волна отражается от края мишени, моделирование следует провести для кристаллических решеток с дефектами типа пор. В этом случае, предположительно, часть ударной волны может отражаться от поры в кристаллической решетке

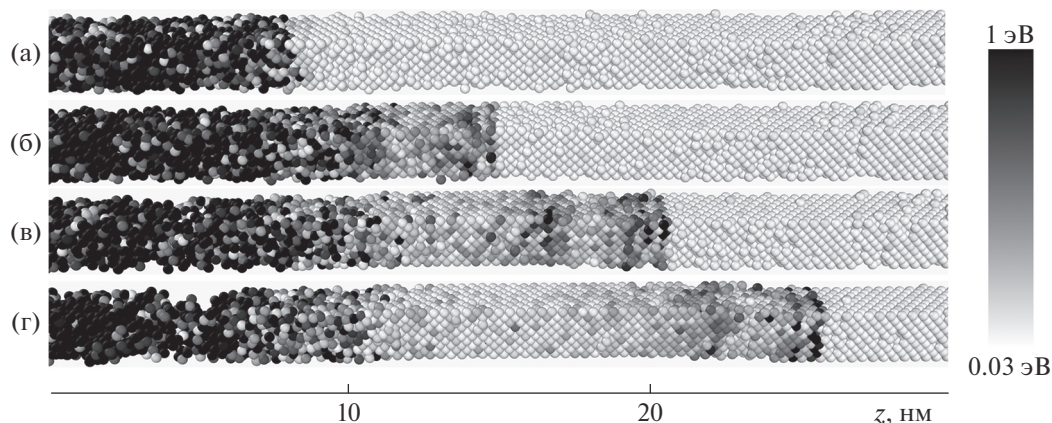


Рис. 1. Динамика тепловых процессов и ударной волны при облучении четырьмя ионами меди с энергией 1 кэВ в моменты времени: 1 (а); 2 (б); 3 (в); 4 пс (г). Размер мишени $2 \times 2 \times 40$ нм.

мишени или изменить структуру поры, что приводит к последующему исчезновению самой поры, т.е. фактически изменяются свойства мишени. Поэтому второй этап исследований проводили для мишеней с различным расположением пор. На рис. 3 показаны результаты, полученные при моделировании облучения мишени, содержащей пору, импульсным пучком меди, состоящим из двух атомов меди с энергией 1.5 кэВ, в разрезе.

На рис. 4 представлены результаты, полученные при моделировании облучения мишени, содержащей пору, импульсным пучком меди, состоящим из четырех атомов меди с энергией 1 кэВ, в разрезе, в различные моменты времени. Этот рисунок наглядно показывает влияние ударной волны на исчезновение поры в мишени. Аналогичные результаты можно получить для поры других размеров в зависимости от энергии и плот-

ности пучка. Другим возможным изменением параметров облучения является изменение расстояний между ионами пучка. Это приводит к изменению интенсивности облучения (изменения мощности облучения в единицу времени). Одним из важных результатов в этих исследованиях яв-

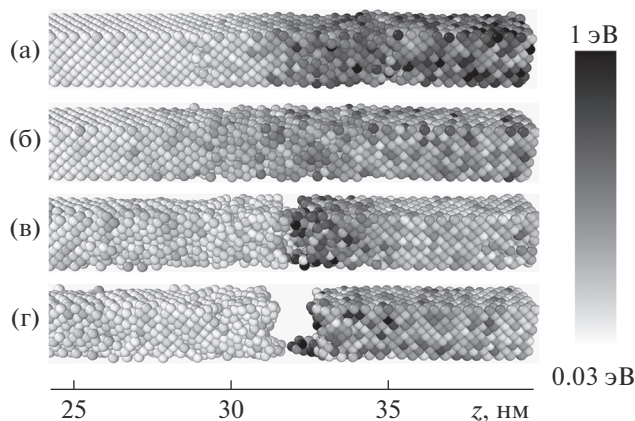


Рис. 2. Динамика структурных изменений в глубине мишени при облучении четырьмя ионами меди с энергией 2 кэВ в моменты времени: 8 (а); 9 (б); 10 (в); 11 пс (г). Размер мишени $2 \times 2 \times 40$ нм.

