

УДК 539.534.9:53.072.23

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НАНОКЛАСТЕРОВ МЕДИ С МЕТАЛЛИЧЕСКИМИ МИШЕНЯМИ С ДЕФЕКТАМИ ТИПА ПОР

© 2022 г. З. А. Шарипов^а, *, Б. Батгэрэл^с, И. В. Пузынин^а,
Т. П. Пузынина^а, И. Г. Христов^б, Р. Д. Христова^б, З. К. Тухлиев^в

^аОбъединенный институт ядерных исследований, Дубна, 141980 Россия

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

^вМонгольский государственный университет науки и технологий, Улан-Батор, 11000 Монголия

*e-mail: zarif@jinr.ru

Поступила в редакцию 12.01.2022 г.

После доработки 25.02.2022 г.

Принята к публикации 28.02.2022 г.

Реальные кристаллы содержат в себе различные дефекты — поры, вакансии и дислокации. Тип дефектов во многом определяет важные свойства материалов. Следовательно, изменение дефектов под действием облучения меняет свойства мишени. Моделирование облучения реальных образцов является актуальной задачей, важной для понимания механизма структурных изменений в мишенях. В настоящей работе методом молекулярной динамики исследованы образцы меди, железа и никеля с заданным типом дефектов — порами — под действием облучения нанокластерами атомов меди с энергией 1–100 эВ. Получены результаты численного моделирования: пороговая плотность энергии, приводящая к образованию ударных волн, их воздействие на дефектные структуры облучаемой мишени в зависимости от энергии атомов нанокластера. Исследованы возникающие структурные изменения в глубине мишени в зависимости от энергии атомов и размера мишени. Установлено образование гексагональной плотноупакованной решетки в окрестности пор в мишени из меди в зависимости от энергии атомов нанокластера.

Ключевые слова: моделирование, метод молекулярной динамики, нанокластеры, ударная волна, облучение, дефекты, структурные изменения.

DOI: 10.31857/S1028096022080131

ВВЕДЕНИЕ

Результаты моделирования термоупругих процессов при облучении нанокластерами металлических мишеней с кристаллической решеткой, содержащей “природные” дефекты, представляют интерес в материаловедении. Дефекты кристаллической решетки делятся на точечные (вакансии и примеси), линейные (дислокации), плоские (граница зерен и поверхности раздела фаз) и объемные (поры и каналы). Различные типы дефектов во многом определяют важные свойства материалов. При облучении нанокластерами в мишени возникают ударные волны, которые зависят от энергии, размера, типа нанокластера и размера мишени. Подбирая эти параметры, можно генерировать ударные волны различной величины, влияющие на дефекты, а значит и на свойства облучаемой мишени.

Исследованию действия ударных волн на кристаллическую решетку различных мишеней посвящено множество работ [1–4]. Целью настоящей

работы было изучение структурных изменений в порах мишеней из меди, железа или никеля под действием облучения нанокластерами меди. Выбор такого типа дефектов объясняется тем, что в расчетах не удалось полностью определить закономерность изменений вакансий и дислокаций в зависимости от энергии облучения нанокластерами. При исследовании вакансий в мишени было выяснено, что при увеличении температуры вакансии становятся сильно подвижными, сливаются (объединяются) друг с другом, стремятся к поверхности мишени и исчезают. Закономерность изменений в дислокациях под действием ударной волны тоже пока до конца не ясна.

Выбор меди в качестве мишени обусловлен тем, что именно она была использована в предыдущих работах [5, 6]. Железо и никель выбраны из-за их расположения в периодической таблице в начале своих подгрупп. Все рассматриваемые образцы имеют различные физические свойства, сами образцы и их сплавы широко применяются в раз-

Таблица 1. Основные физические свойства исследуемых образцов

Элемент	Fe	Ni	Cu
Z	26	28	29
Атомная масса, а.е.м.	55.845	58.6934	63.48
Плотность, г/см ³	7.874	8.902	8.92
Тип решетки	ОЦК	ГЦК	ГЦК
Параметр решетки, Å	2.866	3.524	3.615
Температура плавления, К	1812	1726	1356
Температура кипения, К	3134	3005	2567

личных сферах промышленности. В табл. 1 приведены основные физические свойства образцов, которые важны для моделирования в рамках метода молекулярной динамики и интерпретации полученных результатов [7].

