

# Молекулярно-динамическое моделирование процессов в металлах с заданными дефектами структуры при облучении металлическими нанокластерами

## Molecular dynamics simulation of processes in metals with prescribed structure defects under irradiation with metal nanoclusters



Б. Батгэрэл<sup>3</sup>, И. В. Пузынин<sup>1</sup>, Т. П. Пузынина<sup>1</sup>, З. К. Тухлиев<sup>1</sup>, И. Г. Христов<sup>2</sup>, Р. Д. Христова<sup>2</sup>, З. А. Шарипов<sup>1</sup>

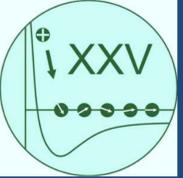
<sup>1</sup>Лаборатория информационных технологий, Объединенный Институт Ядерных Исследований,

ул. Жолио-Кюри 6, Дубна, Московская область, Россия, 141980

<sup>2</sup>Софийский университет "Св. Климент Охридски", София, Болгария

<sup>3</sup>Монгольский государственный университет науки и технологий, Улан-Батор, Монголия

\*E-mail: [zafar@jinr.ru](mailto:zafar@jinr.ru) [zarif@jinr.ru](mailto:zarif@jinr.ru)



### Аннотация

В работе представлена методика молекулярно-динамического моделирования структурных изменений, возникающих в металле с кристаллической решеткой, содержащей заданные дефекты, при облучении его металлическими нанокластерами. Реальные образцы кристаллической решетки содержат различные дефекты структуры типа пор, вакансий и дислокаций. Моделирование облучения реальных образцов является актуальной задачей, важной для понимания механизма структурных изменений в мишенях. В качестве примера рассмотрено моделирование процессов в мишенях из меди с заданными дефектами структуры, облучаемых нанокластером меди. Получены результаты численного моделирования: пороговая плотность энергии, приводящая к образованию ударных волн, воздействующих на дефектные структуры облучаемой мишени в зависимости от энергии нанокластера. Установлено образование гексагональной плотноупакованной (ГПУ) решетки в глубине мишени в зависимости от энергии нанокластера и размера мишени.

A technique for molecular dynamics modeling of structural changes in the crystal lattice of a metal containing specified defects irradiated by metal nanoclusters is presented. Real samples of the crystal lattice contain various structural defects such as pores, vacancies and dislocations. Simulation of the irradiation of real samples is an urgent problem that is important for understanding the mechanism of structural changes in targets. As an example, the simulation of processes in copper targets with specified structural defects irradiated by copper nanoclusters is considered. The formation of a hexagonal close-packed (hcp) lattice in the depth of the target is established as a function of the nanocluster energy and target size.

### Метод молекулярной динамики

В данной работе моделирование проводилось с помощью пакета LAMMPS [3], установленного на кластере HybriLit [4]. 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:

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

Здесь  $i$  – номер частицы ( $1 \leq i \leq N$ );  $N$  – полное число частиц;  $m_i$  – масса частицы;  $\mathbf{f}_i$  – равнодействующая всех сил, действующих на частицу, имеющая следующее представление:

$$\mathbf{f}_i = -\frac{\partial U(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)}{\partial \mathbf{r}_i} + \mathbf{f}_i^{ex},$$

где  $U$  – потенциал взаимодействия между частицами,  $\mathbf{f}_i^{ex}$  – сила, обусловленная внешними полями.

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

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

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

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

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

$$\mathbf{v}_i(t + \Delta t) = \mathbf{v}_i(t) + \frac{\mathbf{a}_i(t + \Delta t) + \mathbf{a}_i(t)}{2} \Delta t \quad (3)$$

В данной работе моделирование проводилось с помощью пакета LAMMPS [3], установленного на гетерогенном вычислительном кластере HybriLit [4]. Для моделирования столкновения атомов нанокластера меди с мишенью при расчетах в качестве межатомного потенциала использовался потенциал взаимодействия Циглера-Бирзака-Литтмарка (ZBL) [5], который корректно описывает взаимодействие атомов с высокими энергиями для коротких расстояний между атомами ( $< 0.5 \text{ \AA}$ ). Для расстояний между атомами больше  $0.5 \text{ \AA}$  использовался EAM (Embedded atom model) [6] – потенциал для меди, встроенный в пакет LAMMPS. Визуализация полученных результатов выполнена с помощью программы OVITO [7].

