

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
Національний університет «Запорізька політехніка»
Інститут інформатики та радіоелектроніки

Кафедра ІТЕЗ

МЕТОДИЧНІ ВКАЗІВКИ
до виконання лабораторних робіт
з дисципліни
«САПР мікро- і наносистем»

для студентів спеціальності 172
«Телекомунікації та радіотехніка»
освітньої програми «Інтелектуальні технології мікросистемної
радіоелектронної техніки»
усіх форм навчання

2019

Методичні вказівки до виконання лабораторних робіт з дисципліни «САПР мікро- і наносистем» для студентів спеціальності 172 «Телекомунікація та радіотехніка» освітньої програми «Інтелектуальні технології мікросистемної радіоелектронної техніки» усіх форм навчання / Укладачі: О.Ю. Фарафонов, Н.І. Фурманова, О.Ю. Малий. – Запоріжжя: ЗНТУ, 2019. – 29 с.

Укладачі: Фарафонов Олексій Юрійович, доц., к.т.н., доц. каф. ІТЕЗ;
Фурманова Наталія Іванівна, доц., к.т.н., доц. каф. ІТЕЗ;
Малий Олександр Юрійович, к.т.н., доц. каф. ІТЕЗ.

Рецензент: Онищенко Вадим Федорович, к.фіз.-мат. н.

Відповідальний за випуск: Шило Галина Миколаївна, зав. кафедрою ІТЕЗ, доц., д.т.н.

Затверджено
на засіданні кафедри ІТЕЗ
протокол № 1 від 28.08.19 р.

Рекомендовано до видання
НМК ФРЕТ
протокол № 1 від 02.09.19 р.

ЗМІСТ

Лабораторна робота № 1 Методи та програми візуалізації результатів моделювання наноструктур.....	4
Лабораторна робота № 2 Основні принципи роботи XMD.....	13
Лабораторна робота № 3 Моделювання плавлення металевих наночастинок і кластерів.....	19
Лабораторна робота № 4 Моделювання нанокрісталізації аморфних металів при деформації.....	25
Список рекомендованої літератури	28

Лабораторна робота № 1
МЕТОДИ ТА ПРОГРАМИ ВІЗУАЛІЗАЦІЇ
РЕЗУЛЬТАТІВ МОДЕЛЮВАННЯ НАНОСТРУКТУР

Мета роботи: навчитися візуалізувати атомні системи, отримані в результаті моделювання, і маніпулювати зображеннями.

Використовувана програма: програма молекулярної графіки RasMol.

1 ТЕОРЕТИЧНА ЧАСТИНА

Призначення і роль візуалізації атомних систем

Велику роль в пізнанні людиною природи грає візуальне сприйняття їм навколишнього світу. Якими б великими були можливості комп'ютерів, людина здатна краще, ніж вони, розпізнавати зображення і робити з цього висновки. Наприклад, людина практично миттєво може зробити висновок про наявність того чи іншого дефекту в кристалічному матеріалі, по його зображенню, тоді як комп'ютеру необхідно для цього провести складні розрахунки за певним алгоритмом, спеціально створеним для розпізнавання саме цього типу дефекту. Тому в атомному комп'ютерному моделюванні структур і процесів в твердих тілах широко використовуються методи і програми візуалізації.

Основний принцип візуалізації дуже простий. Якщо є деяка система (кристал або складна молекула), що складається з одного або декількох типів атомів, координати яких відомі, то цю систему можна відобразити на екрані, зображуючи атоми у вигляді певних геометричних тіл (як правило, у вигляді сфер) відповідно до їх відносним розташуванням. При цьому кожному типу атомів можна привласнити певний колір, можна зобразити зв'язок між ними і т. д.

Слід сказати, що сучасна техніка візуалізації дозволяє отримувати не тільки двовимірне зображення на екрані комп'ютера, але також тривимірні зображення в спеціальних камерах.

Спочатку програми візуалізації були створені для зображення складних молекул. Однією з програм, призначених з цією метою, є програма RasMol, розроблена на кафедрі біомолекулярних структур Единбурзького університету (Велика Британія). Офіційний сайт (<http://www.umass.edu/microbio/rasmol/index2.htm>) містить інформацію про правила роботи з програмою, дистрибутиви останніх версій. Популярність цієї програми, доступність кодів, призвела до того, що

на її основі розроблені нові більш функціональні засоби візуалізації структур (OpenRasmol, ProteinExplorer). В даний час є безліч подібних програм, більшість з яких вільно поширюється. Виявилося, що багато хто з них придатний також для візуалізації кристалів, оскільки останні є великими молекулами. По набору виконуваних функцій різні програми близькі один до одного, тому, знаючи принципи візуалізації, на прикладі однієї з них, легко навчитися користуватися іншими.

У даній роботі методи візуалізації атомних структур вивчаються на прикладі програми RasMol.

2 ПРАКТИЧНА ЧАСТИНА

Запуск програми і вікна.

Програма RasMol зчитує певним чином з записаного файлу координати атомів і створює їх графічне зображення. Функціонує в режимі двох вікон: графічного і текстового (рис. 2.1). У графічному вікні відбувається візуалізація структур макромолекул, а в текстовому вікні вводиться керуюча інформація, яка дозволяє змінювати масштаб малюнка, колір, уявлення молекул, виділяти групи атомів, залишків, білкових ланцюгів. Керуючі дані вводяться у вигляді текстових команд, опис яких наведено на сторінці допомоги. Графічне вікно за умовчанням має чорний фон. У верхній частині цього вікна розташовується панель меню, яка має: "*Файл*", "*Правка*", "*Вид*", "*Колір*", "*Опції*", "*Установки*", "*Експорт*" і "*Довідка*". Крім цього, основне віконце має дві смуги прокрутки, які використовуються для повороту зображення навколо вертикальної і горизонтальної осей. Команди можуть бути введені з клавіатури в текстовому вікні, навіть якщо активним є графічне. Це дозволяє вводити команди і змінювати зображення без перемикання вікон. Для читання координатного файлу можна користуватися командою "*Відкрити*" меню "*Файл*". Можна також відкрити PDB-файл подвійним натисканням на нього.

