

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
Національний університет «Запорізька політехніка»

МЕТОДИЧНІ ВКАЗІВКИ ТА ЗАВДАННЯ

з курсу
«Основи моделювання наносистем»

для студентів другого (магістрського) рівня вищої освіти
за спеціальністю 124 “Системний аналіз”
для всіх форм навчання

Молекулярна динаміка

Методичні вказівки та завдання з курсу „Основи моделювання наносистем” для студентів другого (магістрського) рівня вищої освіти за спеціальністю 124 “Системний аналіз” для всіх форм навчання. Молекулярна динаміка. /Укл.: Г.В. Корніч, О.О. Подковаліхіна, О.В. Кривцун, Д.В. Широкопад, В.І. Кіпріч.– Запоріжжя: НУ “Запорізька політехніка”, 2021.– 21 с.

Методичні вказівки містять теоретичні відомості, індивідуальні завдання з курсу “Основи моделювання наносистем” та приклади їх виконання для студентів другого (магістрського) рівня вищої освіти за спеціальністю 124 “Системний аналіз” для всіх форм навчання. Молекулярна динаміка.

Укладачі: Г.В. Корніч, професор,
О.О.Подковаліхіна, доцент,
О.В. Кривцун, доцент,
.....Д.В.Широкопад, старший викладач,
В.І. Кіпріч, асистент.

Рецензент: Е.В. Терещенко, доцент.

Відповідальний
за випуск: Г.В. Корніч, професор

Затверджено
на засіданні кафедри
системного аналізу та
обчислювальної математики,
протокол № 18 від 16.08.2021.
Рекомендовано до друку НМК
факультету комп’ютерних наук
і технологій, протокол №1 від
19.08.2021.

ЗМІСТ

Вступ.....	4
1 Основи методу молекулярної динаміки	5
1.1 Загальний опис класичної молекулярної динаміки.....	6
1.2 Парні потенціали міжатомної взаємодії.....	7
1.3 Поняття про багаточастинкові потенціали взаємодії.....	10
1.4 Чисельні методи розв'язання рівнянь руху атомів.....	12
1.5 Вибір кроку інтегрування рівнянь руху.....	13
1.6 Побудова модельного кристала.....	14
1.7 Список найближчих сусідів (neighbor list).....	15
2 Практичні завдання.....	17
3 Основна література.....	19
4 Додаткова література.....	20

ВСТУП

Термін “наносистема” позначає системи або фрагменти систем атомів з характерними лінійними розмірами порядку 10^{-9} м. Якщо не торкатися експериментальних досліджень і технологій створення наносистем, то усі методи їх теоретичного і/або модельного опису можна поділити на дві групи: *континуальні* та *атомно-дискретні*. Континуальне наближення передбачає розгляд фізичного середовища, як суцільної субстанції. В межах такого підходу створюються системи відповідних стаціонарних /нестационарних диференціальних рівнянь на основі гідродинаміки, теорії пружності, електродинаміки суцільних середовищ тощо. Для їх розв’язання використовуються методи математичної фізики і чисельні методи. Таким чином створюється континуальна картина поведінки системи, де фігурують просторово-усереднені фізичні параметри, що не “відчувають” окремих атомів, але охоплюють великі об’єми і інтервали часу еволюції системи.

Атомно-дискретні методи складаються з методів молекулярної динаміки і Монте-Карло. Метод Монте-Карло використовує поняття випадкового процесу для опису переміщення окремих атомів у кристалі застосовуючи генератор випадкових чисел. Метод дозволяє моделювати достатньо великі інтервали часу, але вимагає попереднього складання списку можливих механізмів переміщення атомів, що для деяких задач може бути серйозним недоліком. У методі молекулярної динаміки цей недолік відсутній, але характерні інтервали модельного часу є значно меншими ніж у методі Монте-Карло. Таким чином, метод молекулярної динаміки є ефективним для дослідження окремих механізмів і процесів на інтервалах часу приблизно до 10^{-9} с. При цьому, кількість атомів, що одночасно розглядаються, в залежності від продуктивності обчислювальної системи може бути від декількох сотен до сотен тисяч атомів.

З метою збільшення інтервалів модельного часу використовують комбінації молекулярно-динамічного моделювання разом з континуальними рівняннями, наприклад, перенесення маси. Це дозволяє враховувати конкретні механізми атомних перескоків і одночасно виконувати моделювання на великих інтервалах часу. Іншим засобом збільшення модельних інтервалів часу для термічно-активованих процесів є методи прискореної молекулярної динаміки.

1 ОСНОВИ МЕТОДУ МОЛЕКУЛЯРНОЇ ДИНАМІКИ

Розвиток класичного методу молекулярної динаміки (МД) почався з моделі Віньярда у 1960 році, яка була розроблена для моделювання механізмів генерації дефектів кристалічної ґратки. В основі класичного МД методу лежить модельне уявлення про багатоатомну систему, де поведінка кожного атома описується класичними рівняннями руху. Умова коректного застосування цього методу для частинки масою m і швидкістю v визначається її де-бройлівською довжиною хвилі λ , значення якої повинно бути суттєво меншим за сталу кристалічної ґратки d модельної речовини:

$$\lambda = \frac{h}{mv} \ll d$$

де h – стала Планка. Видно, що наприклад, для атомів міді ця умова виконується навіть при енергіях порядку 0,01 еВ.