МЕТОДИКА ИССЛЕДОВАНИЙ

Методы молекулярной динамики широко применяются в радиационной физике твердого тела [8–11]. В настоящей работе в рамках метода молекулярной динамики был промоделирован процесс облучения металлических мишеней с заданным типом дефектов –порами – нанокластерами атомов меди с энергией 1–100 эВ. Необходимо отметить, что практическое получение нанокластеров и их ускорение является технически трудной задачей, но моделирование облучения нанокластерами может дать важную информацию об изменениях в дефектных структурах мишени под действием облучения. В работе расчеты проведены для мишеней с объемными сферическими пораами диаметром 2 нм. Для применения методов молекулярной динамики существуют готовые программные пакеты (LAMMPS, DL_POLY, NAMD и другие). В настоящей работе для моделирования использован пакет LAMMPS [12], установленный на гетерогенном вычислительном кластере HybriLit [13]. При моделировании в рамках молекулярной динамики важным параметром является выбор потенциала взаимодействия между атомами. Для металлов в основном используется многочастичный потенциал на основе метода “погруженного атома” – EAM-потенциал [14]:

$$E_i = F_\alpha \left(\sum_{j \neq i} \rho_\alpha(r_{ij}) \right) + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \phi_{\alpha\beta}(r_{ij}),$$

где r_{ij} – расстояние между i -м и j -м атомами, $\phi_{\alpha\beta}$ – функция парного потенциала, ρ_α – вклад в плотность заряда электронов j -го атома в месте расположения i -го атома и F_α – это функция “погружения”, которая представляет собой энергию, необходимую для помещения i -го атома типа α в электрон-

ное облако. В настоящей работе такой потенциал был применен для моделирования взаимодействия атомов мишени между собой.

Для моделирования столкновения атомов при высоких энергиях был использован потенциал взаимодействия Циглера–Бирзака–Литтмарка [15] $V(r)$, который корректно описывает взаимодействие атомов на коротких расстояниях (менее 0.5 Å):

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2}{r} \phi(r),$$

$$\phi(r) = \sum_{i=1}^4 A_i \exp\left(\frac{-b_i r}{a}\right),$$

$$a = \frac{0.8854}{(Z_1^{0.23} + Z_2^{0.23})},$$

где Z_1, Z_2 – атомные номера элементов, r – меж-атомное расстояние, $\phi(r)$ – функция экранирования и коэффициенты A_i и b_i приведены в [16]. Для моделирования столкновений атомов нанокластера с атомами мишени при низких энергиях (менее 1 эВ) подходят многочастичные потенциалы и их модификации для соответствующих комбинаций нанокластер–мишень [17, 18]. Визуализация полученных результатов выполнена с помощью программы OVITO [19], в которой частице соответствует цвет, приписываемый по кинетической энергии частицы (чем величина больше, тем цвет темнее).

На первом этапе выполнена подготовка образцов мишени и нанокластера, как в [20]. Моделирование проведено для мишеней размера $5 \times 5 \times 50$ нм (количество частиц в системе $\sim 10^5$) с периодическими граничными условиями по оси x и y , облучаемых нанокластерами диаметром 1.5 нм, состоящими из 141 атома. Использование периодических граничных условий означает, что в процессе облучения в мишени возникают плоские ударные волны, которые затухают медленно и проникают глубоко в мишень. В случае облучения мишени больших размеров, например $50 \times 50 \times 50$ нм (количество частиц более 10^7), в мишени возникают сферические волны, которые затухают быстрее по сравнению с плоскими. Механизм затухания плоской волны (диссипации энергии) становится заметным на больших расстояниях в направлении z (согласно модели облучения происходит именно в этом направлении). Однако размеров мишени, использованной в настоящей работе (50 нм по оси z), недостаточно для выявления затухания плоской волны. Чтобы не возникало движения образца под действием облучения, центр масс мишени при моделировании был фиксирован.

