

Молекулярно-динамическое моделирование термоупругих процессов в металлах при облучении ускоренными частицами

З. А. Шарипов¹, Б. Батгэрэл³, И. Сархадов¹, З. К. Тухлиев¹, И. Г. Христов², Р. Д. Христова²,

¹Лаборатория информационных технологий, Объединенный Институт Ядерных Исследований,
ул. Жоллио-Кюри 6, Дубна, Московская область, Россия, 141980

²Софийский университет "Св. Климент Охридски", София, Болгария

³Монгольский государственный университет науки и технологии, Улан-Батор, Монголия

*E-mail: zarif@jinr.ru



Аннотация

В работе методом молекулярной динамики проведено исследование термоупругих процессов в металлических мишенях при облучении нанокластерами меди. При молекулярно-динамическом моделировании термоупругих процессов теплопроводность и упругость изначально связаны и вычисляется по определенной формуле, и рассматривается как состояние среды по определенным свойствам. Моделирование проводилось в мишенях с различными размерами из диапазона $2^{-10} \times 2^{-10} \times 80$ нм с периодическими граничными условиями по направлениям Ох и Оу, при этом облучении ускоренными частицами проводилась по направлению Oz. Анализируется связь температуры и механических напряжений и их влияние на динамику термоупругих волн в зависимости от энергии и плотностью облучения нанокластерами.

Введение

Теория термоупругости исследует взаимодействие поля деформаций и поля температуры и, таким образом связывает две отдельные независимые предметы – теорию упругости и теорию теплопроводности. Математическая модель термоупругости в рамках механики сплошных сред представляет собой систему связанных уравнений теплопроводности и упругости. Исследованию проблемы термоупругости посвящено много работ, в которых она рассматривается в рамках механики сплошных сред. В настоящей работе процессы термоупругости исследуются в рамках молекулярно-динамической (МД) модели. При молекулярно-динамическом моделировании термоупругих процессов теплопроводность и упругость изначально связаны и вычисляется по определенной формуле, и рассматривается как состояние среды по определенным свойствам. В предыдущих работах соавторов исследовались термоупругие процессы в металлах при облучении импульсными пучками ионов различными источниками с использованием модели термоупругости в рамках механики сплошных сред. В [7] исследовано термоупругие процессы в металлах и металлических соединениях при импульсном облучении высокоэнергетическими электронами и ионами. Обнаружено, что временная эволюция термоупругих напряжений приводит к возникновению локализованной структуры, которая может объяснить структурно-фазовые изменения облучаемой поверхности, наблюдаемых в эксперименте. В [8] моделируется термоупругие эффекты, которые могут возникнуть в металлическом образце под действием периодически меняющегося со временем источника. Выявлены режимы резонансного усиления и ослабления термоупругих напряжений. В [9] исследована модель эволюции термоупругого импульса в зависимости от формы и место расположения источника.

Метод молекулярной динамики

В данной работе моделирование проводилось с помощью пакета LAMMPS [1], установленного на кластере HybriLit [2]. 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:

$$\mathbf{f}_i = -\frac{\partial U(r_1, \dots, r_N)}{\partial \mathbf{r}_i} + \mathbf{f}_i^{\text{ex}}.$$

где U – потенциал взаимодействия между частицами, $\mathbf{f}_i^{\text{ex}}$ – 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:

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

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

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

В настоящей работе выполнено моделирование термоупругих и тепловых процессов при облучении мишени из меди нанокластерами меди с энергией 1-100 эВ. В предыдущих работах авторами изучались процессы в меди при облучении нанокластерами меди [3 - 5], поэтому в настоящей работе используются мишень и ион меди. Моделирование проводилось с использованием пакета LAMMPS [1], а визуализация, в которой частице структуры соответствует цвет, приписываемый кинетической энергии частицы (чем величина больше, тем цвет темнее), с помощью программы OVITO [6]. При моделировании размер мишени выбран $3.6 \times 3.6 \times 54$ нм (с периодическими граничными условиями по направлениям Ох и Оу). В рамках МД вычислялся 6-компонентный тензор (σ_{xx} , σ_{yy} , σ_{zz} , σ_{xy} , σ_{xz} , σ_{yz}) механических напряжений для каждого атома в мишени.

Заключение

Получены результаты МД моделирования облучения металлических мишеней нанокластерами меди с энергией 1-100 эВ. Исследованы образование и динамика распространения термоупругих волн в зависимости от энергии облучения. Полученные результаты в рамках МД позволяют уточнить форму источника в уравнении термоупругости. Это дополнит результаты, полученные для уравнений термоупругости сплошных сред в микромасштабах и развивать комбинированный подход для различных задач термоупругости..

