

## ВОЗНИКНОВЕНИЕ ТЕРМИЧЕСКОЙ НЕУСТОЙЧИВОСТИ В НАНОСИСТЕМАХ. МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

И.Ф. Головнев, Е.И. Головнева

*Институт теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича СО РАН  
630090, Новосибирск, Россия*

**Введение.** Исследованию влияния температуры на механические характеристики с помощью метода молекулярной динамики в мировой науке уделяется достаточно большое внимание.

Хотя в работах многих авторов и исследуются механические свойства и разрушение медных нанопроволок при различных температурах, однако в них отсутствует мезоанализ и анализ по подсистемам поверхностных и объемных атомов, что принципиально не позволяет исследовать влияние температуры на стадии разрушения. А это как раз является важной отличительной чертой данной работы.

В данной работе вначале вся система охлаждалась, что ее приводило к термодинамически равновесному состоянию. Затем, производился нагрев этой равновесной системы до требуемой температуры и анализ необходимых характеристик системы.

**Приготовление начального состояния системы и разогрев структуры до заданной температуры.** Поведение наноструктур при нагревании исследовалось на примере нанопроволоки. Для формирования нанопроволоки строился идеальный кристалл меди в форме прямоугольного параллелепипеда с числом кристаллических ячеек  $n_x=50$ ,  $n_y=n_z=5$  вдоль соответствующих осей. Выбрана ориентация кристалла (1,0,0). Первоначально атомы находились в узлах идеальной кристаллической ГЦК - решетки. Взаимодействия атомов описывались потенциалом, полученным по методу внедренного атома (EAM) [1].

В работе использовалась широко известная скоростная модификация Верле второго порядка точности с шагом по времени  $10^{-16}$  с [2].

На первом этапе проводилось охлаждение системы с помощью метода искусственной вязкости [3]. Далее, полученные в ходе процесса охлаждения, координаты и импульсы атомов использовались в качестве начальных данных для разогрева структуры до нужной температуры.

В процессе разогрева поверхностные атомы оставались свободными, что обеспечивало исследование влияния свободных поверхностей на процесс нагрева наноструктуры. Разогрев системы осуществлялся с помощью метода стохастических импульсов. Впервые начальная модификация этого метода была предложена в работе [4].

**Разогрев нанопроволоки и проведение релаксации системы для формирования термодинамического равновесного состояния.** По рис.1(а) видно, что для температур выше 500 К наблюдается превышение изменения потенциальной энергии над хаотической составляющей кинетической энергии атомов. Это обусловило необходимость проведения дополнительных расчетов для проведения релаксации системы после разогрева к равновесному термодинамическому состоянию.

Для системы, разогретой до 500 К, видно по зависимостям температуры, изменению потенциальной энергии, изменению хаотической составляющей кинетической энергии атомов, что в пределах температурных флуктуаций эти параметры системы остаются постоянными. Следовательно, система уже в процессе разогрева вышла на стационарное, термодинамически равновесное состояние. Выясним, в чем причина отличия между компонентами внутренней энергии (на рис.1(а)). На рис.1(б) приведен вид наноструктуры

после релаксации в плоскости XZ. Видно сильное отклонение от идеальной кристаллической структуры.

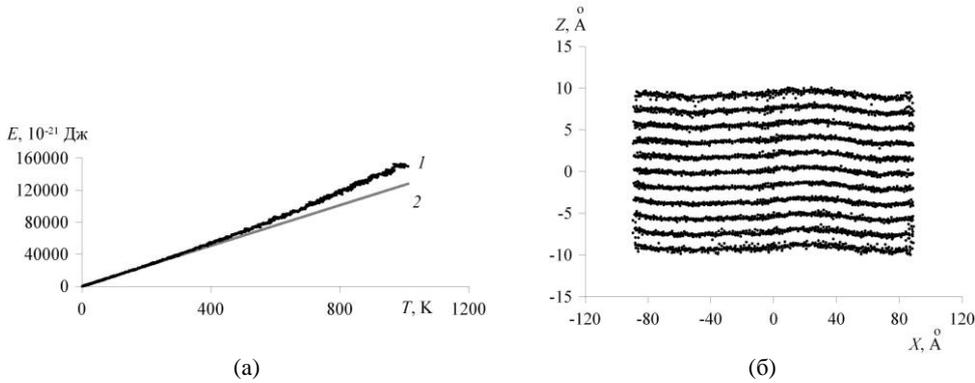


Рис. 1. (а) Зависимость изменения энергетических компонент внутренней энергии структуры от температуры. 1 – изменение потенциальной энергии, 2 – изменение хаотической составляющей кинетической энергии атомов. (б) Вид нанопроволоки в плоскости XZ после релаксации. Температура после разогрева 500 К.

По сравнению парной функции распределения radial distribution function для системы при 500 К и для идеального ГЦК-кристалла (FCC-crystal) (рис. 2(a)) видно, что нагрев только до 500 К приводит к значительной аморфизации системы. Следовательно, разница между компонентами внутренней энергии обусловлена значительным влиянием дефектов кристаллической структуры. Несмотря на это, структура находится в стационарном состоянии.