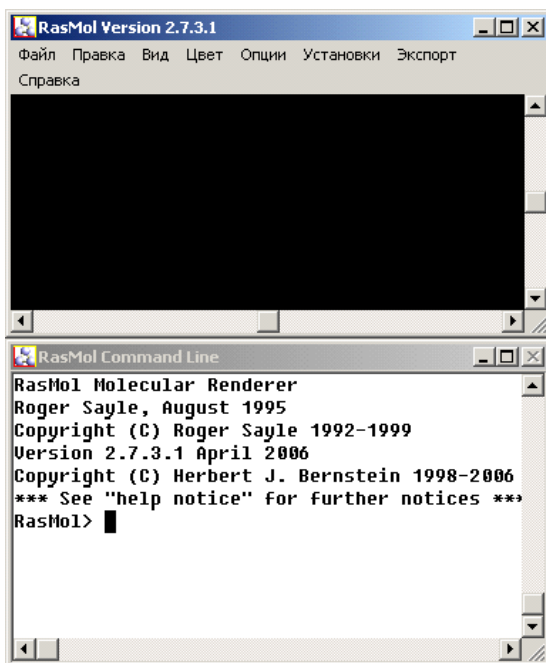


Рисунок 2.1 - Графічне і текстове вікна програми RasMol

Маніпуляції зображенням. Обертання молекули здійснюється пересуванням миші при натиснутій лівій кнопці або за допомогою смуг прокрутки праворуч і вниз. Обертання в площині малюнка здійснюється при натиснутій правій кнопці миші з утриманням клавіші «*Shift*». Рух миші при натиснутій лівій кнопці і утримуваної клавіші «*Shift*» змінює масштаб зображення.

Ліва кнопка
Права кнопка
Shift + ліва кнопка
Shift + права кнопка

Поворот X–Y
Переміщення X–Y
Збільшення
Поворот Z

За допомогою меню «*Вид*» можна вибрати форму представлення зображення. Найбільш використовуваними при візуалізації кристалів є команди «*Ван-дер-Ваальса радіус*» і «*Атоми і зв'язку*». Перша команда заповнює вікно атомами відповідно їх радіусам. При

використанні другої команди атоми представляються у вигляді сфер невеликого діаметру, з порожнім простором між ними. При цьому, якщо відстань між двома атомами менше деякого значення, між ними малюється зв'язок у вигляді прямолінійного відрізка.

Використання команд. За допомогою команд RasMol, що вводяться в командному вікні, можна виконати значно більшу кількість маніпуляцій зображенням, ніж з використанням меню графічного вікна і миші. Команди вводяться з клавіатури так само, як команди *dos*. При цьому RasMol зберігає попередні команди. Команда «*Ctrl + P*» викликає з пам'яті попередню команду, а «*Ctrl + N*» - таку. Ці команди дозволяють вибрати формат представлення зображення і записати його в файл.

Розміри і відстані в RasMol можуть бути задані в ангстремах або одиницях RasMol. Якщо значення будь-якої величини містить десяткову точку, то воно вважається заданим в ангстремах. Наприклад, координати, введені в PDB-файлі з використанням десяткового дробу, мають автоматично розмірність ангстрема. Одиниця RasMol становить 1/250-ю частину ангстрема. Будь-яка величина, задана у вигляді цілих чисел, сприймається в цих одиницях. Наприклад, команда «*spacefill 300*» задає сфери радіусом 300 одиниць RasMol, тобто 1,2 Å.

Розглянемо найбільш використовувані команди. Детально про них і про інші команди можна дізнатися з керівництва до програми.

Background. Формат: *background <colour>* (тут і далі в кутіві дужки полягають вираження або слова, які набираються за вибором користувача). Задає колір фону в графічному вікні. Можна, можливо вибрати колір, набравши відповідне англійська назва (в британській транскрипції). Наприклад, команда «*background white*» встановлює білий фон. Колір може бути обраний також завданням інтенсивностей трьох основних кольорів: червоного, зеленого і синього. Інтенсивність кожного кольору може варіюватися від 0 до 255. Наприклад, команда «*background [255, 0, 0]*» задає червоний фон, а команда «*background [100, 100, 100]*» - сірий фон (однакова інтенсивність трьох кольорів дає різні градації сірого кольору). Замість «*background*» може бути використана також команда «*set background <colour>* », що має ті ж функції.

Clipboard. Дозволяє копіювати зображення в графічному вікні в буфер пам'яті комп'ютера, що робить можливим його перенесення в інші додатки Windows.

Colour. Формат: colour <colour>. Команда дозволяє вибирати колір уявлення обраного типу атомів (про команду вибору атомів одного сорту «select» див. нижче). Кольори атомів вибираються так само, як для фону.

Print. Дозволяє надрукувати зображення на принтері, що використовується операційною системою за замовчуванням.

Quit, Exit. Припиняють виконання програми і закривають обидва вікна.

Rotate. Формат: rotate <axis> <value> дозволяє повертати зображення навколо обраної осі на обраний кут. Параметр <Axis> може мати значення «x», «y» і «z». Параметр <value> має цілочисельне значення, рівне куту повороту в градусах.

Script. Формат: script <filename>. Дана команда послідовно зчитує і виконує команди, записані в текстовому файлі з назвою <filename>. Користувач може заздалегідь скласти і записати ряд команд, необхідних для приведення зображення до кінцевого виду, який йому потрібно, і виконати всі ці команди завданням однієї команди «script». Синонімом команди «script» є команда «source».

Select. Формат: select <expression>. Дозволяє вибирати певні атоми в системі. Подальші команди, що визначають, наприклад, колір, діють тільки на вибрані атоми. Вираз <Expression> може представляти, наприклад, назва елемента, атоми якого вибираються (Al, Cu і т. д.). Іноді типи атомів в PDB-файлі визначаються цифрами; тоді в <expression> використовується відповідна цифра. Приклади: «select Al», «select 1».