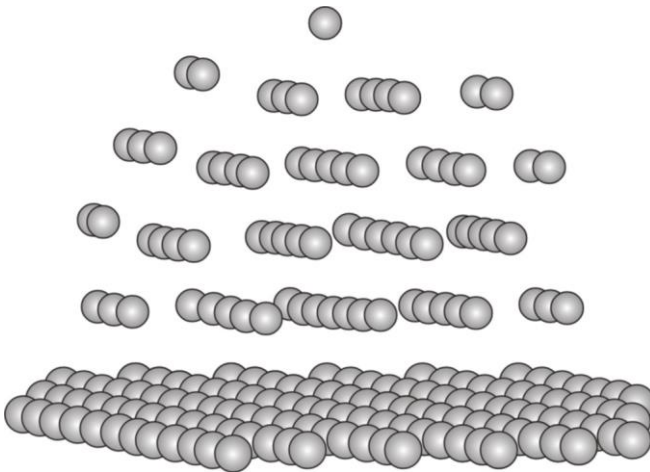


Рисунок 1.1 – Молекулярно-динамічне моделювання кластера міді на підкладинці

В цілому, масштабне використання та популярність методу молекулярної динаміки почалося з опису переміщень атомів у каскадах зіткнень, що розвиваються при попаданні енергетичної атомної частинки (або групи частинок – кластер, молекула) на поверхню твердого тіла. Однак необхідність великих комп'ютерних ресурсів для реалізації цього методу стримували його розвиток та застосування до початку 90-х років XX століття, коли з'явилися відносно дешеві персональні комп'ютери та високопродуктивні робочі станції. Зараз метод молекулярної динаміки становить один з найпотужніших засобів модельного дослідження у матеріалознавстві, радіаційній фізиці, технологіях мікро- та наноелектроніки, біофізиці та медицині. На рисунку 1.1 показаний приклад результату молекулярно-динамічних розрахунків – кластер міді осаджений на підкладку змінює структуру згідно її поверхні.

1.1 Загальний опис класичної молекулярної динаміки

Рух атомів у каскаді зіткнень, що виникає в твердому тілі під дією іонів, що налітають, визначається силами взаємодії з усіма сусідніми атомами мішені. Рівнодійна сила, що діє на окремий атом, є сумою цих сил взаємодії. Розгляд каскадів зіткнень у межах класичної механіки потребує використання рівнянь руху (наприклад, Ньютона):

$$\vec{F}_i(\vec{r}_i(t)) = \sum_{j=1}^N \vec{F}_{ij} = M_i \frac{d^2 \vec{r}_i(t)}{dt^2}, \quad (1.1)$$

де N – число атомів модельного кристала;

$\vec{r}_i(t)$ – радіус-вектор атома i в кристалі;

M_i – маси атомів;

F_{ij} – сила взаємодії між атомами i та j .

Сили обчислюються за допомогою потенціалу $V(r_{ij})$, де вектор r_{ij} – відстань між атомами i і j . Проекція сили, прикладеної до атома j , на вісь k дорівнює:

$$F_j^k(t) = F^k(r_{1j}, r_{2j}, \dots, r_{Nj}) = - \sum_i \alpha_i^k \frac{\partial V(r_{ij})}{\partial r_{ij}} \quad (1.2)$$

де α_i^k – косинус кута між вектором r_{ij} і віссю k .

Сума по i включає атоми, сусідні з j -м атомом, i залежить від області дії потенціалу $V(r)$. Обривання потенціалу повинно відповідати тим константам, на основі яких будуються значення потенціалу. Збільшення радіусу обривання призводить до підвищення точності обчислень, але зменшує швидкість роботи програми. Частіше за все беруть до уваги 2 - 3 сфери найближчих сусідніх атомів. Вибір потенціалу буде обговорюватися нижче.

Важливим моментом є вибір часового кроку інтегрування рівнянь руху (1.1)-(1.2). Часовий крок вибирають таким чином, щоб за один крок інтегрування рівняння руху, каскадний атом, який має найбільшу кінетичну енергію у кристалі, зміщувався не більше, як на 5% від розміру сталої ґратки. З часом розвитку каскаду, максимальна кінетична енергія атома зменшується, що призводить до збільшення кроку інтегрування. При цьому, крок чисельного інтегрування не повинен перевищувати $10^{-15} \div 5 \cdot 10^{-15}$ с, щоб розрахунок не вийшов за межі необхідної точності.

1.2 Парні потенціали міжатомної взаємодії

Найскладніша частина МД методу полягає у правильному виборі потенціалу міжатомної взаємодії для конкретної задачі, якщо взагалі існує можливість такого вибору. У найпростішому випадку для опису атом-атомних взаємодій використовуються парні потенціали відштовхування. Крім того, були розроблені двочастинкові потенціали взаємодії зі складовою притягання, як наприклад, потенціал Морзе (1.3) або потенціал Леннарда-Джонса (1.4), які мали досить простий математичний вигляд:

$$V(r) = D \cdot \exp[-2 \cdot \alpha \cdot (r - r_0)] - 2 \cdot D \cdot \exp[-\alpha \cdot (r - r_0)], \quad (1.3)$$

$$V(r) = \lambda_{12} \cdot r^{-12} - \lambda_6 \cdot r^{-6}. \quad (1.4)$$

Перші доданки цих потенціалів виконують роль відштовхуючих складових, а другі – складових притягання потенціалу. При цьому в потенціалі Морзе константа D відповідає за глибину потенціальної ями, r_0 – відстань між атомами, α – частота

коливань атомів у диполі. Параметри λ_6 і λ_{12} не мають такого чіткого фізичного змісту.

