

Молекулярно-динамическое моделирование трансформации тепловой энергии в механическую тонкопленочными металлическими наноструктурами *

Ив.С. Коноваленко
e-mail: ivkon@ispms.tsc.ru

К.П. Зольников
С.Г. Псахье

*Учреждение Российской академии наук
Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения РАН*

Проведено моделирование поведения наноразмерных структур, формирующихся при самосворачивании двухслойных кристаллических пленок, в условиях импульсного теплового воздействия. Исследование проводилось на основе метода молекулярной динамики. Межатомные взаимодействия описывались потенциалами, полученными в рамках метода погруженного атома. Показана возможность преобразования моделируемыми наноструктурами тепловой энергии в энергию механических колебаний их свободных краев. Изучено влияние нагрева, его продолжительности и вязкостных свойств среды на кинематические характеристики наноструктур. Исследовано влияние размеров и массы колеблющихся частей моделируемых наноструктур на их поведение при нагреве. Выполнены оценки эффективности преобразования тепловой энергии в механическую наноразмерными структурами в зависимости от их конфигурации, химического состава и интенсивности импульсного теплового воздействия. Исследованы атомные механизмы ответственные за особенности локальных структурных трансформаций в двухслойной нанопленке при ее отделении от подложки, а также механизмы преобразования наноразмерными структурами тепловой энергии в механическую.

Введение

В настоящее время изучению различных свойств наноструктур и возможности их использования в наноустройствах различного функционального назначения уделяется пристальное внимание [1]. Тем не менее, открытыми остаются вопросы, связанные с атомными механизмами, ответственными за процессы образования наноструктур, не достаточно исследованы способы контроля над движением таких структур, а также их способностью к преобразованию подводимой к ним энергии. Изучение данных вопросов является краеугольным камнем в решении многих фундаментальных проблем и важным шагом в направлении практического использования наноразмерных структур, например, в наномашинах и при проектировании нанороботов и наноустройств.

1. Постановка задачи

Целью настоящей работы является изучение атомных механизмов структурных перестроек, определяющих характер поведения незамкнутых наноструктур, сформированных из двухслойных металлических пленок, в процессе формирования и при тепловом нагружении.

*Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Лаврентьевского конкурса молодежных проектов СО РАН 2009-2010 гг., гранта РФФИ № 11-08-00817-а.

Все расчеты в работе проводилось в рамках метода молекулярной динамики с использованием многочастичных потенциалов межатомного взаимодействия, рассчитанных методом погруженного атома [2].

2. Результаты моделирования

Объектом исследования настоящей работы являются незамкнутые наноразмерные структуры, сформированные на основе двухслойных металлических пленок с кристаллической структурой. Моделирование процесса формирования наноразмерных структур, составленных из включений с регулярной внутренней структурой, детально описано в работе [3]. Каждое из включений состоит из атомов одного сорта, в частности, один тип включений был составлен из атомов алюминия, другой – из атомов меди. Конечная форма моделируемых незамкнутых наноструктур определялась начальными параметрами исходных наноразмерных пленок. Варьируя геометрические размеры медных включений и их взаимное расположение в исходной алюминиевой пленке, можно получать незамкнутые наноструктуры различной формы. Для того чтобы ускорить процесс сворачивания наноструктур, в работе [3] пренебрегалось процессами травления «жертвенного слоя» и полагалось, что исходная наноразмерная пленка, находящаяся в напряженном состоянии, уже отделена от связи с подложкой. Результаты моделирования незамкнутых наноструктур, состоящих из алюминиевых и медных включений, приведены на Рис. 1.