Spacefill. Формат: spacefill <expression>. Являє вибрані атоми у вигляді суцільних сфер з розміром, визначеним виразом <expression>. Якщо значення в цьому виразі задано цілим числом, одиницею виміру є одиниця RasMol, рівна 1/250-ї частини ангстрема. Якщо число задано з десятковою крапкою, розмір визначається в ангстремах. Розмір атома не повинен перевищувати 500 одиниць (2,0 Å); при перевищенні цього значення програма видає помилку «Parameter value too large» («Значення параметра занадто велике») в командному рядку.

Wireframe. Формат: wireframe <value>. являє зв'язку між атомами у вигляді циліндрів або ліній з товщиною, що задається

значенням <value> в одиницях RasMol (ціле число) або ангстремах (3 десятковою крапкою). Колір зв'язків задається командою colour bonds <Colour>. Зображення зв'язків, як правило, є функцією, зайвої для візуалізації кристалів, але важливою для молекул. Повністю уникнути зображення зв'язків можна, тільки змінивши масштаби в координатному файлі, помноживши координати на один і той ж число так, щоб всі відстані між атомами виявилися істотно більшими. Командами RasMol можна звести зображення зв'язків до мінімуму, задавши товщину зв'язків рівним 0 (при цьому вони зображуються тонкими лініями) і колір, що співпадає з кольором фону.

Write. Формат: write {<format>} <filename>. Записує зображення в одному із стандартних графічних форматів, заданих виразом <format>, в файл з назвою <filename>. Підтримуються багато поширених графічні формати, як bmp, gif, ps, epsf, vectps (векторний пост-скрипт) і ін.

Zoom. Формат: zoom <value>. Змінює збільшення зображення. Максимальне значення - 1562. Використання команд «zoom on» і «zoom off» дозволяє встановлювати і скасовувати фіксоване збільшення.

Colip атома або зв'язку може бути заданий назвою або у вигляді трійки чисел, які задають інтенсивності червоного, зеленого і синього (RGB). Запропоновані назви кольорів і їх чисельні уявлення дані нижче.

Синій	blue	[0, 0, 256]
Блакитний	cyan	[0, 255, 255]
Синьо-зелений	greenblue	[46, 139, 87]
Помаранчевий	orange	[255, 165, 0]
Червоний	red	[255, 0, 0]
Фіолетовий	violet	[238, 130, 238]
Жовтий	yellow	[255, 255, 0]
Чорний	black	[0, 0, 0]
Зелений	green	[0, 255, 0]
Малиновий	magenta	[255, 0, 255]
Пурпурний	purple	[160, 32, 240]
Червоно-помаранчевий	redorange	[255, 69, 0]
Білий	white	[255, 255, 255]

Кольори CPK. RasMol використовує також колірну схему «CPK», в якій атоми кожного елемента мають свій колір, використовуваний хіміками.

Елемент	Element	Colour	Triple
Вуглець	Carbon	light grey	[200, 200, 200]
Кисень	Oxygen	red	[240, 0, 0]
Водень	Hydrogen	white	[255, 255, 255]
Азот	Nitrogen	light blue	[143, 143, 255]
Сірка	Sulphur	yellow	[255, 200, 50]
Фосфор	Phosphorous	orange	[255, 165, 0]
Хлор	Chlorine	green	[0, 255, 0]
Бром, цинк	Bromine, zinc	brown	[165, 42, 42]
Натрій	Sodium	blue	[0, 0, 255]
Залізо	Iron	purple	[160, 32, 240]
Кальцій, метал	Calcium, metals	dark grey	[128, 128, 144]
невідомий	unknown	deep pink	[255, 20, 147]

Формат PDB-файлів

Формат PDB був встановлений Брукхавенською національною лабораторією в США для архівування структур молекул (The Protein Data Bank). Структура файлу містить повну інформацію про молекули. Однак для візуалізації кристалів може бути використана значно простіша структура файлу. Є два варіанти спрощеної записи.

Варіант 1. Запис з присвоєнням різних сортів атомів умовних назв елементів.

У кількох перших рядках файлу записується кількість атомів в системі і інша додаткова інформація, що не прочитується програмою (ці рядки можуть бути відсутніми). Усі наступні рядки містять інформацію про окремі атоми (однарядок на кожен атом). Рядок починається з записи HETATM. Наступні п'ять позицій відводиться для порядкового номера атома в файлі, причому заповнені повинні бути праві позиції. Потім, з пропуском двох позицій, друкується назва елемента, присвоєне атому (для цього відводяться дві позиції, які заповнюються зліва). Залишається 15 прогалів, і друкуються три координати атомів (на кожен відводяться вісім позицій, три на дробову частину, одна на десяткову точку, ці позиції заповнюються праворуч). Приклад заповнення PDB-файлу наведений нижче.

Samplesystem

HETATM 1 H	0.025	72.181	0.880
HETATM 2 Cu	10.025	72.181	20.880
HETATM 3 O	0.025	72.181	4.400

Варіант 2. Запис з присвоєнням номерів різних сортів атомів.

Аналогічно першому випадку, в декількох перших рядках можуть бути записані число атомів і інша додаткова інформація. Рядки, що містять інформацію про атоми, мають такий вигляд: 1-6 позиції - HETATM; 7-14 - номер атома (Займаються починаючи праворуч); 24-я - тип атома; чотири пробіли; три координати по вісім позицій (три на дробову частину, одна на десяткову точку і чотири на цілу частину). Приклад такого формату файлу наведено нижче.

SamplePDBfile

NumberofAtoms = 4

HETATM	1	1	15.693	72.181	0.880
HETATM	3	1	15.693	72.181	7.920
HETATM	4	2	15.693	72.181	11.440

Виконання завдання

Наведені нижче вправи розраховані на освоєння основних функцій програми візуалізації на прикладі перегляду кількох атомних систем, створюваних вручну і за допомогою програм побудови. Необхідні файли наведені в папці «Pract_1».

Вправа 1. Перегляд зображення готової атомної системи і маніпуляція їм.

Запустити програму RasWin2.6 (файл «RasWin2.6.exe»). Відкрити файл «Sample_1.pdb». Переглянути вміст, відкривши в текстовому редакторі «Блокнот» або «WordPad».

