

P11-2013-61

Б. Батгэрэл, Э. Г. Никонов, И. В. Пузынин

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ СОУДАРЕНИЯ
НАНОКЛАСТЕРОВ С МЕТАЛЛИЧЕСКОЙ ТВЕРДОЙ
ПОВЕРХНОСТЬЮ**

Батгэрэл Б., Никонов Э. Г., Пузынин И. В.

P11-2013-61

Моделирование процессов соударения нанокластеров с металлической твердой поверхностью

В работе приводятся результаты исследований методами молекулярной динамики зависимости глубины проникновения металлических незаряженных нанокластеров в материал с металлической твердой поверхностью от энергии налетающих частиц в пучке, размера нанокластеров и частоты импульсного источника нанокластеров. Исследована зависимость толщины поверхностного слоя с новой структурой, который образуется в результате облучения материала наночастицами, от перечисленных выше параметров пучка налетающих нанокластеров. Обнаружена зависимость глубины проникновения атомов кластера в материал мишени и толщины осаждаемого слоя от количества атомов в налетающих кластерах, частоты импульсного источника в случае облучения пучками кластеров. Установлено, что толщина осаждаемого слоя, в отличие от глубины проникновения, перестает зависеть от числа атомов в налетающих кластерах N , частоты импульсного источника ω и энергии налетающих кластеров E при увеличении N , ω и E . Показано, что существует зависимость характеристик различных энергетических режимов (soft landing, droplet spreading и implantation) от числа атомов в налетающих кластерах. Исследованные проблемы могут представлять интерес для получения материала поверхностного слоя с новыми физическими и химическими свойствами, существенно отличающимися от свойств основного материала.

Работа выполнена в Лаборатории информационных технологий ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 2013

Batgerel B., Nikonov E. G., Puzynin I. V.

P11-2013-61

Molecular Dynamic Simulation of Impact of Nanocluster with Metallic Solid Surface

We have simulated the impact of uncharged metal nanoclusters beam with solid metal surface by molecular dynamics. The penetration depth of clusters atoms in solid material and thickness of deposited layer on the surface are studied, depending on the energy of incident particles in the beam, the size of nanoclusters and the frequency of beam. It has been found that the penetration depth and thickness of the surface layer are dependent on the above parameters of nanocluster. It was also found that the thickness of deposited layer is not dependent on size of cluster and frequency of the beam, while incident energy is increasing. The studied problems may be of interest to obtain new materials, which have surface layer with new physical and chemical properties that significantly differ from those of base materials.

The investigation has been performed at the Laboratory of Information Technologies, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna, 2013

ВВЕДЕНИЕ

В связи с развитием нанотехнологий увеличился интерес к моделированию процессов, происходящих при облучении материалов пучками высокоэнергетических наночастиц [1]. Облучение конструкционных материалов импульсными высокоэнергетическими пучками как заряженных частиц (электронов и ионов), так и нейтральных (незаряженных) наночастиц является одним из наиболее эффективных современных технологических методов получения наноматериалов с новыми физическими, химическими и структурными свойствами [1–5]. Взаимодействие заряженных пучков с тонким поверхностным слоем облучаемого материала может приводить к появлению новых структур в поверхностном слое и, соответственно, новых физических и химических свойств поверхности облучаемого вещества [6–8].

В работах [9–11] представлены результаты моделирования процессов модификации твердой поверхности при облучении пучками частиц с энергиями столкновения от $< 0,1$ до > 3 эВ/атом.

В работе [12] приведены результаты численных исследований столкновения металлических нанокластеров между собой и с металлической поверхностью в широком интервале энергий столкновения. Расчеты проводились в рамках молекулярно-динамического моделирования. Обнаружен новый механизм образования связанного состояния в системах «кластер–кластер» и «кластер–подложка» без плавления на контакте. В [9–12] проведен также физический анализ этого процесса.

Целью данной работы является исследование методами молекулярной динамики зависимости величины глубины проникновения металлических нанокластеров в материал с металлической твердой поверхностью от энергии налетающих частиц в пучке, размера нанокластеров и частоты импульсного источника нанокластеров. Также исследована зависимость толщины поверхностного слоя с новой структурой, который образуется в результате облучения материала наночастицами, от перечисленных выше параметров пучка налетающих нанокластеров. Показано, что прямой зависимости толщины поверхностного слоя от глубины проникновения нанокластеров в материал с твердой поверхностью не наблюдается. Исследованные проблемы являются актуальными в прикладных задачах, связанных с облучением твердых поверхностей наночастицами для получения материала поверхностного слоя с новыми

физическими и химическими свойствами, существенно отличающимися от свойств основного материала.

1. МЕТОДЫ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Молекулярно-динамическое моделирование основано на представлении объектов моделирования в виде системы взаимодействующих частиц (атомов или молекул). Эволюция системы происходит в результате движения упомянутых выше частиц. Координаты частиц в каждый последующий момент времени вычисляются посредством интегрирования уравнений движения, в которые входят потенциалы взаимодействия частиц между собой и внешней средой.

В зависимости от типа уравнений движения молекулярная динамика подразделяется на следующие системы моделирования: классическая молекулярная динамика, квантовая молекулярная динамика, релятивистская молекулярная динамика, релятивистская квантовая молекулярная динамика.

Рассмотрим вариант классической молекулярной динамики [13]. Она основана на следующих положениях.

- Для описания движения атомов или частиц применяется классическая механика. Закон движения частиц находят при помощи аналитической механики.
- Силы межатомного взаимодействия можно представить в форме классических потенциальных сил (как градиент потенциальной энергии системы).
- Точное знание траекторий движения частиц системы на больших промежутках времени не является необходимым для получения результатов макроскопического (термодинамического) характера.
- Наборы конфигураций, получаемые в ходе расчетов методом молекулярной динамики, распределены в соответствии с некоторой статистической функцией распределения, например, отвечающей микроканоническому распределению.

Таким образом, в основе методов классической молекулярной динамики лежит модельное представление о многочастичной системе, в которой все частицы (атомы или молекулы) представляют собой материальные точки. Поведение отдельной частицы описывается классическими уравнениями движения Ньютона, которые могут быть записаны в таком виде [13]:

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

Здесь i — номер частицы ($1 \leq i \leq N$); N — полное число частиц; m_i — масса частицы; \vec{f}_i — равнодействующая всех сил, действующих на частицу,

имеющая следующее представление:

$$\vec{f}_i = -\frac{\partial U(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)}{\partial r_i} + \vec{f}_i^{\text{ex}}, \quad (2)$$

где U — потенциал взаимодействия между частицами; \vec{f}_i^{ex} — сила, обусловленная внешними полями.

Потенциал взаимодействия между частицами может быть задан в виде силового поля [15]:

$$U = \overbrace{\sum U_{\text{bond}} + \sum U_{\text{angle}} + \sum U_{\text{dihed}} + \sum U_{\text{inv}} + \sum U_{\text{pair}} + \sum U_{\text{3-body}} + \sum U_{\text{4-body}} + \sum U_{\text{Tersoff}} + \sum U_{\text{metal}}}_{\text{Межмолекулярное взаимодействие}}$$

Здесь U_{bond} — потенциал, описывающий непосредственное прямое взаимодействие между атомами (частицами); U_{angle} — потенциал, описывающий не прямое взаимодействие между атомами (частицами); U_{dihed} — потенциал, описывающий взаимодействие между атомами (частицами), возникающее в результате действия торсионных сил внутри молекулы; U_{inv} — потенциал, описывающий взаимодействие между атомами (частицами), возникающее из-за особенностей геометрического расположения трех атомов вокруг некоторого центрального внутри молекулы; U_{pair} , $U_{\text{3-body}}$ — многочастичные потенциалы; $U_{\text{4-body}}$, U_{Tersoff} — потенциалы, используемые для описания многокомпонентных систем; U_{metal} — металлический потенциал.

