

УДК 539.534.953.072.23

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭФФЕКТА ДАЛЬНОДЕЙСТВИЯ В МЕТАЛЛАХ ПРИ ОБЛУЧЕНИИ НАНОКЛАСТЕРАМИ МЕДИ (Cu_{141})

© 2019 г. З. А. Шарипов^{1, *}, Б. Батгэрэл³, И. В. Пузынин¹, Т. П. Пузынина¹,
З. К. Тухлиев¹, И. Г. Христов², Р. Д. Христова²

¹Международная межправительственная организация Объединенный институт ядерных исследований,
Дубна, Россия

²Софийский университет имени святого Климента Охридского, София, Болгария

³Монгольский государственный университет науки и технологии, Улан-Батор, Монголия

*E-mail: zarif@jinr.ru

Поступила в редакцию 10.12.2018 г.

После доработки 13.05.2019 г.

Принята к публикации 27.06.2019 г.

В работе проведено молекулярно-динамическое моделирование эффекта дальнего действия, возникающего при облучении металлической мишени нанокластерами. Расчеты показали, что при одновременном облучении несколькими нанокластерами с различными областями взаимодействия с поверхностью мишени в глубине происходит слияние движущихся областей с высокой температурой. Температура в области слияния резко возрастает, превышая температуру плавления мишени. В результате могут возникнуть структурные изменения кристаллической решетки в глубине мишени, превышающей глубину проникновения нанокластеров, что указывает на эффект дальнего действия.

DOI: 10.1134/S0367676519100259

ВВЕДЕНИЕ

Эффект дальнего действия в материалах, облучаемых частицами, состоит в том, что структурные изменения образуются на глубине облучаемой мишени, превосходящей глубину проникновения частиц [1–6]. Эффект активно изучается экспериментально и теоретически в течение уже более двадцати лет несколькими научно-исследовательскими группами России. Несмотря на большое количество экспериментальных работ для различных типов материалов и источников облучения пока не разработана единая теоретическая модель описания эффекта дальнего действия [3, 4].

Среди указанных работ [1–6] особое место занимают исследования в области ионной имплантации в металлы [1, 2], положившие начало изучению эффекта дальнего действия. В работе [3] обсуждается теоретическая модель этого явления, основанная на акустических волновых процессах, характеристики которых зависят от тепловых процессов и структурных изменений, возникающих в металле при имплантации в него ускоренных ионов. В наших работах [7, 8] на основе метода молекулярной динамики [9] выполнено моделирование волнового переноса теплоты внутри мишени из меди, облучаемой нанокластерами

меди с энергией 10–50 эВ/атом. Был подтвержден эффект движущейся области с высокой температурой (или ударной волны), который был численно найден в моделях 1D–3D-размерности, описываемых нелинейным уравнением теплопроводности [10]. Поэтому представляет интерес с учетом полученных нами результатов выполнение моделирования эффекта дальнего действия с помощью метода молекулярной динамики.

Исследования эффекта дальнего действия с применением метода молекулярной динамики нам неизвестны. Это отчасти связано с невозможностью непосредственного применения этого метода, так как при облучении пучками, начиная с энергии ионов 1 кэВ растет доля неупругих взаимодействий налетающих ионов с мишенью. Учет неупругих взаимодействий требует введения электронной подсистемы для мишени (уравнения теплопроводности электронного газа мишени), и соответственно задача моделирования усложняется. В настоящее время такой подход (введение электронной подсистемы) разработан и применяется при облучении тяжелыми ионами высоких энергий (10–1000 МэВ) [14], когда можно пренебречь упругими взаимодействиями налетающего иона с мишенью (их доля составляет соответственно 5–0.1%). При энергиях облучения 1–1000 кэВ/ион

происходят упругие и неупругие взаимодействия налетающих ионов с мишенью. Как показывает моделирование, облучение нанокластерами металлических мишеней [7, 8] сходно с моделированием облучения другими источниками: тяжелыми ионами высоких энергий и импульсными пучками. При облучении нанокластерами и пучками тяжелых ионов высоких энергий в локальной области мишени также выделяется большое количество энергии в единице объема. Таким образом, облучение пучками ионов можно условно рассмотреть как облучение нанокластерами в рамках энерговыделения в малом объеме, что дает возможность использовать методы молекулярной динамики [9].

Настоящая работа отличается от работ [7, 8] тем, что металлическая мишень облучается не только одним нанокластером, а одновременно четырьмя нанокластерами, области взаимодействия которых с поверхностью мишени отстоят друг от друга на определенном расстоянии (4–10 нм).