Розглянути зображення системи в режимах «Spacefill», «Ball & Stick». Розглянути його з усіх боків, використовуючи маніпуляції мишею. За допомогою команд RasMol змінити колір фону, уявлення двох сортів атомів, розміри атомів і інші параметри зображення. Використовуйте команди «Background», «Colour», «Rotate», «Select», «Spacefill», «Write», «Zoom» і ін. В одному з положень об'єкта

візуалізації зберегти зображення в графічному форматі і використовувати для звіту.

Вправа 2. Створення PDB-файлу для візуалізації довільної системи з двох типів атомів

За допомогою текстового редактора відредагувати файл Sample_2.pdb, набравши в ньому в одному з двох форматів PDB рядки для завершення системи з атомів двох або трьох сортів, розташувавши атоми так, щоб вони склали якусь геометричну фігуру або зображення Вашого імені. Візуалізувати цю систему і привести в звіті роздруковку змісту PDB-файлу і зображення системи.

Вправа 3. Візуалізація складної атомної системи.

Відкрити PDB-файли, що містять вакансію і дислокацію (Sample_vacancy.pdb, Sample_dislocation_1.pdb, Sample_dislocation_2.pdb). Візуалізувати дефекти, вивчити їх і дати опис в звіті. У звіті привести малюнок об'єктів в найбільш вигідною перспективі.

З ЗМІСТ ЗВІТУ

Звіт повинен бути оформлений у вигляді файлу Winword і містити наступні елементи:

- мета роботи;
- коротку теорію;
- постановку завдань;
- рисунки, що візуалізують об'єкти з поясненнями для кожної вправи;
- висновки.

Лабораторна робота № 2

ОСНОВНІ ПРИНЦИПИ РОБОТИ XMD

Мета роботи: ознайомитися з методом молекулярної динаміки, принципами роботи і призначенням програми XMD.

Використовувана програма: програма XMD.

1 ТЕОРЕТИЧНА ЧАСТИНА

Для нанотехнологій і наноматеріалів найбільший інтерес представляють моделі, що відносяться до одного з найглибших рівнів опису структури твердих тіл, - атомному. У цих моделях матеріали розглядаються як класичні системи взаємодіючих атомів. Основними методами моделювання це методи молекулярної динаміки (МД) – методи моделювання, які засновані на розрахунку еволюції системи взаємодіючих частинок (атомів, молекул) шляхом інтегрування рівнянь їх руху. Для того щоб займатися моделюванням за допомогою МД, в даний час немає необхідності самому розробляти програми, оскільки існує велика кількість як комерційних, так і наукових, вільно розповсюджуваних програм. З комерційних слід зазначити програму Materials Explorer, розроблену компанією Fujitsu. Ця програма, як більшість сучасних комерційних програм, відрізняється хорошим інтерфейсом. Крім того, в пакеті є досить багата колекція міжатомних потенціалів, що дозволяє моделювати широке коло матеріалів. Однак швидкодія цієї програми недостатня для моделювання великих систем. Найбільш гнучкими є некомерційні наукові програми з відкритими вихідними кодами, в які можна вводити зміни. Такими є, зокрема, програми для однопроцесорних комп'ютерів Dynamo, XMD і для паралельних кластерів Paradyn, LAMMPS, IMD і т. д.

XMD являє собою одну з програм, що реалізують метод МД. Програма розроблена Джоном Ріфкін (John Rifkin) в університеті штату Коннектикут (США). У ній можуть бути використані потенціали методу впровадженого атома, потенціал Терсоффа - для кремнію і вуглецю, а також потенціал Стіллінгера Вебера - для кремнію. Ця програма поширюється вільно у вихідних кодах. На її веб-сторінці (<http://xmd.sourceforge.net/about.html>) можна також компілювати програму (виконуваний модуль), яка легко запускається

в командному вікні Windows. Для роботи програми потрібен вхідний файл, що складається з команд XMD. За допомогою цього файлу можна ввести вихідні структури, поставити потенціал, а також режими моделювання.

У середовищі Windows програму XMD найбільш зручно використовувати за допомогою FAR Manager. Робота програми викликається командою `xmd` із зазначенням назви командного файлу, наприклад, `xmd xmd.in`.

Тут і далі для визначеності вхідний файл команд XMD буде називатися `xmd.in`, хоча для цього може бути використана будь-яка назва і розширення.

Нижче будуть наведені основні команди XMD, необхідні для проведення моделювання методом МД. Назви самих команд будуть набрані прописними буквами, хоча в командному файлі вони можуть бути набрані і малими. Назви параметрів, необхідних командами, будуть набрані малими літерами.

Введення основних параметрів моделювання

Для завдання значення маси атомів використовується команда `mass mass`, де `mass` - значення маси атомів в атомних одиницях маси (Наприклад, при моделюванні Ni використовується команда `MASS 27`).

Для завдання кроку за часом використовується команда `dtime dtime`, де `dtime` - значення кроку за часом в секундах. Наприклад, команда `dtime 5.e-15` встановлює крок, рівний 5 фс.

Можна вибрати одиницю виміру енергії, яка далі буде використана при будь-яких вводах-висновках енергетичних величин: `eunit upame`, де `upame` = `erg`, `joule`, `K`, `eV`. Найчастіше одиниця енергії вводиться при читанні межатомного потенціалу, який може бути табульовано в будь-який з цих одиниць. Тому, як правило, команда `eunit` ставиться в першому рядку файлу з таблицею потенціалу.

Для читання команд з будь-якого іншого текстового файлу використовується команда `read filename`, де `filename` - назва файлу, що містить набір команд. Зручно буває виділяти в окремі файли команди, що вводять потенціал взаємодії та вихідні координати атомів. Тоді в командному файлі `xmd.in` будуть команди читання з цих файлів, наприклад, `read ni.ptf` і `read ni.in`, де `ni.ptf` - файл, що містить опис потенціалу для нікелю, а `ni.in` - файл, що містить координати атомів

кристалічної решітки нікелю. Для багатьох металів доступні вже готові таблиці потенціалів, тоді як вихідні структури найчастіше доводиться створювати самим. Для опису початкової конфігурації використовуються команди *position* або *particle* (вони є синонімами). формат цієї команди наступний. У першому рядку задається *position n*, де *n* - число частинок. У наступних *n* рядках вводяться типи і координати всіх частинок: перше число позначає тип атома (якщо моделюється чистий метал, то цифра 1, якщо сплав двох елементів - то цифри 1 і 2), три наступні - координати *x*, *y*, *z* атома в ангстремах. Наприклад, такі рядки вводять вихідну конфігурацію системи з трьох атомів: READ coord.in.

