

ФОРМИРОВАНИЕ НАНОСТРУКТУР, МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕЛИНЕЙНЫХ КОЛЕБАНИЙ В АТОМНЫХ ЦЕПОЧКАХ, ПОДВЕРГНУТЫХ ВОЗДЕЙСТВИЮ НИЗКОЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО ИОННОГО ОБЛУЧЕНИЯ

Н.М. Калиновская, И.И. Мельников, И.В. Терешко

Цель работы – изучение влияния низкоэнергетического ионного облучения на формирование наноструктур.

Ключевые слова: низкоэнергетическое ионное облучение, потенциал Морзе

Нанонаука и нанотехнология являются двумя новейшими областями науки, исследования в которых позволят ускорить научно-технический прогресс и разработать новые упрочняющие технологии на основе целенаправленного управления свойствами материалов. В этом направлении наиболее перспективными как в научном, так и в прикладном плане, являются исследования процессов воздействия потоков различных энергий на поверхность материалов.

Наиболее перспективной задачей развития современных технологий управления поведением материалов и элементов конструкции является создание в них многоуровневой структуры, в частности, формирование наноразмерных комплексов и кластеров.

Взаимодействие энергетических лучей с веществом часто формирует основу для широкого ряда процессов, которые используются для образования наноструктур в электронике и оптоэлектронике. Яркими примерами такого взаимодействия являются электронно-лучевая литография, плазменное травление и осаждение, ионная имплантация [1, 2, 3].

Для улучшения технологии образования наноструктур, в частности, тонких пленок, очень важно понять механизм взаимодействия между заряженными частицами и кристаллическими средами посредством их поверхности. Для этого необходимо знать структурные, химические и электронные свойства твердой поверхности и характеристики заряженных частиц. При этом очень важно также учитывать возможные нелинейные эффекты, которые имеют место при взаимодействии заряженных частиц с облучаемой поверхностью материала, а также нелинейные свойства облучаемых кристаллических материалов. Именно эти нелинейные эффекты становятся одной из движущих причин для самоорганизации материи и, как следствие, ее глубокой модификации, часто необъяснимой в рамках классической физики твердого тела [4, 6, 7].

Основываясь на методе молекулярной динамики, авторами был разработан новый лабораторный практикум по исследованию нелинейных колебаний в атомных цепочках, подвергнутых воздействию низкоэнергетического ионного облучения, используя метод компьютерного моделирования. Для разработки лабораторного практикума использовалось приложение MathCAD 11 Enterprise Edition.

В работе была разработана специальная модель для расчета смещения атомов кристаллической решетки под действием внешнего низкоэнергетического ионного облучения. Она базировалась на представлении трехмерных решеток как сети нелинейных атомных цепочек. Именно в этой модели проводились расчеты в плоскостном (двухмерном) варианте с использованием уравнений классической динамики. Правильность

этой модели и результатов расчета контролировалась при выделении из трехмерной решетки одной цепочки атомов, которую возможно описать конкретными уравнениями, приведенными в данной статье, и где погрешности в расчетах были минимальны.

$$m \frac{d^2 x_1}{dt^2} = -K'x_1 + Ax_1^2 - Bx_1^3 + Cx_1^4 - Dx_1^5 + K(x_2 - x_1) - A(x_2 - x_1)^2 + B(x_2 - x_1)^3 - C(x_2 - x_1)^4 + D(x_2 - x_1)^5 - \beta' \frac{dx_1}{dt}, \quad (1)$$

$$m \frac{d^2 x_i}{dt^2} = -K'(x_i - x_{i-1}) + A(x_i - x_{i-1})^2 - B(x_i - x_{i-1})^3 + C(x_i - x_{i-1})^4 - D(x_i - x_{i-1})^5 + K(x_{i+1} - x_i) - A(x_{i+1} - x_i)^2 + B(x_{i+1} - x_i)^3 - C(x_{i+1} - x_i)^4 + D(x_{i+1} - x_i)^5 - \beta \frac{dx_i}{dt}, \quad (2)$$

$$m \frac{d^2 x_n}{dt^2} = -K(x_n - x_{n-1}) + A(x_n - x_{n-1})^2 - B(x_n - x_{n-1})^3 + C(x_n - x_{n-1})^4 - D(x_n - x_{n-1})^5 - K'x_n + Ax_n^2 - Bx_n^3 + Cx_n^4 - Dx_n^5 - \beta' \frac{dx_n}{dt}, \quad (3)$$

где x_i , $i = \overline{1, \dots, n}$ – смещение i -го осциллятора из положения равновесия; K' , K – коэффициенты упругости в приграничной и внутренней областях цепочки, соответственно; β' , β – коэффициенты затухания в пограничной и внутренней областях, соответственно; K , A , B , C , D – коэффициенты упругости, квадратичной и кубической нелинейностей, а также коэффициенты нелинейностей четвертого и пятого порядка, соответственно. Коэффициенты K , A , B , C , D рассчитываются с помощью параметров потенциала Морзе для заданного материала. В лабораторном практикуме они вводятся как исходные данные, и их можно варьировать в широких пределах.