В данной работе для моделирования взаимодействия пучков нанокластеров с металлической поверхностью использовался потенциал Саттона–Чена:

$$U_{\text{metal}} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N V_{ij}(r_{ij}) + \sum_{i=1}^N F(\rho_i), \quad \rho_i = \sum_{j=1, j \neq i}^N \rho_{ij}(r_{ij}),$$

где $V_{ij}(r_{ij}) = \epsilon(a/r_{ij})^n$ — потенциал парного взаимодействия; $\rho_{ij}(r_{ij}) = (a/r_{ij})^m$ — вклад в плотность заряда i -го атома от j -го атома; $F(\rho_i) = -c\epsilon\sqrt{\rho_i}$ — функция «погружения», которая представляет собой энергию, необходимую для перемещения i -го атома в электронное облако.

Значения величин параметров a , c , ϵ , m и n для потенциала Саттона–Чена приведены в табл. 1.

В реальных экспериментах температура системы поддерживается за счет энергообмена с внешней средой. Детальный учет взаимодействия частицы с внешней средой часто невозможен. Для учета эффектов энергообмена с внешней средой используются специальные алгоритмы — термостаты. В молекулярной динамике температура молекулярной системы вводится через

Таблица 1. Значения параметров для потенциала Саттона–Чена

Металл	$a, \text{Å}$	c	$\epsilon, \text{эВ}$	m	n
Al	4,05	16,399	0,0331	6	7
Cu	3,61	39,755	0,0124	6	9

удельное среднее значение кинетической энергии. Выражение для средней кинетической энергии системы имеет вид

$$E = \frac{\sum_{i=1}^N m_i v_i^2}{2N}, \quad (3)$$

где m_i — масса частицы; v_i — скорость частицы; N — полное число частиц.

Из статистической физики известно, что кинетическая энергия системы и ее температура связаны следующим соотношением:

$$E = \frac{3kT}{2}, \quad (4)$$

k — постоянная Больцмана.

Из (3) и (4) получим мгновенное значение температуры

$$T = \frac{\sum_{i=1}^N m_i v_i^2}{3Nk}.$$

Далее, проведя усреднение по времени, получим значение температуры системы:

$$\bar{T} = \frac{1}{3Nk\tau} \int_{t_0}^{t_0+\tau} \sum_{i=1}^N m_i v_i^2 dt.$$

Использование термостата особенно важно на этапе релаксации системы. В случае установившегося термодинамического равновесия температура термостата и средняя температура молекулярной системы должны совпадать. Энергии подсистем обычно много меньше энергии термостата, это является условием приближенного термодинамического равновесия. При моделировании методами молекулярной динамики обычно фиксируют температуру термостата. Температура молекулярной системы может при этом меняться вследствие различных причин. Например, из-за конечного шага интегрирования частица может оказаться в классически запрещенной области. Это приведет к резкому скачку энергии, а затем и температуры. Наиболее часто

встречающимися моделями термостатов являются: коллизионный термостат, основанный на столкновительной динамике, термостат Берендсена, использующий в уравнениях движения знакопеременное нелинейное трение, термостат Эванса, Ланжевена, Андерсена, Ноза–Хувера и др. В частности, термостат Эванса имеет следующее определение:

$$\begin{aligned}\frac{dr_i(t)}{dt} &= v_i(t), \\ \frac{dv_i(t)}{dt} &= \frac{f_i(t)}{m_i} - \chi(t)v_i(t), \\ \frac{dT(t)}{dt} &= 0 \quad \Rightarrow \quad \chi(t) = \frac{\sum v_i(t)f_i(t)}{\sum m_i v_i^2(t)}.\end{aligned}$$

Для обеспечения термодинамического равновесия при моделировании сложных многокомпонентных систем, как правило, также фиксируется давление в системе. Для решения данной задачи используются так называемые баростаты. Наиболее часто используемыми моделями баростатов являются: баростат Берендсена, баростат Ланжевена и баростат Ноза–Хувера.

Для интегрирования системы уравнений (1) необходимо задать начальные координаты, импульсы частиц и граничные условия. При этом для корректного интегрирования уравнений движения молекулярной динамики нужно учитывать следующее.

Длина траектории в молекулярной динамике равняется шагу интегрирования, умноженному на число произведенных шагов. Выбор длины траектории в значительной степени связан с понятием эргодичности траектории. В молекулярной динамике обычно имеют дело со средними величинами вдоль траектории (или со средними по времени). В эксперименте обычно имеют дело с величинами, средними по ансамблю. Для того чтобы сравнение статистических характеристик системы с результатами молекулярно-динамических расчетов было корректным, необходимо, чтобы траектория обладала достаточно хорошими эргодическими свойствами [13]. Реально это означает, что за время интегрирования система должна много раз побывать во всех значимых областях конфигурационного пространства, т. е. время интегрирования должно быть значительно больше τ — времени преодоления энергетического барьера:

$$\tau \sim 3^M \exp \frac{U}{kT}, \quad (5)$$

где M — количество торсионных углов в молекуле; U — значение энергетического барьера; k — постоянная Больцмана; T — температура.

Используя (5), можно оценить минимальную длину траектории, которая должна быть значительно больше, чем время, необходимое для преодоления каждого из энергетических барьеров.

В рамках классической молекулярной динамики интегрирования уравнений движения частиц системы обычно используется метод Верле. Дискретизация классических уравнений движения (1), (2) производится следующим образом:

$$\vec{f}_i = -\vec{\nabla}_i \sum_j U(r_{ij}).$$

Затем рассчитываются новые координаты частиц, из которых определяются равнодействующие силы:

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

Здесь a — ускорение, $a(t + \Delta t) = [f(t + \Delta t)]/m$.

Далее определяются скорости атомов:

$$v(t + \Delta t) = v(t) + \frac{a(t + \Delta t) + a(t)}{2}\Delta t.$$

Одной из наиболее существенных проблем процедуры интегрирования является выбор шага. При большом шаге погрешности интегрирования могут быть значительными, что приведет к нестабильности траектории. При малом шаге существенно увеличивается время расчета. В связи с этим шаг интегрирования был выбран равным $\Delta t = 10^{-15}$ с = 1 фс. В уравнениях движения, описывающих изменения по различным степеням свободы, временные характеристики существенно отличаются друг от друга. Для достаточно точного вычисления решения по быстрым и медленным переменным шага интегрирования по ним могут различаться. По быстрым переменным может быть выбран значительно больший шаг [13]. В методе Верле шаг интегрирования берется единым. Начальные скорости атомов выбираются с помощью генератора случайных чисел в соответствии с распределением Максвелла при заданной температуре.

Наиболее используемыми модификациями метода Верле являются следующие.

Метод Velocity Verlet. В рамках данного метода интегрирование уравнений движения производится по такой схеме.

- В начале каждого шага задаются или рассчитываются на предыдущем шаге величины t : $r(t)$, $v(t)$, $f(t)$.

- Затем вычисляются значения скоростей частиц в момент времени $t + (\Delta t/2)$ и координат нового местонахождения частиц:

$$v\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right) = v(t) + \frac{\Delta t}{2} \frac{f(t)}{m},$$

$$r(t + \Delta t) = r(t) + \Delta t v\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right).$$

- После этого пересчитываются силы, действующие на частицу в момент времени $t + \Delta t$:

$$f(t + \Delta t) \leftarrow f(t).$$

- Далее рассчитываются значения скоростей на следующем шаге:

$$v(t + \Delta t) = v\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right) + \frac{\Delta t}{2} \frac{f(t + \Delta t)}{m}.$$

Метод Leapfrog Verlet. Этот метод реализуется по следующей схеме.