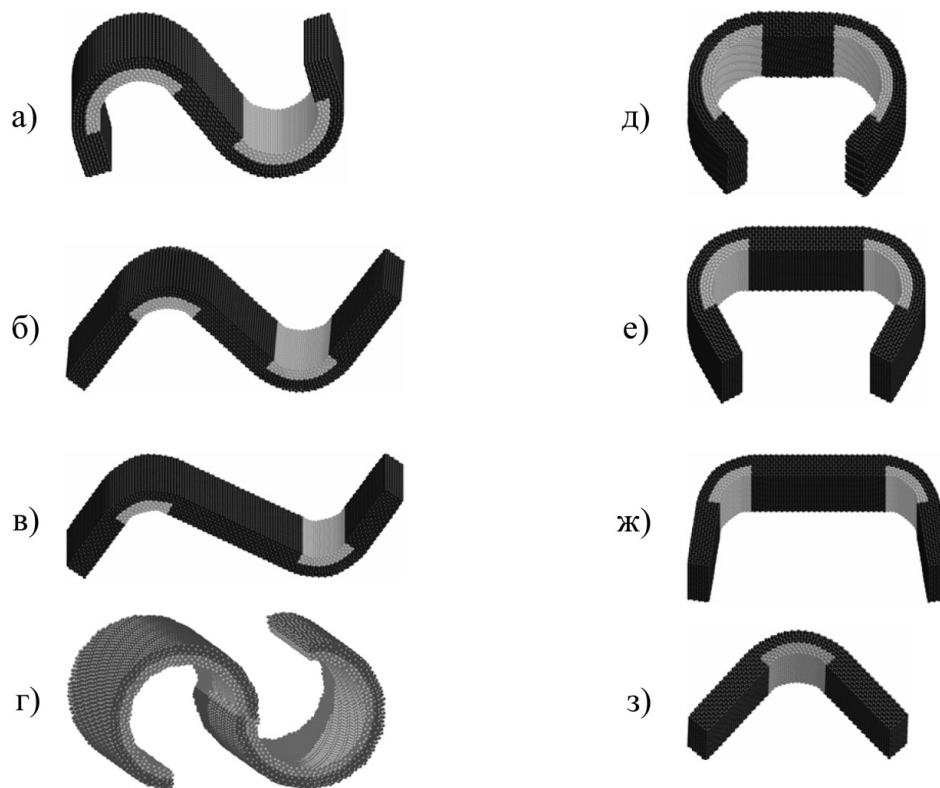


Рис. 1. Формы незамкнутых наноструктур. Медные включения различной длины находятся: а)– г) на противоположных сторонах алюминиевой пленки; д)– ж) на одной стороне алюминиевой пленки; з) наноструктура с одним включением. Светло-серым цветом выделены атомы меди; темно-серым – атомы алюминия

Поведение незамкнутых наноструктур, приведенных на Рис. 1, исследовалось при нагреве в температурном интервале от 50 до 500 К. При термическом воздействии края таких структур начинают совершать колебательные движения. Это связано с тем, что коэффициенты теплового расширения слоев и их температурная зависимость существенно различаются. Частоты колебаний краев моделируемых наноструктур практически не зависят от степени нагрева, в то же время длина медных включений и их взаимное расположение в алюминиевой пленке оказывают существенное влияние на частоту и амплитуду колебаний краев. Увеличение длин включений может приводить как возрастанию частоты колебаний незамкнутых наноструктур (включения находятся на одной стороне пленки (Рис. 1, д-ж), так и к уменьшению частоты колебаний (включения находятся на противоположных сторонах пленки (Рис. 1, а-в).

Результаты расчетов показали, что амплитуда колебаний краев увеличивается с ростом температуры нагрева и уменьшается при охлаждении незамкнутой наноструктуры. Данный факт свидетельствует о том, что часть подводимой тепловой энергии трансформируется в энергию механических колебаний свободных краев. Для моделируемых наноструктур частоты колебаний лежат в гигагерцовом интервале. Таким образом, варьируя геометрией расположения и размерами медных включений, можно менять отклик моделируемой незамкнутой наноструктуры на тепловое воздействие. Исследование вопросов, связанных с возможностью трансформации подводимой тепловой энергии незамкнутыми наноструктурами, представляет не только научный интерес, но и играет важную роль с точки зрения проектирования и создания преобразователей энергии и наномоторов. С этой целью проводилось моделирование трансформации тепловой энергии в механическую на примере наноструктуры, изображенной на Рис. 1, е.

Температурный интервал, в котором выполнялись расчеты, варьировался от 130 до 230 К. В изучаемой модели работа вязких сил среды, окружающей наноструктуру, не учитывалась, а диссипация энергии механического движения (также как и сообщение тепловой энергии) осуществлялась за счет плавного уменьшения (увеличения) кинетической температуры наноструктуры на 100 К. На Рис. 2, а, б приведены зависимости расстояния между колеблющимися краями моделируемой наноструктуры от времени.