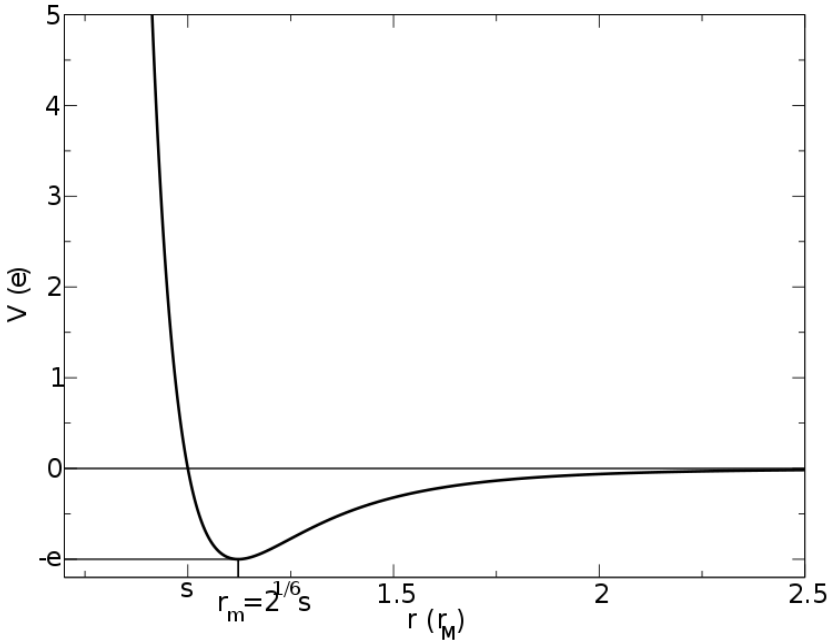


Рисунок 1.2 – Потенціал Ленарда-Джонса

Було розроблено також відштовхуючий потенціал Зіглера-Бірзака-Літмарка (Ziegler-Biersack-Littmark), який відноситься до групи екранованих кулонівських потенціалів:

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \Phi\left(\frac{r}{a}\right) \quad (1.5)$$

де екрануюча функція Φ апроксимується виразом:

$$\Phi\left(\frac{r}{a}\right) = \sum_{i=1} c_i \exp\left(-d_i \frac{r}{a}\right) \quad (1.6)$$

$$\sum_{i=1}^n c_i = \Phi(0) = 1 \quad (1.7)$$

а довжина екранування a може обчислюватися різними способами, наприклад, екранування по Фірсову:

$$a = 0.88534a_b (Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2})^{-2/3} \quad (1.8)$$

або по Зиглеру-Бірзаку-Літмарку:

$$a = 0.88534a_b (Z_1^{0.23} + Z_2^{0.23})^{-1} \quad (1.9)$$

де $Z_{1,2}$ – заряди взаємодіючих частинок;

a_b – радіус Бора ($0.529 \cdot 10^{-8}$ см);

e - елементарний заряд ($4.8 \cdot 10^{-10}$ од. СГС);

d_i , c_i – константи потенціалу;

$n = 4$ для потенціалу Зиглера- Бірзака-Літмарка (ЗБЛ).

ЗБЛ потенціал є оптимальним потенціалом серед інших відштовхуючих потенціалів атом-атомної взаємодії, які приєднуються до складової притягання потенціалу (наприклад, ((1.3) або (1.4)) на малих відстанях та при великих енергіях (більше ніж декілька еВ) атом-атомної і іон-атомної взаємодії. Приєднання проводиться при виконанні двох умов: неперервності функцій та їх перших похідних при умові мінімізації розбіжностей для других похідних від функцій потенціалів у точках з'єднання. Іншою можливістю для з'єднання складових відштовхування та притягання потенціалів є використання проміжного поліному п'ятого ступеня у вигляді:

$$\begin{aligned} \Phi(x) = & a_0 + a_1(x - x_1) + a_2(x - x_1)^2 + \\ & + a_3(x - x_1)^3 + a_4(x - x_1)^4 + a_5(x - x_1)^5 \end{aligned} \quad (1.10)$$

де $x_{1,2}$ – межі приєднання полінома до відштовхуючої та притягаючої частин потенціалу.

Коефіцієнти a_{0-5} обчислюються виходячи з умов неперервності функції потенціалу, її першої і другої похідних. Самі точки $x_{1,2}$ можуть варіюватися виходячи з умови, що поліном (1.10) повинен

бути гладким та монотонним. У деяких випадках виконання останньої умови досить складно досягти.