- В начале каждого шага задаются или рассчитываются на предыдущем шаге величины $t : r(t)$, $f(t - \Delta t)$ и скорости $v(t - (\Delta t/2))$ в момент времени $t - (\Delta t/2)$.

- После этого пересчитываются силы, действующие на частицу в момент времени $t - \Delta t$:

$$f(t) \leftarrow f(t - \Delta t).$$

- Далее вычисляются значения скоростей в момент времени $t + (\Delta t/2)$:

$$v\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right) = v\left(t - \frac{\Delta t}{2}\right) + \Delta t \frac{f(t)}{m},$$

координаты нового положения частиц:

$$r(t + \Delta t) = r(t) + \Delta t v\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right)$$

и значения скорости в момент времени t :

$$v(t) = \frac{1}{2} \left[v\left(t - \frac{\Delta t}{2}\right) + v\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right) \right].$$

Для анализа результатов моделирования рассчитываются различные характеристики системы. Кинетическая энергия:

$$E_{\text{kin}}(t) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N m_i v_i^2(t),$$

температура:

$$T(t) = \frac{2}{kd} E_{\text{kin}},$$

где степень свободы

$$d = 3N - 3N_{\text{frozen}} - N_{\text{constraints}} - 3 - p,$$

для периодического граничного условия $p = 3$, для непериодического граничного условия $p = 0$.

2. ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДЛЯ МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОГО ПРОГРАММИРОВАНИЯ

В данной работе компьютерное моделирование проводилось с использованием пакета программ Las Palmas Molecular Dynamics (LPMO) [14]. Данный пакет, в отличие от множества программных продуктов, предназначенных для молекулярно-динамического моделирования (DL_POLY [15], Gromacs, Moldy, Moscito и др.), является наиболее подходящим для исследования проблем, сформулированных в данной работе.

Программа LPMO предназначена для молекулярно-динамического моделирования как равновесных, так и неравновесных процессов, таких как распространение ударных волн, бомбардировка снарядами мишени, кластерных столкновений, распространение тепла и т. д.

Пакет реализован на языке программирования C++, имеет модульную архитектуру. Функциональность программной системы может быть расширена за счет подключения plugin-модулей, которые вызываются по мере необходимости во время запуска основной программы. Данный программный пакет содержит также набор модулей для визуализации процессов моделирования в реальном времени.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Для моделирования использовалась следующая конфигурация системы: «снаряд–мишень». На неподвижную мишень налетает пучок наночастиц (нанокластеров) (см. рис. 1). Мишень представляет собой металлический

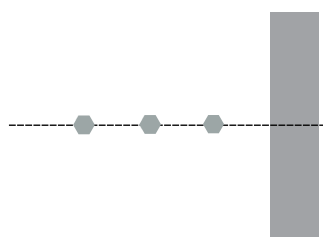


Рис. 1. Схема эксперимента

прямоугольный параллелепипед с геометрическими размерами $54,15 \times 108,3 \times 108,3 \text{ \AA}$ и состоит из 54000 атомов меди. Моделирование проводилось для кластеров, состоящих из 13, 55 и 147 атомов меди, с поперечными размерами 5,86, 12,17 и 15,82 \AA соответственно. Рассматривались два варианта: облучение мишени одиночными наночастицами и облучение мишени пучком наночастиц при энергиях налетающих кластеров, равных 0,1, 1,0, 10 эВ/атом. Вычисления проводились в два этапа. Сначала перед непосредственным столкновением осуществлялась специальная процедура подготовки кластеров. Затем велось моделирование процессов столкновения сформированных перед этим нанокластеров с твердой поверхностью.

3.1. Процедура подготовки нанокластеров. Данная процедура необходима для учета реальных условий образования пучков кластеров в экспериментах, поскольку структура реальных наноразмерных кластеров существенно отличается от гранецентрированной кристаллической решетки. Сначала из достаточно большой гранецентрированной кристаллической решетки выбирается необходимое для получения оптимальной (как правило, икосаэдрической) структуры нанокластера число (13, 55, 147 . . .) атомов, находящихся на наименьших расстояниях от центрального атома. В начальном состоянии наночастицы размером 14,44 Å имеют структуру гранецентрированной кубической кристаллической решетки. Следующим шагом является термализация наночастиц без учета граничных условий. Затем постепенно нагреваем получившийся кластер до температуры $T = 1800$ К в течение 10^5 шагов по времени (шаг по времени равен 1 фс, температура плавления меди $T = 1356$ К), потом охлаждаем до температуры $T = 300$ К и проводим процедуру термализации в течение 10^5 шагов с шагом 1 фс. Достижение кластером оптимальной структуры подтверждается установлением парных структур типа 1-5-5-5, характерных для икосаэдрических решеточных структур, что выявляется в рамках структурного анализа методом CAN (Common Neighbor Analysis) [14]. Суть данного метода состоит в анализе взаимного расположения соседних атомов с использованием кристаллографических индексов. Каждая пара атомов характеризуется наборами чисел четырех индексов (i, j, k, l) . Здесь индекс i равен 1 для близких соседей и 2 для остальных, второй индекс j равен числу общих близких соседей, третий индекс k равен числу бондов (ковалентных химических связей) среди j общих близких соседей и четвертый индекс l равен длине наибольших связанных бондов среди общих близких соседей. Распределение структур с различными кристаллографическими индексами, демонстрирующими преобладание икосаэдрических решеточных структур в результате процедуры подготовки нанокластеров, представлено в табл. 2 и 3. N_{CAN} — относительное количество кристаллических структур с определенными индексами (в процентах).

Таблица 2. Распределение кристаллических структур в первоначальных наночастицах с преобладанием гранецентрированных структур

i	j	k	l	N_{CAN}
1	1	0	0	0,15
1	2	0	0	7,22
1	2	1	1	7,22
1	3	1	1	23,42
1	4	2	1	62,00

Таблица 3. Распределение кристаллических структур после процедуры подготовки нанокластеров

i	j	k	l	N_{CAN}
1	0	0	0	1,03
1	1	0	0	1,47
1	2	0	0	6,45
1	2	1	1	6,30
1	3	0	0	2,79
1	3	1	1	18,48
1	3	2	2	5,13
1	4	1	1	0,29
1	4	2	1	28,01
1	4	2	2	27,27
1	4	3	3	1,47
1	5	4	4	1,17
1	5	5	5	0,15

3.2. Моделирование процессов столкновения. После образования нанокластеров выполнялись вычисления по моделированию процессов столкновения с металлической поверхностью. Сначала моделировалось столкновение одиночных нанокластеров, затем столкновение пучка их трех кластеров с поверхностью. В результате моделирования процессов бомбардирования

