

01

Моделирование колебаний медного наностержня методом молекулярной динамики

© А.Н. Куприянов, О.С. Трушин, И.И. Амиров

Ярославский филиал Физико-технологического института РАН,
Ярославль
E-mail: amirov@yandex.ru

Поступило в Редакцию 22 мая 2014 г.

Методом молекулярного динамического моделирования проведено исследование динамики колебаний медного наностержня (длина 16.4 nm, размер стороны квадратного сечения 3.0 nm). Обнаружено, что при релаксации напряженного наностержня в нем возникают преимущественно продольные колебания. Показано, что изменение его потенциальной энергии во времени не отражает в полной мере всю динамику колебаний. Обнаружены биения продольных и поперечных колебаний первоначально отклоненного медного наностержня. Определен его модуль Юнга. Приводится обсуждение полученных результатов.

Наностержни (НС) и нанопроволоки (НП) являются основными элементами наноэлектромеханических сенсоров и нанопереклюателей [1,2]. Собственная частота металлических НС лежит в гигагерцевой области, и изучение динамики колебаний таких нанорезонаторов (НР) методом молекулярной динамики (МД) позволило выявить многие ее особенности [3–5]. Исследование наиболее изученной системы — закрепленных с двух сторон металлических нанобалок, НП — показало влияние поверхностных эффектов на их собственную частоту f_0 , возникновение биений при их колебаниях [4,5]. Собственные частоты

НР обычно находили из зависимости периодических изменений их потенциальной энергии во времени [3–5]. Однако такая методика определения f_0 не позволяет отслеживать их пространственные колебания. Это особенно важно при изучении колебаний закрепленного с одной стороны НС, колебания которого могут происходить в разных плоскостях и являются связанными. В данной работе на примере исследования динамики колебаний медного НС показано, что определение резонансной частоты из данных периодического изменения его потенциальной энергии не согласуется с результатами ее определения по данным изменения во времени пространственных колебаний НС. Показано, что в результате распределения энергии колебаний по различным степеням свободы потенциальная энергия НС может не меняться, хотя он будет продолжать колебаться. Обнаружено, что при релаксации напряженного НС в нем возникают преимущественно продольные колебания. На основе измерений частоты его продольных колебаний определена величина модуля Юнга медного НС, которая была почти в 2.5 раза меньше его значения, соответствующего объемному материалу.

Моделирование проводили с помощью разработанного программного комплекса (MDEAM) [6]. В состав программного комплекса входят расчетный модуль и средства визуализации атомных структур с использованием графической библиотеки OpenGL собственной разработки. Расчет межатомного взаимодействия атомов Cu–Cu осуществлялся с использованием метода погруженного атома (EAM потенциал) [7]. Интегрирование уравнений движения проводилось с использованием алгоритма Leap-frog с временным шагом 10^{-15} s. При моделировании поддерживалось постоянство числа частиц, объема и энергии (NVE ансамбль). Начальная температура модели задавалась равной 1 К. Координаты атомов записывались в файл с интервалом 10^{-13} s, что позволяет отследить колебания в системе с частотами ниже 1 THz.

НС представлял собой вырезанный из объемного ГЦК (100) кристалла меди с постоянной решетки $a = 0.3615$ nm параллелепипед с размерами $8a \times 8a \times 90a$ ($3.0 \times 3.0 \times 16.5$ nm) с основанием размерами $20a \times 20a \times 9a$ ($7.2 \times 7.2 \times 1.5$ nm) (рис. 1, а). Число атомов в НС равнялось 18 848. Нижние 2 слоя атомов основания были зафиксированы. Для имитации бесконечного основания использованы периодические граничные условия в плоскости XY. Возбуждение колебаний НС осуществлялось путем сдвига атомов по координате X с линейным возрастанием смещения от нуля около основания балки