При енергіях взаємодії менше 500 еВ значною популярністю користується також відштовхуючий потенціал Борна-Майєра, параметри якого A_{bm} і a_{bm} розраховані, практично, для всіх елементів:

$$V(r) = A_{bm} \exp(-r / a_{bm}) \quad (1.11)$$

1.3 Поняття про багаточастинкові потенціали взаємодії

Кінець 80-х років відзначився появою відносно дешевих персональних комп'ютерів, які мали значну продуктивність та широкі можливості для відтворення графічних зображень, зокрема каскадів зіткнень атомів, а також розвитком методів побудови багаточастинкових напівемпіричних потенціалів металів та їх сплавів у межах моделі “зануреного атома” Фіннісом (Finnis) та Синклайром (Sinclair) з одного боку, та Дау (Daw), Баскесом (Baskes) і Фойлесом (Foiles) з іншого. Обидва підходи дозволяли реалістично описувати радіаційні дефекти, малі кластери, пружні константи з врахуванням їх симетричності та інше. Основна ідея була закладена у рівнянні загальної енергії металевої системи, де підсумовування проводиться по всім атомам кристала:

$$E = \frac{1}{2} \sum_i \sum_j V_R(r_{ij}) - \sum_i f(n_i) \quad (1.12)$$

де $V_R(r_{ij})$ – відштовхуючий парний потенціал для атомів i і j , які знаходяться на відстані r_{ij} ;

$f(n_i)$ – функція “занурення” атома i в фонову електронну систему з густиною, що прямо пропорційно пов'язана з величиною n_i .

У схемі Фінніса-Синклайра $f(n_i) = c \cdot (n_i)^{1/2}$, тоді як у схемі Дау-Баскеса для моделювання залежності $f(n_i)$ використовується кубічний сплайн. У деяких інтерпретаціях схеми Фінніса-Синклайра розмірна стала c чисельно дорівнює одиниці. Величина n_i , і відповідно, густина електронної системи поблизу атома i , приблизно залежить від суперпозиції електронних густин сусідніх атомів j :

$$n_i = \sum_{j, j \neq i} \rho_j(r_{ij}) \quad (1.13)$$

Електронні густини, що пропорційно пов'язані з ρ_i , знаходяться методом Хартрі-Фока. Взагалі, багаточастинкові потенціали у інтерпретації Фінніса-Синклаіра або Дау-Баскеса не являються повністю адитивними, що докорінно відрізняє їх від парних потенціалів атом-атомної взаємодії.

У галузі напівпровідників та інших ковалентних матеріалів аналогічні потенціали були розроблені Терсофом (Tersoff) для кремнія та вуглецю, а також їх сполучень, Бреннером (Brenner) для сполучень вуглеця з воднем, Смітом (Smith) для арсеніду галія. Ідея Терсофа виходила з представлення загальної енергії ковалентної системи у вигляді суми:

$$E = \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} (V_R(r_{ij}) + B_{ij} V_A(r_{ij})) \quad (1.14)$$

де $V_A(r_{ij})$ – частина притягання потенціалу;

$B_{ij} = B(G_{ij})$ – багаточастинковий співмножник.

Параметр B_{ij} зв'язаний з напрямком взаємодії та положенням атомів i і j по відношенню до інших найближчих сусідніх атомів. При цьому, функція G_{ij} визначається згідно виразу:

$$G_{ij} = \sum_k f_c(r_{ik}) g(\theta_{ijk}) f(r_{ij} - r_{ik}) \quad (1.15)$$

де $f_c(r)$, $g(\theta)$, $f(r)$ – спеціально підібрані функції, які дозволяють відтворити діамантову ґратку.

Основний зміст складався з того, що зв'язок i - j може слабнути в залежності від присутності та розташування інших зв'язків i - k , які включають атом i . При цьому, функція θ_{ijk} – описує кут між напрямками атом-атомних зв'язків i - j та i - k . Поява багаточастинкових атомних потенціалів призвела до прискореного розвитку, як самого класичного методу молекулярної динаміки, так і різних його практичних застосувань, як наприклад, у матеріалознавстві для моделювання новітніх наноматеріалів та багатоатомних молекул.

1.4 Чисельні методи розв'язання рівнянь руху атомів

Взагалі для розв'язання МД рівнянь руху можна використовувати добре відомі чисельні схеми, хоч іноді більш ефективними є специфічні чисельні схеми, розроблені спеціально для задач молекулярної динаміки. Розглянемо найбільш широко відомі методи чисельного інтегрування рівнянь руху Ньютона.

1.4.1 Метод Верле (рис. 1.2) ($X(t)$ – координата, $V_x(t)$ – відповідна швидкість, $a_x(t)$ – відповідне прискорення атомної частинки):

$$V_x(t) = (X(t + \Delta t) - X(t - \Delta t)) / (2 \cdot \Delta t), \quad (1.16)$$

$$X(t + \Delta t) = X(t) + V_x(t) \cdot \Delta t + \frac{a_x(t) \cdot \Delta t^2}{2}. \quad (1.17)$$

1.4.2 Метод центральних різниць:

$$V_x(t + \Delta t / 2) = V_x(t - \Delta t / 2) + a_x(t) \cdot \Delta t \quad (1.18)$$