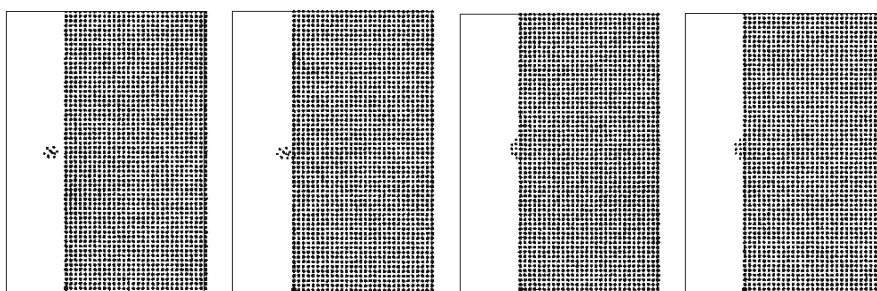


Рис. 2. Кластеры $N = 13$, $E = 0,1$ эВ/атом, $t = 3, 3,5, 6, 10$ пс

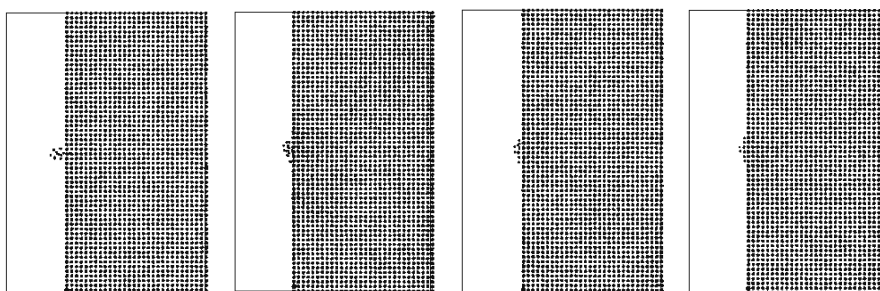


Рис. 3. Кластеры $N = 13$, $E = 1,0$ эВ/атом, $t = 1,75, 3, 4, 10$ пс

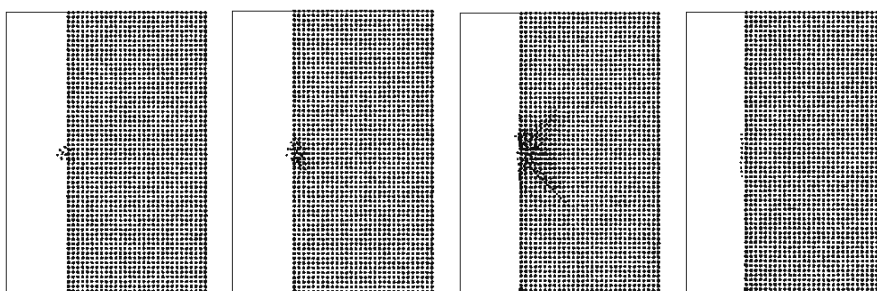


Рис. 4. Кластеры $N = 13$, $E = 10$ эВ/атом, $t = 1,25, 1,3, 1,5, 10$ пс

поверхности одиночными наночастицами мы получаем следующую картину. Рис. 2–4 демонстрируют результаты моделирования для кластеров, содержащих $N = 13$ атомов, при значениях энергии E налетающих наночастиц 0,1, 1,0 и 10 эВ/атом соответственно. Рис. 5–7 демонстрируют результаты моделирования для кластеров, содержащих $N = 55$ атомов, при значениях

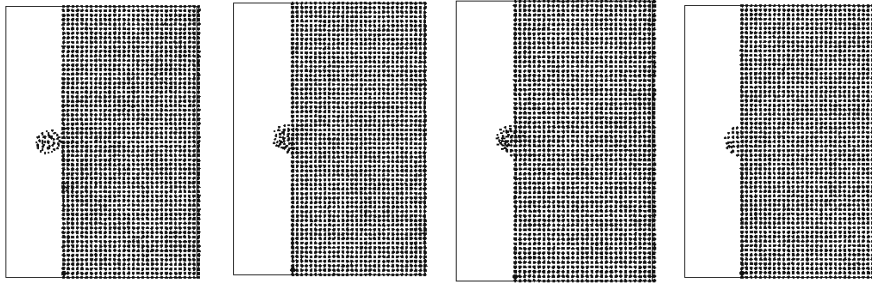


Рис. 5. Кластеры $N = 55$, $E = 0,1$ эВ/атом, $t = 3, 4, 4,5, 10$ пс

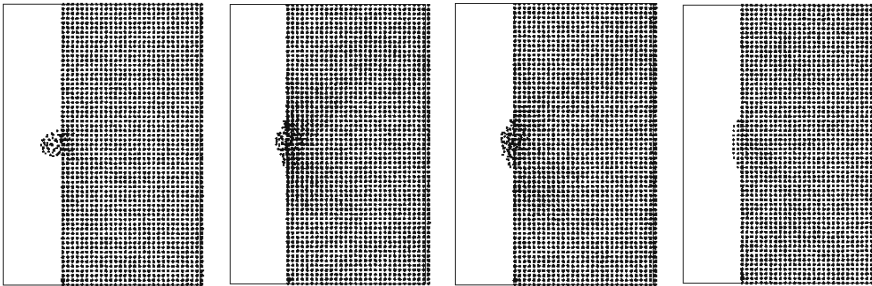


Рис. 6. Кластеры $N = 55$, $E = 1,0$ эВ/атом, $t = 1,75, 2,5, 3, 10$ пс

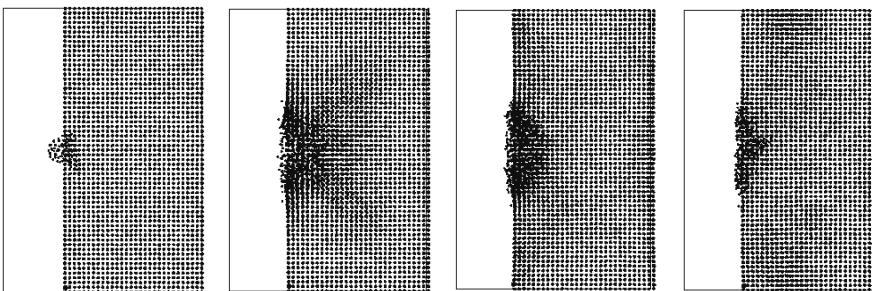


Рис. 7. Кластеры $N = 55$, $E = 10$ эВ/атом, $t = 1,25, 2, 3, 5$ пс

энергии E налетающих наночастиц 0,1, 1,0 и 10 эВ/атом соответственно. Рис. 8–10 демонстрируют результаты моделирования для кластеров, содержа-

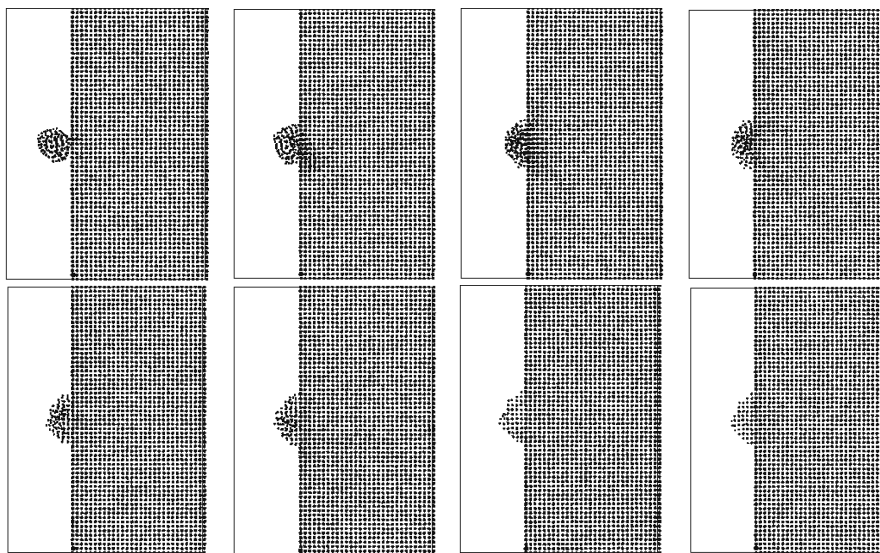


Рис. 8. Кластеры $N = 147$, $E = 0,1$ эВ/атом, $t = 3, 3,5, 4, 4,5, 5, 6, 8, 10$ пс

