

УДК 539.21

*Ив. С. Коноваленко, Иг. С. Коноваленко***Изучение атомных механизмов преобразования энергии тонкопленочными металлическими наноструктурами методом молекулярной динамики****Iv. S. Konovalenko, Ig. S. Konovalenko***Investigation of Atomic Mechanisms of Energy Transformation by Thin-Film Metallic Nanostructures Using Molecular Dynamics Method**

Изучено поведение незамкнутых наноструктур, сформированных из двухслойных медно-никелевых пленок при нагреве. Исследование проводилось в рамках метода молекулярной динамики с использованием многочастичных потенциалов, рассчитанных методом погруженного атома. Показано, что при импульсном нагреве моделируемые незамкнутые наноструктуры преобразуют подведенную к ним тепловую энергию в механическую энергию колебаний. Это обусловлено существенным различием коэффициентов теплового расширения слоев пленки и их температурных зависимостей. Показано, что в структуре пленок различной толщины при их отделении от подложки начинают генерироваться коллективные движения атомов, имеющие вихревой характер.

Ключевые слова: металлические тонкопленочные наноструктуры, механические колебания наноструктур, трансформация энергии, вихревое движение атомов, молекулярно-динамическое моделирование.

DOI 10.14258/izvasu(2014)1.1-44

Введение. Современные способы формирования наноразмерных структур позволяют получать их как в процессе поатомной сборки, так и из различных заранее подготовленных заготовок требуемого материала [1, 2]. В настоящее время процесс поатомной сборки сопровождается значительными технологическими трудностями, в связи с этим перспективным является второй способ. В соответствии с ним такими заготовками могут быть, например, наноразмерные многослойные кристаллические пленки. Для их получения используется метод молекулярно-лучевой эпитаксии, который позволяет наносить на поверхность подложки атомные слои с точностью до одной атомной плоскости. При этом формируемые пленки имеют идеальную кристаллическую структуру, в точности воспроизводящую структуру подложки. При последующем химическом травлении «жертвенного» слоя пленка начинает отделяться от подложки и, сворачиваясь вследствие возникающих

The behavior of non-closed nanostructures formed from the two-layer copper-nickel films during heating is studied. The investigation is carried out using molecular dynamics method. The interatomic interactions are described by potentials calculated using the embedded atom method. It is shown that simulated non-closed nanostructures convert thermal energy supplied to them under impulse heating into mechanical energy of oscillations. This is due to a significant difference in the coefficients of thermal expansion of the film layers and their temperature dependencies. It is shown that under detaching the films with different thickness from the substrate the collective atomic motions with vortex character are generated in these films.

Ключевые слова: thin-film metallic nanostructures, mechanical oscillations of nanostructures, energy conversion, vortex motions of atoms, molecular dynamics simulation.

моментов сил, формирует ту или иную наноструктуру. Этот способ позволяет с высокой точностью получать широкий класс наноструктур: балок, лент, трубок, спиралей, раковин и др. [3].

Несмотря на успехи, достигнутые в области получения наноструктур, мало изученными остаются атомные механизмы, ответственные как за процессы формирования, так и за особенности поведения наноструктур при внешних воздействиях. Например, недостаточно изучены особенности локальных структурных трансформаций в нанопленке при ее отделении от подложки, а также механизмы преобразования наноструктурами одного вида энергии в другой. Данные фундаментальные знания являются ключевыми для понимания закономерностей деформационного отклика тонкопленочных наноструктур при термических воздействиях. Отметим, что экспериментальные исследования наноструктур сталкиваются со зна-

* Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект 11-08-00817-а).

чительными трудностями, связанными с малостью их размеров (нанометры) и характерных времен рассматриваемых процессов (наносекунды). Преодолеть вышеуказанные трудности при исследовании наноструктур возможно в рамках использования методов компьютерного моделирования. В соответствии с вышесказанным цель настоящей работы — исследование процесса трансформации тепловой энергии в механическую двухслойными металлическими наноструктурами и коллективных атомных механизмов, ответственных за данное преобразование.

Объект и метод исследования. Объектом исследования являются двухслойные тонкопленочные наноструктуры, каждый слой которых состоит из атомов одного сорта (Cu или Ni). Наноструктуры формировались самосворачиванием исходно напряженных пленок согласно [3]. Исследования в работе проводились на основе развитого подхода для моделирования процессов формирования наноструктур из многослойных кристаллических пленок, начиная с их начального плоского прототипа и заканчивая трехмерной равновесной конфигурацией [4, 5]. Расчеты выполнялись в рамках метода молекулярной динамики. Межатомное взаимодействие описывалось потенциалами, полученными методом погруженного атома [6, 7].