Файл coord.in містить наступну інформацію.

position 3

1 0.24E-01 0.76E + 02 0.88E +00

1 0.52E-01 0.16E + 02 0.11E +00

1 0.34E +00 0.76E + 01 0.88E + 01

Особливість програми XMD полягає в тому, що всі частинки повинні знаходитися в першому Октанті системи координат. Тобто, лівий нижній кут розрахункової осередки завжди збігається з початком координат. Для завдання розрахункової осередки використовується команда box xbox ybox zbox, де xbox ybox zbox визначають координати правого верхнього кута розрахункової осередки в ангстремах. Як правило, параметри розрахункового осередку розраховуються при побудові вихідної структури системи, тому їх зручно записувати в одному файлі з координатами атомів.

Початкова температура системи задається командою TEMPER temp, де temp - значення температури в кельвінах.

Для підтримки температури в процесі моделювання використовується команда *clamp temp [cstep]*. Значення temp задає необхідну температуру. На кожному кроці МД швидкості частинок множаться на величину $(temp / T) * (1 / (2 * cstep))$, де *T* - миттєва температура на даному етапі.

За замовчуванням кордону розрахункової осередку при моделюванні в XMD фіксовані. Для моделювання при постійному тиску використовується команда *pressure clamp bulkmodulus [cstep]*. При використанні цієї моди стінки розрахункової осередку флюктуують з амплітудою, обернено пропорційній об'ємному модулю пружності bulkmodulus. Значення останнього задається в

мегабар (1 Мбар = 100 ГПа). Не обов'язково його вказувати точно, досить задати наближене значення. Параметр *cstep*, який може відсутній, визначає, як швидко флюктуірует розмір осередку у відповідь на внутрішній тиск. Якщо за допомогою цієї команди динамічні граничні умови включені, то можна задати зовнішній тиск командою *pressure external pressure X [pressure Y pressure Z]*. Можна задати тільки одне значення тиску (Мбар), тоді буде задано изотропное тиск. Задавши три значення, можна визначити незалежні тиску уздовж трьох осей координат.

Команди, які контролюють процес моделювання

Процес моделювання контролюється за допомогою двох основних команд: *quench* і *cmd*.

Команда *quench nstep [nquench]* (гарт) здійснює *nstep* кроків релаксації при абсолютному нулі для знаходження конфігурації з мінімумом енергії. Параметр *nquench* задає спосіб відбирання кінетичної енергії при релаксації. При *nquench* = 1 (значення по замовчуванням) швидкості всіх атомів покладаються рівними нулю, якщо потенційна енергія системи перевищує значення в попередньому кроці. При *nquench* = 2 зануляють швидкість тільки тієї частки, енергія якої збільшується.

Команда *cmd nstep* наказує проведення *nstep* кроків МД. Умови МД описуються наведеними вище командами.

При виконанні цих двох команд часто зручно збереження проміжних результатів або виконання інших дій аборізне поєднання процесів МД і релаксації. У цих випадках використовується цикл команд, який починається командою *repeat n* і закінчується командою *end*. Між цими командами може розташовуватися будь-яка послідовність команд, яка буде виконана *n* раз. Наприклад, цикл

```
repeat 10
cmd 100
quench 200
end
```

десять разів виконує послідовність з 100 кроків МД і 200 кроків релаксації.

Команди виведення даних

XMD надає багатий вибір можливостей виведення різних величин в процесі моделювання. Нижче розглянемо основні з команд.

Bsave nskip file. При моделюванні з командою *cmd* вказує програмі зберігати кожен *nskip* кроків у файлі з назвою *file* розмірів розрахункового осередка. У кожному рядку записуються чотири числа: номер кроку і три розміри комірки по осях *x*, *y*, *z*. Використання цієї команди зручно для моніторингу розмірів осередку при моделюванні з динамічними межами, тобто при постійному тиску.

Esave nskip file. Ця команда дає вказівку кожен *nskip* кроків МД або релаксації записувати в файл з назвою *file* значень енергії. Зберігається середня енергія, що припадає на один атом системи в одиниці, встановленої командою *eunit*. кожен висновок здійснюється в один рядок, в якій записуються чотири числа: номер кроку, повна енергія, потенційна і кінетична енергія.

Команда *write* - найбільш універсальна команда для виведення інформації при моделюванні. Вона має численні опції, які вказують виведені величини і назви файлів, а також режими виведення. Один з найбільш поширених форматів цієї команди наведено нижче.

write file [+] filename quantity

Тут *quantity* - назва виведеної величини, яка буде записана в файл з назвою *filename*. Перед назвою файлу може бути поставлений знак «+»; тоді запис проводитиметься починаючи з кінця цього файлу. В іншому випадку весь вміст файлу буде замінено записуваною інформацією.

Розглянемо деякі важливі значення опції *ouantity*.

Quantity = box. Команда *write file filename box* записує розміри розрахункової осередки.

Quantity = eatom. Записує номери і значення енергій всіх атомів системи.

Quantity = stress. Створює компонент тензора внутрішніх напруг, усереднених по всьому атомами систем, на атомний обсяг. Напруга визначається діленням цього добутку на атомний об'єм.

Quantity = particle. Записує типи і координати атомів системи. Координати виводяться в ангстремах. Зручна для збереження релаксированной конфігурації системи, якщо використовується режим моделювання *quench*.

Quantity = posvel. Зберігає типи, координати (в ангстремах) і швидкості (в см / с) всіх атомів системи. Команда зручна для збереження проміжних або кінцевих станів системи при ненульових температурах, що моделюються командою *cmd*.

У XMD передбачена також можливість збереження всієї поточної інформації, з використанням якої моделювання може бути продовжено з перерваного місця. Це робиться за допомогою команди *write state file*. Раніше збережений стан системи зчитується за допомогою команди *state file*. У командному вікні *dos* виконання програми XMD може бути перервано натисканням на клавіші «*Cntrl* + *C*». При надходженні сигналу на переривання перш всього створюється файл стану системи на момент переривання, якому дається назва *stop.sta*. Надалі моделювання може бути продовжено з цього кроку.

