

07,01,10

Изучение структурных трансформаций нанопор цилиндрической формы в золоте методом молекулярной динамики в условиях термоактивации и воздействия звуковых и ударных волн

© А.В. Маркидонов, М.Д. Старостенков, А.А. Сосков, Г.М. Полетаев

Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова,
Барнаул, Россия,

E-mail: gmpoletaev@mail.ru

(Поступила в Редакцию 10 апреля 2014 г.)

Методом молекулярной динамики проведено исследование структурных трансформаций нанопор цилиндрической формы в золоте в условиях термоактивации и воздействия звуковых и ударных волн. Показано, что при температуре выше 600 К на внутренней поверхности поры зарождаются дислокационные петли, формирующие в итоге тетраэдры дефектов упаковки. Начальная температура схлопывания нанопор снижается при воздействии на нее звуковых волн. При воздействии ударных волн в направлении, перпендикулярном оси цилиндрической нанопоры, возможно ее деление на две отдельные поры.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ в рамках научных проектов № 12-02-31135 мол_а, 13-02-00301_а, 14-02-98000-р_сибирь_а.

1. Введение

При радиационном облучении материала интенсивность выделения энергии в электронную подсистему твердого тела быстрым ионом может в 10^3 – 10^4 раз превышать выделение энергии в ядерную подсистему [1]. Такое различие усиливает роль электронных возбуждений в процессах генерации дефектов, вызывает интенсивное неупругое распыление материала [2] в том числе появление ряда специфических эффектов, таких как локальное плавление, аморфизация и генерация ударных волн. Наиболее интересным из возможных результатов прохождения высокоэнергетического иона через твердое тело является образование скрытого трека (latent track). Данные макродефекты выявляются химическим травлением облученного материала [3,4]. Экспериментальные исследования [5] свидетельствуют о том, что в зависимости от значения энергии, выделяемой быстрым ионом в электронную подсистему твердого тела, может наблюдаться различная морфология дефектных образований, при этом относительно высокое значение энергии приводит к образованию протяженных цилиндрических треков.

Облучение материала высокоэнергетическими ионами является не единственным механизмом создания в нем трехмерных дефектов цилиндрической формы. Так, например, образование цилиндрических пор наблюдалось при выходе маточного раствора из объема кристалла на поверхность при нагреве медного купороса [6]. Кроме того при воздействии на поверхность металла электронным пучком наблюдалось образование капилляра [7].

Изучение подобного рода дефектов вызывает интерес в связи с тем, что материал, содержащий протяженные поры цилиндрической формы, может использоваться при создании фильтров, детекторов, охлаждающих элементов в нанoeлектронике и т.д.

Радиационное облучение материала сопровождается еще одним интересным явлением — образованием ударных послекаскадных волн [8]. Развитие каскада атомных столкновений до момента, при котором устанавливается максвелловское распределение сталкивающихся частиц по скоростям, происходит за время порядка 10^{-12} с, тогда как для равномерного рассеяния энергии по объему каскада волнами в решетке необходимо время 10^{-11} с [9]. В результате резкого расширения сильно разогретой каскадной области может возникнуть ударная волна. Распространение ударных послекаскадных волн приводит к ряду уникальных эффектов: течению бездефектного материала, аномальному массопереносу, бездиффузионным структурным трансформациям и т.д. [8,10–12].

Цель настоящей работы заключается в исследовании с помощью метода молекулярной динамики структурных трансформаций нанопор цилиндрической формы на примере золота в условиях термоактивации и воздействия звуковых и ударных волн. Ранее [13–19] авторами были проведены исследования структурных превращений пор сферической формы в условиях воздействия ударных волн. В частности, было показано, что с результате управляемого воздействия ударными волнами на пору возможно ее деление на отдельные дефекты (вакансии, тетраэдры дефектов упаковки (ТДУ), отдельные поры).