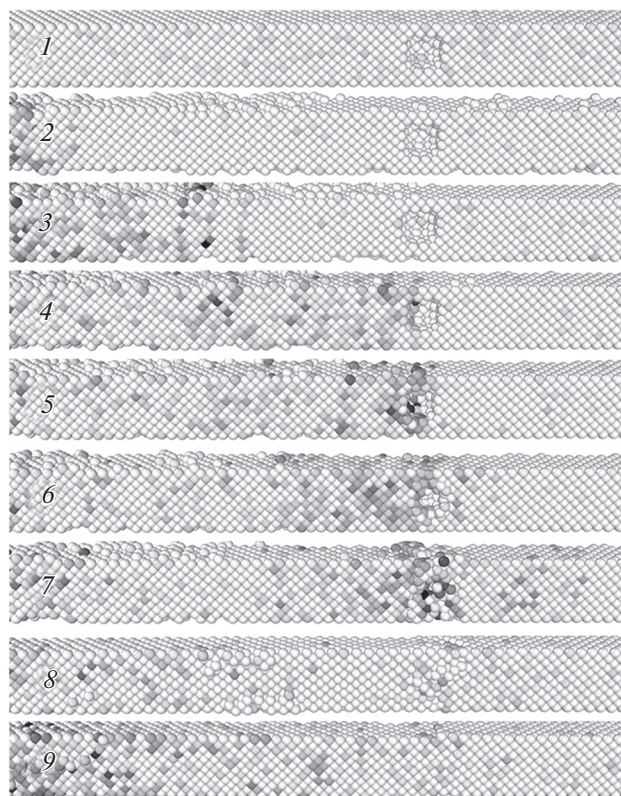


Рис. 3. Динамика ударной волны и ее влияние на пору размером 1 нм на глубине мишени 20 нм при облучении двумя ионами меди с энергией 1.5 кэВ в разные моменты времени: 0 (1); 1 (2); 2 (3); 3 (4); 3.2 (5); 3.4 (6); 4 (7); 8 (8); 12 пс (9). Размер мишени $2 \times 2 \times 40$ нм.

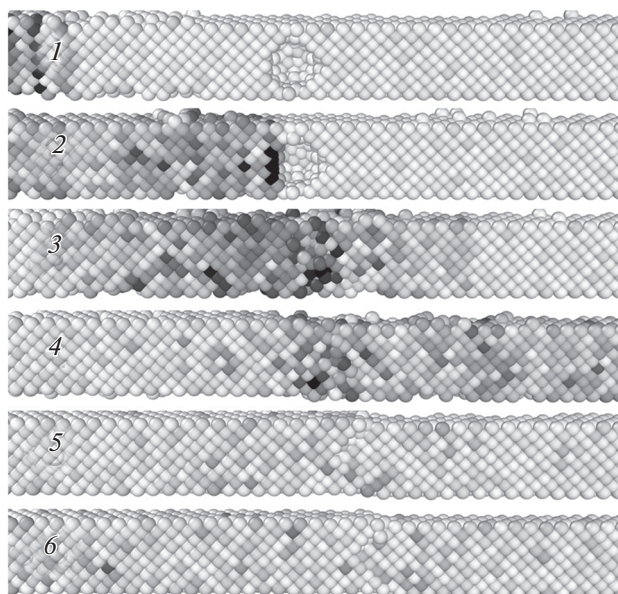


Рис. 4. Динамика ударной волны и ее влияние на пору с размером 1 нм на глубине мишени 25 нм при облучении четырьмя ионами меди с энергией 1 кэВ в разные моменты времени: 3 (1); 4 (2); 5 (3); 6 (4); 10 (5); 20 пс (6). Размер мишени $1.8 \times 1.8 \times 72$ нм.

ляется нахождение значений пороговой энергии и плотности мощности пучка, при которой пора исчезает. Таким образом, варьируя параметры пучка, можно получить различные интересные результаты.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Получены результаты моделирования облучения металлических мишеней импульсным пучком ионов в зависимости от энергии иона и размера мишени. Исследованы тепловые процессы, образование ударных волн и их воздействие на структуру мишени. Облучение мишени пучком из четырех ионов с энергией 1 кэВ и пучком из двух ионов с энергией 1.5 кэВ приводит к исчезновению поры. Полученные результаты показывают, что, увеличивая энергию и плотность мощности облучения (количество частиц), можно изменить дефектные структуры на различных глубинах мишени. Эти результаты можно использовать для дальнейшего развития модели импульсного пучка ионов. Важным шагом в этих исследованиях является также классификация результатов в зависимости от различных параметров МИП, что и планируется в будущих исследованиях.