$$X(t + \Delta t) = X(t) + V_x(t + \Delta t / 2) \cdot \Delta t \quad (1.19)$$

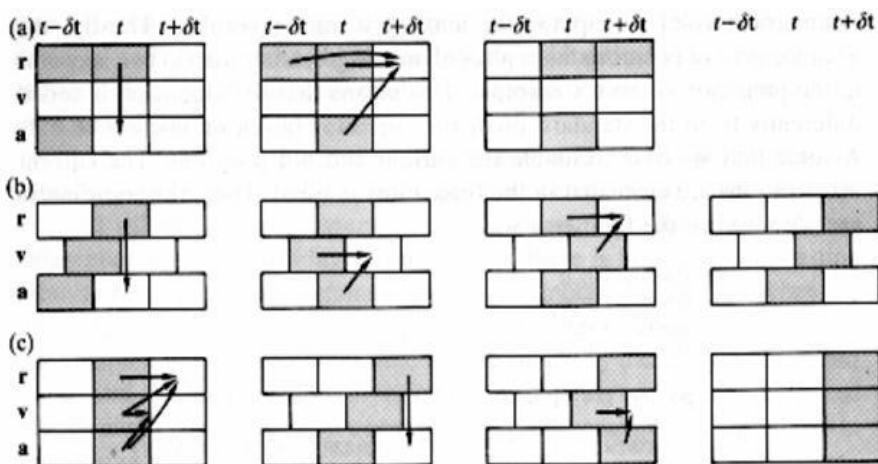


Рисунок 1.2 - Схематичний опис різних форм алгоритму Верле:
 а - основний алгоритм Верле; б - алгоритм «стрибків жаби»; в - швидкісна форма алгоритму Верле

1.4.3 Метод “предиктор-коректор”:

Оцінка:

$$X_p(t + \Delta t) = X(t - \Delta t) + 2 \cdot V_x(t) \cdot \Delta t \quad (1.20)$$

$$a_{x_v}^{(1)}(t + \Delta t) = a_x(X_p(t + \Delta t)) \quad (1.21)$$

Корекція на першому кроці:

$$V_{x_c}^{(1)}(t + \Delta t) = V_x(t) + (\Delta t / 2) \cdot (a_{x_p}^{(1)}(t + \Delta t) + a_x(t)) \quad (1.22)$$

$$X_c^{(1)}(t + \Delta t) = X(t) + (\Delta t / 2) \cdot (V_{x_p}^{(1)}(t + \Delta t) + V_x(t)) \quad (1.23)$$

На наступних ітераціях маємо:

$$a_{x_v}^i(t + \Delta t) = a_x(X_c^{(i-1)}(t + \Delta t)) \quad (1.24)$$

$$V_{x_c}^{(i)}(t + \Delta t) = V_x(t) + (\Delta t / 2) \cdot (a_{x_p}^{(i)}(t + \Delta t) + a_x(t)) \quad (1.25)$$

$$X_c^{(i)}(t + \Delta t) = X(t) + (\Delta t / 2) \cdot (V_{x_c}^{(i)}(t + \Delta t) + V_x(t)) \quad (1.26)$$

1.5 Вибір кроку інтегрування рівнянь руху

Важливим моментом у виборі часового кроку інтегрування рівнянь руху (1.1) виявляється компроміс між точністю обчислення і загальним часом розрахунку. Часовий крок вибирають таким чином, щоб за один крок інтегрування рівняння руху, каскадний атом, який має найбільшу кінетичну енергію у кристалі, зміщувався не більше, як на 5% від розміру сталої ґратки. З часом розвитку каскаду, максимальна кінетична енергія атома зменшується, що призводить до збільшення кроку інтегрування. При цьому, крок чисельного інтегрування не повинен перевищувати $10^{-15} \div 5 \cdot 10^{-15}$ с, щоб розрахунок не вийшов за межі необхідної точності. Точність обчислень в методі молекулярної динаміки контролюється точністю виконання закону збереження енергії, відносна похибка обчислення якої не повинна перевищувати 1.0% . Коректність обчислення сил взаємодії та побудови алгоритму перевіряється також виконанням закону збереження імпульсу, так що сума всіх сил міжатомної

взаємодії у системі повинна дорівнювати нулю (в межах точності обчислень) у кожний момент часу моделювання.

Для отримання необхідної якості обчислень в комп'ютерних МД програмах доцільним є використання подвійної точності в обчисленнях з раціональними числами (тип **double** у C/C++, який крім того є природним для цієї мови програмування). Наприклад, МД алгоритм обчислення каскаду зіткнень, який еволюціонує на протязі $\sim 10^{-11}$ - 10^{-10} с з кроком $\sim 10^{-15}$ с робить приблизно 104 – 105 циклів обчислень, що вказує на необхідність використання подвійної точності в розрахунках.

1.6 Побудова модельного кристала

Значною проблемою МД методу є збереження стабільності модельного кристала. Для того, щоб кристал залишався стабільним на протязі усього розрахунку, необхідно введення додаткових пружних сил, які підпорядковуються закону Гука, на межах кристала або введення періодичних межових умов на бічних сторонах кристала. Періодичні межові умови повинні працювати так, щоб атоми протилежних сторін взаємодіяли між собою. При цьому закінчення кристала з одного боку є його продовженням з іншого, що може мати наступний вигляд на мові комп'ютерного алгоритму:

$$SSR2 = SAY(I) - SAY(K)$$

$$SSR3 = SAZ(I) - SAZ(K)$$

$$SSR2 = SSR2 - (BGY + DDY * 5.D - 1) * IDINT(SSR2 / (BGY - 0.25D1 * DDY))$$

$$SSR3 = SSR3 - (BGZ + DDZ * 5.D - 1) * IDINT(SSR3 / (BGZ - 0.25D1 * DDZ))$$

де SAY(I), SAZ(K) – координати у та z атомів i, k;

DDY, DDZ – сталі ґратки в напрямках у, z;

BGY, BGZ – ефективні розміри кристала в напрямках у, z;

IDINT – функція виділення цілої частини від аргументу.