Команди *write xmol* *[+] file* і *write pdb* *[+] file* дозволяють записувати координати атомів в форматах XMOLE і PDB, які можна відкривати в візуалізації, зокрема, програмою RasMol.

2 ЗМІСТ ЗВІТУ

Звіт повинен бути оформлений у вигляді файлу Winword і містити:

- теорію (особливо програми XMD, основні команди програми та їх призначення);
- висновки.

Лабораторна робота № 3

МОДЕЛЮВАННЯ ПЛАВЛЕННЯ МЕТАЛЕВИХ НАНОЧАСТИНОК І КЛАСТЕРІВ

Мета роботи: визначити температуру плавлення металевих наночастинок і кластерів і зіставити з температурою плавлення об'ємного кристала.

Використовувані програми:

- програма XMD;
- програма створення розрахункової осередки для моделювання наночастинок і кластерів;
- набір табульованих потенціалів для г. ц. к. металів;
- програма візуалізації атомних структур RasMol;
- програма побудови графіків функцій.

1 ТЕОРЕТИЧНА ЧАСТИНА

Наночастки і кластери

Під кластерами і наночастинками розуміються частки твердих тел, що містять від декількох до сотень атомів і тисячі і десятки тисяч атомів відповідно. Кордон між наночастинками і кластерами умовна. У наночастицях (розмір їх становить величину порядку 10 нм) число поверхневих атомів відрізняється від числа об'ємних лише на порядок, а в кластерах ці числа можна порівняти, чи навіть усі частинки можуть бути віднесені до поверхневих. Надалі наночастинки і кластери будемо об'єднувати під загальною назвою малих частинок.

Через велику частку поверхневих атомів фізичні властивості малих частинок істотно змінені порівняно з масивними зразками. Відмінність властивостей малих частинок від властивостей масивних зразків вже використовується в найрізноманітніших технічних додатках. Наприклад, порошки з малих частинок працюють в якості каталізаторів незрівнянно краще, ніж масивні зразки з тих же матеріалів. Введення малих металевих частинок всередину керамічних матеріалів надає цим матеріалами (КЕРМЕТ) унікальні механічні властивості, через що вони використовуються в авіаційній і космічній техніці.

Сильний вплив поверхні, суттєва зміна електронної структури наночастинок призводять до суттєвих відмінностей термодинамічних

властивостей малих частинок від об'ємних кристалів. До таких властивостей відноситься, наприклад, температура плавлення.

Температура плавлення об'ємних кристалів від їх розмір не залежить. Однак коли розміри матеріалу зменшуються до нанорозмірного рівня, температура плавлення починає залежати від розміру і зменшується з ним. Зменшення температури плавлення може скласти кілька сотень градусів.

Для більшості матеріалів зміна T починається в області діаметра частинок 50 нм, нижче якого відбувається різке зменшення температури плавлення (рис. 1.1).

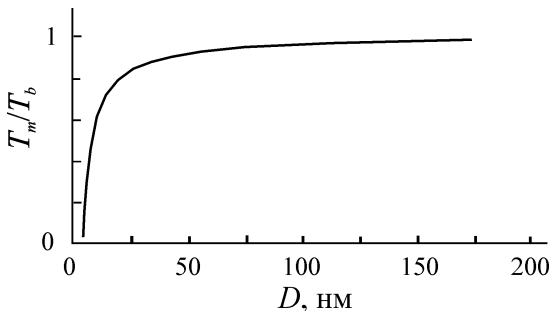


Рисунок 1.1 - Крива залежності нормованої температури плавлення золота від діаметра наночастинок D (T_b - температура плавлення об'ємного кристала)

Радіальна функція розподілу

Найважливішою характеристикою атомної структури конденсованих середовищ є радіальна функція розподілу (РФР). Вона характеризує кореляцію в розташуванні частинок газу, рідини або твердого тіла і визначається нижченаведеними чином.

Нехай система з N однакових атомів займає обсяг V . Виберемо в ньому два елементи обсягу dV_1 і dV_2 , що фіксуються радіусвекторами R_1 і R_2 (рис. 1.2). Якщо взаємне розташування атомів хаотичне, тобто некорреліровані, то ймовірність того, що атом 1 знаходиться в елементі обсягу dV_1 , а атом 2 в той же час знаходиться в елементі dV_2 , через незалежності їх положень дорівнює

$$dP(\vec{R}_1, \vec{R}_2) = \frac{dV_1}{V} \frac{dV_2}{V}.$$

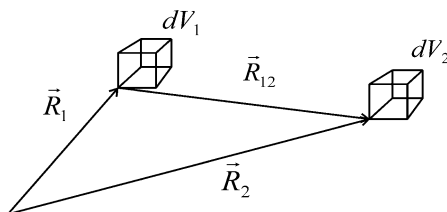


Рисунок 1.2 - До визначення радіальної функції розподілу

За результатами комп'ютерного моделювання РФР можна розрахувати наступним чином. Положення всіх атомів даної системи записують у файл. З атомів складають всілякі пари і розраховують відстані між частинками в парах. Проміжок відстаней від 0 до R_{max} , максимального відстані, що розділяє пари, ділиться на малі інтервали $(R_i, i R_{i+1}), i=1, 2, \dots, K$. Підраховується кількість пар n_i , відстань між якими лежить в кожному з цих інтервалів. Якщо повне число пар дорівнює n , то середнє число пар, що припадають на кожен інтервал, дорівнюватиме n/K , тоді відношення дійсної кількості пар в інтервалі n_i до середнього числа пар i буде представляти собою відносну ймовірність того, що відстані між парами атомів будуть укладені в цьому інтервалі: $f_i = n_i / p_0$. Можна побудувати гістограму цієї функції, яка і буде представляти собою наближення до РФР. Чим більше число атомів в системі і менше відрізки, на які розбивається область зміни відстаней, тим ближче буде ця гістограма до безперервної функції $g(R)$.