Поры размером 1.5 (для железной мишени) или 2 нм (для медной и никелевой мишеней), со-

гласно модели, были расположены на глубинах 12, 25 и 40 нм. Энергия атомов нанокластера меди варьировалась в диапазоне 1–100 эВ с шагом 10 эВ. При облучении структурные изменения происходят в приповерхностном слое толщиной 1–10 нм в зависимости от энергии атомов нанокластера. Воздействие на дефекты в глубине мишени могут оказать ударные волны, возникающие вследствие облучения. При взаимодействии нанокластера с мишенью возникновение ударной волны зависит от энергии, размера нанокластера и площади облучаемой мишени, т.е. в общем случае от плотности энергии, вносимой нанокластером. Следует заметить, что при низких энергиях облучения нанокластером ударная волна в мишени не образуется.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Облучение медной мишени

На первом этапе моделирования исследовали формирование ударной волны и скорость ее движения при различной энергии атомов нанокластера. Расчеты показали, что при энергии 5 эВ в мишени образуются ударные волны. При увеличении энергии атомов нанокластера скорость ударной волны пропорционально не растет. При взаимодействии нанокластера с мишенью происходит следующее. Сначала нанокластер проникает в мишень, теряя свою энергию. Вследствие этого возникает высоковозбужденная область (с высокой кинетической энергией атомов в приповерхностном слое), и часть атомов удаляется с поверхности мишени. Остальная часть атомов образует сначала сферическую ударную волну, которая отражается от границ мишени (из-за периодических граничных условий по оси x и y), и постепенно образует плоскую ударную волну. При увеличении энергии атомов нанокластера его проникающая способность растет.

На рис. 1 приведены результаты, полученные при облучении медной мишени нанокластером атомов с энергией 40 эВ. В этом случае сформировавшаяся ударная волна достигала дефектов (пор) при временах 1.9, 5 и 8.1 пс. При заданных условиях начальная скорость нанокластера составляла 11020 м/с, средняя скорость ударной волны, соответственно, ~5200, 4900 и 4790 м/с. При энергии атомов нанокластера 60 эВ и выше под действием ударной волны первая пора исчезала, вторая уменьшалась в размерах в два раза. В случае облучения нанокластером с энергией атомов 100 эВ вторая пора тоже исчезала, а третья деформировалась.

Отдельный интерес представляет облучение нанокластером атомов с энергией 100 эВ в виду высокой плотности энергии облучения. На рис. 2 приведены результаты воздействия ударной волны на поры в медной мишени при облучении таким нанокластером. В этом случае сформировавшаяся удар-

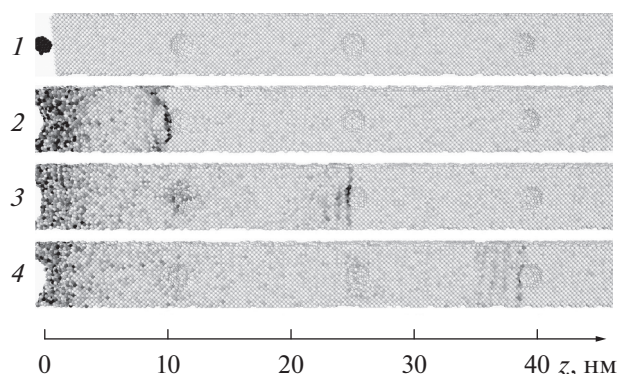


Рис. 1. Исходный образец медной мишени в разрезе с заданными дефектами (1) и динамика ударной волны в моменты времени 1.9 (2); 5 (3) и 8.1 пс (4) при облучении нанокластером атомов с энергией 40 эВ.