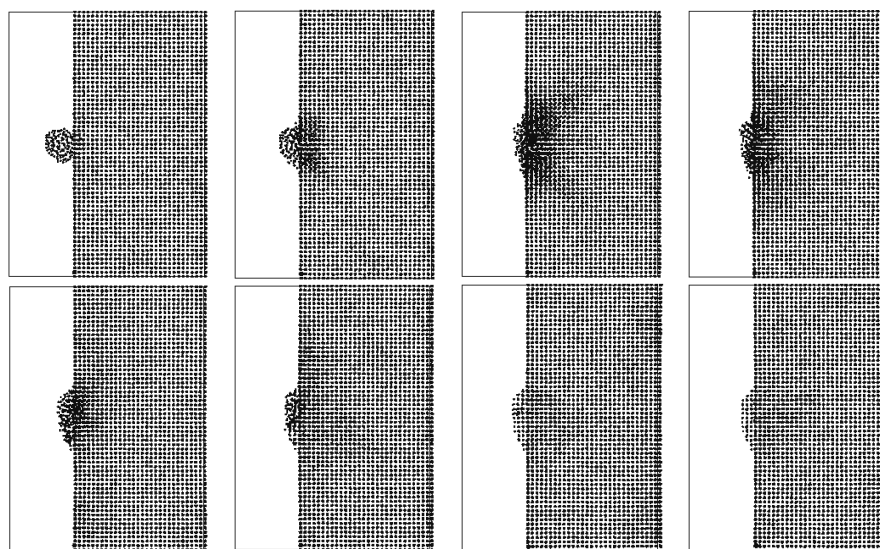


Рис. 9. Кластеры $N = 147$, $E = 1,0$ эВ/атом, $t = 1,7, 2, 2,5, 3, 4, 5, 8, 10$ пс

щих $N = 147$ атомов, при значениях энергии E налетающих наночастиц 0,1, 1,0 и 10 эВ/атом соответственно. На рис. 11 представлен фронтальный вариант рис. 10 при тех же условиях моделирования.

В результате моделирования процессов бомбардирования поверхности пучками наночастиц, состоящими из трех кластеров, мы получаем следующую картину. Рис. 12–14 демонстрируют результаты моделирования для пучков кластеров, содержащих $N = 13$ атомов, при значениях энергии E

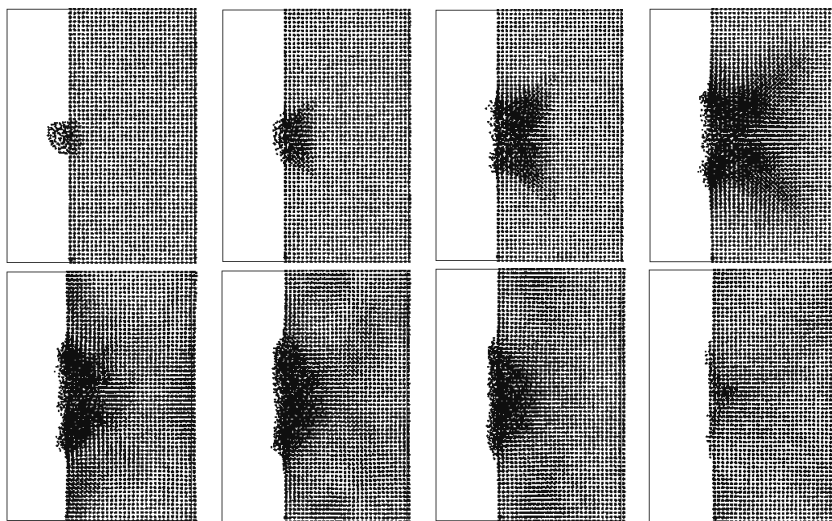


Рис. 10. Кластеры $N = 147$, $E = 10$ эВ/атом, $t = 1, 2, 1, 3, 1, 5, 2, 3, 4, 5, 10$ пс

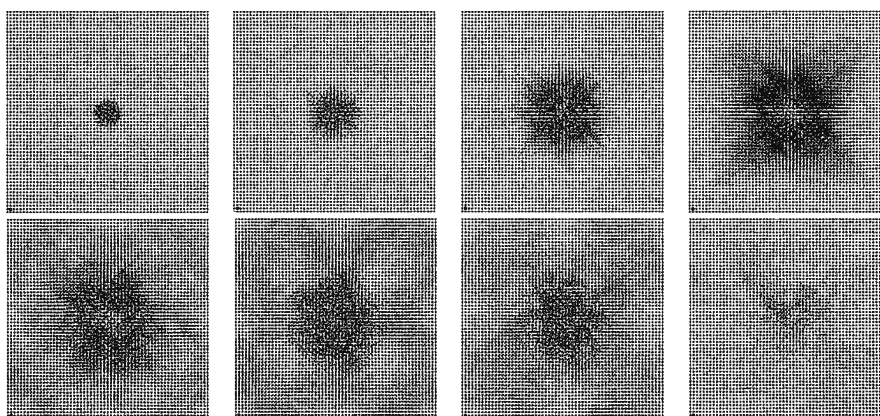


Рис. 11. Фронтальный вариант рис. 10 при тех же условиях моделирования

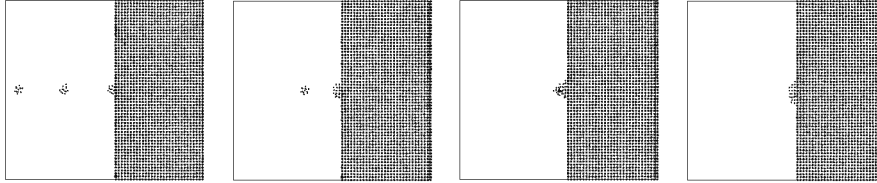


Рис. 12. Пучки кластеров $N = 13$, $E = 0,1$ эВ/атом, $t = 3,5, 10, 13, 20$ пс

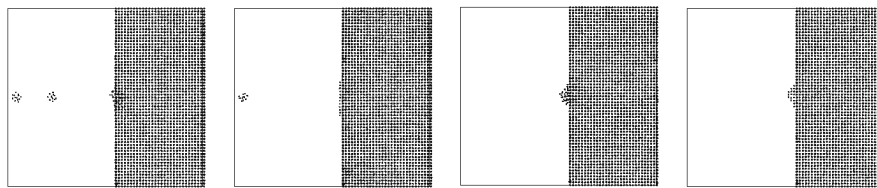


Рис. 13. Пучки кластеров $N = 13$, $E = 1,0$ эВ/атом, $t = 2, 10, 12, 20$ пс

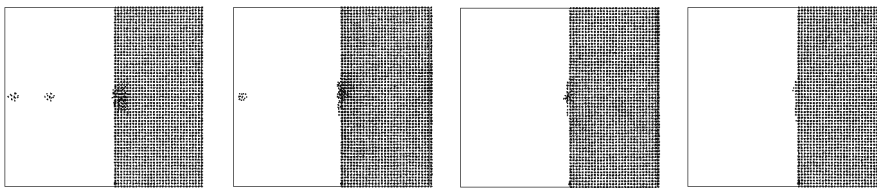


Рис. 14. Пучки кластеров $N = 13$, $E = 10$ эВ/атом, $t = 1,3, 8, 11,2, 20$ пс

налетающих наночастиц 0,1, 1,0 и 10 эВ/атом соответственно. Рис. 15–17 демонстрируют результаты моделирования для пучков кластеров, содержащих $N = 55$ атомов, при значениях энергии E налетающих наночастиц 0,1, 1,0 и 10 эВ/атом соответственно. Рис. 18–20 демонстрируют результаты моделирования для кластеров, содержащих $N = 147$ атомов, при значениях энергии E налетающих наночастиц 0,1, 1,0 и 10 эВ/атом соответственно. На рис. 21 представлен фронтальный вариант рис. 20 при тех же условиях моделирования.

После облучения поверхности мишени нанокластерами исследовалась зависимость глубины проникновения h составляющих частиц нанокластеров в материал мишени и толщины d поверхностного слоя, образованного в результате облучения, от величины нанокластера и энергии налетающих нанокластеров после термализации всей системы (см. рис. 22).