Результаты моделирования. Для изучения поведения незамкнутых двухслойных медно-никелевых наноструктур при нагреве моделировался их отклик на импульсное тепловое воздействие различной продолжительности и интенсивности. Исследуемый интервал температур составлял от 50 до 450 К. Результаты расчетов показали, что при импульсном нагреве моделируемых наноструктур они начинают совершать механические колебания, обусловленные существен-

ным различием коэффициентов теплового расширения слоев пленки и их температурных зависимостей. Обнаружено, что частоты колебаний краев наноструктур слабо зависят от степени нагрева, в то же время размеры, кристаллографическая ориентация, композиция исходной пленки оказывают существенное влияние не только на частоту, но и на амплитуду колебаний ее краев. Для моделируемых наноструктур собственные частоты колебаний не превышают 45 ГГц.

Поскольку внутренняя диссипация энергии, обусловленная тепловыми колебаниями атомной структуры пленки, очень мала, то такая наноструктура, например, приведенная на рисунке 1а, в отсутствие внешних воздействий может совершать достаточно большое число слабозатухающих колебаний, вызванных ее нагревом (рис. 1б). Помимо внутреннего трения диссипация энергии колебаний моделируемых наноструктур может быть обусловлена особенностями среды, в которой они функционируют. Одна из важных характеристик среды — вязкость. Поэтому в работе исследовано поведение незамкнутых наноструктур при нагреве с имитацией вязких сил окружающей среды, действующих на их поверхность. Для этого к поверхностным атомам колеблющейся наноструктуры прикладывалась вязкая сила, задаваемая формулой $F_v = -kV$, где V — скорость атома, k — коэффициент пропорциональности. Для различных расчетов коэффициент k менялся в интервале от 0 до $6 \cdot 10^{-11}$ Н·с/м. Увеличение вязкой силы F_v приводило к более быстрому затуханию колебаний наноструктуры. Обнаружено, что для значения коэффициента пропорциональности $k = 26 \cdot 10^{-14}$ Н·с/м, примерно соответствующего вязкости керосина при комнатной температуре, колебания моделируемой наноструктуры затухают за шесть периодов колебаний.

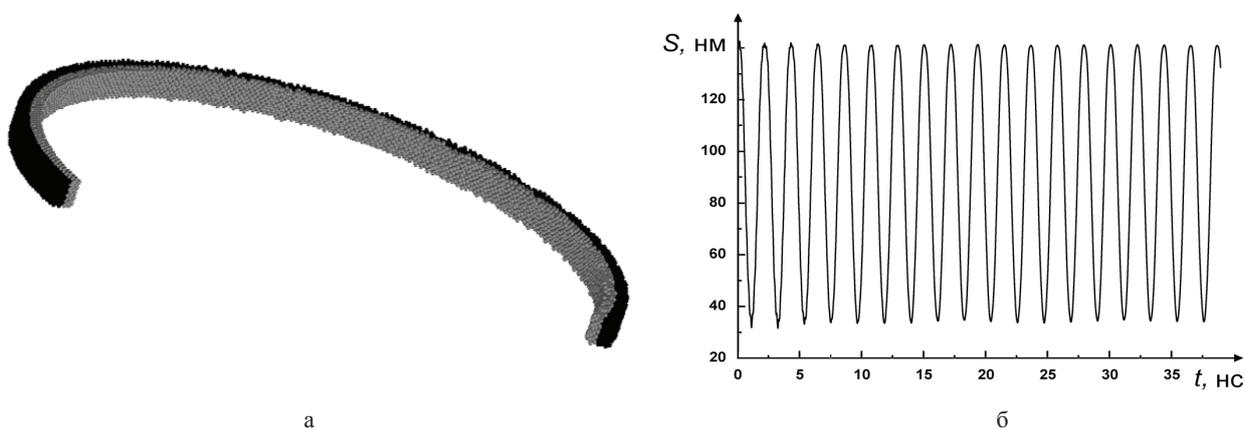


Рис. 1. Моделируемая незамкнутая медно-никелевая наноструктура с толщиной десять атомных плоскостей (а); изменение расстояния (S) между краями колеблющейся наноструктуры от времени (б)

Один из способов импульсного нагрева наноструктур — использование пико- и наносекундных лазеров. Результаты расчетов колебаний наноструктур в отсут-

ствии сил вязкого сопротивления приведены на рисунке 2. Наноструктура, температура которой в исходном состоянии была значительно ниже комнатной, после

импульсного нагрева до 200 К начинала совершать колебания (на рисунке 2а — б им соответствует кривая, расположенная до пунктирной линии). Далее моделировался импульсный нагрев уже колеблющейся наноструктуры до температур 300 и 500 К. В результате нагрева амплитуды колебаний наноструктуры увели-

чивались скачкообразно (на рисунке 2 этим колебаниям соответствуют кривые, расположенные после пунктирной линии). Видно, что в отсутствие сил вязкого сопротивления среды амплитуда колебаний наноструктуры может быть увеличена в несколько раз импульсным нагревом.