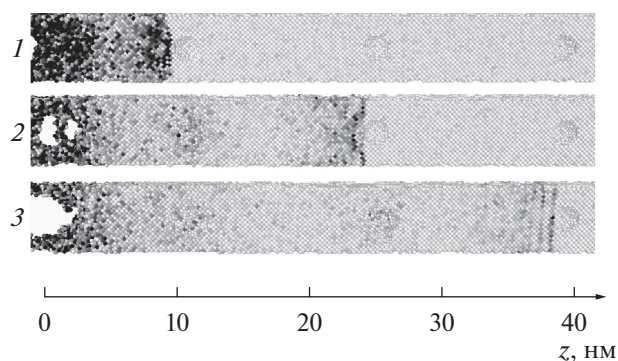


Рис. 2. Динамика ударной волны в медной мишени в моменты времени 1.5 (1); 4.4 (2) и 7.4 пс (3) при облучении нанокластером атомов с энергией 100 эВ.

ная волна достигает дефектов при временах 1.5, 4.4 и 7.4 пс. Начальная скорость нанокластера составляла 17424 м/с, средняя скорость ударной волны ~6660, 5570 и 5240 м/с соответственно.

Моделирование показало, что поры заполняются атомами и вокруг пор образуется гексагональная плотноупакованная решетка. Такой результат определен с помощью программы OVITO с использованием функции “общего анализа соседей” (common neighbor analysis). Расчеты в интервале времени 10–500 пс показывают стабильность образовавшейся гексагональной плотноупакованной решетки. Эти результаты приведены на рис. 3.

Облучение железной и никелевой мишени

Ударная волна в железной мишени образуется при облучении нанокластером атомов меди с энергией 7 эВ. В железной мишени размер пор уменьшен до 1.5 нм, так как на поры диаметром 2 нм даже нанокластеры атомов с энергией 100 эВ не оказа-

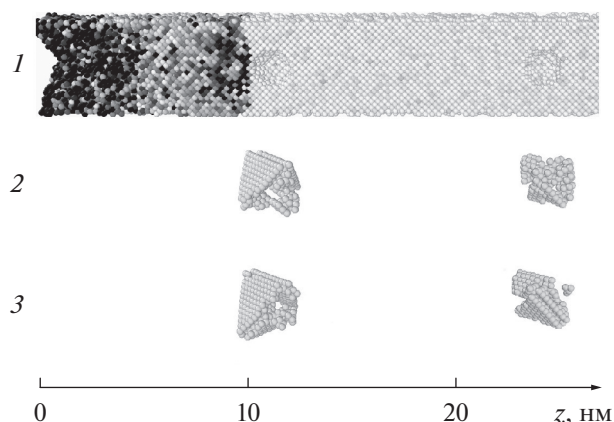


Рис. 3. Динамика ударной волны в медной мишени в момент времени 1.9 пс (1). Гексагональная плотноупакованная решетка, образованная вследствие ударной волны в окрестности пор мишени в моменты времени 10 (2) и 60 пс (3) при облучении нанокластером с энергией атомов 100 эВ.

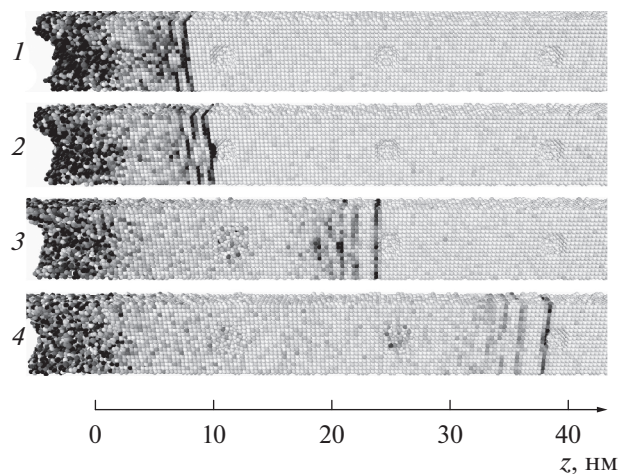


Рис. 4. Динамика ударной волны в железной мишени в моменты времени 1.2 (1); 1.4 (2); 3.1 (3) и 4.9 пс (4) при облучении нанокластером меди с энергией атомов 100 эВ.