МЕТОД МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

В настоящее время для применения методов молекулярной динамики существуют готовые программные пакеты (LAMMPS, DL_POLY, NAMD и др.). В данной работе моделирование проводилось с помощью пакета LAMMPS [12], установленного на кластере HybriLit [13]. В этом программном пакете рассматривается многочастичная система, в которой все частицы (атомы или молекулы) представляют собой материальные точки, поведение отдельной частицы описывается классическими уравнениями движения Ньютона, которые могут быть записаны в следующем виде:

$$m_i \frac{d^2 \vec{r}_i}{dt^2} = \vec{f}_i. \quad (1)$$

Здесь i – номер частицы; N – полное число частиц; m_i – масса частицы; \vec{f}_i – равнодействующая всех сил, действующих на частицу, имеющая следующее представление: $\vec{f}_i = -\partial U(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) / \partial \vec{r}_i + \vec{f}_i^{\text{ex}}$, где U – потенциал взаимодействия между частицами, \vec{f}_i^{ex} – сила, обусловленная внешними полями. Согласно [14], рассматриваются системы, в которых сила взаимодействия двух любых частиц зависит только от расстояния между ними, то есть

$$U(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \sum_{i < j=1}^N V(r_{ij}), \quad r_{ij} = \|\vec{r}_i - \vec{r}_j\|. \quad (2)$$

В рамках классической молекулярной динамики для интегрирования уравнений движения частиц обычно используется метод Верле. Дис-

кретизация классических уравнений движения (1) производится следующим образом:

$$\vec{f}_i = -\nabla_i \sum_j V(r_{ij}). \quad (2)$$

Здесь $V(r_{ij})$ – потенциал парного взаимодействия между частицами. Затем рассчитываются новые координаты частиц, из которых определяются равнодействующие силы:

$$\vec{r}_i(t + \Delta t) = \vec{r}_i(t) + \vec{v}_i(t) \Delta t + \frac{\vec{a}_i(t)}{2} \Delta t^2. \quad (3)$$

Здесь $\vec{a}_i(t + \Delta t) = \vec{f}_i(t + \Delta t) / m$ – ускорение. Далее определяются скорости атомов:

$$\vec{v}_i(t + \Delta t) = \vec{v}_i(t) + \frac{\vec{a}_i(t + \Delta t) + \vec{a}_i(t)}{2} \Delta t. \quad (4)$$

Часто используемыми модификациями метода Верле являются методы Velocity Verlet и Leapfrog Verlet. При численном решении системы (1) с помощью разностной схемы (3), (4) необходимо задать начальные условия. Общий подход к постановке начальных условий приведен в работе [14].

В настоящей работе выполнено моделирование эффекта дальнего действия в мишени из меди, облучаемой нанокластерами меди. Для этой цели была проведена модификация пакета LAMMPS. Она заключалась во внедрении в пакет программы формирования нанокластеров на основе методики, изложенной в работе [15], и облучения мишени. При расчетах в качестве межатомного потенциала использовался EAM (Embedded atom model) – потенциал для меди, встроенный в пакет LAMMPS [12]. Визуализация результатов расчета проводилась с помощью программы OVITO [17].

МЕТОДИКА ИССЛЕДОВАНИЙ И ПОЛУЧЕННЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Моделирование процесса взаимодействия нанокластеров с металлической мишенью проводилось следующим образом. В рамках молекулярно-динамического подхода решаем задачу облучения металлической мишени несколькими нанокластерами с одинаковой энергией. В первом этапе моделирование проводилось при одновременном облучении четырьмя нанокластерами. При моделировании расстояния между областями взаимодействия нанокластеров с мишенью варьировались для получения требуемого эффекта. Как уже отмечалось выше, авторами [7, 8] был обнаружен эффект волнового переноса тепла в металлах, облучаемых нанокластерами. Так как волновой перенос теплоты распространяется по диагоналям сечений в глубине мишени, параллельных ее поверхности, это приводит к тому, что в глубине мишени происходит слияние движущихся областей