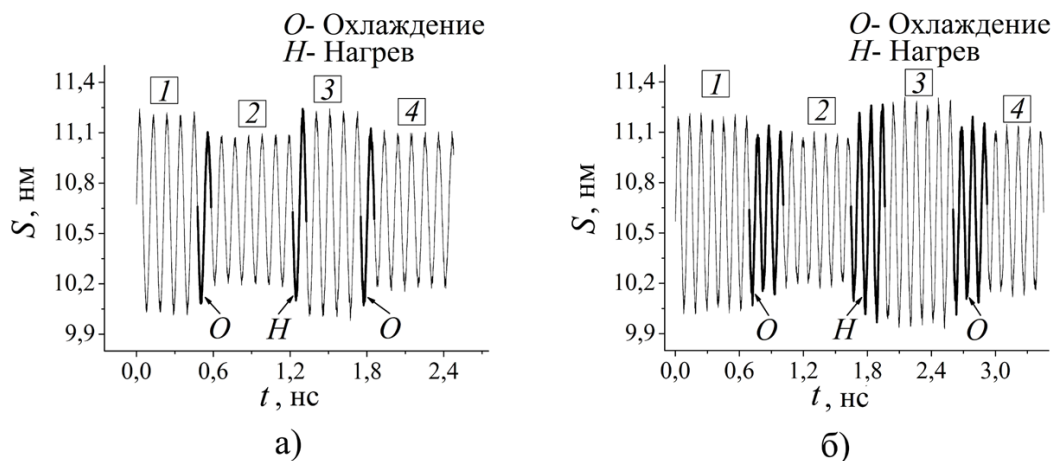


Рис. 2. Зависимости расстояния S между колеблющимися краями моделируемой незамкнутой наноструктуры от времени. Продолжительность нагрева (охлаждения) составляла: а)– один период колебаний; б)– три периода колебаний

Участки кривых под номерами 1 и 3 соответствуют состоянию наноструктуры с

кинетической температурой 230 К в то время как области, обозначенные номерами 2 и 4, – состоянию наноструктуры с кинетической температурой 130 К. Таким образом, меняя температуру изучаемой наноструктуры, можно изменять амплитуду колебаний ее краев. В работе также исследовалось влияние продолжительности нагрева (охлаждения) моделируемой системы на характер колебательных движений. Продолжительность нагрева (охлаждения) менялась от одного до трех временных периодов колебаний наноструктуры. Результаты расчетов показали, что частота колебаний краев изучаемой наноструктуры слабо зависит от продолжительности теплового воздействия в указанном интервале температур (Рис. 2, а, б).

Следует отметить, что для более реалистичного поведения незамкнутых наноразмерных структур при нагреве необходимо производить учет вязких сил, действующих на колеблющиеся края.

Для учета вязкостных характеристик среды, в которую помещена моделируемая наноструктура, к поверхностным атомам колеблющихся краев (они выделены светло-серым цветом на Рис. 3, а, прикладывалась вязкая сила. Сила вязкого сопротивления (F_ν), действующая на поверхностные атомы, определялась по формуле:

$$\mathbf{F}_\nu = -k\mathbf{V}$$

где \mathbf{V} – скорость атома k – коэффициент пропорциональности.

Для тестового определения коэффициента пропорциональности k в формуле для F_ν было проведено исследование характера затухания колебаний изучаемой наноструктуры для различных значений вязкости (коэффициент k менялся в интервале от 0 до $6 \cdot 10^{-11}$ Н·с/м). Результаты расчета представлены на Рис. 3, б.

