УДК 538.911

А.В. Маркидонов

О ВОЗМОЖНОСТИ СОЗДАНИЯ КАПИЛЛЯРНЫХ СТРУКТУР В КРИСТАЛЛЕ ПУТЕМ ДЕЛЕНИЯ ЛАТЕНТНЫХ ТРЕКОВ УДАРНЫМИ ВОЛНАМИ (КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ)

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], и, 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 латентного трека. Данные макродефекты выявляются химическим травлением облученного материала [3, 4]. Изучение подобного рода дефектов вызывает интерес в связи с тем, что материал, содержащий протяженные поры цилиндрической формы, может широко применяться при создании фильтров, детекторов, охлаждающих элементов в наноэлектронике и т.д.

В результате травления матрицы по трекам кислотой (щелочью) размер пор увеличивается и уменьшается поверхностная пористость, что снижает разделительную способность будущей мембраны. Поэтому разработка новых методов получения трековых мембран является актуальной задачей.

Ранее автором в работах [5-11] были получены результаты, свидетельствующие о том, что мощным инструментов, способным модифицировать дефектные структуры в кристаллах, являются высокоскоростные кооперативные атомные смещения. При радиационном облучении подобные смещения проявляются в виде ударных послекаскадных волн [12], образующихся следующим образом. 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 [13]. В результате резкого расширения сильно разогретой каскадной области может возникнуть ударная волна. Распространение ударных послекаскадных волн приводит к ряду интересных эффектов: течение бездефектного материала с перемешиванием атомов среды, аномальный массоперенос, бездиффузионные процессы, фазовые превращения, резкое увеличение числа смещений на атом в объеме материала, даже в отсутствие температуры, необходимой для начала процессов диффузии [12, 14 - 16] и т.д.

Цель настоящей работы – определить влияние ударных волн на структурные изменения латентных треков. Рассматриваемые здесь явления отличает малый размер исследуемых областей, что затрудняет прямые наблюдения. Поэтому наиболее рациональным видится использование методов компьютерного моделирования. В качестве метода компьютерного моделирования был выбран метод молекулярной динамики, в связи с тем, что он позволяет проводить эксперименты с заданными скоростями атомов и сравнивать динамику исследуемых процессов с реальным временем. Исследование проводилось с помощью пакета МД-моделирования авторской разработки [17].

Моделируемый кристаллит золота имел форму параллелепипеда. Ориентация кристаллита задавалась следующим образом: ось X была направлена вдоль кристаллографического направления $<1\bar{1}0>$, ось Y – вдоль $<11\bar{2}>$, а Z – $<111>$. Для создания поры в кристаллической структуре создавалось сквозное отверстие цилиндрической формы с некоторым радиусом основания. Затем ось цилиндра совмещалась с одним из узлов решетки и удалялись все атомы, попадающие в этот цилиндр. После удаления атомов осуществлялась структурная релаксация расчетной ячейки до прихода системы в состояние с минимальной энергией.

Волны создавались путем присвоения атомам, расположенным на границе расчетной ячейки, скорости вдоль направления X. Плотноупакованное направление было выбрано потому, что из-за наличия механизмов фокусировки энергии, сферическая волна трансформируется во фрагменты плоских волн, распространяющихся именно вдоль плотноупакованных направлений [18, 19].

В качестве потенциальной функции межатомного взаимодействия использовался потенциал Джонсона [20], рассчитанный в рамках метода погруженного атома. В данном потенциале функциональный вид электронной плотности $f(r)$, парного потенциала $\varphi(r)$ и энергии внедрения $F(\rho)$ представляется в виде:

$$f(r) = f_e \exp\left[-\beta\left(\frac{r}{r_e}-1\right)\right], \quad r \le r_c,$$

$$\varphi(r) = \varphi_e \exp\left[-\gamma\left(\frac{r}{r_e}-1\right)\right], \quad r \le r_c,$$

$$F(\rho) = $$
$$= -E_0\left[1-\frac{\alpha}{\beta}\ln\left(\frac{\rho}{\rho_e}\right)\right]\left(\frac{\rho}{\rho_e}\right)^{\alpha/\beta} - \Phi_e\left(\frac{\rho}{\rho_e}\right)^{\gamma/\beta}$$

где $\alpha = 3\sqrt{V_a B / E_0}$, B – модуль всестороннего сжатия, V_a – атомный объем, $\rho_e = 12 f_e$, $\Phi_e = 6\varphi_e$. Параметры потенциала φ_e, β, γ, r_c, определяются подгонкой к параметру решетки a_0 или атомному объему V_a, энергии связи E_0, энергии образования вакансии E_v, модулю всестороннего сжатия B и модулю сдвига G.