Таким чином, атом, що залишає кристал з одного боку, зразу ж опиняється на вході з іншого боку кристала. Найбільш ефективно працює комплекс умов, який включає періодичні умови та дисипативні сили на межі кристала, які не дозволяють атому, що має значну енергію і спроможний залишити кристал, входити у нього з

протилежного боку на значну глибину. У випадку дії дисипативних сил, рівняння руху має наступний вигляд:

$$M_i \cdot \frac{d\vec{V}_i}{dt} = \vec{F}_i + M_i \cdot \gamma \cdot \vec{V}_i \quad (1.27)$$

Вибір числового значення константи γ становить значну проблему, оскільки, наприклад, в металевих кристалах крім теплопровідності ґратки, необхідно враховувати електронну теплопровідність. Зазвичай γ вибирається рівною середній частоті фононів $\gamma=3/4\omega_D$, де ω_D – частота Дебая, з метою критичного пригнічення небажаних осциляцій атомів на межах кристала.

1.7 Список найближчих сусідів (neighbor list)

Список найближчих сусідів (“neighbour list”), це перелік атомів, які розміщуються на відстані не більше, ніж r_m від атома, з яким розраховується взаємодія (див. рис. 1.1). При цьому r_m повинен бути відчутно більшим (вибирається в ~ 1.5 - 2 рази більшим, точне значення відношення вибирається шляхом спеціальних випробувань) за радіус обривання потенціалу, щоб у процесі деякої кількості кроків алгоритму, нові атоми із зовні не потрапляли в зону прямої взаємодії з обраним атомом. Після розрахунку заданої кількості кроків алгоритму (або заданої довжини переміщень), будується новий список найближчих сусідніх атомів і все починається з початку. Виграш часу відбувається завдяки тому, що при розрахунку сил взаємодії з кожним атомом кристала, перебираються тільки атоми, які знаходяться всередині сфери r_m навкруги обраного атома, а не усі атоми кристала. У цілому, час розрахунку МД програми із списком найближчих сусідів, у разі вдало обраного співвідношення між радіусом обривання потенціалу і параметром r_m , скорочується в ~ 2.5 - 3.5 рази.

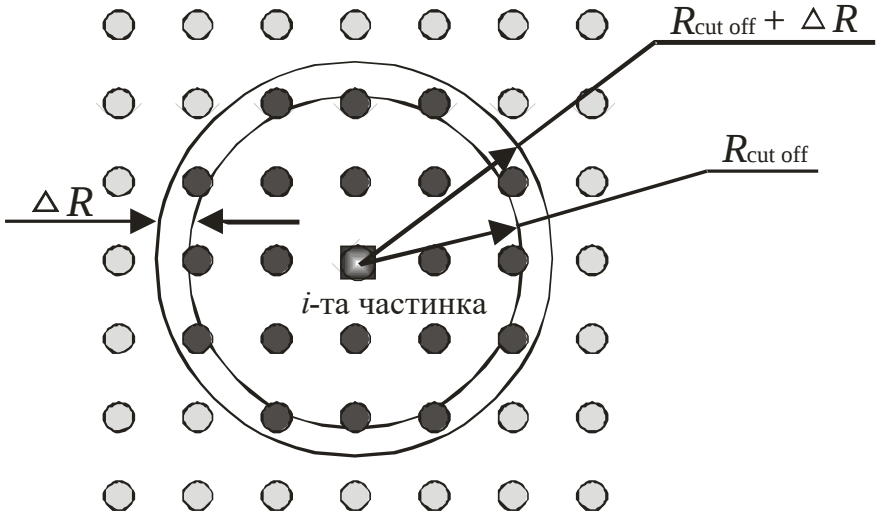


Рисунок 1.3 - Список найближчих сусідів

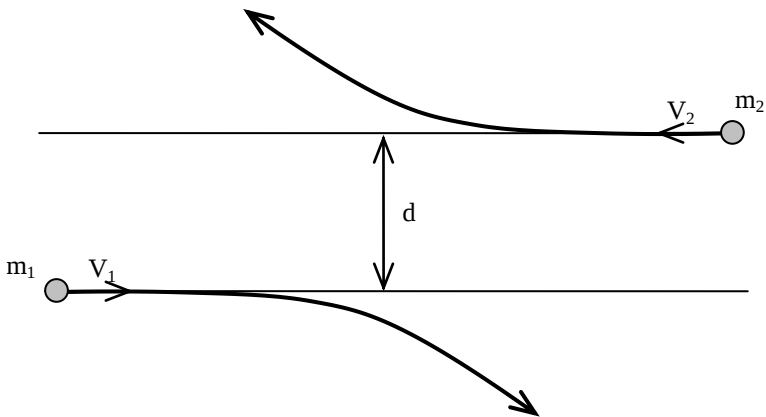


Рисунок 1.4 - Прицільний параметр

2 ПРАКТИЧНІ ЗАВДАННЯ

Наступні завдання дають можливість виконати на практиці здобуті теоретичні знання та отримати навички роботи згідно методу молекулярної динаміки.