Полученные результаты

На рис.1-3.а показаны динамика термоупругой волны в образце в моменты времени 1пс (1), 2пс (2), 3пс (3), 4пс (4) и 5пс (5), полученные при моделировании облучения мишени из меди ионом меди с энергией 5-20 эВ. На рис.1-3.б приведены усредненные значения напряжения компоненты σ_{zz} для каждого атома мишени при облучении нанокластером меди с энергией 5-20 эВ в моменты времени 1пс (1), 2пс (2), 3пс (3), 4пс (4) и 5пс (5) соответствующие рис.1-3.а. Выбор компоненты σ_{zz} обусловлен тем, что облучение проводится по направлению Oz (с периодическими граничными условиями по направлениям Ох и Оу) и термоупругая волна движется по направлению Oz, соответственно усредненное значение компоненты σ_{zz} для каждой частицы показывает какое давление испытывает частицы по направлению Oz. Эффективность этого подхода заключается в том, что при облучении образцов с большими поперечными размерами (пример в форме куба) можно по компонентам исследовать движение термоупругой волны по различным направлениям.

Полученные результаты наглядно показывает скорость и рост амплитуды термоупругой волны в зависимости от энергии нанокластера. Аналогичные результаты были получены и для высоких энергий нанокластера вплоть до 100 эВ. При моделировании с помощью уравнений механики сплошных сред процессов облучения нанокластерами одной из важных проблем является выбор функции источника для описания действий нанокластера в зависимости от энергии и количество нанокластеров, а при моделировании в рамках МД такая проблема отсутствует.

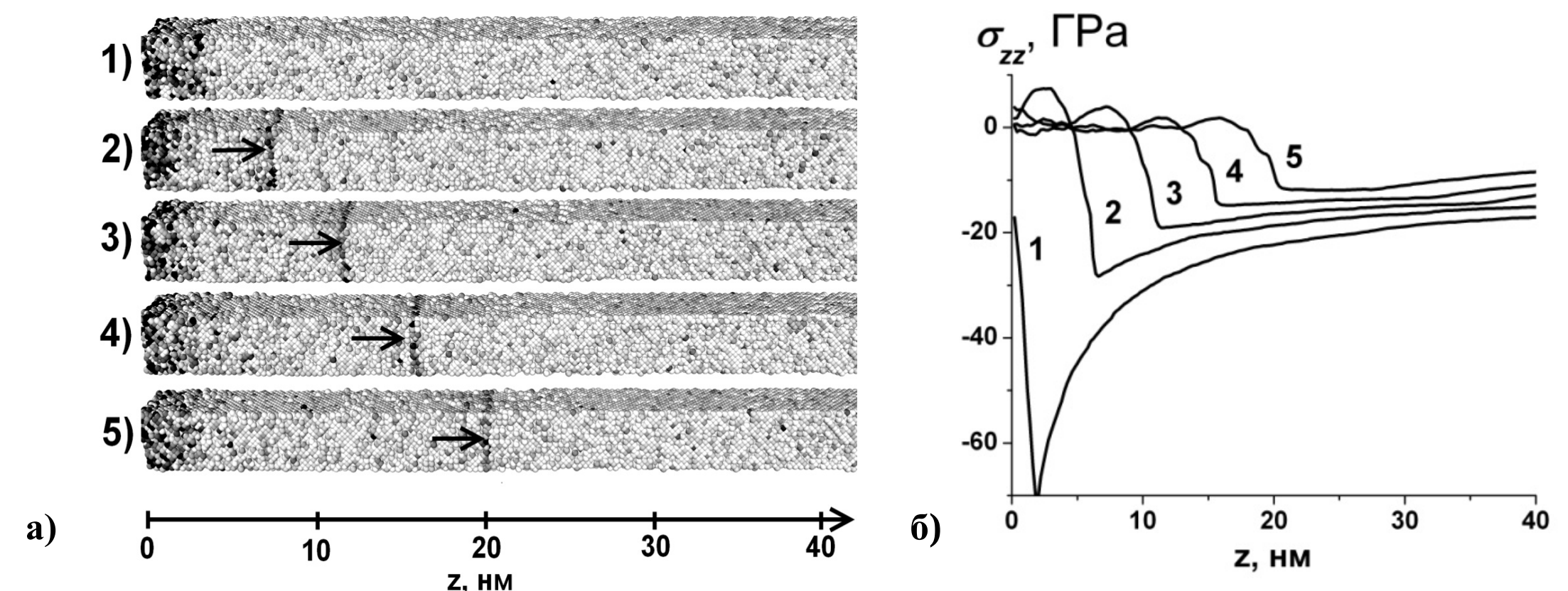


Рис.1. Динамика термоупругой волны (а) и усредненные значения напряжений компоненты σ_{zz} для каждого атома мишени (б) при облучении мишени нанокластером меди с энергией 5 эВ в моменты времени 1пс (1), 2пс (2), 3пс (3), 4пс (4) и 5пс (5). Расчетной областью является параллелепипед со сторонами 3.6×3.6×50 нм, количество частиц в мишени – 56338. Стрелками указаны пик амплитуды и направление движения термоупругой волны.