Исследования глубины проникновения нанокластеров в облучаемый материал проводилась для кластеров, содержащих $N = 13, 55$ и 147 атомов, при

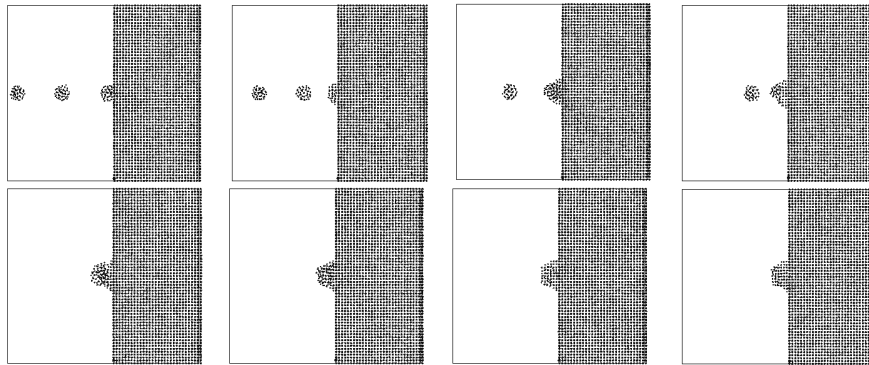


Рис. 15. Пучки кластеров $N = 55$, $E = 0,1$ эВ/атом, $t = 3,2, 5, 8, 10, 13, 15, 18, 20$ пс

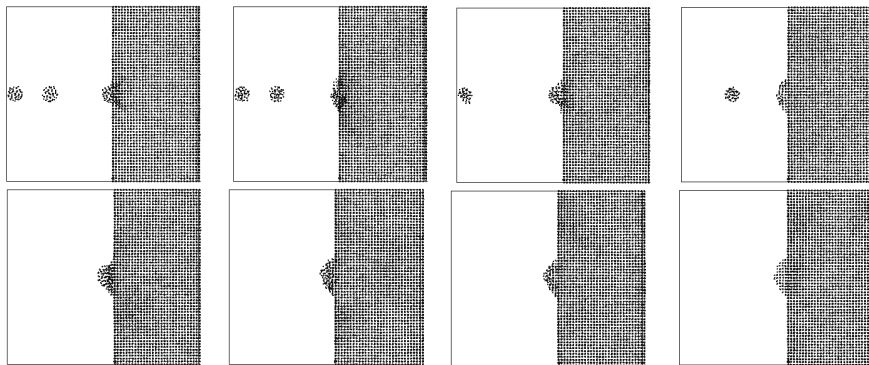


Рис. 16. Пучки кластеров $N = 55$, $E = 1,0$ эВ/атом, $t = 1,8, 3, 6,7, 10, 11,6, 13, 15, 20$ пс

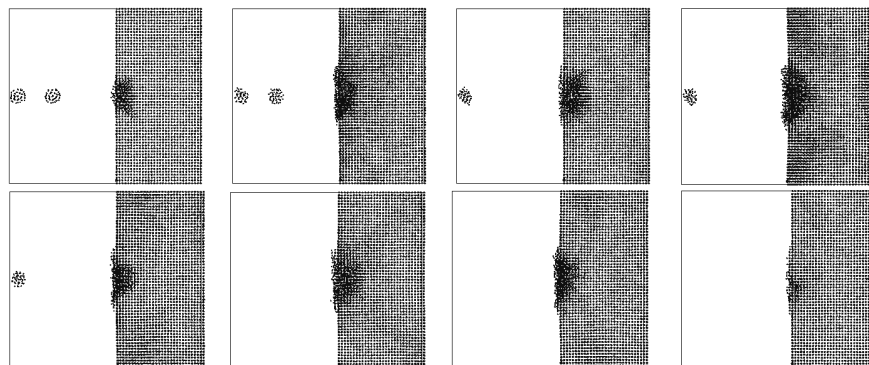


Рис. 17. Пучки кластеров $N = 55$, $E = 10$ эВ/атом, $t = 1,3, 4, 6,4, 8, 10, 11,4, 15, 20$ пс

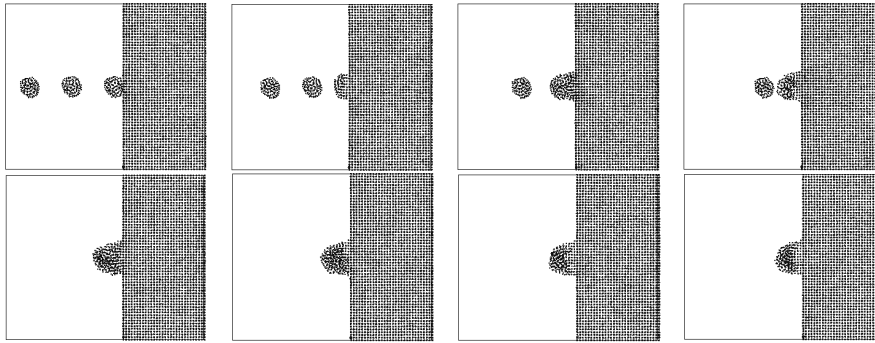


Рис. 18. Пучки кластеров $N = 147$, $E = 0,1$ эВ/атом, $t = 3,3, 5, 8, 10, 13, 15, 18, 20$ пс

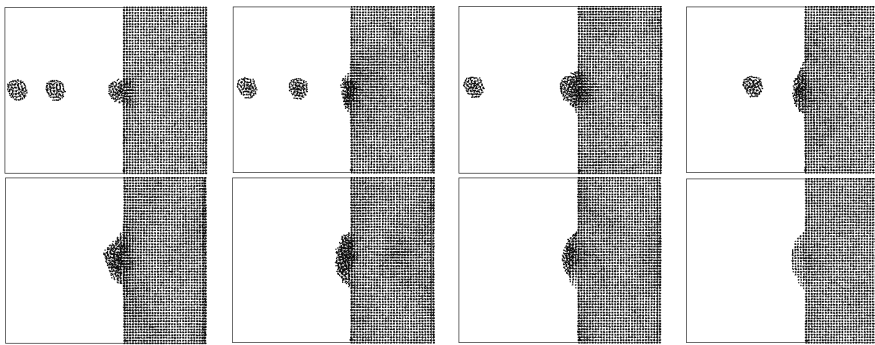


Рис. 19. Пучки кластеров $N = 147$, $E = 1,0$ эВ/атом, $t = 1,8, 5, 6,7, 10, 11,6, 13, 15, 20$ пс

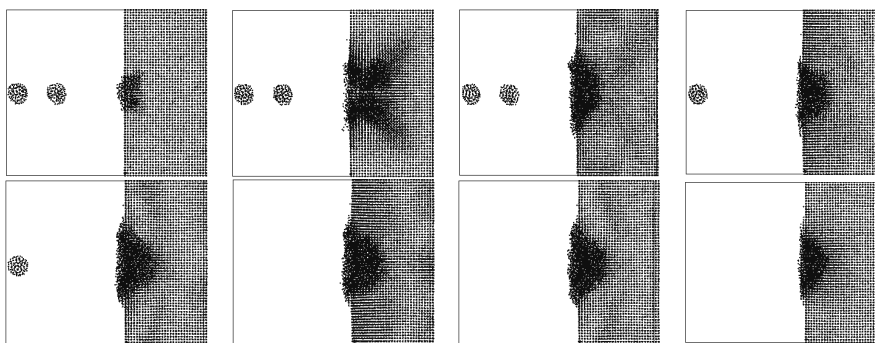


Рис. 20. Пучки кластеров $N = 147$, $E = 10$ эВ/атом, $t = 1,3, 2, 4, 6,4, 10, 11,4, 15, 20$ пс