Для апробации потенциала были рассчитаны упругие постоянные при помощи метода конечных разностей [21, 22]. Для вычисления модуля сдвига C' расчетная ячейка подвергалась растяжению в направлении <100> и сжатию в направлении <010> таким образом, чтобы объем ячейки оставался постоянным. Затем рассчитывалась потенциальная энергия решетки как функция a на сетке с постоянным шагом, при значениях аргумента, не выходящих за пределы упругой деформации. После получения данных осуществлялась их аппроксимация с помощью сплайнов, а затем вычислялась вторая производная от энергии по параметру a в точке минимума. После расчетов энергии и аппроксимации полученных значений модуль сдвига вычислялся по формуле:

$$C' = \frac{a_0^2}{4V_a}\frac{\partial^2 E}{\partial a^2}. \qquad (1)$$

В дальнейшем упругие константы C_{11} и C_{12} можно вычислить, решив систему уравнений:

$$B = \frac{C_{11}+2C_{12}}{3}, \qquad C' = \frac{C_{11}-C_{12}}{2}.$$

Для расчета упругой константы C_{44} воспользуемся формулой (1), но в данном случае расчетная ячейка подвергается растяжению в направлении <110> и сжатию в направлении $<1\bar{1}0>$.

Результаты вычислений и их сравнение с экспериментальными данными приведены в табл. 1.

Таблица 1. Упругие постоянные кристаллической решетки золота, ГПа

Характеристика	C_{11}	C_{12}	C_{44}
Полученное значение	186	157.6	42.5
Экспериментальные данные [13]	192.5	163	42.4

Таким образом, потенциал дает результаты, близкие с экспериментальными данными, поэтому может быть использован в проводимом исследовании.

Температура расчетной ячейки задавалась путем присвоения атомам случайных скоростей в соответствии с распределением Максвелла-Больцмана для указанной температуры. Так как моделирование необходимо было проводить при фиксированной температуре, то для ее сохранения использовался термостат Андерсена [23]. При использовании данного термостата атомы системы испытывают столкновения с некими виртуальными частицами, в результате чего скорость реальных частиц понижается. Шаг численного интегрирования уравнений движения равнялся 5 фс.

После выполнения заданного количества шагов компьютерного эксперимента следовала структурная релаксация системы при 0 К.

Для визуализации получившейся структуры рассчитывалась энергия связи атомов, и та часть атомов, энергия которых лежала в определенных пределах, удалялась. Для большей наглядности атомы раскрашивались различными оттенками серого цвета. Кроме этого использовался визуализатор наложения плотноупакованных рядов, состоящий из линий, соединяющих атомы в трех плотноупакованных направлениях. С помощью данного визуализатора изображалась плоскость <111> расчетной ячейки.

В работе рассматривались цилиндрические поры различного диаметра с осями цилиндров, ориентированных в различных кристаллографических направлениях. Проведенное исследование показало, что пора цилиндрической формы при повышении температуры претерпевает структурные трансформации, заключающиеся в формировании тетраэдров дефектов упаковки. Данное явление наблюдается также при порах сферической формы [5]. В процессе структурной релаксации генерируются дислокационные петли, источником которых служит внутренняя поверхность поры, и так как золото является металлом с низкой энергией дефектов упаковки [24], то в дальнейшем осуществляется расщепление петель, и образуются тетраэдры дефектов упаковки. Отметим, что генерируемые порой дислокационные петли являются сдвоенными. Известно, что энергия двойного дефекта упаковки меньше суммы двух энергий обычных дефектов упаковки, поэтому вероятность образования двойных петель увеличивается [25].

При температурах ниже $0.45 \cdot T_{пл}$ цилиндрические поры остаются стабильными, так как при таких температурах механизм генерации дислокаций на внутренней поверхности поры не реализуется из-за невозможности преодоления значительного энергетического барьера. Кроме этого, проведенные эксперименты показали, что в случае ориентации оси цилиндрической поры вдоль направления Y или X, согласованное, симметричное расположение тетраэдров не наблюдается. Возможно появление отдельных фрагментов, но какое либо упорядоченное их расположение не идентифицируется. Причина данного явления следующая. Дислокационные петли, генерируемые поверхностью поры, располагаются в наиболее

плотноупакованной плоскости кристалла с ГЦК решеткой, которой является плоскость <111>. Поэтому при ориентации оси цилиндрической поры вдоль направления расчетной ячейки *Z*, петли располагаются симметрично в параллельных плоскостях. Последующее их расщепление формирует упорядоченное расположение тетраэдров.