В качестве исходных данных также вводится количество атомов в цепочке (не менее трех), скорость (в м/с), приобретенная первым атомом цепочки в результате низкоэнергетического ионного облучения, масса каждого атома (в кг) (она одинакова для всех атомов цепочки), среднее расстояние между атомами цепочки (в м) (оно также должно быть одинаковым).

Затем с помощью программы MathCAD происходит построение матрицы начальных положений и скоростей каждого атома. Другими словами, происходит ввод начальных условий для решения системы дифференциальных уравнений второго порядка, общий вид которых показан в формулах (1), (2), (3).

Далее происходит построение матрицы системы этих самых дифференциальных уравнений второго порядка.

На основе созданной матрицы системы уравнений и введенных значений начального и конечного моментов времени, а также введенной точности (количество отрезков, на которые разбивается временной интервал) с помощью метода Рунге-Кутты находится решение системы уравнений. Данные заносятся в таблицу, где первый столбец содержит значения времени, остальные – значения координаты и скорости каждого атома в данный момент времени.

На основе данных таблицы создаются графики зависимости координаты атома от времени, его скорости от его координаты (рис. 1, рис. 2).

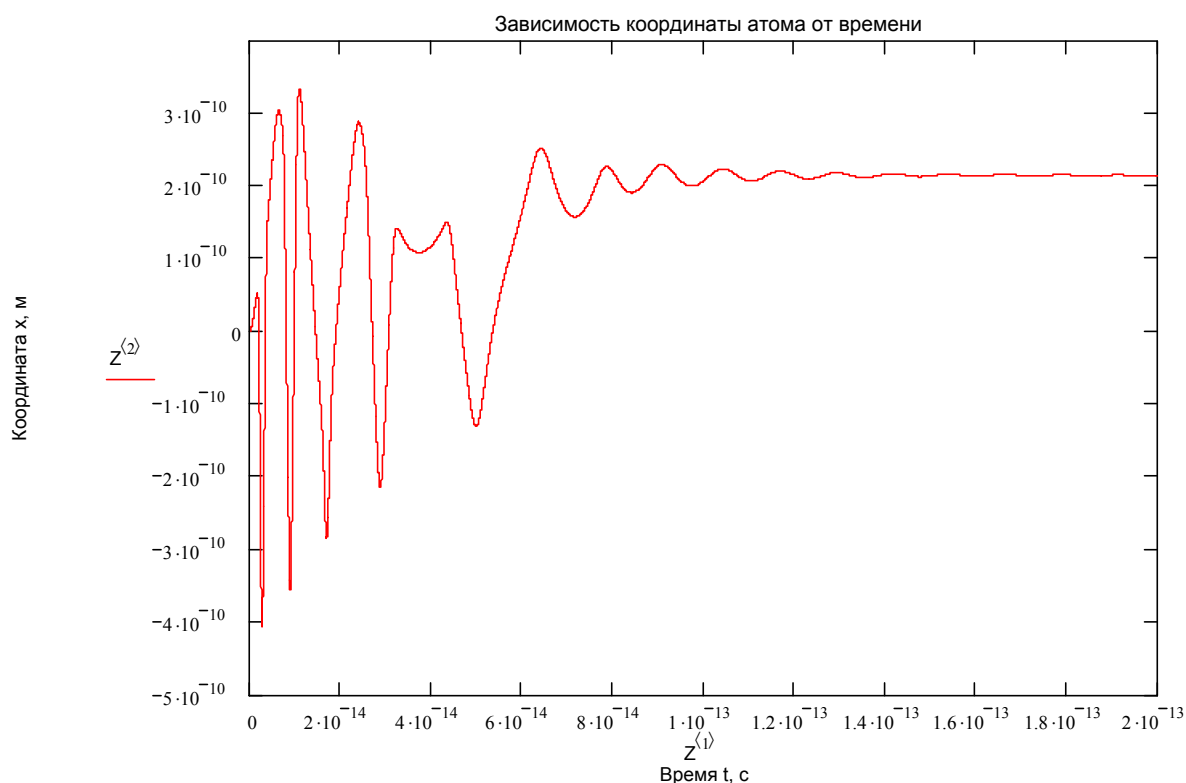


Рис. 1. Смещение облученного атома (первого)