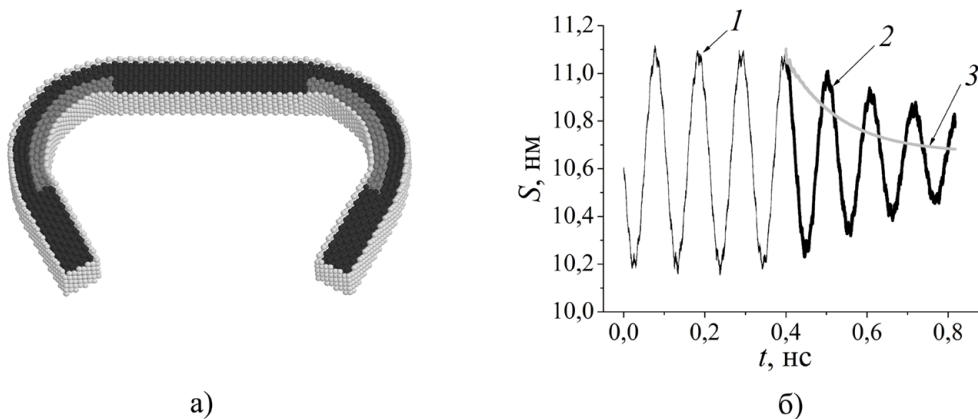


Рис. 3. Форма наноструктуры, использованная для исследования ее поведения в вязкой среде. Черным цветом выделены атомы алюминия; темно-серым цветом – атомы меди; светло-серым – отмечены поверхностные атомы наноструктуры, на которые действует вязкая сила (а). Зависимость величины смещения свободных краев незамкнутой наноструктуры от времени в средах с различными вязкостными характеристиками. Значение коэффициента пропорциональности силы вязкого сопротивления (k) составляло: 1 – $k = 0$ Н·с/м (наноструктура колеблется в отсутствие сил вязкого сопротивления); 2 – $k = 26 \cdot 10^{-14}$ Н·с/м; 3 – $k = 26 \cdot 10^{-12}$ Н·с/м (б)

Для проведения тестовых расчетов по исследованию отклика моделируемой структуры на импульсное нагревание коэффициент пропорциональности k был положен равным $k = 26 \cdot 10^{-14}$ Н·с/м. Суть тестовых расчетов заключалась в том, чтобы исследовать принципиальную возможность в восстановлении исходной амплитуды колебаний наноструктуры (Рис. 3, а), находящейся в вязкой среде, путем периодического импульсного

разогрева. С этой целью через определенный промежуток времени (в данном случае примерно через 3 осцилляционных периода) моделируемая структура подогревалась в течение одного периода. Отметим, что на практике одним из способов импульсного нагрева изучаемых наноструктур может быть использование пико- или наносекундных лазеров. Исходная температура моделируемой наноструктуры составляла 140 К. В течение трех периодов за счет сил вязкого сопротивления амплитуда колебаний краев понижалась примерно на 50 %, а кинетическая температура всей наноструктуры уменьшалась до 90 К. Затем за счет равномерного искусственного разогрева температура исследуемой структуры увеличивалась до 400 К. При таком нагреве амплитуда колебаний краев увеличивалась примерно на 40 % по отношению к ее значению на предыдущем участке (Рис. 4).

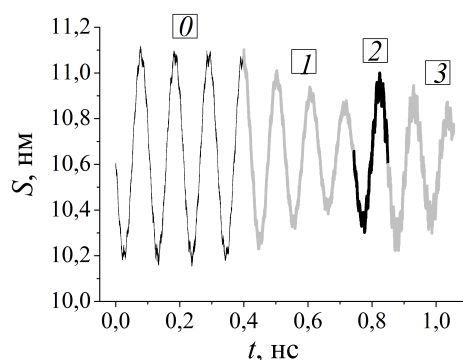


Рис. 4. Изменение расстояния между свободными краями наноструктуры, колеблющейся в вязкой среде, при импульсном разогреве: 0 – колебания наноструктуры без учета силы вязкого сопротивления; 1 – колебания в вязкой среде ($k = 26 \cdot 10^{-14}$ Н·с/м); 2 – импульсный разогрев наноструктуры в течение 1-го периода колебаний; 3 – колебания в вязкой среде ($k = 26 \cdot 10^{-14}$ Н·с/м)

Одним из важных аспектов моделирования незамкнутых наноструктур при тепловом воздействии является изучение возможности использования данных систем в качестве нанодвигателей различного функционального назначения. Для этого необходимо исследовать атомные механизмы структурных перестроек в моделируемых наноструктурах, начиная с исходного момента их сворачивания и заканчивая осцилляциями уже сформированных наноструктур. Изучение особенностей поведения атомной системы проводилось применительно к медно-никелевым пленкам.

Выявлены атомные механизмы, ответственные за формирование незамкнутых наноструктур на основе гетерогенных пленок и их отклик при тепловом воздействии. Исследованы пленки различной толщины (от 10 до 30 атомных плоскостей). Особенности структурных изменений атомной системы были проанализированы на основе полей атомных смещений в различные моменты времени для различных участков моделируемой системы. Исследования показали, что в структуре пленки с момента ее отделения от подложки начинают генерироваться коллективные движения атомов, имеющие вихревой характер, Рис. 5. Их зарождение начинается вблизи свободных краев пленки. Возникновение вихревого движения связано со свободными поверхностями и границей раздела между слоями пленки. Продолжительность существования вихревого движения атомов для пленок, приведенных на Рис. 5, не превышает значения порядка десятка пикосекунд, а смещение вихря происходит на расстояния до 5 параметров решетки.