Завдання 1

Два атоми Cu ($Z_1 = Z_2 = 29$, атомна маса 64.5 а.о.м., 1 а.о.м. = $1.66 \cdot 10^{-24}$ г.) мають енергію 20 і 100 еВ (1 еВ = $1.6 \cdot 10^{-12}$ ерг) рухаються назустріч один одному з прицільним параметром $1.3 \cdot 10^{-8}$ см). Використовуючи потенціали взаємодії:

а) Борна-Майєра, $A_{bm} = 2.2563$ кеВ, $a_{bm} = 0.019661$ нм;

б) ЗБЛ, $c_1 = 0.028171$, $c_2 = 0.28022$, $c_3 = 0.50986$, $c_4 = 0.18175$, $d_1 = 0.20162$, $d_2 = 0.4029$, $d_3 = 0.94229$, $d_4 = 3.1998$;

в) Морзе, $D = 0.3429$ еВ, $a = 1.3588 \cdot 10^{-8}$ см, $r_0 = 2.866 \cdot 10^{-8}$ см;

г) Леннарда-Джонса, $\lambda_6 = 2 \cdot D \cdot r_0^6$, $\lambda_{12} = D \cdot r_0^{12}$.

Розрахувати траєкторії руху атомних частинок під час їх взаємодії використовуючи чисельні методи. Радіус обривання $3.5 \cdot 10^{-8}$ см

Завдання 2

Розрахувати кінетику коливання атомів у дімері Cu_2 , використовуючи значення констант завдання 1.

Завдання 3

Побудувати залежність кута розсіювання атомів у завданні 1, як функцію прицільного параметра.

Завдання 4

Використовуючи потенціал ЗБЛ, побудувати траєкторії руху атомів у завданні 1 для випадку одного атома Cu, тоді як другий атом важкий - Pb : $Z_2 = 82$, атомна маса 207 а.о.м.

Завдання 5

Виконати завдання 1-4 з використанням різних чисельних методів (наприклад, методи Ейлера, Верле, Рунге-Куты (або предикції-корекції)) та порівняти побудовані траєкторії.

Завдання 6

Побудувати ГЦК (гранецентрований кубічний кристал) міді (приблизно стала гратки становить $3.615 \cdot 10^{-8}$ см.) з орієнтовно 2500-3000 атомів і досягти його стабільності використовуючи періодичні межові умови та дисипативні сили на бічних межах кристалу. Придонна площина атомів кристалу повинна бути нерухомою. Перевірити стабільність кристалу протягом 6 пс. Використовувати потенціал Морзе. Перевірити виконання закону збереження енергії та імпульсу.

Завдання 7

Виконати завдання 6, побудувати алгоритм із списком найближчих сусідів. Дослідити швидкість виконання алгоритму в залежності від співвідношення зовнішнього та внутрішнього радіусів у списку найближчих сусідів. Знайти оптимальний варіант з найбільшою швидкістю виконання алгоритму.

Завдання 8

Виконати завдання 7, та розглянути взаємодію такого кристала з однойменним атомом Си з початковою енергією 50, 100, 200 та 400 еВ. Час розрахунку повинен становити не менше 4 пс. Побудувати графічну картину кінцевого результату розрахунку, дослідити розвиток точкових радіаційних дефектів у приповерхневих атомних прошарках.

Завдання 9

Виконати завдання 8 у випадку одночасного бомбардування кристалу двома атомами Си (дімер Cu_2), які початково розташовані в межах своєї взаємодії (наприклад, $2.0 \cdot 10^{-8}$ см). Обговорити особливості взаємодії у такій системі та розвитку каскаду зіткнень.

Завдання 10

Виконати завдання 8 та дослідити залежність результату від вибору сталої дисипації для межових атомів кристалу. Зробити висновки з отриманих результатів.

3 ОСНОВНА ЛІТЕРАТУРА

1. Snehanshu Pal, Bankim Chandra Ray. Molecular Dynamics Simulation of Nanostructured Materials. An Understanding of Mechanical Behavior / CRC Press.- 2020.- 334 p. ISBN 9780367029821.
2. Habasaki J. Molecular Dynamics of Nanostructures and Nanoionics. Simulation in Complex Systems. / Jenny Stanford Publishing.- 2020.- 338 p. ISBN 9789814800778 .
3. Allen M.P., Tildesley D.J. Computer Simulation of Liquids: Second Edition. Oxford : Oxford University Press, 2017.- 626 p. ISBN-13: 9780198803195 DOI:10.1093/oso/9780198803195.001.0001 .
4. Корніч Г.В. Поверхня твердого тіла при бомбардуванні низькоенергетичними іонами: моделювання і аналіз атомної системи. Монографія.— Видавництво: НУ “Запорізька політехніка”, 2019.- 313 с. ISBN 978-617-529-240-2. <http://eir.zp.edu.ua/handle/123456789/7624> .
5. Haile J.M. Molecular Dynamics Simulation – Elementary Methods.- New York: Wiley-Interscience, 1997.- 386 p. ISBN 10: 047118439X / ISBN 13: 9780471184393 .
6. Behrisch R. Sputtering by Particle Bombardment I / Springer-Verlag Berlin Heidelberg.- 1981.- 284 p. ISBN 978-3-662-30888-2 . DOI 10.1007/3-540-10521-2 . (Russian edition: Распыление твердых тел ионной бомбардировкой. Выпуск I: Пер. с англ./ Бериш Р., Зигмунд П., Робинсон М., Андерсен Х., Бай Х., Розендал Х./ Под. ред. Р.Бериша. -М.: Мир, 1984.- 336 с.)
7. Behrisch R. Sputtering by Particle Bombardment II / Springer-Verlag Berlin Heidelberg.- 1983.- 394 p. ISBN 978-3-662-31169-1. DOI 10.1007/3-540-12593-0. (Russian edition: Распыление твердых тел ионной бомбардировкой. Выпуск II: Пер. с англ./ Бериш Р., Бетц Г., Венер Г., Рот И., Таунсенд П., Картер Д., Навиншек Б., Виттон Д., Шерцер Б. / Под. ред. Р. Бериша.- М.: Мир, 1986.- 486 с.)
8. Eckstein W. Computer simulation of ion-solid interactions/ Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1991.- 296 p. ISBN 978-3-642-73515-8, DOI 10.1007/978-3-642-73513-4 (Russian edition: Экштайн В. Компьютерное моделирование взаимодействия частиц с поверхностью твердого тела: Пер. с англ.-М.: Мир, 1995.- 320 с.)