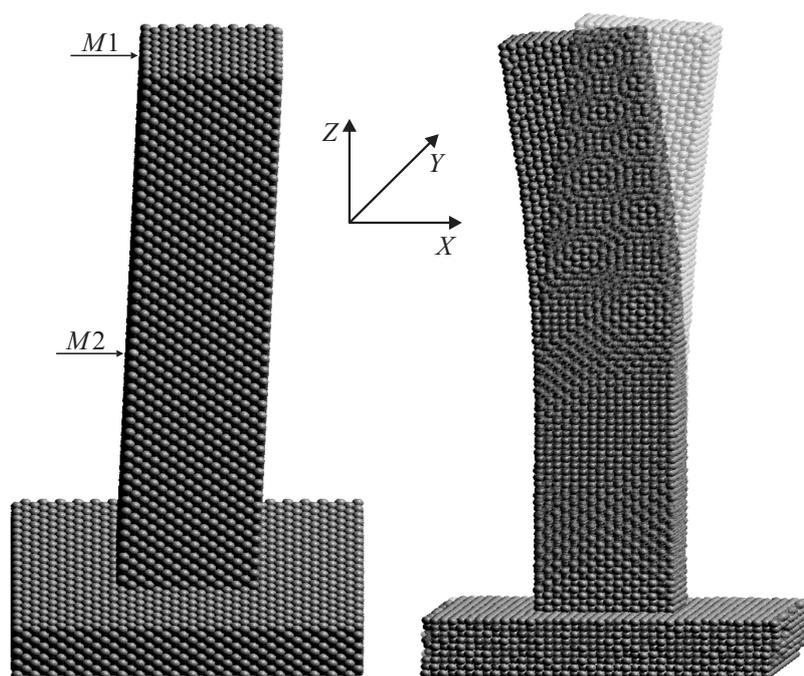


Рис. 1. Вид отклоненного НС с метками $M1$ и $M2$.

до 0.5 nm на ее вершине. Приведение НС в колебательный режим путем начального отклонения является эффективным способом возбуждения колебаний [3–5]. В работе собственная частота НС, согласно [4,5], определялась по частоте колебаний потенциальной энергии, а также из данных периодического движения в пространстве атомов-меток $M1$ и $M2$, расположенных на вершине и на половине расстояния от вершины грани НС (рис. 1, *a*). Контроль за движением меток $M1$ и $M2$ позволил в реальном масштабе времени наблюдать особенности осцилляций НС. Число временных шагов вычислительного эксперимента равнялось 10^6 .

НС, вырезанный из объема ГЦК (100) кристалла меди, обладает избыточной поверхностной энергией. Поэтому перед осуществлением

1* Письма в ЖТФ, 2014, том 40, вып. 21

сдвига атомов по координате X он был приведен в состояние с минимальной энергией методом молекулярно-динамического охлаждения до температуры 0.001 К. Такой способ релаксации возбужденного состояния вырезанного из объема ГЦК (100) кристалла металла НП обычно осуществлялся при исследовании их резонансных свойств [3,4]. Однако с методической точки зрения представляет интерес вопрос, в какие колебательные моды может трансформироваться избыточная поверхностная энергия возбужденного НС, если его не приводить в состояние минимальной энергии. Известно, что ГЦК кристаллические НП и НС с поперечным сечением менее 2.0 nm при релаксации претерпевают структурные изменения [8]. При релаксации нашего НС никаких его структурных трансформаций не происходило. Наблюдались только слабые по оси колебания НС по оси X и Y . Однако происходили довольно сильные (~ 0.6 nm) продольные (по оси Z) гармонические колебания с частотой около 34 GHz (колебания 3, рис. 2, *a*). Таким образом, происходила трансформация избыточной поверхностной энергии в энергию продольных колебаний НС. Такие же продольные колебания, но с частотой 33.5 GHz наблюдались и для отклоненного, нерелаксированного НС (колебания 1, рис. 2, *a*). Однако отрелаксированный, отклоненный НС не испытывал продольных колебаний (колебания 2, рис. 2, *a*). В этом случае по оси Z наблюдались слабые зашумленные колебания с частотой приблизительно 3.5 GHz.

Контроль за изменением во времени потенциальной энергии нерелаксированных наностержней показал, что у отклоненного (колебания 1, рис. 2, *b*) и неотклоненного НС (колебания 3, рис. 2, *b*) наблюдались интенсивные колебания избыточной потенциальной энергии dE_p ($dE_p = E_p - E_0$, где E_0 — минимальная энергия отрелаксированного НС) почти с одинаковой частотой. Только время установления колебаний, как и величина dE_p , в первом случае были выше. Кроме того, наблюдалась слабая модуляция колебаний с частотой приблизительно 3.5 GHz. Частота колебаний равнялась приблизительно 67 GHz, что соответствовало пространственной частоте колебаний 33.5 GHz. Она равнялась частоте продольных колебаний НС, определенной по колебаниям меток $M1$ и $M2$ по оси Z (колебания 1, рис. 2, *a*). Можно отметить, что уменьшение потенциальной энергии НС во времени было слабым (колебания 1, 3, рис. 2, *b*). Однако ее затухание было значительным в случае колебаний отрелаксированного, отклоненного НС (колебания 2, рис. 2, *b*). При этом наблюдались также биения