2. Описание модели

Моделируемый кристаллит золота изначально содержал 20 000 атомов (до создания в нем цилиндрической поры) и имел форму параллелепипеда. Ориентация кристаллита задавалась следующим образом: ось X была направлена вдоль кристаллографического направления $\langle 1\bar{1}0 \rangle$, ось Y — вдоль $\langle 11\bar{2} \rangle$, ось Z — вдоль $\langle 111 \rangle$ (рис. 1). Межатомные взаимодействия в модели для

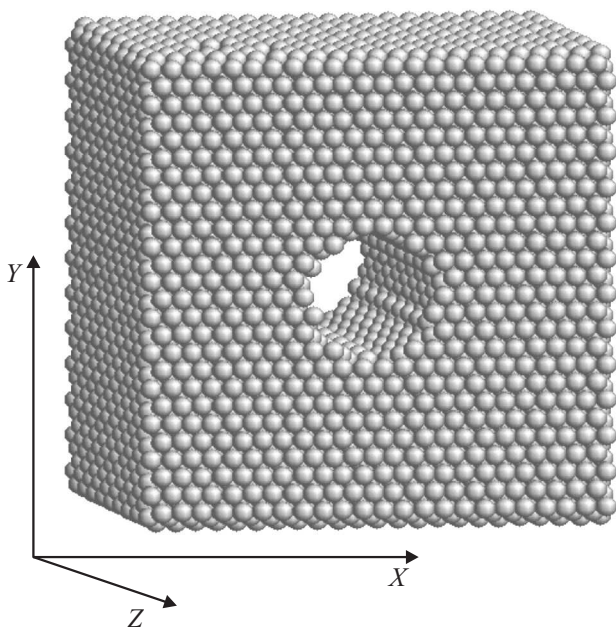


Рис. 1. Расчетный блок, содержащий цилиндрическую пору диаметром 2.3 nm вдоль оси Z.

сравнения описывались двумя разными потенциалами: Джонсона [20] и потенциалом, предложенным Шеном с соавторами [21]. Оба потенциала были рассчитаны в рамках метода погруженного атома.

Цилиндрическая пора в модели создавалась путем удаления соответствующих атомов. Диаметр пор варьировался от 1 до 3 nm. Рассматривались ориентации пор вдоль осей X, Y и Z. После создания поры проводилась структурная релаксация при низкой температуре, по завершении которой расчетный блок охлаждался до 0 K. Полученная структура расчетного блока использовалась в дальнейшем как стартовая.

Температура расчетного блока в модели задавалась путем присвоения атомам случайных скоростей в соответствии с распределением Максвелла–Больцмана. Для сохранения температуры в процессе компьютерного эксперимента использовался термостат Андерсена. Шаг интегрирования по времени в методе молекулярной динамики составлял 5 fs.

Упругие и ударные волны инициировались путем присвоения атомам, расположенным на одной из границ расчетного блока, соответствующих начальных скоростей вдоль оси X. Плотнупакованное направление вдоль оси X было выбрано потому, что из-за наличия механизмов фокусировки энергии волны, как известно, трансформируются во фрагменты, распространяющиеся преимущественно вдоль плотноупакованных направлений [22,23].

Исследование структурных трансформаций проводилось на различных этапах компьютерного эксперимента с помощью визуализатора распределения потенциальной энергии в расчетном блоке. Данный визуализатор позво-

ляет наглядно демонстрировать в объеме охлажденного расчетного блока различные дефекты и распределение внутренних напряжений. В этом случае для каждого атома рассчитывается потенциальная энергия, и в соответствии с этим значением атомы окрашиваются в тот или иной оттенок серого. Для улучшения визуализации (в трехмерных моделях) атомы, у которых значение энергии связи близко к значению для идеального кристалла, не изображаются.

3. Результаты и обсуждение

При температурах ниже 600 K ($0.45T_m$, где T_m — температура плавления золота) рассматриваемые цилиндрические поры оставались стабильными. При превышении указанной температуры поры в процессе компьютерного эксперимента претерпевали структурные трансформации, заключающиеся преимущественно в формировании тетраэдров дефектов упаковки. Данное явление отмечалось нами ранее в работах [13,24] в случае пор и обедненных зон сферической формы в ГЦК-металлах.

Грани ТДУ, как известно, ориентированы вдоль плоскостей типа $\{111\}$ и являются дефектами упаковки, а ребра ориентированы вдоль направлений $\langle 110 \rangle$ и представляют собой вершинные дислокации с вектором Бюргерса $1/6\langle 110 \rangle$ [25,26]. ТДУ образуются во всех ГЦК-металлах, однако их критический размер, при котором энергетически более выгодными становятся вакансионные диски, существенно зависит от энергии образования дефекта упаковки в данном металле [25].