На следующем этапе исследования рассматривались компьютерные эксперименты, включающие в себя создание кооперативных атомных смещений, моделирующих распространение волны в расчетной ячейке. Ударные волны создавались в результате присвоения граничным атомам скорости, в два раза большей скорости распространения звуковых волн в золоте. Ранее, в работах [5, 8], было показано, что под воздействием ударных волн наблюдается отщепление и последующее удаление групп вакансий от сферической поры. Кроме этого, при температурах, превышающих $0.5 \cdot T_{пл}$ золота, наблюдается дробление

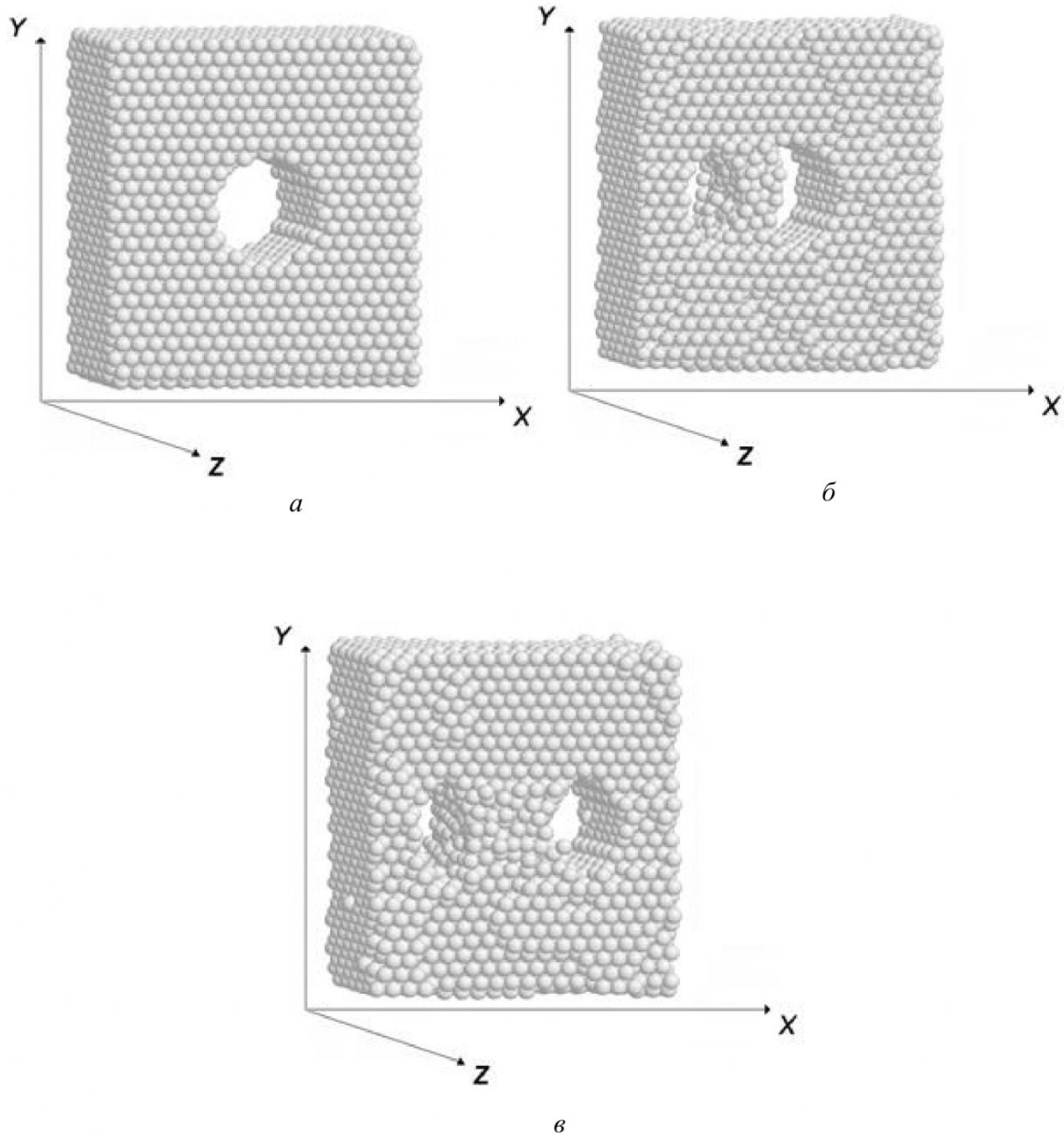

Рис. 1. Процесс разделения цилиндрической поры на две части с помощью ударных волн: а – фрагмент расчетной ячейки с порой; б – пора после прохождения трех ударных волн, распространяющихся слева направо относительно рисунка; в – после еще трех волн, распространяющихся справа налево

поры на отдельные составляющие. В настоящей работе схожие результаты были получены и для цилиндрических пор. При помощи ударных волн удается отщепить группы вакансий от «родительской», т.е. созданной до начала эксперимента, поры. Число отщепляемых вакансий варьируется в зависимости от частоты генерации волн. Кроме этого, еще одним способом регулирования данного числа, является деформация расчетной ячейки [11]. Опишем один интересный результат. Расчетная ячейка, содержащая цилиндрическую пору с диаметром основания 23 Å (см. рис. 1.а), подвергалась одноосному растяжению вдоль направления Z с величиной деформации $\varepsilon_z = 3\%$. Затем генерировались ударные волны (через каждые 500 шагов компьютерного эксперимента). После прохождения трех волн наблюдается «деление» поры на две части, примерно одинакового размера (см. рис. 2.б). В дальнейшем будем генерировать волны с противоположной границы расчетной ячейки. В результате их воздействия на пору одна из частей удаляется от второй (см. рис. 2.в). В результате выполнения данных манипуляций «родительскую» пору удается разделить на две отдельные «дочерние» поры. При увеличении количества генерируемых волн, расстояние между порами возрастает.