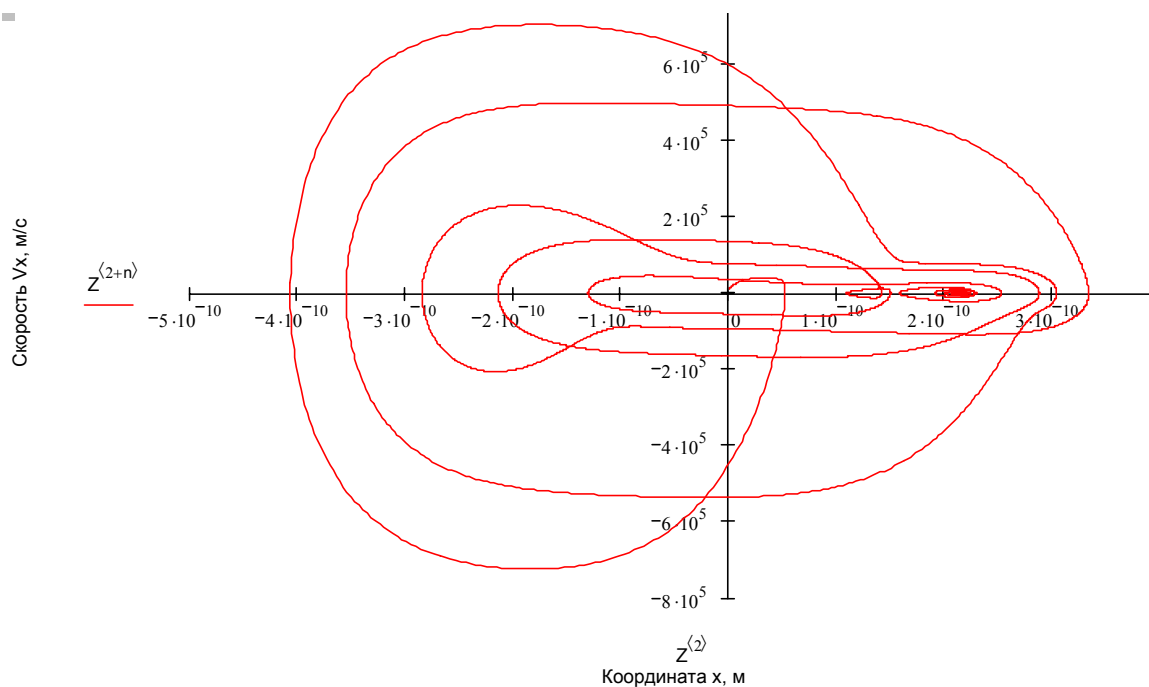


Рис. 2. Фазовая траектория первого атома

Данная работа позволяет исследовать зависимость смещения каждого атома от коэффициентов нелинейности, массы атомов, энергии облучающих ионов, числа атомов в цепочке, расстояния между атомами. Графики показывают, что после облучения хотя бы одного атома (в данной работе первого) в атомной цепочке возникают нелинейные

процессы, которые приводят к тому, что атомы устанавливаются в новое положение, то есть происходит модификация приповерхностного слоя материала, который подвергается облучению ионами низких энергий, что может быть в дальнейшем использовано для разработки новых технологий упрочнения материалов.

Литература

1. *Ivanov V., Kotov Yu., Samatov O. et al.* Synthesis and Dynamic Compaction of Ceramic Nanopowers by Techniques on Electric Pulsed Power. // *J. Nanostructured Materials.*–1995.-N6
2. *Матюхин С.И.* Ионная имплантация: Новые возможности известного метода. // *Известия Орловского государственного технического университета.*-2003.-N 1-2.–С. 59
3. *J.F. Ziegler, J.P Biersack., and U. Littmark.* The Stopping and Range of Ions in Solids, Vol. 1, Pergamon, New York, 1985.
4. *I.V. Tereshko, V.I. Khodyrev, V.M. Tereshko, E.A. Lipsky, and I.V. Romanenko.* Active modification and amorphisation of materials by low-energy ion irradiation. // In: *Application of Particle and Laser Beams in Materials Technology.* London, 1995. p. 595
5. *W. Eckstein.* Computer Simulation of Ion-Solids Interaction. Springer Berlin, 1991.
6. *I.V. Tereshko, V.I. Khodyrev, V.M. Tereshko, E.A. Lipsky, A.V. Goncharenya, and S.Ofori-sey.* Self-Organizing processes in metals by low-energy ion beams. // *NIMB.*- 1993.-80/81.-P. 115
7. *I.V. Tereshko, V.I. Khodyrev, E.A. Lipsky, A.V. Goncharenya, and A.M. Tereshko,* Materials modification by low-energy ion irradiation. // *NIMB.* -1997.-127/128.-P. 861

Калиновская Наталья Михайловна

Студентка электротехнического факультета
Белорусско-Российский университет, г. Могилев
Тел.: +375(8-0222) 27-78-21

Мельников Игорь Игоревич

Студент электротехнического факультета
Белорусско-Российский университет, г. Могилев
Тел.: +375(8-0222) 48-86-64

E-mail: mel_igor@mail.ru

Терешко Ирина Васильевна

Доцент кафедры физики
Белорусско-Российский университет, г. Могилев
Тел.: +375(8-0222) 47-46-05