ли явного воздействия. На рис. 4 приведены результаты облучения железной мишени.

Как в случае мишени из меди, особый интерес представляет воздействие ударной волны на поры в мишени при облучении нанокластером с энергией атомов 100 эВ. В этом случае плоская ударная волна формируется в момент времени 1.2 пс на глубине 9 нм в мишени и достигает пор при временах 1.4, 3.1 и 4.9 пс. Средняя скорость сформировавшейся ударной волны составляла ~9900, 7250 и 7100 м/с соответственно. Из-за большей твердости железа по сравнению с медью скорость ударной волны в железной мишени больше, а дефекты железной мишени более устойчивы к воздействию ударной волны.

При облучении никелевой мишени ударная волна образуется при энергии атомов нанокластера 6 эВ. При энергии 40 эВ диаметр первой поры уменьшается от 2 до 1 нм, при энергии 60 эВ она исчезает. На рис. 5 приведены результаты облучения никелевой мишени нанокластером атомов с энергией 100 эВ. Скорость ударной волны в никелевой мишени при таком облучении близка к скорости ударной волны в мишени из меди, в этом случае все поры в никелевой мишени исчезают.

АНАЛИЗ ПРОЦЕССОВ ОБЛУЧЕНИЯ НАНОКЛАСТЕРАМИ

Для интерпретации результатов исследований облучения материалов ускоренными ионами эксперименты можно условно разделить на два типа в соответствии с энергией бомбардирующих частиц: облучение тяжелыми ионами высоких энергий (1–1000 МэВ); импульсное облучение пучками ионов низких энергий (1–500 кэВ, частота

1–50 имп./с). В обоих случаях площадь облученной поверхности составляет несколько см².

В первом случае флюенс облучения доходит до 10^{12} – 10^{15} см⁻², энергия несколько сотен МэВ, и мишень облучается в течение одной–двух недель. Такие условия необходимы для набора соответствующего флюенса, или дозы, т.е. время облучения больше на несколько порядков по сравнению с моделированием в рамках молекулярной динамики. При облучении тяжелыми ионами высоких энергий основной механизм потери энергии в мишени – ионизационный (более 90%), т.е. энергия уходит на возбуждение электронной подсистемы с последующей передачей энергии в решетку. Через некоторое время после взаимодействия частиц с

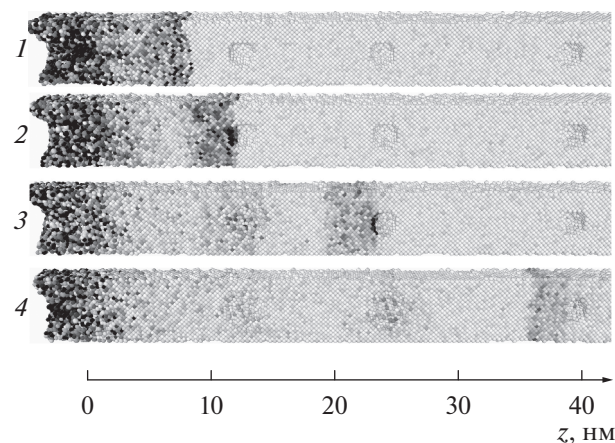


Рис. 5. Динамика ударной волны в никелевой мишени в моменты времени 1.5 (1); 2.1 (2); 4.5 (3) и 7.3 пс (4) при облучении нанокластером меди с энергией атомов 100 эВ.