БЛАГОДАРНОСТИ

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты № 18-51-18005 Болг_а, № 19-01-00645-а) и в

рамках гранта Полномочного представителя Республики Болгарии в ОИЯИ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Бойко В.И., Евстигнеев В.В.* Введение в физику взаимодействия сильноточных пучков заряженных частиц с веществом. М.: Энергоатомиздат, 1988. 137 с.
2. *Диденко А.Н., Лигачев А.Е., Куракин И.Б.* Воздействие пучков заряженных частиц на поверхность металлов и сплавов. М.: Энергоатомиздат, 1987. 183 с.
3. *Блейхер Г.А., Кривобоков В.П., Пащенко О.В.* Тепло-массоперенос в твердом теле под действием мощных импульсных пучков заряженных частиц. Новосибирск: Наука, 1999. 176 с.
4. *Миллер Р.* Введение в физику сильноточных пучков заряженных частиц. М.: Мир, 1984. 432 с.
5. *Блейхер Г.А., Кривобоков В.П.* // Изв. вузов. Порошковая металлургия и функциональные покрытия. 2013. № 2. С. 48.
6. *Пушкарев А.И., Исакова Ю.И.* Диагностика мощных ионных пучков. Новосибирск: СибАК, 2016. 126 с.
7. *Абрамов А.И., Казанский Ю.А., Матусевич Е.С.* Основы экспериментальных методов ядерной физики. М.: Атомиздат, 1977. 528 с.
8. *Рябухин Ю.С., Шальнов А.В.* Ускоренные пучки и их применение. М.: Атомиздат, 1980. 192 с.
9. *Неклюдов И.М.* Основы физики прочности и пластичности металлов. Белгород: БелГУ, 2003. 485 с.
10. *Рабинович М.Х.* Прочность и сверхпрочность металлов. М.: АН СССР, 1963. 198 с.
11. *Холмуродов Х.Т., Алтайский М.В., Пузынин И.В. и др.* // ЭЧАЯ. 2003. Т. 34. Вып. 2. С. 472.
12. *Лагарьков А.Н., Сергеев В.М.* // УФН. 1978. Т. 125. С. 409.
13. *Batgerel B., Dimova S., Puzynin I. et al.* // EPJ Web. Conf. 2018. V. 173. P. 06001.
14. *Batgerel B., Didyk A. Yu., Puzynin I. V. et al.* // J. Surface Invest.: X-ray, Synchrotron Neutron Tech. 2015. V. 9. P. 1026.
15. *Батгэрэл Б., Пузынин И.В., Пузынина Т.П. и др.* // Изв. РАН. Сер. физ. Т. 81. № 11. С. 1546.
16. *Гулд Х., Тобочник Я.* Компьютерное моделирование в физике. Ч. 1. М.: Мир, 1990. 350 с.
17. *Allen M.P., Tildesley D.J.* Computer Simulation of Liquids. Oxford: Clarendon Press; New York: Oxford University Press, 1987. 385 p.
18. *Plimpton S.* // J. Comp. Phys. 1995. V. 117. P. 1.
19. *Daw M.S., Baskes M.I.* // Phys. Rev. B. 1984. V. 29. № 12. P. 6443. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.29.6443>
20. *Stukowski A.* // Modeling Simul. Mater. Sci. Eng. 2010. V. 18. P. 015012. <https://doi.org/10.1088/0965-0393/18/1/015012>

Molecular Dynamic Simulation of Processes of Interaction of Pulse Ion Beams with Metals

I. V. Puzynin¹, T. P. Puzynina¹, I. G. Hristov², R. D. Hristova¹, Z. K. Tukhliev^{1,*}, Z. A. Sharipov¹

¹*Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, 141980 Russia*

²*Sofia University "St. Kliment Ohridski", Sofia, 1504 Bulgaria*

**e-mail: zafar@jinr.ru*

The molecular dynamics method is used to model the interaction processes of pulsed ion beams with metal targets. The main parameters of a pulsed ion beam interacting with a target are ion energy, pulse duration, and charge density per unit area of the target. Using the averaged values of these parameters of ion beams published for various types of accelerators, a numerical study of the dependence of the dynamics of thermal and structural processes in irradiated targets upon a change in the size and heterogeneity of the structure is performed. Simulation of the irradiation processes and estimates of the distribution of beam ions in the volume have been carried out in the range of beam ion energies of 1–10 keV using the concept of a shock wave. The results are important for developing the model of a pulsed ion beam and classifying the types of structural changes in the irradiated material depending on the model parameters.

Keywords: modeling, molecular dynamics method, pulsed ion beams, target destruction, shock wave.