Структурные трансформации цилиндрических пор начинались с генерации дислокационных петель, источником которых служила внутренняя поверхность поры. В дальнейшем петли расщеплялись и образовывали ТДУ. На первом этапе трансформации возникали относительно небольшие ТДУ, имеющие различные геометрические несовершенства: усеченные вершины, ступеньки на гранях. Впоследствии происходило укрупнение ТДУ и уменьшение суммарной длины их ребер, которые по сути являются ядрами вершинных дислокаций.

При ориентации цилиндрической поры вдоль оси Z наблюдалось относительно упорядоченное, по сравнению с ориентациями вдоль осей X и Y образование ТДУ вдоль оси поры. Причиной этого, по всей видимости, является то, что ось Z $\langle 111 \rangle$ по направлению совпадает с нормалью к грани ТДУ.

На рис. 2 изображены примеры комплексов ТДУ, образующихся в результате структурной трансформации цилиндрической поры диаметром 1.45 nm при температуре 900 K через 25 ps (5000 итераций) после начала компьютерного эксперимента. Структура изображена с помощью визуализатора распределения потенциальной энергии.

На следующем этапе рассматривалось влияние звуковых и ударных волн на структурные трансформации цилиндрических пор. Приграничным атомам в начале компьютерного эксперимента присваивалась скорость вдоль

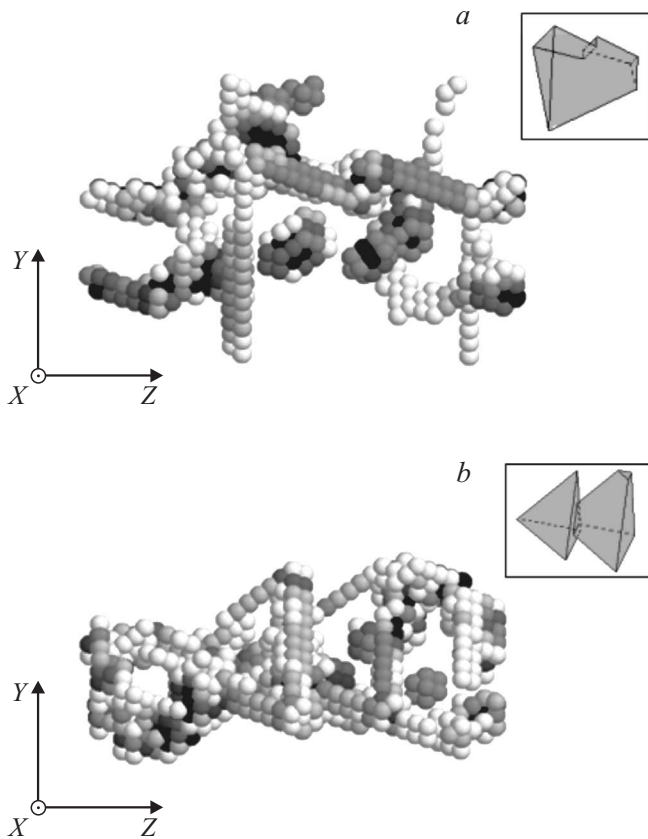


Рис. 2. Распределение потенциальной энергии в расчетном блоке, изначально содержащем цилиндрическую пору с осью вдоль Z диаметром 1.45 nm, после 25 ps при температуре 900 K. В правом верхнем углу схематически изображена ориентация ТДУ. Результаты получены при использовании потенциалов Джонсона (*a*) и Шена (*b*).

оси X . При создании звуковых волн начальная скорость приграничных атомов была равна скорости распространения звуковых волн в кристалле золота (3240 m/s). Было выяснено, что при воздействии нескольких фронтов звуковых волн на рассматриваемые цилиндрические поры температура инициации структурной трансформации пор в комплекс ТДУ снижается вплоть до комнатной.

Ударные волны создавались путем сообщения группе граничных атомов скорости, в 2 раза большей скорости распространения звуковых волн в золоте. Ранее в работах [13,16] было показано, что под воздействием ударных волн происходит отщепление и последующее удаление групп вакансий от сферической поры. Кроме того, при температурах, превышающих $0.5T_m$ золота, наблюдалось дробление поры на отдельные составляющие. В настоящей работе схожие результаты были получены и для цилиндрических пор. При помощи ударных волн удалось отщепить вакансии от цилиндрической поры. Число отщепляемых вакансий зависело от частоты генерации ударных волн. Еще одним способом регулирования данного числа, как было выяснено, является деформация расчетного блока [19].