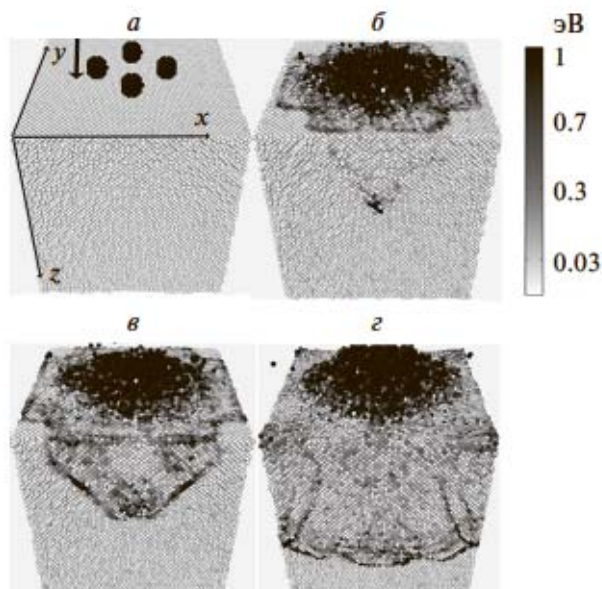


Рис. 1. Динамика распространения ударной волны внутри и образование кратера на поверхности мишени при облучении одновременно четырьмя нанокластерами с энергией 100 эВ/атом в моменты времени: 1 (а), 4 (б), 7 (в) и 10 пс (з). Расчетной областью являлся параллелепипед со сторонами $14 \times 14 \times 14$ нм, количество частиц в мишени $\sim 259\,000$. Расстояние между кластерами 2 нм. Справа представлена цветовая шкала кинетической энергии частиц.

с высокой температурой. Волновой перенос тепла фактически возникает вследствие удара нанокластера в мишень и представляет собой распространение ударной волны. В данной работе, в отличие от [8], мы вычисляем кинетическую энергию каждой частицы. Визуализация кинетической энергии частиц наглядно показывает возникновение и распространение ударной волны в мишени (рис. 1–5).

Численные эксперименты (рис. 1–5) проводились с нанокластерами с количеством частиц 141 и энергией облучения 100 эВ/атом. Для усиления эффекта дальнего действия выполнено моделирование облучения мишени одновременно четырьмя нанокластерами с энергией 100 эВ/атом и размером мишени $14 \times 14 \times 14$ нм. Рисунок 2 демонстрирует динамику распространения ударной волны внутри мишени, а также образование кратера на поверхности облучаемой мишени. Основной нагрев мишени в глубине происходит на отрезке, соединяющем точки пересечения диагоналей поверхности облучения и основания мишени, где происходит слияние областей с высокой кинетической температурой. Температура в области слияния резко возрастает, превышая температуру плавления мишени, что может привести к структурным изменениям мишени. Численно опреде-

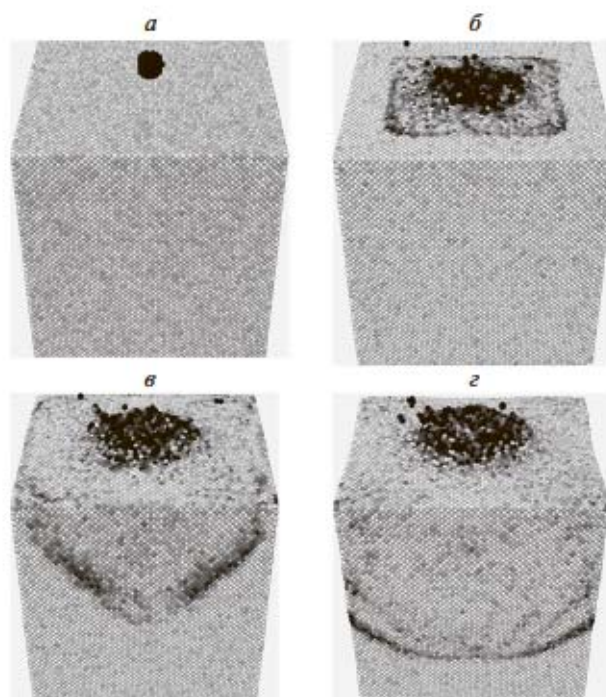


Рис. 2. Динамика распространения ударной волны и образование кратера на поверхности мишени при облучении нанокластером с энергией 100 эВ/атом в моменты времени 1 (а), 4 (б), 7 (в) и 10 пс (з). Расчетной областью являлся параллелепипед со сторонами $11 \times 11 \times 18$ нм, количество частиц в мишени $\sim 183\,000$.

лено, что эта область находится на глубине, превышающей глубину проникновения кластера. При моделировании по сторонам мишени по x , y используется периодические граничные условия [18]. Это означает, что в соседних областях также происходят аналогичные процессы облучения нанокластерами. При уменьшении размеров образца по x , y , мы на самом деле увеличиваем плотность облучения нанокластерами, вследствие этого усиливается образование ударной волны. Поэтому в дальнейших численных экспериментах использовали только один нанокластер.