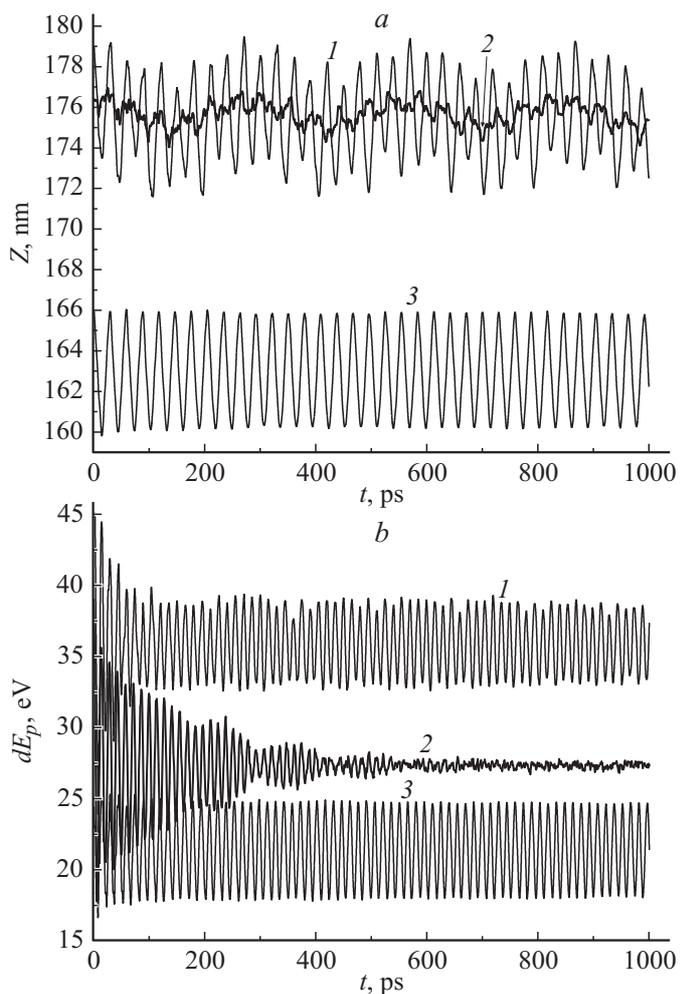


Рис. 2. Колебания во времени: *a* — по оси *Z* отклоненного, нерелаксированного НС (1), отклоненного, релаксированного НС (2) и неотклоненного, нерелаксированного НС (3); *b* — потенциальной энергии отклоненного, нерелаксированного НС (1), отклоненного, релаксированного НС (2) и неотклоненного, нерелаксированного НС (3).

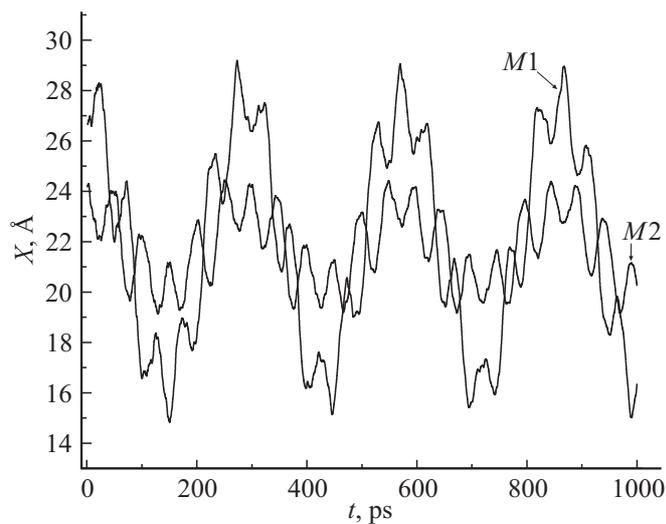


Рис. 3. Колебания меток $M1$ и $M2$ по оси X отклоненного, нерелаксированного НС.

с частотой около 3.5 GHz. Почти полное прекращение колебаний потенциальной энергии наблюдалось начиная с 550 ps. Однако с этого момента началась раскачка колебаний НС по оси Y . Полная амплитуда колебаний метки $M1$ равнялась 0.1 nm, а частота колебаний была около 20 GHz. Прекращение колебаний потенциальной энергии НС после 550 ps (колебания 2, рис. 2, b), очевидно, обусловлено тем, что в процессе колебаний происходило перераспределение избыточной энергии по разным модам колебаний, находящимся в противофазе так, что потенциальная энергия стала постоянной. Однако колебание НС продолжалось. Поэтому добротность колебаний, которую определяли по данным затухания потенциальной энергии [3], в нашем случае характеризует скорость перераспределения энергии по всем модам колебаний.