В качестве примера, рассмотрим деление с помощью ударных волн цилиндрической поры диаметром 2.3 nm, изображенной на рис. 1. Начальная температура расчетного блока была равна 300 K. Помимо воздействия ударных волн расчетный блок, содержащий пору, подвергался растяжению вдоль оси поры (т.е. вдоль оси Z) на 3%. Ударные волны генерировались вдоль оси X (перпендикулярно оси цилиндрической поры) с интервалом в 2.5 ps (500 итераций). После прохождения трех волн происходило отчетливое деление цилиндрической поры на две поры меньшего диаметра, ориентированные

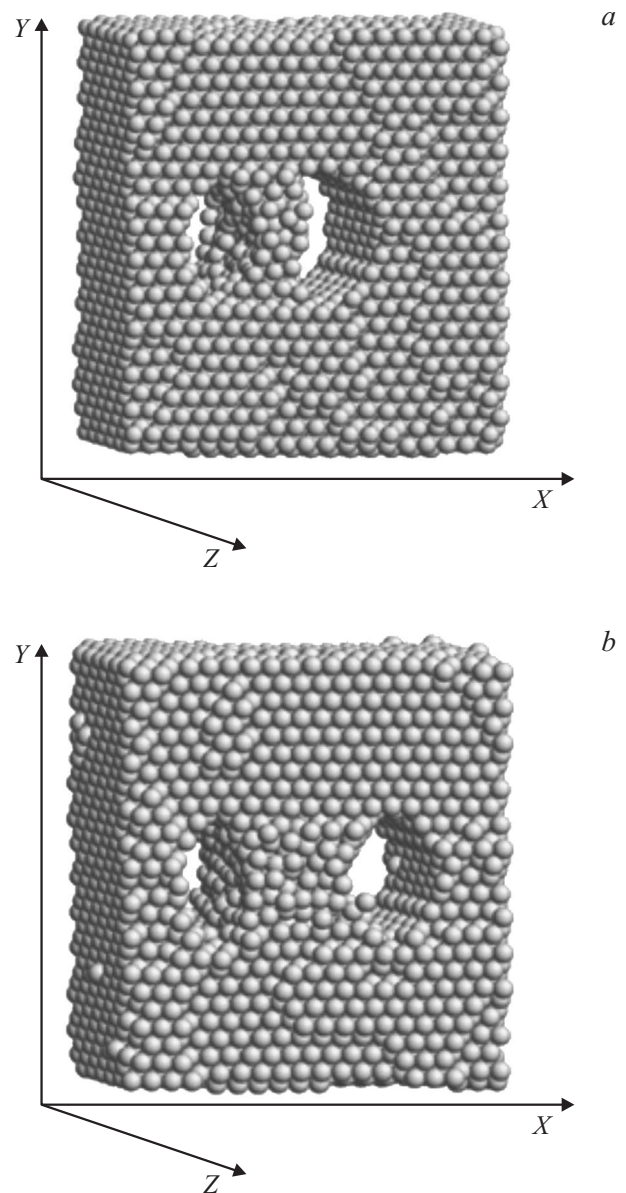


Рис. 3. Процесс разделения цилиндрической поры на две части с помощью ударных волн, распространяющихся вдоль оси X , и растяжения материала вдоль оси Z . *a* — пора после прохождения трех ударных волн, распространяющихся слева направо, *b* — после прохождения еще трех волн, распространяющихся справа налево.

вдоль той же оси (оси Z) (рис. 3, *a*). После этого были сгенерированы ударные волны с противоположной стороны вдоль оси X , которые приводили к удалению образовавшихся цилиндрических пор друг от друга (рис. 3, *b*). При увеличении количества генерируемых ударных волн расстояние между порами возрастало. Описанные результаты были получены при использовании обоих типов потенциалов: Джонсона и Шена.

4. Заключение

Проведенное исследование показало, что цилиндрические нанопоры остаются стабильными до некоторой температуры, которая для кристалла золота составляет 600 К. При более высоких температурах поры схлопываются, трансформируясь в комплексы тетраэдров дефектов упаковки. В процессе структурной релаксации тетраэдры укрупняются за счет поглощения отдельных вакансий или соседних тетраэдров. Таким образом, можно предположить, что на месте цилиндрической поры большой протяженности может сформироваться упорядоченная система тетраэдров дефектов упаковки.

Критическая температура, при которой происходит трансформация цилиндрической поры, может быть снижена при воздействии на пору упругих волн.