мишеню ($t > 1$ пс) энергия переходит в тепловые колебания. Упругие потери энергии происходят в области остановки налетающего иона (обычно на глубине несколько мкм). Ударная волна в этом случае образуется в глубине мишени, но требует подробного исследования.

Во втором случае, при низких энергиях ионов и облучении импульсами, преобладают упругие потери энергии, и этого достаточно для образования плоских ударных волн, так как площадь облучения несколько см². При импульсном облучении из-за неравномерного распределения частиц в некоторых областях их плотность может быть в несколько раз больше среднего в импульсе. Тогда можно утверждать, что полученные результаты условно применимы к описанию реального случая облучения объемной мишени импульсными пучками ионов.

Выяснить, насколько свойства ударных волн, описанных в настоящей работе, близки к свойствам макроскопических ударных волн (например, [21]), очень важно, и это требует подробного исследования, так как затрагивает вопрос применимости уравнений для сплошных сред (например, уравнения теплопроводности и волнового уравнения) для исследования дискретных (атомных) систем.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Получены результаты моделирования облучения металлических мишеней из меди, железа и никеля с заданным типом дефектов — порами — в зависимости от энергии атомов нанокластеров меди. Исследовано влияние ударных волн на поры в мишенях. Вычислены пороговые значения энергии атомов нанокластеров меди, изменяющие структуру мишеней вблизи дефектов.

При облучении меди ударная волна образуется при энергии атомов нанокластера 5 эВ; при энергии 60 эВ первая пора (на глубине 12 нм) исчезает. При облучении с энергией 100 эВ в окрестности пор образуется устойчивая ($t \sim 10$ –500 пс) гексагональная плотноупакованная решетка.

При облучении железной мишени ударная волна образуется при энергии атомов нанокластера 7 эВ. Результаты облучения железной мишени показали устойчивость дефектов с размерами больше 1.5 нм к воздействию ударных волн при облучении нанокластером меди атомов с энергией 100 эВ, а пора размером 1.5 нм исчезает.

При облучении никелевой мишени ударная волна образуется при энергии атомов нанокластера 6 эВ; при энергии 40 эВ диаметр первой поры уменьшается в два раза, а при энергии 60 эВ она исчезает.

Моделирование показало большую устойчивость пор в железной мишени к воздействию

ударной волны по сравнению с образцами из меди и никеля.

БЛАГОДАРНОСТИ

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ и МОКНСМ (проекты № 20-51-44001, № 19-01-00645) и Полномочного представителя Республики Болгарии в ОИЯИ.

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Конфликт интересов: авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Канель Г.И., Фортков В.Е., Разоренов С.В. // Успехи физических наук. 2007. Т. 177. № 8. С. 809. <https://doi.org/10.3367/UFNr.0177.200708a.0809>
2. Стегайлов В.В., Янилкин А.В. // ЖЭТФ. 2007. Т. 131. № 6. С. 1064.
3. Куksин А.Ю., Стегайлов В.В., Янилкин А.В. // ФТТ. 2008. Т. 50. № 11. С. 1984.
4. Болеста А.В., Фомин В.М. // Прикладная мех. тех. физ. 2014. № 5. С. 86.
5. Batgerel B., Dimova S., Kупenova T., Puzynin I., Puzynina T., Hristov I., Hristova R., Tuxhliev Z., Sharipov Z. // EPJ Web Conf. 2018. V. 173. P. 06001. <https://doi.org/10.1051/epjconf/201817303005>
6. Batgerel B., Dimova S., Puzynin I., Puzynina T., Hristov I., Hristova R., Tuxhliev Z., Sharipov Z. // Lecture Notes Comp. Sci. 2019. V. 11189. P. 318. https://doi.org/10.1007/978-3-030-10692-8_35
7. Кнунянц И.Л. Химическая энциклопедия. Т. 2. М.: Советская энциклопедия, 1990. 671 с.
8. Лагарьков А.Н., Сергеев В.М. // Успехи физ. наук. 1978. Т. 125. С. 409. <https://doi.org/10.3367/UFNr.0125.197807b.0409>
9. Холмуродов Х.Т., Алтайский М.В., Пузынин И.В., Дардин Т. // ЭЧАЯ. 2003. Т. 34. № 2. С. 472.
10. Пузынин И.В., Пузынина Т.П., Христов И.Г., Христова Р.Д., Тухлиев З.К., Шарипов З.А. // Поверхность. Рентген., синхротрон. и нейтрон. исслед. 2020. № 12. С. 78. <https://doi.org/10.31857/S1028096020120249>
11. Батгэрэл Б., Пузынин И.В., Пузынина Т.П., Тухлиев З.К., Христов И.Г., Христова Р.Д., Шарипов З.А. // Изв. РАН. Сер. физ. 2017. Т. 81. № 11. С. 1546.
12. Plimpton S. // J. Comp. Phys. 1995. V. 117. P. 1. <https://doi.org/10.1006/jcph.1995.1039>
13. Гетерогенный кластер HybriLit URL: <http://hybrilit.jinr.ru/>
14. Foiles S.M., Baskes M.I., Daw M.S. // Phys. Rev. B. 1986. V. 33. № 12. P. 7983. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.33.7983>
15. Ziegler J.F., Biersack J.P., Littmark U., The Stopping and Range of Ions in Solids. N.Y.: Pergamon Press, 1985.