Контроль за движением меток-атомов $M1$ и $M2$ в направлении отклонения по оси X нерелаксированного НС показал, что амплитуды их колебаний были достаточно велики и составляли 1.4 и 0.5 nm соответственно. Однако колебания не были чисто гармоническими (рис. 3).

Форма колебаний соответствовала случаю, когда колебания на основной моде сопровождались колебаниями на более высоких модах. Изменение амплитуды низкой моды, равной 3.5 GHz, происходило скачками с частотой, равной приблизительно 20.5 GHz. На рисунке видно, что колебания $M1$ и $M2$ находятся в противофазе. Это характерно для случая, когда колебания $M1$ и $M2$ происходят на второй гармонике. Такие же по форме и амплитуде колебания наблюдались также для отклоненного, но релаксированного НС. Только частота его колебаний была выше почти на 1 GHz. Возникновение таких сложных, не гармонических колебаний НС по оси X можно объяснить тем, что медный стержень нанометровой толщины становится сильно пластичным. Определение модуля Юнга из данных о частоте продольных колебаний НС подтверждает это. Из теории упругости [9] известно, что частота продольных колебаний стержня длиной L определяется модулем Юнга E и плотностью материала ρ ($\rho_{Cu} = 8.9 \text{ g/cm}^3$) соотношением: $f = (E/\rho)^{0.5}4L$. Определенный из данной формулы модуль Юнга меди равнялся 43.5 GPa. Эта величина была почти в 2.5 раза меньше модуля Юнга объемного материала меди, равного 102.7 GPa [10]. Увеличение пластичности материала при уменьшении размеров характерно для металлических, кристаллических нанопроволок [11,12].

Наблюдаемые биения колебаний с частотой 3.5 GHz колебаний по оси Z (колебания I , рис. 2) можно объяснить дефектами кристаллической структуры медного НС, возникшими в результате его отклонения. Частота биений зависела от длины НС. Ранее при моделировании методом МД колебаний Ag НП [4,5] также наблюдали биения колебаний. Их появление связывали с возникновением дефектов упаковки кристаллической решетки НП при ее отклонении. В результате этого колебания НП происходили на двух близких частотах, что приводило к возникновению биений.

Таким образом, методом МД показаны связанность мод продольных и поперечных колебаний НС и то, что колебания его потенциальной энергии во времени не отражают всей динамики колебаний. Контроль колебаний по меткам-атомам на вершине и на середине НС позволил обнаружить сложную динамику колебаний НС. Биения с частотой 3.5 GHz продольных по оси Z колебаний НС и с такой же частотой негармонические колебания по оси X и Y объясняются дефектами кристаллической структуры НС. Показано сильное уменьшение модуля Юнга кристаллического НС по сравнению с объемным материалом.

Список литературы

- [1] *Eom K., Park H.S., Yoon D.S., Kwon T.* // *Physics Reports*. 2011. V. 503. P. 115–163.
- [2] *Loh O.Y., Espinosa H.D.* // *Nature Nanotech.* 2012. V. 7. P. 283–295.
- [3] *Kim S.Y., Park H.S.* // *Phys. Rev. Lett.* 2008. V. 101. P. 215 502.
- [4] *Zhan H.F., Gu Y.* // *J. Appl. Phys.* 2012. V. 111. P. 124 303.
- [5] *Zhan H.F., Gu Y., Park H.S.* // *Nanoscale.* 2012. V. 4. P. 6779.
- [6] *Trushin O.S., Kokko K., Salo R.T.* // *Surf. Sci.* 1999. V. 442. P. 420–430.
- [7] *Foils S.M., Baskes M.I., Daw M.S.* // *Phys. Rev. B.* 1986. V. 33. P. 7983–7990.
- [8] *Lao J., Moldovan D.* // *Appl. Phys. Lett.* 2008. V. 93. P. 093 108.
- [9] *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теория упругости. М.: Наука, 1987. 248 с.
- [10] *Zeng H., Li T., Bartenwerfer M., Fatikow S., Wang Y.* // *J. Phys. D: Appl. Phys.* 2013. V. 46. P. 305 501.
- [11] *Yue Y., Liu P., Zhang Z., Han X.D., Ma E.* // *Nano Letters.* 2011. V. 11. P. 3151–3155.
- [12] *Park H.S., Cai W., Espinosa H.D., Huang H.* // *MRS Bulletin.* 2009. V. 34. P. 178–183.