Под воздействием ударных волн цилиндрические поры могут быть расщеплены на отдельные составляющие. В комбинации с деформацией растяжения с помощью воздействия ударных волн возможно деление цилиндрической поры на две отдельные поры меньшего диаметра, имеющие ту же ориентацию.

Данные результаты свидетельствуют о том, что высокоскоростные кооперативные атомные смещения являются мощным инструментом, позволяющим модифицировать дефектные структуры кристаллов. Результаты проведенного исследования, возможно, могут быть использованы в радиационном материаловедении, нанотехнологии, при ультразвуковой обработке материалов.

Список литературы

- [1] Ф.Ф. Комаров. УФН **173**, 1287 (2003).
- [2] Я.А. Баранов, Ю.В. Мартыненко, С.О. Цепелевич, Ю.Н. Явлинский. УФН **156**, 477 (1988).
- [3] P.V. Price, R.M. Walker. Phys. Rev. Lett. **8**, 217 (1962).
- [4] С.П. Третьякова. Физика элементарных частиц и атом. ядра **23**, 364 (1992).
- [5] Ch. Houpert, F. Studer, D. Groult. Nucl. Instrum. Meth. Res. B **39**, 720 (1989).
- [6] М.А. Прокофьев, Д.Г. Бердоносова, И.В. Мелихов, С.С. Бердоносов. Вестн. МГУ. Сер. 2. Химия **51**, 325 (2010).
- [7] З. Шиллер, У. Гайзиг, З. Панцер. Электронно-лучевая технология. Энергия, М. (1980). 528 с.
- [8] В.В. Овчинников. УФН **178**, 991 (2008).
- [9] М.А. Штремель. Прочность сплавов. Ч. I. Дефекты решетки. МИСИС, М. (1999). 384 с.
- [10] В.П. Жуков, А.А. Болдин. Атом. энергия **63**, 375 (1987).
- [11] В.П. Жуков, А.В. Демидов. Атом. энергия **59**, 568 (1985).
- [12] Г.А. Блейхер, В.П. Кривооков, О.В. Пашенко. Тепло-массоперенос в твердом теле под воздействием мощных пучков заряженных частиц. Наука, Новосибирск (1999). 176 с.
- [13] А.В. Маркидонов, М.Д. Старостенков, А.В. Яшин. Фундаментальные проблемы современного материаловедения **10**, 12 (2013).
- [14] А.В. Маркидонов, М.Д. Старостенков, Е.П. Павловская. Фундаментальные проблемы современного материаловедения **9**, 694 (2012).
- [15] А.В. Маркидонов, М.Д. Старостенков, Е.П. Павловская, А.В. Яшин, Г.М. Полетаев. Фундаментальные проблемы современного материаловедения **10**, 254 (2013).
- [16] М.Д. Старостенков, А.В. Маркидонов, Е.П. Павловская. Вестн. Тамбов. ун-та. Сер. Естественные и технические науки **18**, 1741 (2013).
- [17] А.В. Маркидонов, М.Д. Старостенков, Е.П. Павловская, А.В. Яшин, Н.Н. Медведев, П.В. Захаров, А.А. Ситников. Фундаментальные проблемы современного материаловедения **10**, 443 (2013).
- [18] А.В. Маркидонов, М.Д. Старостенков, Е.П. Павловская. Хим. физика и мезоскопия **15**, 370 (2013).
- [19] А.В. Маркидонов, М.Д. Старостенков, Е.П. Павловская, А.В. Яшин, Н.Н. Медведев, П.В. Захаров. Фундаментальные проблемы современного материаловедения **10**, 563 (2013).
- [20] R.A. Johnson. Phys. Rev. B **37**, 3924 (1988).
- [21] H.W. Sheng, M.J. Kramer, A. Cadien, T. Fujita, M.W. Chen. Phys. Rev. B **83**, 134118 (2011).
- [22] V.G. Chudinov, R.M.J. Cotterill, V.V. Andreev. Phys. Status Solidi A **122**, 111 (1990).
- [23] Р.И. Гарбер, А.И. Федоренко. УФН **83**, 385 (1964).
- [24] Г.М. Полетаев, М.С. Аксенов, М.Д. Старостенков. Фундаментальные проблемы современного материаловедения **9**, 235 (2012).
- [25] Д. Хирт, И. Лоте. Теория дислокаций. Пер. с англ. Атомиздат, М. (1972). 600 с.
- [26] Г.М. Полетаев, М.Д. Старостенков. Письма в ЖТФ **35**, 3 (2009).