Визначення температури плавлення об'ємних матеріалів і наночастинок

Зважаючи на велику роль поверхневих атомів, що володіють підвищеною енергією, в наночастицях при нагріванні можливо гетерогенне зародження рідкої фази поблизу поверхні, особливо у вершин багатогранників, які утворюють частинки. Тому фазові переходи плавлення і кристалізації в малих частках можна моделювати їх безпосереднім нагріванням або охолодженням. Для того щоб при нагріванні утворився зародок рідкої фази, відбулося плавлення всього кристала і встановилася рівновага в рідкій фазі, необхідний досить тривалий, але цілком доступний в масштабах

моделювання час. Наприклад, для кластерів, що містять до 1000 атомів, досить порядку 4×10^4 кроків, щоб відбувалося плавлення. На підставі результатів моделювання малих частинок при різних температурах будується калорическая крива. За стрибка в калориметричній кривій можна визначити температуру плавлення $T_m(d)$.

Алгоритм моделювання наведено нижче. будується вихідна модель частинки із заданою формою і розміром. Проводиться релаксація (мінімізація енергії) при $T = 0$ К. Потім проводиться релаксація системи при різних постійних значеннях температури. При температурах, далеких від температури плавлення, зазвичай буває достатньою релаксація в інтервалі часу порядку 30-50 пс. Після цього визначається повна енергія атомної системи, що дорівнює сумі потенційної і кінетичної енергій всіх атомів, яка являє собою внутрішню енергію малої частки. Проробивши це для ряду значень температури, будують калорическую криву, аналіз якої і дозволяє знайти температуру плавлення.

Приклад такого дослідження наведено на рис. 1.3, на якому зображені калорическі криві малих частинок золота, що містять 219, 477, 879 атомів, і об'ємного кристала (з огляду на описаного вище відмінності плавлення малих частинок і об'ємного кристала, для останнього калориметрична крива визначена іншим способом).

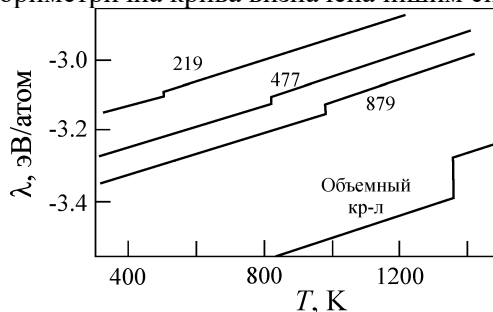


Рисунок 1.3 - Внутрішня енергія як функція температури для малих частинок і об'ємного кристала золота

2 ПРАКТИЧНА ЧАСТИНА

1. Для того щоб отримати комп'ютерну модель малої частки, скористайтесь програмою побудови `nanocluster.exe`. Побудуйте і збережіть малу частку нікелю з радіусом $R = 1,5$ нм.

2. Напишіть список команд для досягнення рівноважного стану системи при заданій температурі і визначення внутрішньої енергії при цій температурі. Внутрішню енергію слід визначати розподілених на досить великій кількості тимчасових кроків після досягнення рівноваги (оцінити середнє значення можна, побудувавши графік залежності від часу повної енергії в процесі моделювання). При температурах, свідомо більш низьких або більш високих, ніж точка плавлення кристала, кількість тимчасових кроків може бути маленьким, але в області температури плавлення слід взяти якомога більше число кроків МД (Не менше 30 тисяч).

3. Використовуючи команду `xmd`

`write file filename RDF nbin rmin rmax,`

розрахуйте радіальну функцію розподілу (РФР) для двох станів малої частки: твердої і рідкої. Ця команда розраховує і виводить в файл з назвою `filename` число атомних пар з відстанню, укладеними в кожному з `nbin` підінтервалів, на які ділиться цікавить нас відрізок відстаней між значеннями в ангстремах `rmin` і `rmax`, які вказує користувач. У зазначений файл виводиться наступна інформація: на першому рядку друкуються слово `RDF`, значення `nbin`, `rmin` і `rmax`; на кожній з наступних рядків друкуються значення відстані, $(R_k + R_{k+1})/2$, число пар M_k і кумулятивна сума чисел пар у всіх інтервалах від 1 до k . Для того щоб розрахувати РФР за цими результатами, необхідно скористатися формулою

$$g(R_i) = \frac{\Delta M_i}{M} \frac{V}{4\pi R_i^2 \Delta R_i},$$

де $M = N(N-1)/2$ - число пар в системі;

$$V = 4\pi R^3 / 3.$$

4. Для побудованої моделі малої частки провести моделювання для значень температури $T = 400, 600, 800, 1000, 1200, 1350, 1400, 1600, 1800$ і 2000 К.

5. Побудувати графік залежності внутрішньої енергії від температури (калорическу криву) і по ньому визначити приблизне значення температури плавлення малої частки.

6. Зіставити отримане значення з температурою плавлення об'ємного кристала нікелю, який становить $T_b = 1740 \text{ K}$.

З ЗМІСТ ЗВІТУ

Звіт повинен бути оформлений у вигляді файлу Winword і містити:

- коротку теорію;
- постановку завдань;
- командний файл з коментарями;
- графіки зміни повної внутрішньої енергії частинок при кожній температурі з числом кроків і рівноважне значення енергії;
- калорическую криву і розраховане значення температури плавлення;
- висновки.

Лабораторна робота № 4 **МОДЕЛЮВАННЯ НАНОКРИСТАЛІЗАЦІЇ АМОРФНИХ** **МЕТАЛІВ ПРИ ДЕФОРМАЦІЇ**

Мета роботи: вивчити зміни атомної структури аморфних металів при деформації; виробити навички самостійного вивчення першоджерел з моделювання процесів нанотехнології, опублікованих в наукових журналах англійською мовою.

Використовувані програми:

- програма XMD;
- програма створення розрахункової осередки р ц. к. кристала;
- набір табульованих потенціалів для г. ц. к. металів;
- програма візуалізації атомних структур RasMol.

Використовуваний джерело: стаття Lee B.-J., Lee C.S., Lee J.C. Stress induced crystallization of amorphous materials and mechanical properties of nanocrystalline materials: a molecular dynamics simulation study. - ActaMaterialia, 2003. - V. 51. - P. 62336240.