На рис. 2–5 представлены результаты облучения мишени одним нанокластером с энергией 100 эВ/атом. Рисунки демонстрируют динамику распространения ударной волны на глубинах мишени, а также образование кратера на поверхности облучаемой мишени. Результаты, приведенные на рис. 2–5, отличаются друг от друга размерами мишени: ребра по x и y уменьшаются, а по z – глубина мишени увеличивается. Увеличение глубины мишени делается для проверки, достигает ли ударная волна границ мишени.

Эти рисунки демонстрируют динамику возможных структурных изменений на поверхности и в глубине облучаемой мишени: структурные из-

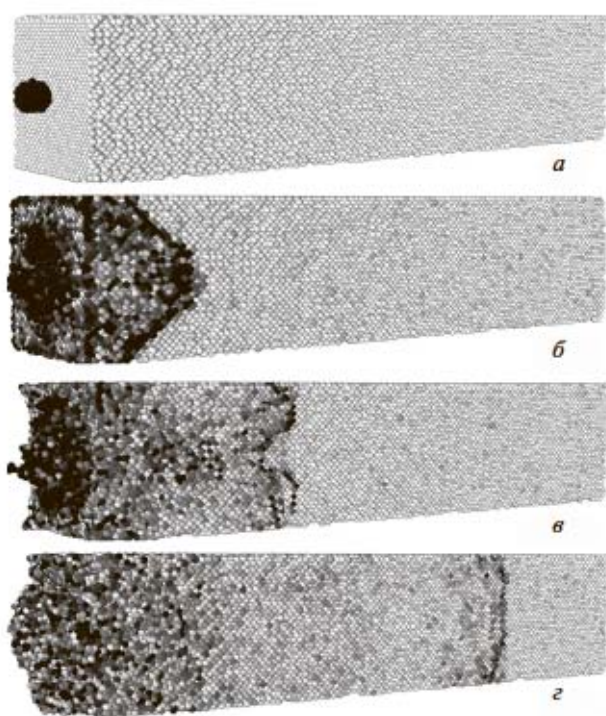


Рис. 3. Динамика ударной волны в глубине мишени при облучении нанокластером с энергией 100 эВ/атом в моменты времени 1 (а), 4 (б), 7 (в) и 10 пс (г). Расчетной областью являлся параллелепипед со сторонами $7.2 \times 7.2 \times 32$ нм, количество частиц в мишени ~ 145000 .

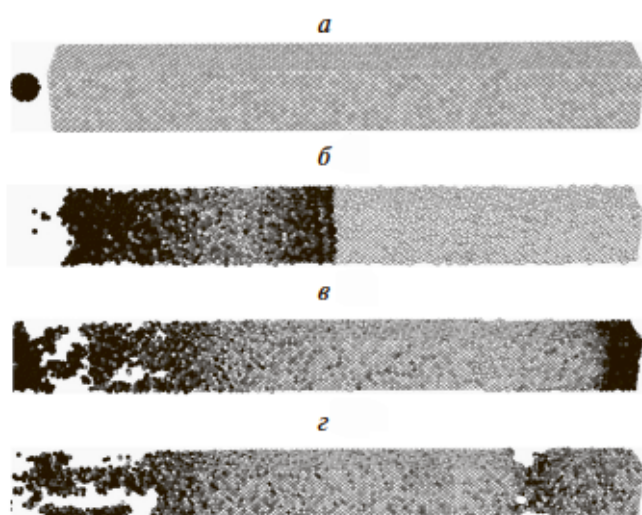


Рис. 4. Динамика ударной волны в глубине мишени при облучении нанокластером с энергией 100 эВ/атом в моменты времени 1 (а), 4 (б), 7 (в) и 10 пс (г). Расчетной областью являлся параллелепипед со сторонами $3.6 \times 3.6 \times 32$ нм, количество частиц в мишени ~ 40338 .