4 ДОДАТКОВА ЛІТЕРАТУРА

9. Поплавко Ю.М., Воронов С.О. Фізичне матеріалознавство: Навчальний посібник. Інтернет – Вид. НТУУ “КПІ”.- 2015.- 700 с.
10. Покропивний В. В., Роговой Ю. И., Огородников В. В., Лысенко А. А. Атомистическое моделирование материалов: монографія. К.: Інститут проблем матеріалознавства ім. І.М. Францевича НАНУ. – 2008.- 220 с.
11. Shyrokorad D.V., Kornich G.V., Buga S.G. Evolution of the Ni-Al Janus-like clusters under the impacts of low-energy Ar and Ar13 projectiles // Materials Today Communications.-23 - 2020 101107-12 <https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2020.101107> . (Вид. Elsevier).
12. Shyrokorad D.V., Kornich G.V., Buga S.G. Formation of the core-shell structures from bimetallic Janus-like nanoclusters under low-energy Ar and Ar13 impacts: a molecular dynamics study // Computational Materials Science.- 159(3) - 2019 110-119. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2018.12.002> . (Вид. Elsevier).
13. Shyrokorad D.V., Kornich G.V., Buga S.G. Simulation of the interaction of bipartite bimetallic clusters with low-energy argon clusters // Physics of the Solid State.- 59(1).- 2017.- 198-208. <https://doi.org/10.1134/S1063783417010292> . (Вид. Springer).
14. Kornich G.V., Betz G. Two step simulation of low energy ion beam mixing at different temperatures//Nucl. Instr. and Meth.B.- 1996.- V.117, N1-2.-P.81-89. [https://doi.org/10.1016/0168-583X\(96\)00274-1](https://doi.org/10.1016/0168-583X(96)00274-1) . (Вид. Elsevier).
15. Kornich G.V., Betz G., King B.V. Molecular dynamics simulation of low energy ion beam mixing // Nucl. Instr. and Meth.B.- 1996.- V.115, N1-4.- P.461-467. [https://doi.org/10.1016/0168-583X\(95\)01439-X](https://doi.org/10.1016/0168-583X(95)01439-X) . (Вид. Elsevier).
16. Kornich G.V., Betz G., Bazhin A.I. Molecular dynamics simulation of defect formation in an aluminum crystal under low-energy ion bombardment // Physics of the Solid State.- 43(1).- 2001.- 29-34. <https://doi.org/10.1134/1.1340181> . (Вид. Springer).
17. Kornich G.V., Betz G., Zaporozhchenko V., Bazhin A.I. Simulation of ion sputtering of copper clusters from single graphite surface // Technical Physics letters.- 29(11).- 2003.- 938-940. <https://doi.org/10.1134/1.1631370> . (Вид. Springer).

18. Kornich G.V., Betz G., Zaporozhchenko V.I., Bazhin A.I. Sputtering of metal clusters from graphite substrate by low-energy ions *Izvestiya Akademii Nauk. Rossijskaya Akademiya Nauk. Seriya Fizicheskaya.*- 68(3).- 2004.- 304-307.
19. Kornich G.V., Betz G., Kornich V.G., Shulga V.I., Yermolenko O.A. Synergism in sputtering of copper nanoclusters on graphite substrate at low energy Cu₂ bombardment // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. B* 269 (14)- 2011.- 1600-1603. <https://doi.org/10.1016/j.nimb.2010.11.088> . (Вид. Elsevier).
20. Duda E.V., Kornich G.V.. On the Combination of Methods of Temperature-Accelerated Dynamics and Hyperdynamics// *J. of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques.*- 13(4) – 2019.- 667-669. <http://doi.org/10.1134/S1027451019030066> . (Вид. Springer).
21. Duda E.V., Kornich G.V. Hyperdynamics Simulation of the Diffusion of a Vacancy in a Crystal // *Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques.*- V.14(6) – 2020.- 1205-1207. <http://doi.org/10.1134/S1027451020050043>). (Вид.Springer).
22. Дуда Е.В., Корнич Г.В. Моделирование диффузии вакансии в кристалле методом температурно-ускоренной динамики // *Металофізика та Новітні Технології.*- 42(3) 2020 341-350. <https://doi.org/10.15407/mfint.42.03.0341> . (Інститут металофізики ім. Г.В. Курдюмова, НАН України).