16. *Satake S., Inoue N., Taniguchi J., Shibahara M.* // J. Phys. Conf. Ser. 2008. V. 106. P. 012013.
<https://doi.org/10.1088/1742-6596/106/1/012013>
17. *Lee B.-J., Wirth B.D., Shim J.-H., Kwon J., Kwon S.C., Hong J.-H.* // Phys. Rev. B. 2005. V. 71. P. 184205.
<https://doi.org/10.1103/physrevb.71.184205>
18. *Fischer F., Schmitz G., Eich S.M.* // Acta Materialia. 2019. V. 176. P. 220.
<https://doi.org/10.1016/j.actamat.2019.06.027>
19. *Stukowski A.* // Modeling Simul. Mater. Sci. Eng. 2010. V. 18. P. 015012.
<https://doi.org/10.1088/0965-0393/18/8/085001>
20. *Батгэрэл Б., Дидык А.Ю., Никонов Э.Г., Пузынин И.В.* // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2015. Т. 10. С. 40.
21. *Зельдович Я.Б., Райзер Ю.П.* Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений: практическое пособие. М.: Физматлит, 2008. 653 с.

Simulation of Processes of Interaction between Copper Nanoclusters and Metal Targets with Pore-Type Defects

**Z. A. Sharipov^{1, *}, B. Batgerel³, I. V. Puzynin¹,
T. P. Puzynina¹, I. G. Hristov², R. D. Hristova², Z. K. Tukhliev¹**

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

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

³*Mongolian State University of Science and Technology, Ulaanbaatar, 11000 Mongolia*

*e-mail: zarif@jinr.ru

Real crystals contain various defects such as pores, vacancies and dislocations. The type of defects largely determines the important properties of materials. Consequently, the change in defects under the action of irradiation changes the properties of the target. Modeling the irradiation of real samples is an important task for understanding the mechanism of structural changes in targets. In this work, the molecular dynamics method is used to study copper, iron, cobalt, and nickel samples with a given type of defects — pores — under the action of irradiation with copper atom nanoclusters with an energy of 1–100 eV. The results of numerical simulation are obtained: the threshold energy density leading to the formation of shock waves, their effect on the defect structures of the irradiated target, depending on the energy of the nanocluster atoms. The resulting structural changes in the depth of the target are studied depending on the energy of the atoms and the size of the target. The formation of a hexagonal close-packed lattice in the vicinity of pores in a copper target has been established depending on the energy of nanocluster atoms.

Keywords: simulation, molecular dynamics method, nanoclusters, shock wave, irradiation, defects, structural changes.