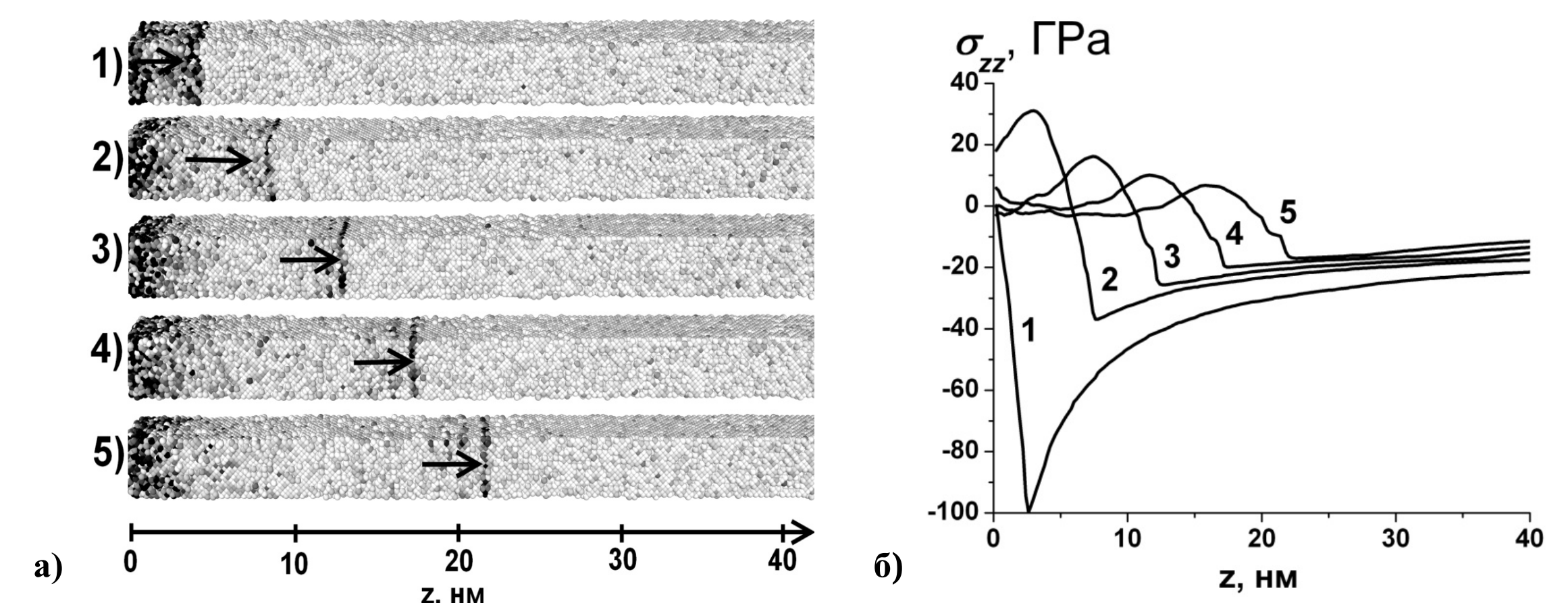


Рис.2. Динамика термоупругой волны (а) и усредненные значения напряжений компоненты σ_{zz} для каждого атома мишени (б) при облучении мишени нанокластером меди с энергией 10 эВ в моменты времени 1пс (1), 2пс (2), 3пс (3), 4пс (4) и 5пс (5). Расчетной областью является параллелепипед со сторонами 3.6×3.6×50 нм, количество частиц в мишени – 56338. Стрелками указаны пик амплитуды и направление движения термоупругой волны.