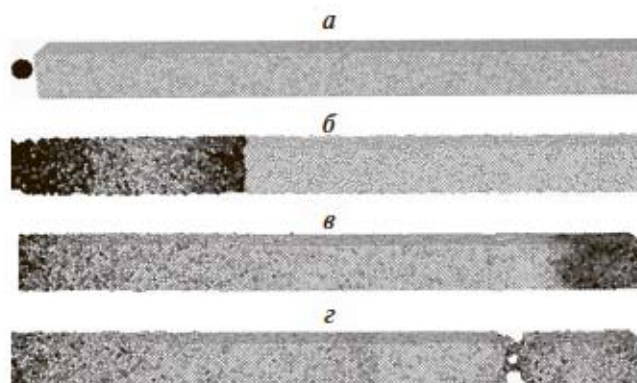


Рис. 5. Динамика ударной волны в глубине мишени при облучении нанокластером с энергией 100 эВ/атом в моменты времени 0 (а), 2.5 (б), 10 (в) и 15 пс (г). Расчетной областью являлся параллелепипед со сторонами $3.6 \times 3.6 \times 51$ нм, количество частиц в мишени 56338.

менения для мишени размером $3.6 \times 3.6 \times 32$ нм происходит в глубине ~ 28 нм а для мишени размером $3.6 \times 3.6 \times 51$ нм в глубине ~ 45 нм. Данные структурных изменений внутри мишени получены в результате наших расчетов. Налетающие нанокластеры с энергией 100 эВ/атом проникают в мишень в глубину 2–6 нм. Полученные результаты показывают, что в глубине мишени могут происходить структурные изменения вследствие ударной волны. Кроме того, мишень испытывает сильные упругие взаимодействия с нанокластерами и часть теплопереноса связана с термоупругим эффектом.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе проведено молекулярно-динамическое моделирование процессов облучения мишени из меди одновременно несколькими нанокластерами меди. Результаты можно использовать для объяснения эффекта дальнего действия, так как структурные изменения могут возникнуть в глубине мишени, превосходящей глубину проникновения нанокластера. Уменьшение поперечных размеров мишени (ребра по x и y) приводит к увеличению ударной волны и ее распространению в глубь мишени. Вследствие изменения ударной волны вид структурных изменений в глубине мишени имеет другой вид.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 17-01-00661-а, № 18-51-18005-Болг_а и гранта Полномочного представителя Республики Болгария в ОИЯИ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Tetelbaum D.I.* // Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B. 1997. V. 127/128. P. 153.

2. Шаркеев Ю.П., Колупаева С.Н., Гирсова Н.П. и др. // *Металлы*. 1998. № 1. С. 109.
3. Тетельбаум Д.И., Баянкин В.Я. // *Природа*. 2005. № 4. С. 9.
4. Апарина Н.П., Гусева М.И., Колбасов Б.Н. и др. // *ВАНТ. Сер. термояд. синтез*. 2007. № 3. С. 18.
5. Овчинников В.В. // *УФН*. 2008. Т. 178. № 9. С. 991; *Ovchinnikov V.V.* // *Phys. Usp.* 2008. V. 51 № 9. P. 955.
6. Степанов В.А., Хмелевская В.С. // *ЖТФ*. 2011. Т. 81. № 9. С. 52; *Stepanov V.A., Khmelevskaya V.S.* // *Tech. Phys. Russ. J. Appl. Phys.* 2011. V. 56. № 9. P. 1272.
7. *Batgerel B., Dimova S., Puzynin I. et al.* // *EPJ Web Conf.* 2018. V. 173. Art. № 06001.
8. *Batgerel B., Didyk A.Yu., Puzynin I.V. et al.* // *J. Surf. Invest.* 2015. V. 9. P. 1026.
9. Холмуродов Х.Т., Алтайский М.В., Пузынин И.В. и др. // *ЭЧАЯ*. 2003. Т. 34. № 2. С. 472.
10. Самарский А.А., Соболев И.М. // *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.* 1963. Т. 3. № 4. С. 702.
11. *Батгэрэл Б., Пузынин И.В., Пузынина Т.П. и др.* // *Поверхность*. 2018. № 7. С. 103.
12. *Plimpton S.* // *J. Comp. Phys.* 1995. V. 117. P. 1.
13. <http://hybrilit.jinr.ru/>.
14. Гулд Х., Тобочник Я. Компьютерное моделирование в физике. Часть 1. М.: Мир, 1990. 350 с.
15. Сивухин Д.В. Общий курс физики. т. 2. Термодинамика и молекулярная физика. М.: Наука, 1990. 591 с.
16. *Batgerel B., Nikonov E.G., Puzynin I.V.* // *Vestnik RUDN. J. Math. Inf. Sci. Phys.* 2014. № 1. P. 4751.
17. *Stukowski A.* // *Modeling Simul. Mater. Sci. Eng.* 2010. V. 18. Art. № 015012.
18. *Allen M.P., Tildesley D.J.* // Oxford: Clarendon Press; New York: Oxford University Press, 1987. 385 p.