Таким образом, в результате прохождения ударных волн через кристаллическую матрицу возможно разделение цилиндрических пор, которыми могут являться скрытые треки, на более мелкие капилляры. Описываемые явления наблюдаются при температурах, недостаточных для начала диффузионных процессов.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 12-02-31135 мол_а

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Комаров Ф.Ф.* Дефектообразование и трекообразование в твердых телах при облучении ионами сверхвысоких энергий // Успехи физических наук, 2003. - Т.173. - №12. - С.1287 – 1318.

2. *Баранов Я.А.* Неупругое распыление твердых тел ионами / Я.А. Баранов, Ю.В. Мартыненко, С.О. Цепелевич, Ю.Н. Явлинский // Успехи физических наук, 1988. - Т. 156. - Вып.3. - С.477 – 511.

3. *Price P.B.* Electron Microscope Observation of Etched Tracks from Spallation Recoils in Mica / P.B. Price, R.M. Walker // Physical Review Letters, 1962. - Vol. 8. - Issue 5. - P. 217-219.

4. *Третьякова С.П.* Диэлектрические детекторы и их использование в экспериментальной ядерной физике // Физика элементарных частиц и атомного ядра, 1992. - Т. 23. - Вып. 2. - С. 364 – 429.

5. *Маркидонов А.В.* Структурные трансформации вакансионной поры при радиационном облучении материала / А.В. Маркидонов, М.Д. Старостенков, А.В. Яшин // Фундаментальные проблемы современного материаловедения, 2013. - Т.10. - №1. - С.12 – 21.

6. *Маркидонов А.В.* Влияние послекаскадных ударных волн на процессы укрупнения вакансионных пор / А.В. Маркидонов, М.Д. Старостенков, Е.П. Павловская // Фундаментальные проблемы современного материаловедения, 2012. - Т.9. - №4/2. - С. 694-702.

7. *Маркидонов А.В.* Низкотемпературное растворение поры вблизи поверхности кристалла под воздействием ударных волн / А.В. Маркидонов, М.Д. Старостенков, Е.П. Павловская, А.В. Яшин, Г.М. Полетаев // Фундаментальные проблемы современного материаловедения, 2013. - Т.10. - №2. - С.254-261.

8. *Старостенков М.Д.* Структурные превращения вакансионых пор под воздействием ударных волн / М.Д. Старостенков, А.В. Маркидонов, Е.П. Павловская // Вестник Тамбовского университета. Серия: Естественные и технические науки, 2013. - Т. 18. - Вып. 4. - Ч. 2. - С. 1741-1743.