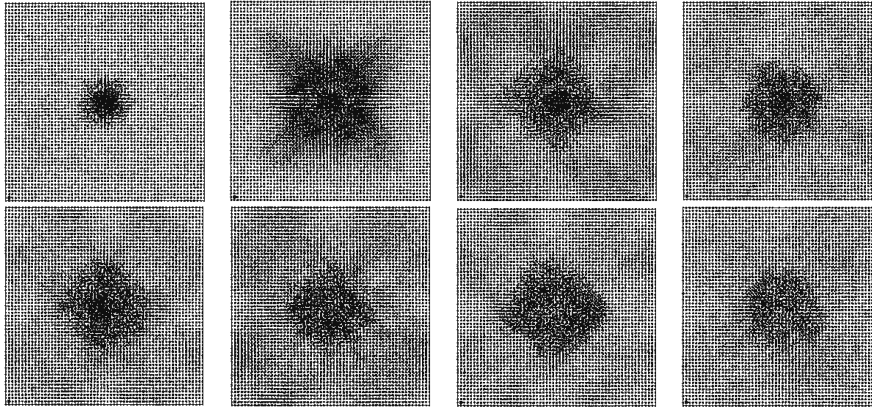


Рис. 21. Фронтальный вариант рис. 20 при тех же условиях моделирования

Рис. 22. Схематическое изображение взаимодействия нанокластеров с поверхностью: d — толщина поверхностного слоя, h — глубина проникновения частиц нанокластеров в материал мишени

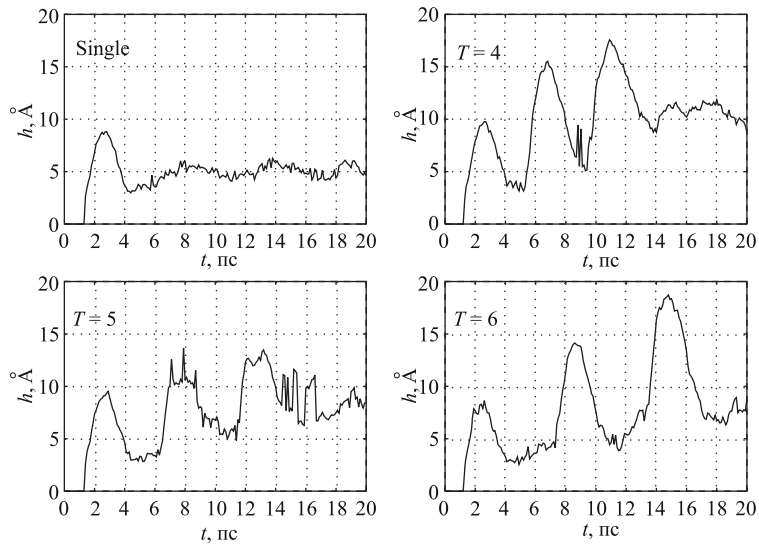
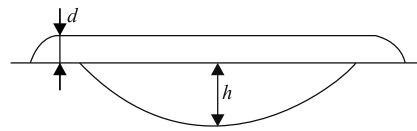


Рис. 23. Зависимость глубины проникновения h нанокластеров в облучаемый материал от времени для $N = 147$ при $E = 10$ эВ/атом

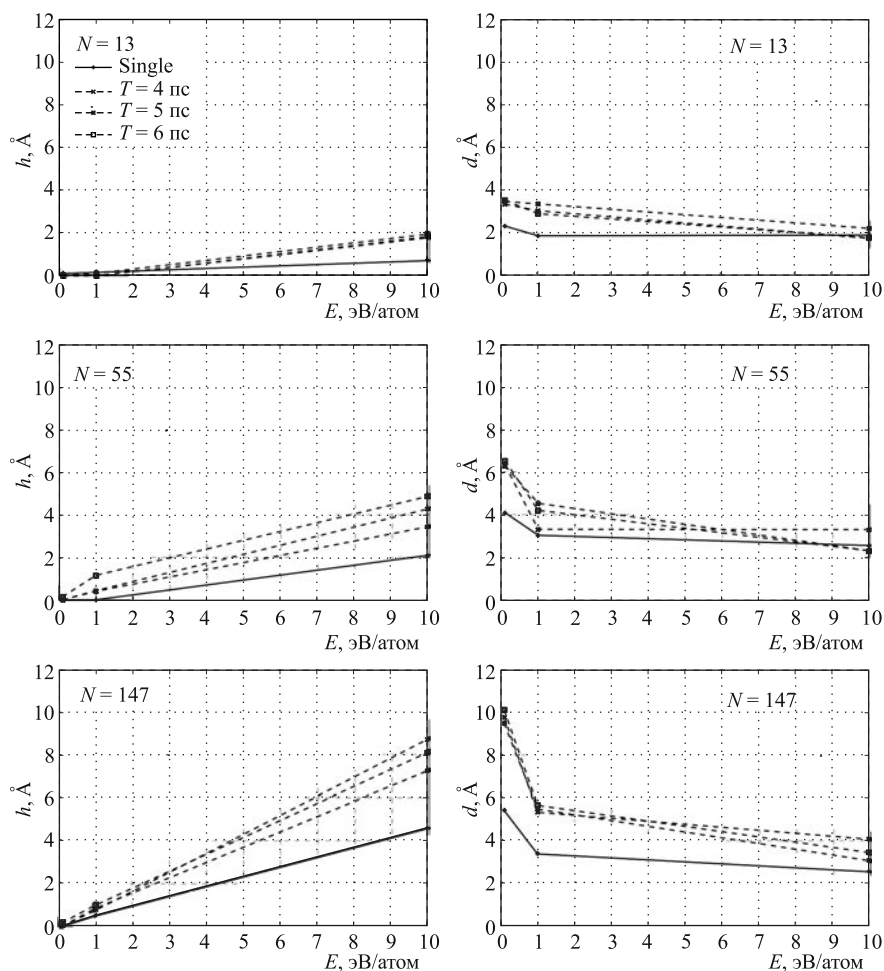


Рис. 24. Зависимость глубины проникновения h нанокластеров и толщины поверхностного слоя d от энергии

значениях энергии E налетающих наночастиц 0,1, 1,0 и 10 эВ/атом соответственно. На рис. 23 приведены графики зависимости глубины проникновения нанокластеров в облучаемый материал h от времени для числа частиц в кластере $N = 147$ при энергии налетающих частиц $E = 10$ эВ/атом. Данные графики наглядно демонстрируют основные особенности процессов проникновения атомов нанокластеров в материал мишени. На рис. 24 приведены графики зависимости глубины проникновения h и толщины поверхностного слоя d от энергии E налетающих нанокластеров 0,1, 1,0 и 10 эВ/атом для

кластеров, содержащих $N = 13, 55$ и 147 атомов, и для случаев одиночных нанокластеров (Single, $T = \infty$), а также пучка из трех нанокластеров ($T = 4, 5, 6$ пс).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Исследование зависимости плотности и температуры от энергии в системе «кластер–поверхность» далеко не тривиальная задача [9–11]. Метод молекулярной динамики является одним из наиболее эффективных инструментов исследования такого типа задач и позволяет проводить вычисления с высоким разрешением по пространственным и временным координатам. Обычно для удобства анализа результатов моделирования мишень разбивают на конечное количество слоев фиксированной толщины a_0 вдоль движения налетающих кластеров (обычно координатная ось z). Все полученные данные (для координат положения частиц, скоростей и т. д.) анализируются в каждом из таких слоев (например вычисление средней величины скорости и т. п.). Для каждого такого слоя рассчитывается изменение величин плотности и температуры на каждом временном шаге для мишени и снаряда. Анализ результатов моделирования позволяет сделать вывод о наличии трех интервалов энергии столкновения кластеров с поверхностью, которые существенно отличаются по характеристикам основных процессов, происходящих при взаимодействии кластеров с материалом поверхности. Режимы соударения, соответствующие трем интервалам энергии, в специальной литературе обычно называются следующим образом. При энергиях налетающих кластеров $0 < E < 0,1$ эВ/атом происходит налипание кластеров на поверхность (Soft landing). При энергиях E порядка 1 эВ/атом начинается осаждение кластеров на поверхность с частичной деформацией налетающих кластеров (Droplet spreading). И наконец, при энергиях $E > 10$ эВ/атом происходит глубокое проникновение кластеров в материал поверхности с образованием структуры поверхностного слоя (Implantation). Процессы, возникающие при соударениях кластеров с поверхностью при значениях энергий из указанных выше интервалов, характеризуются существенно разными распределениями плотности и температуры, а также величинами энергии осаждения.