### Методика исследований

Моделирование проводилось для мишени из меди с размерами  $5 \times 5 \times 50$  нм (количество частиц в системе  $\sim 110000$ ) с периодическими граничными условиями по оси  $Ox$  и  $Oy$ , облучаемых нанокластером меди с диаметром  $1.5$  нм. Облучение проводилось по направлению  $Oz$ . Дефекты в мишени типа пор с размером  $1.5$  нм заданы (расположены) на глубине  $18$  и  $25$  нм (Рис.1). При облучении нанокластером структурные изменения происходят в приповерхностном слое  $1-10$  нм в зависимости от энергии облучения. Воздействие на дефекты в глубине мишени могут оказать ударные волны, возникающие вследствие облучения.

### Параметры моделируемой системы

Используемые программы <sup>3</sup>LAMMPS и <sup>5</sup>OVITO

Нанокластер: Cu ( $\varnothing 1.5$  нм)  
 Энергия нанокластера: 100 eV/atom  
 Мишень: Cu  
 Размер мишени:  $5 \times 5 \times 50$  нм ( $\sim 110.000$  частиц)  
 Потенциал: ZBL<sup>6</sup>  $< 0.5 \text{ \AA}$  < EAM<sup>7</sup>  
 (Циглера-Бирзака-Литтмарка) (Модель погруженного атома)  
 Дефекты:  $\varnothing 1.5$  нм (на глубине  $18$  и  $25$  нм, Рис. 1.)  
 Граничные условия: p r s (периодическими граничными условиями по осям x и y)

### Заключение

Получены результаты моделирования облучения металлической мишени с заданными дефектами в зависимости от энергии нанокластера. Исследованы влияния ударных волн на дефектные структуры в мишени. При облучении нанокластером с энергией  $100$  эв/атом в окрестности дефектов типа пор образуется устойчивая в интервале времени  $10$  пс- $500$  пс гексагональная плотноупакованная (ГПУ) решетка. Этот результат требует дальнейших исследований влияния ударных волн на дефектные структуры.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и МОКНСМ в рамках научного проекта №20-51-44001 и Полномочного представителя Республики Болгарии в ОИЯИ.

### Литература

1. V.Batgerel, S.Dimova, I.Puzynin et al. //EPJ Web Conf., 173 (2018) 06001.
2. V.Batgerel, I.Puzynin, T.Puzynina et al. //Lecture Notes in Computer Science, vol. 11189. (2019).
3. Plimpton S. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics // J. Comp. Phys. 1995. 117. 1-19.
4. Гетерогенная платформа «HybriLit» <http://hybrilit.jinr.ru/>
5. Stukowski A. "Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO – the Open Visualization Tool", Modeling Simul. Mater. Sci. Eng. 18 (2010), 015012.)
6. J.F. Ziegler, J. P. Biersack and U. Littmark, "The Stopping and Range of Ions in Matter," Vol. 1, Pergamon, 1985.
7. Foiles S.M., Baskes M.I., Daw M.S Embedded-atom method functions for the fcc metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and their alloys. Physical Review B, 1986, vol. 33, no. 12, pp. 7983-7991.
8. <http://wwwinfo.jinr.ru/~sharipov/publ.html>

### Полученные результаты

На рисунках 1-3 представлены результаты при облучении мишени одним нанокластером с энергией  $100$  эв/атом. При взаимодействии нанокластера с мишенью возникновение ударной волны зависит от энергии, размера нанокластера и площади облучаемой мишени, то есть в общем случае от плотности энергии, вносимой нанокластером. Следует заметить, что при низких энергиях облучения нанокластером ударная волна в мишени не образуется. Проведенные расчеты показывают, что при энергии облучения нанокластером  $5$  эв/атом в мишени начинают образовываться ударные волны. Отдельный интерес представляет облучение нанокластером при энергии  $100$  эв/атом в виду высокой плотности энергии облучения. На рис.2 показаны результаты облучения мишени с энергией нанокластера  $100$  эв/атом в моменты времени  $2$  пс и  $4$  пс. Полученные результаты наглядно показывают скорость и направление движения ударной волны. На рис.3 приведены воздействия ударной волны на дефектные структуры типа пор в мишени при облучении нанокластером с энергией  $100$  эв/атом. В этом случае поры заполняются (заделываются) атомами и вокруг пор образуется гексагональная плотноупакованная решетка (ГПУ). ГПУ решетка определена с помощью программы OVITO с использованием функции CNA (common neighbor analysis – общий анализ соседей). Проведенные расчеты в интервале времени  $10$  пс- $500$  пс показывают, что ГПУ решетка достаточно стабильно устойчива в этом интервале.