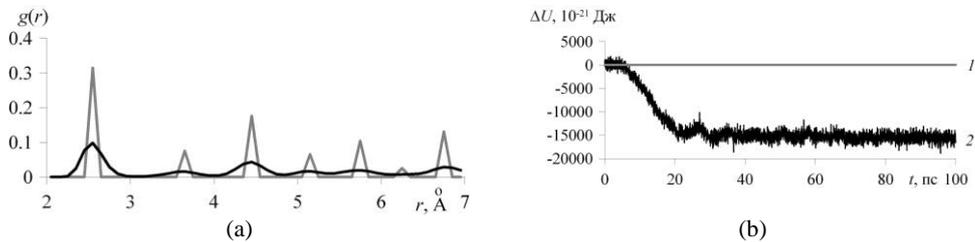


Рис. 2. (а) Парная функция системы после релаксации – черная линия. Температура 500 К. Серая линия – идеальный ГЦК-кристалл. (б) Зависимость изменения полной (линия 1) и потенциальной энергии (линия 2) в процессе релаксации. Начальная температура после разогрева 700 К.

На рис.2 (б) показана релаксация системы (отключен нагрев системы, отсутствуют внешние воздействия) после нагрева до 700 К. Изменения отсчитываются от начального момента релаксации. Видно, что через 5–10 пс потенциальная энергия системы начинает понижаться, в то время как полная энергия с большой точностью остается постоянной. Процесс перестройки длится примерно до 40 пс, а затем потенциальная энергия, с точностью до тепловых флуктуаций, остается постоянной, т.е. система находится в стационарном состоянии с более низкой потенциальной энергией. При этом температура системы в процессе перестройки растет более, чем на 100 К.

При рассмотрении кристалла в плоскости YZ видно, что система перешла из состояния, в котором еще сохранялись атомные плоскости, в состояние, похожее на жидкий кристалл с нитевидными кластерами, ориентированными вдоль оси X (рис. 3 (а)).

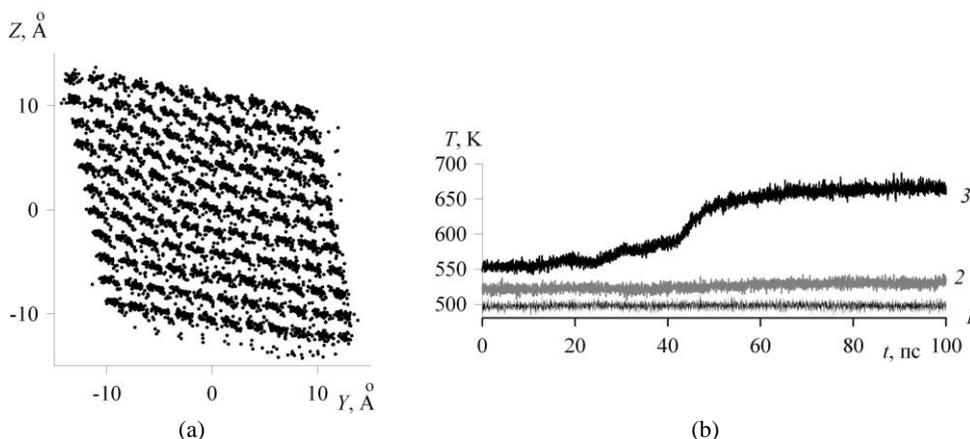


Рис. 3. (а) Вид нанопроволки в плоскости YZ после релаксации. Температура разогрева 700 К. (б) Зависимость температуры структуры в процессе релаксации. Температура разогрева: 1 – 500 К, 2 – 525 К, 3 – 550 К.

Этот переход можно объяснить наличием термического неустойчивого состояния системы, которое наступает при определенной температуре.

**Заключение.** В результате было показано, что:

- При температурах порядка 500 К идеальная кристаллическая структура в нанопроволоке с поперечным размером  $5 \times 5$  кристаллических ячеек переходит в аморфную фазу.
- При температурах около 500 К отличие потенциальной и кинетической составляющих внутренней энергии превышает 5 %, а при достижении температуры 1000 К, отличие достигает 25%, что связано с сильным ангармонизмом колебаний.
- Обнаружено, что при температурах выше 525 К наблюдается термическая неустойчивость – система спонтанно переходит в состояние с более глубоким потенциальным минимумом, что сопровождается ростом температуры примерно на 100 К. При этом конечная стационарная структура отдаленно напоминает жидкий кристалл.
- В результате термической неустойчивости, возникла «запретная» зона в температурном диапазоне примерно от 525 до 650 К. В нанопроволоке происходит спонтанное увеличение температуры примерно на 100 К.

Работа проведена при поддержке грантов РФФИ № 16–01–00468 и № 17-01-00068.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Voter A.F.** Embedded Atom Method Potentials for Seven FCC Metals: Ni, Pd, Pt, Cu, Ag, Au, and Al, Los Alamos Unclassified Technical Report # LA-UR 93-3901, 1993.
2. **Allen M.P., Tildesley D.J.** Computer Simulation of Liquids, Clarendon Press, New York, 1987.
3. **Golovnev I.F., Golovneva E.I., Fomin V.M.** Simulation of quasi-static processes in crystals by a molecular dynamics method. // Phys. Mesomech. 2003. Vol. 6, No. 5–6. P. 41–45.
4. **Bolesta A.V., Golovnev I.F., Fomin V.M.** Contact melting of nickel cluster at collision with rigid wall. // Phys. Mesomech. 2001. Vol. 4, No. 1. P. 5–10.