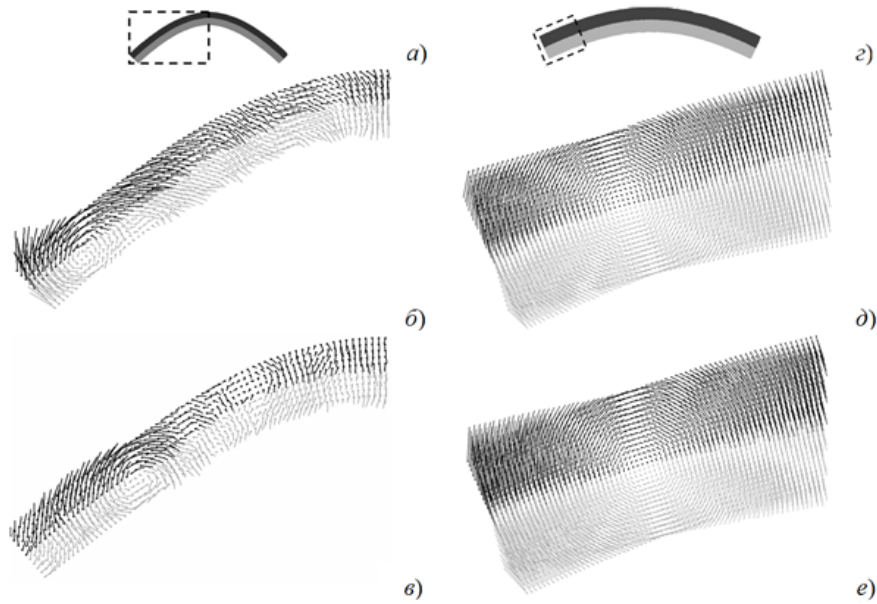


Рис. 5. Поля смещений атомов для фрагментов (а), (г) моделируемых медно-никелевых пленок, построенные для различных отрезков времени: б– $t=(43,54-44,02)$ пс; в– $t=(44,02-44,50)$ пс; д– $t=(254-266)$ пс; е– $t=(268-280)$ пс. Смещения приведены для фрагментов пленок, с длинами: а– 50 % и г– 20 % от длины исходных пленок. Толщины пленок: а– 10 и г– 30 атомных плоскостей

3 Выводы

Таким образом, проведенные расчеты показали возможность использования незамкнутых наноразмерных структур в качестве элементарных преобразователей энергии. Путем подбора соответствующей формы и элементного состава незамкнутой наноструктуры, режима импульсного разогрева, выбора вязкостных характеристик среды можно в значительной степени восстанавливать амплитуды осцилляций краев незамкнутых наноструктур. При самосворачивании в двухслойной кристаллической пленке генерируются вихреобразные упругие смещения атомных групп около ее свободных краев. Вихревые атомные смещения являются динамическими дефектами. Их генерация является аккомодационным механизмом установления однородного распределения напряжений и ведет к изгибной деформации моделируемой двухслойной пленки.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Лаврентьевского конкурса молодежных проектов СО РАН 2009-2010 гг., гранта РФФИ № 11-08-00817-а.

Список литературы

- [1] V. BOLZANI, M. VENTURI, A. CREDI. / Devices and machines. A Journey into the Nanoworld. Weinheim: Wiley VCH, 2003.
- [2] FOILES S.M., BASKES M.I., DAW M.S. Embedded-atom-method for the fcc metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and their alloys // Phys. Rev. B. 1986. Vol. 33, N 12. P. 7983–7991.
- [3] ПСАХЬЕ С.Г., ЗОЛЬНИКОВ К.П., КОНОВАЛЕНКО ИВ.С. Молекулярно-динамическое исследование формирования наноструктур и их поведения в условиях внешнего воздействия // Синтез и свойства нанокристаллических и субструктурных материалов / под ред. Коротяева А.Д. – Томск: Изд-во Том. ун-та, 2007. С. 146–180.