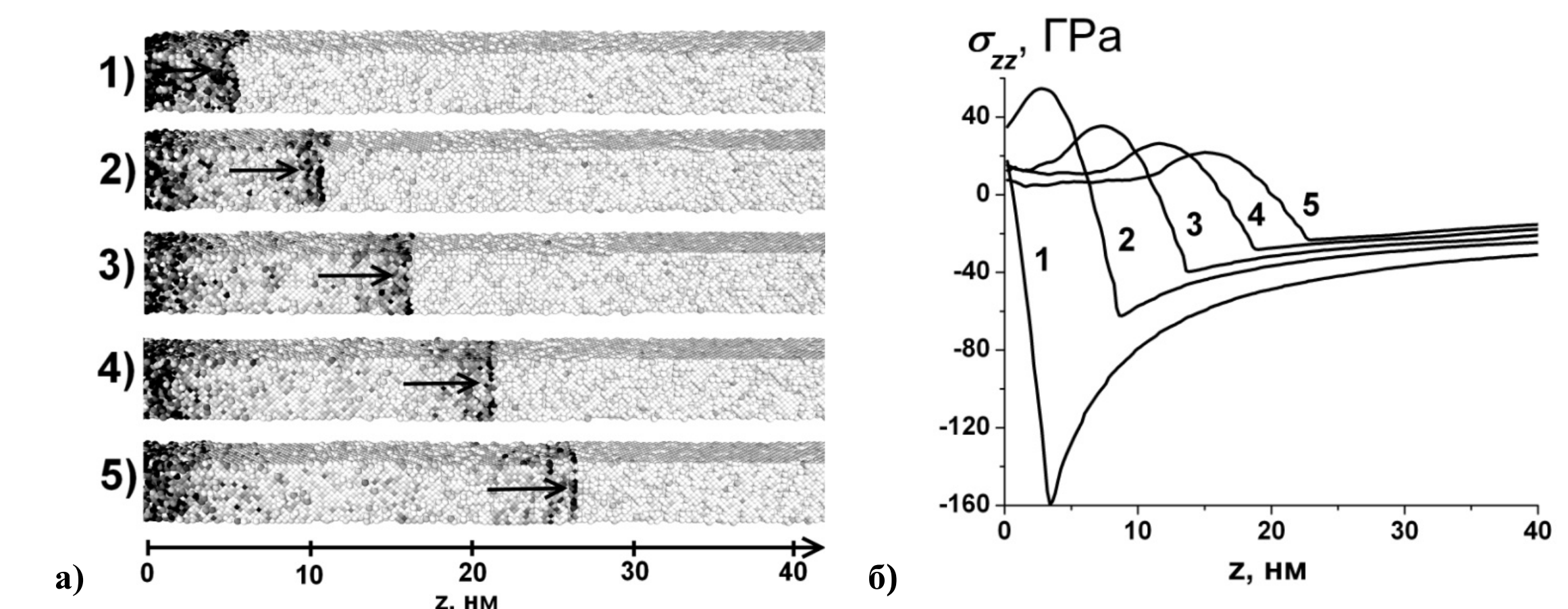


Рис.3. Динамика термоупругой волны (а) и усредненные значения напряжений компоненты σ_{zz} для каждого атома мишени (б) при облучении мишени нанокластером меди с энергией 20 эВ в моменты времени 1пс (1), 2пс (2), 3пс (3), 4пс (4) и 5пс (5). Расчетной областью является параллелепипед со сторонами 3.6×3.6×50 нм, количество частиц в мишени – 56338. Стрелками указаны пик амплитуды и направление движения термоупругой волны.

Литература

1. Plimpton S. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics // J. Comp. Phys. 1995. 117. 1-19.
2. Гетерогенная платформа «HybriLIT» <http://hybrilit.jinr.ru/>
3. Batgerel B., Puzynin I.V.:Simulation of Interaction of Colliding Nanoclusters Beam with Solid Surface. Vestnik RUDN, Journal of Mathematics, Information Sciences and Physics. 1, 4751 (2014)
4. B. Batgerel, S. Dimova, I. Puzynin et al. Modeling Thermal Effects in Metals Irradiated by Copper Nanoclusters //EPJ Web Conf., –173. –2018. –06001.
5. B. Batgerel, I.V. Puzynin, T.P. Puzynina et al. Molecular Dynamic Modeling of Long-Range Effect in Metals Exposed to Nanoclusters. //Lecture Notes in Computer Science, vol.–11189. pp.–318-325. –2019.
6. Stukowski A. “Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO – the Open Visualization Tool”, Modeling Simul. Mater. Sci. Eng. 18 (2010), 015012.)
7. И. В. Амирханов, И. В. Пузынин, В. Н. Самойлов и др. Моделирование термоупругих эффектов при ионной бомбардировке металлов. Дубна : ОИЯИ, 1998. - 16 с. Препринт. P2-98-63.
8. И. В. Амирханов, Е.В. Земляная, И. В. Пузынин, И.Сархадов. Численное моделирование термоупругих эффектов в металлах при их облучении импульсными пучками ионов. Препринт ОИЯИ P11-2000-263.
9. И. В. Амирханов, А. Ю. Дидык, Д. З. Музафаров и др. //Поверхность. 2011. №7. С.52-59.