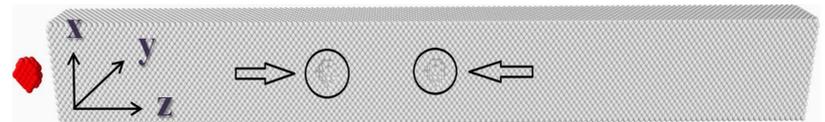


Рис.1. Исходный образец мишени в разрезе с заданными дефектами типа пор с размерами  $1.5$  нм. Стрелками указаны расположения пор и направления облучения.

Fig.1. The initial sample of the target in a section with specified defects such as pores with a size of  $1.5$  nm. Arrows indicate pore locations and irradiation directions.

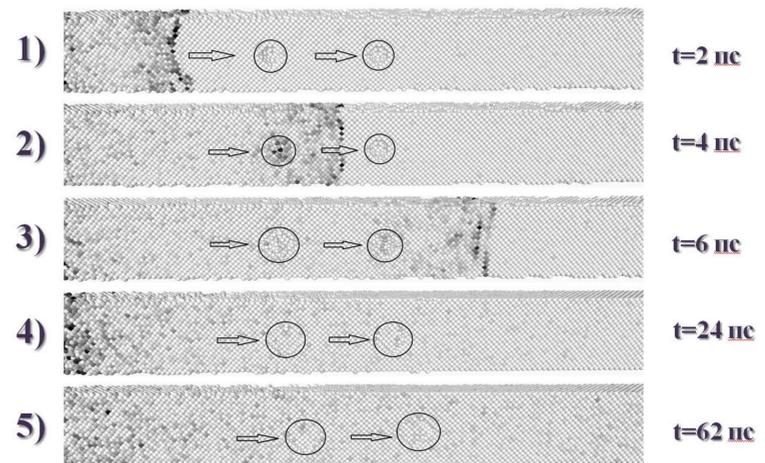


Рис.2. Динамика ударной волны в разрезе мишени в моменты времени  $2$  пс и  $4$  пс при облучении нанокластером с энергией  $100$  эв/атом. Стрелками указаны расположения пор и направления облучения.

Fig.2. The dynamics of the shock wave in the cross section of the target at times of  $2$  ps and  $4$  ps upon irradiation with a nanocluster with an energy of  $100$  eV / atom. Arrows indicate pore locations and irradiation directions.

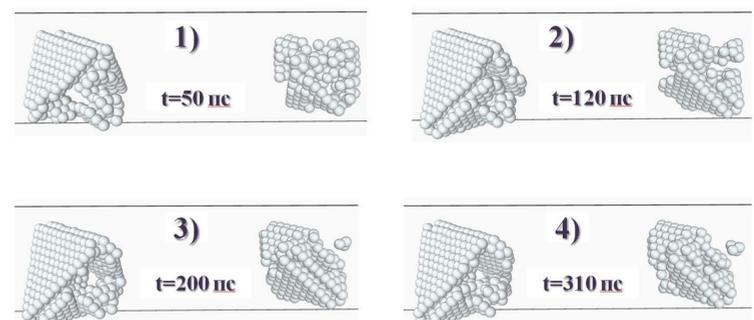


Рис.3. ГПУ-решетки, образованные вследствие ударной волны в окрестности поры мишени в моменты времени  $10$  пс (а) и  $60$  пс (б) при облучении нанокластером с энергией  $100$  эв/атом.

Fig.3. Hexagonal close-packed lattices formed as a result of a shock wave in the vicinity of the target pore at times of  $10$  ps (a) and  $60$  ps (b) upon irradiation with a nanocluster with an energy of  $100$  eV / atom.