9. *Маркидонов А.В.* Расщепление вакансионной поры в зернограничной области ударной послекаскадной волной / 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, 2013. - Т.10. - №3. - С. 443 – 453.

10. *Маркидонов А.В.* Влияние послекаскадных ударных волн на структурные трансформации вакансионных пор / А.В. Маркидонов, М.Д. Старостенков, Е.П. Павловская // Химическая физика и мезоскопия, 2013. - Т. 15. - №3. - С.370-377.

11. *Маркидонов А.В.* Структурная трансформация вакансионных пор в деформированном кристалле под воздействием ударных волн / А.В. Маркидонов, М.Д. Старостенков, Е.П. Павловская, А.В. Яшин, Н.Н. Медведев, П.В. Захаров // Фундаментальные проблемы современного материаловедения, 2013. - Т.10. - №4. - С.563-572.

12. *Овчинников В.В.* Радиационно-динамические эффекты. Возможности формирования уникальных структурных состояний и свойств конденсированных сред // Успехи физических наук, 2008. - Т.178. - №9. - С.991-1001.

13. *Штремель М.А.* Прочность сплавов. Часть I. Дефекты решетки. – Москва: МИСИС, 1999. – 384 с.

14. *Zhukov V.P.* Elastic-Wave Generation in the Evolution of Displacement Peaks / V.P. Zhukov, A.A. Boldin // Atomic Energy, 1987. - V.68. - P.884-889.

15. *Zhukov V.P.* Calculation of the Displacement Peaks in the Continuum Approximation / V.P. Zhukov, A.V.

Demidov // Atomic Energy, 1985. - V.59. - P.568-573.

16. *Блейхер Г.А.* Тепломассоперенос в твердом теле под воздействием мощных пучков заряженных частиц / Г.А. Блейхер, В.П. Кривобоков, О.В. Пащенко. – Новосибирск: Наука, 1999. – 176 с.

17. *Маркидонов А.В.* Моделирование распространения ударных волн в нанообъектах методом молекулярной динамики (ВОЛНА) / А.В. Маркидонов, А.В. Яшин, А.А. Чаплыгина, Н.В. Синица. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2013661857 от 17.12.2013.

18. *Chudinov V.G.* Kinetics of the Diffuse Processes within a Cascade Region in the Sub-Threshold Stages of F.C.C. and H.C.P. Metals / V.G. Chudinov, R.M.J. Cotterill, V.V. Andreev // Physica Status Solidi (a), 1990. - V.122. - №1. - P.111-120.

19. *Гарбер Р.И.* Фокусировка атомных столкновений в кристаллах / Р.И. Гарбер, А.И. Федоренко // Успехи физических наук, 1964. - Т.83. - Вып.3. - С.385-432.

20. *Johnson R.A.* Analytic Nearest-Neighbor Model for FCC Metals // Physical Review B, 1988. - V.37. - №8. - P.3924-3931.

21. *Белаш В.П.* Моделирование упругих констант твердых тел из первых принципов / В.П. Белаш, С.А. Мельчуков, Ю.С. Митрохин, Н.Н. Степанова, В.Е. Шудегов // Труды Первой международной конференции «Трехмерная визуализация научной, технической и социальной реальности. Кластерные технологии моделирования». Том 2. Ижевск, 2009. С. 133-138.

22. *Митрохин Ю.С.* Современные методы моделирования физических свойств твердых тел из первых принципов / Ю.С. Митрохин, В.П. Белаш, Н.Н. Степанова, В.Е. Шудегов // Труды XV Всероссийской научно-методической конференции «Телематика-2008». Т.1. Санкт-Петербург, 2008. С.49-53.

23. *Andersen H.C.* Molecular Dynamics Simulations at Constant Pressure and/or Temperature // Journal of Chemical Physics, 1980. - V.72. - №4. - P.2384-2394.

24. *Хоникомб Р.* Пластическая деформация металлов. – Москва: Мир, 1972. – 408 с.

25. *Цветаева А.А.* Дефекты в закаленных металлах. – Москва: Атомиздат, 1969. - 384 с.

Автор статьи:

Маркидонов
Артем Владимирович,
к.ф.-м.н., доцент каф. АиАП,
филиал КузГТУ, г. Новокузнецк
E-mail: markidonov_artem@mail.ru