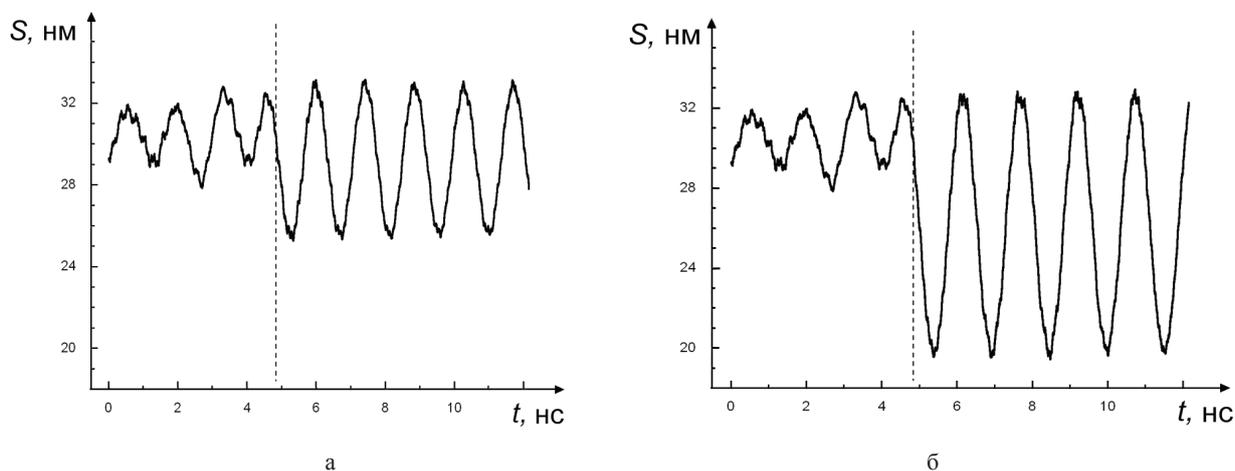


Рис. 2. Зависимость изменения расстояния (S) между краями колеблющейся наноструктуры при нагреве с 200 до 300 К (а) и до 500 К (б). Штрихованная линия соответствует моменту нагрева