Soft landing. При энергии налетающих кластеров $0 < E < 0,1$ эВ/атом поверхность мишени не разрушается и структура кластера остается очень близкой к первоначальному состоянию. Общим свойством процесса налипания является то, что кластер имеет локализованные распределения плотности и температуры и температура в данном процессе всегда ниже температуры плавления. В начале процесса соударения температура кластера во внешнем слое возрастает до своего максимального значения. Плотность кластера увеличивается примерно в два раза по сравнению с первоначальным значением

аналогично результатам работ [9–11]. Как и ожидалось, для твердого тела не наблюдается видимых изменений в распределении плотности в материале мишени (см. рис. 2, 5, 8) в случае облучения одиночными кластерами, независимо от размера кластеров. Аналогичная картина наблюдается и в случае облучения пучками кластеров (см. рис. 12, 15, 18). Глубина проникновения h при данных энергиях столкновения слабо зависит от числа атомов в налетающем кластере и практически равна нулю (рис. 23, 24). Напротив, толщина осаждаемого слоя d существенно отличается от нуля, увеличивается с ростом числа атомов в кластере и падает с ростом частоты импульсного источника пучка кластеров.

Droplet spreading. При энергиях E порядка 1 эВ/атом величины температуры и плотности материала мишени становятся неоднородными вдоль направления движения кластеров по сравнению с режимом *Soft landing* и не восстанавливаются до первоначальных значений температуры и плотности, которые были до соударения (см. рис. 3, 6, 9 для одиночных кластеров и рис. 13, 16, 19 для пучков). При этом увеличивается глубина проникновения h и уменьшается толщина осаждаемого слоя d (рис. 23, 24). Кроме того, появляется явная зависимость глубины проникновения h от числа атомов в налетающем кластере.

Implantation. При энергиях $E > 10$ эВ/атом становятся очевидными изменения структуры материала мишени после соударения с кластерами (см. рис. 4, 7, 10, 11). Причем очевидно также, что структурные изменения при облучении пучками кластеров являются значительно более существенными (рис. 14, 17, 20, 21). Аналогичные выводы можно сделать и в результате анализа зависимости температуры и плотности от времени. Глубина проникновения h при данных энергиях продолжает увеличиваться и явно зависит от числа атомов в налетающих кластерах и частоты импульсного источника в случае облучения мишени пучками кластеров. Толщина осаждаемого слоя d перестает увеличиваться с ростом числа атомов в налетающих кластерах и частоты импульсного источника (рис. 23, 24).

Перспективы дальнейших исследований. Как показали исследования, проведенные в данной работе, процессы, происходящие в системе «снаряд–мишень», в случае облучения одиночными кластерами и в случае облучения пучками кластеров существенно отличаются по ряду параметров. Обнаружена зависимость глубины проникновения атомов кластера в материал мишени и толщины осаждаемого слоя от количества атомов в налетающих кластерах, частоты импульсного источника в случае облучения пучками кластеров. Показано также, что толщина осаждаемого слоя, в отличие от глубины проникновения, перестает зависеть от числа атомов в налетающих кластерах N , частоты импульсного источника ω и энергии налетающих кластеров E при увеличении N , ω и E . Результаты моделирования позволяют сделать вы-

вод о зависимости характеристик различных энергетических режимов (Soft landing, Droplet spreading и Implantation) от числа атомов в налетающих кластерах. Таким образом, увеличивая число атомов в налетающих кластерах, можно переходить от одного режима к другому. Дальнейшие исследования позволят получить более полную и точную картину описанных выше эффектов. Кроме того, на наш взгляд, вызывает несомненный интерес исследование характеристик системы «снаряд–мишень» при различных параметрах металлических потенциалов и выяснение условий переходов между различными режимами процессов столкновений.

Работа поддержана грантом РФФИ № 12-01-00396а.

ЛИТЕРАТУРА

1. Макаров Г. Н. Экстремальные процессы в кластерах при столкновении с твердой поверхностью // УФН. 2006. Т. 176, № 2. С. 121–174.
2. Бойко В. И., Валяев А. Н., Погребняк А. Д. Модификация металлических материалов импульсными мощными пучками частиц // УФН. 1999. Т. 169, № 11. С. 1243–1271.
3. Stinnett R. W. et al. // Proc. Mater. Res. Soc. Symp.: Mater. Synthesis and Proc. Using Ion Beams, Boston, 1994.
4. Диденко А. Н., Лигачев А. Е., Куракин И. Б. Воздействие пучков заряженных частиц на поверхность металлов и сплавов. М.: Энергоатомиздат, 1987. 183 с.
5. Анисимов С. И. и др. Действие излучения большой мощности на металлы. М.: Наука, 1970. 272 с.
6. Корнев С. А. Сообщение ОИЯИ P12-89-615. Дубна, 1989.
7. Быковский Ю. А., Неволин В. Н., Фоминский В. Ю. Ионная и лазерная имплантация металлических материалов. М.: Атомиздат, 1991. 235 с.
8. Yamada I. // Proc. Yamada Conf. XLIII on Struc. and Dyn. of Clusters / Eds.: T. Kondow, K. Kaya, A. Terasaki. Tokyo: Universal Academy Press Inc., 1995.
9. Kholmurodov K. et al. MD Simulation of Cluster-Surface Impacts for Metallic Phases: Soft Landing, Droplet Spreading and Implantation // J. Comp. Phys. Comm. 2001. V. 141. P. 1–16.
10. Kholmurodov K. et al. Molecular Dynamics Simulation of Cluster-Beam-Surface Impact Processes for Metallic Phases // J. Comp. Meth. Sci. Eng. 2002. V. 2, No. 1s–2s. P. 141–147.
11. Холмуродов Х. Т. и др. Методы молекулярной динамики для моделирования физических и биологических процессов // ЭЧАЯ. 2003. Т. 34, вып. 2. С. 472–515.
12. Головнев И. Ф., Головнева Е. И., Фомин В. М. Молекулярно-динамическое исследование столкновения нанокластеров друг с другом и с подложкой // Физическая мезомеханика. 2007. Т. 10, № 2. С. 5–13.

13. *Шайтан К. В., Терёшкина К. Б.* Молекулярная динамика белков и пептидов: Методическое пособие. 1999. Режим доступа: [http:// www.moldyn.ru/library/manual/index.htm](http://www.moldyn.ru/library/manual/index.htm).
14. *Davis S., Loyola C., Gonzalez F., Peralta J.* Las Palmeras Molecular Dynamics: Flexible and Modular Molecular Dynamics // *J. Comp. Phys. Comm.* 2010. V. 181, No. 12. P. 2126–2139.
15. *Smith W., Yong C. W., Rodger P. M.* DL_POLY: Application to Molecular Simulation // *Molecular Simulation.* 2002. V. 28, No. 5. P. 385–471.

Получено 14 июня 2013 г.

Редактор *А. И. Петровская*

Подписано в печать 24.09.2013.

Формат 60 × 90/16. Бумага офсетная. Печать офсетная.

Усл. печ. л. 1,56. Уч.-изд. л. 1,9. Тираж 245 экз. Заказ № 58073.

Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований
141980, г. Дубна, Московская обл., ул. Жолио-Кюри, 6.

E-mail: publish@jinr.ru

www.jinr.ru/publish/