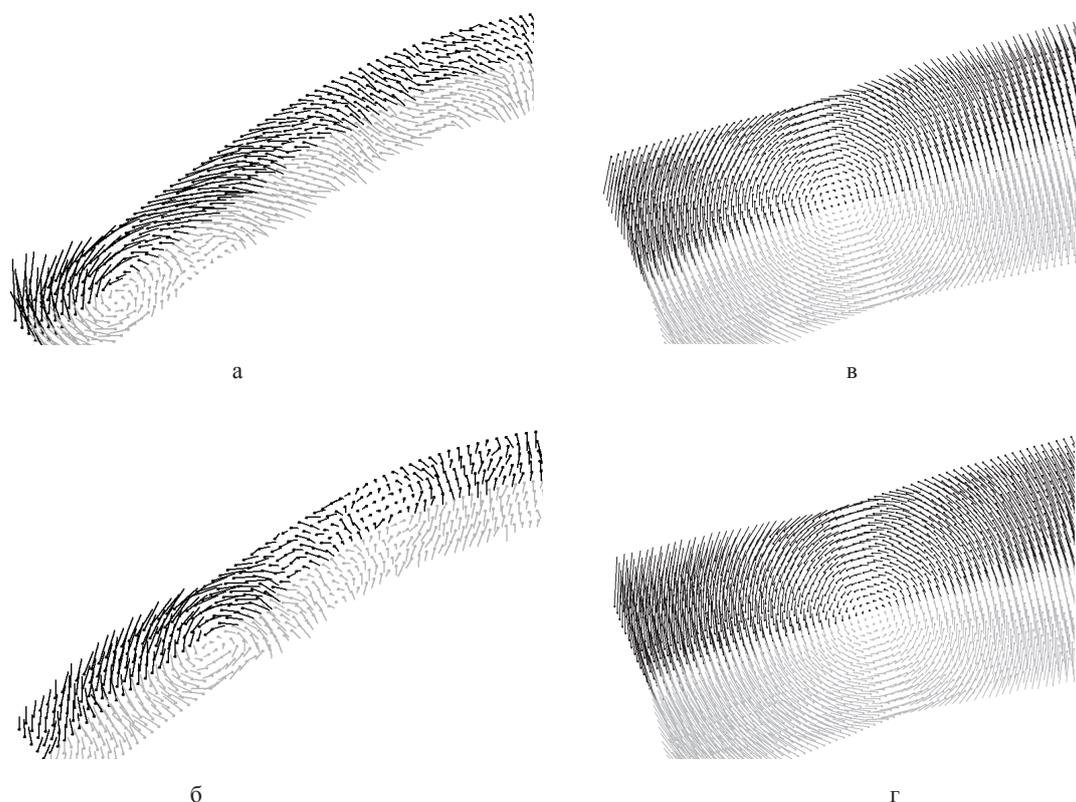


Рис. 3. Поля смещений атомов фрагментов моделируемых медно-никелевых пленок за различные интервалы времени: а — $t = (43,54-44,02)$ пс; б — $t = (44,02-44,50)$ пс; в — $t = (254-266)$ пс; г — $t = (268-280)$ нс.

Толщины пленок: а, б — 10 и в, г — 30 атомных плоскостей

Исследованы особенности колебаний наноструктур в вязкой среде, характеризующейся коэффициентом пропорциональности $k = 26 \cdot 10^{-14}$ Н·с/м. Для этого моделируемая наноструктура, колеблющаяся при температуре 140 К, помещалась в вышеуказанную среду. 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 в течение одного периода колебаний температура исследуемой структуры увеличивалась до 400 К. При таком нагреве амплитуда колебаний краев увеличивалась примерно на 40% по отношению к начальному значению.

Важной задачей при изучении теплового воздействия на незамкнутые наноструктуры является исследование коллективных атомных механизмов, ответственных за трансформацию ими подводимой тепловой энергии в энергию механических колебаний. Для этого проводился анализ полей атомных смещений в различные моменты времени для различных участков моделируемой системы. Обнаружено, что в структуре пленки с момента ее отделения от подложки начинают генерироваться коллективные движения атомов, имеющие вихревой характер. Их зарождение начинается с противоположных свободных краев пленки и является симметричным относительно центра пленки. Поля таких вихревых

атомных смещений для медно-никелевых пленок с толщиной 10 и 30 атомных плоскостей приведены на рисунке 3. Образование вихревых движений атомных групп вблизи краев связано с неоднородностью распределения напряжений в этих областях. Неоднородность распределения напряжений вблизи краев приводит к генерации возмущений, распространяющихся от краев к центральной области. Продолжительность существования вихревого движения атомов для приведенных на рисунке 3 пленок не превышает десятка пикосекунд. При этом происходит смещение вихря на расстояния 8–11 параметров решетки.

Заключение. Показано, что незамкнутые наноструктуры с различной степенью эффективности способны трансформировать подводимую к ним тепловую энергию в механическое движение. Путем подбора соответствующей формы и размеров незамкнутой наноструктуры, режима импульсного разогрева и вязкостных параметров среды можно генерировать колебания краев незамкнутых наноструктур с требуемыми кинематическими характеристиками. Показано, что атомными механизмами, обеспечивающими колебания незамкнутых двухслойных наноструктур, становятся коллективные движения атомов, имеющие вихревой характер. Атомные вихри формируются вблизи свободных краев пленки, охватывают атомы по всей ее толщине и распространяются по направлению к ее центру.

Библиографический список

1. Минько Н.И., Строкова В.В., Жерновский И.В., Нарцев В.М.
2. Пул Ч., Оуэнс Ф. Нанотехнологии. — М., 2005.
3. Prinz V.Ya., Grutzmacher D., Beyer A., David C., Ketterer V., Deccard E. // *Nanotechnology*. — 2001. — V. 12.
4. Псахье С.Г., Зольников К.П., Коноваленко Ив.С. Синтез и свойства нанокристаллических и субструктурных материалов. — Томск, 2007.
5. Konovalenko Iv.S., Zolnikov K.P., Psakhie S.G. // *Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics*. — 2011. — V. 2, №2.
6. Cai J., Ye Y.Y. // *Phys. rev. B*. — 1996. — V. 54, №12.
7. Daw M.S., Baskes M.I. // *Phys. Rev.* — 1984. — V. B29, №12.