1 ТЕОРЕТИЧНА ЧАСТИНА

Кристалізація аморфних сплавів є одним з важливих процесів нанотехнології, оскільки вона дозволяє управляти їх структурою на нанорозмірному рівні. Цей процес лежить в основі вельми поширеного методу отримання нанокристалів. При певних умовах відпалу, що сприяють утворенню центрів кристалізації, аморфні сплави кристалізуються з утворенням нанокристалів. Контролюючи умови відпалу, можна змінювати розміри зерен від 2-3 до 100 нм і більше.

Ряд експериментальних досліджень показав, що нанокристалізація аморфних сплавів може бути активізована шляхом пластичної деформації. Є також дані молекулярно-динамічного моделювання кристалізації аморфних сплавів при деформації.

Дана практична робота по суті є повторенням однієї з таких робіт. Для її виконання слід самостійно вивчити статтю використовуваного джерела в оригіналі.

2 ПРАКТИЧНА ЧАСТИНА

У зазначеній роботі вивчається кристалізація аморфного нікелю при деформації розтягуванням і механізми пластичної деформації утворення нанокристалів.

В якості вихідної структури готують зразок аморфного нікелю у вигляді пластинки розмірами $8 \times 10 \times 2 \text{ нм}^3$ (в напрямках x , y , z). Для цього кристалічний нікель витримують протягом декількох десятків пикосекунд при температурі вище температури плавлення, потім система швидко охолоджується до температури 300 К. Для моделювання деформації розтягуванням зразок пружно подовжується на 1% в напрямку осі x , після чого проводиться МД-релаксація протягом 10 пс при фіксованому новому розмірі зразка в цьому напрямку. Розтягування моделюється повторенням пружного подовження і МД-релаксації. Швидкість деформації, відповідна цій процедурі, $\dot{\epsilon} = 10^{(-2)} / 10^{(-11)} \text{ с} = 10^9 \text{ с}^{(-1)}$, дуже велика в порівнянні з експериментально використовуваними швидкостями, що обумовлено недоліком МД - обмеженим інтервалом часу, доступним для моделювання. Всі розрахунки проводяться при температурі $T = 300 \text{ К}$.

При підготовці аморфного зразка моделювання здійснюється за періодичністю граничних умов за всіма трьома напрямками; при моделюванні деформації використовуються періодичні граничні умови в напрямках x і z , а в напрямку y система має вільні поверхні і кінцевий розмір, який може змінюватися в процесі деформації. Розмір осередку в напрямку z фіксований. Таким чином, моделюється ударна деформація розтягуванням аморфної тонкої плівки, нескінченно протяжної в напрямках осей x і z і має товщину 10 нм по осі y , в напрямку осі x в умовах плоскої деформації.

В роботі використані два потенціалу, засновані на модифікованому методі зануреного атома, що дозволило авторам визначити вплив потенціалу на процес. Явище кристалізації спостерігалось в обох випадках, але були кількісні відмінності, пов'язані з відмінністю потенціалів. Оскільки завдання даної лабораторної роботи - якісне повторення результатів *використовуваного джерела*, буде використаний один потенціал, побудований на простому методі зануреного атома.

Грунтуючись на наведеному вище викладі і вивченні оригінальної статті і використовуючи підготовлені для виконання роботи програми побудови комп'ютерної моделі ідеального р.ц.к. кристала, розрахунку РФР і приблизні командні файли для створення моделі аморфного металу і його деформації, самостійно виконати описані дослідження.

Для моделювання процесу деформації рекомендується скористатися командою SCALeabc, яка множить на величини a , b і c відповідно x -, y - і z - координати всіх частинок і розміри розрахункової осередки у відповідних напрямках. Для того щоб розтягнути аморфний «зразок» уздовж осі x , а в інших напрямках розміри залишити незмінними, можна покласти $a > 1$, $b = c = 1$. Скласти цикл команд з 40 кроків, в кожному з яких зразок розтягується на невелику величину, після цього проводиться МД-релаксація протягом не менше ніж 2000 кроків так, щоб загальна деформація склала величину порядку 1,5.

З ЗМІСТ ЗВІТУ

Звіт по практичній роботі повинен детально описувати всі етапи дослідження.

1. Побудова моделі аморфного металу, доведення аморфного стану отриманої моделі.
2. Моделювання деформації, отримані структури при декількох значеннях деформації.
3. Радіальні функції розподілу зразків, підданих деформації 40% і статичної витримці.
4. Висновки з результатів дослідження.

СПИСОК РЕКОМЕНДОВАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

- 1 Яворський Н.Б., Теслюк В.М., Литвинова Є.І. Комп'ютерні методи в інженерії мікроелектромеханічних систем: навчальний посібник. - Режим доступу: <http://cad.lp.edu.ua/project/b1.pdf>
- 2 М. Лобур, М. Мельник. Основи мікросистемних пристроїв: навчальний посібник. - Режим доступу: <http://cad.lp.edu.ua/project/b3.pdf>
- 3 Семенець В. В., Невлюдов І. Ш., Палагін В. А. Введення в мікросистемну техніку та нанотехнології: підручник для студ. вищ. навч. закл.: затв. МОНУ. – Х.: Компанія СМІТ, 2011. – 416 с.
- 4 Норенков И.П. Автоматизированное проектирование: учебник для студентов вузов. – 2-е изд., перераб. и доп. – М., 2000. – 188 с. – Информатика в техническом университете
- 5 Норенков И. П. Основы автоматизированного проектирования: учебник для студентов вузов. – 2-е изд., перераб. и доп. – Москва: Изд-во МГТУ им. Н. Э.Баумана, 2002. – 336 с. – Информатика в техническом университете
- 6 Советов Б. Я., Яковлев С. А. Моделирование систем: учебник для вузов / 3-е изд., перераб., доп. – Москва: Высш.шк, 2001. – 343 с.
- 7 В.Теслюк, А.Зелінський, В.Каркульовський, Я.Василук. Розширене проектування мікросистемних пристроїв: Навчальний посібник. - Режим доступу: <http://cad.lp.edu.ua/project/m6.pdf>
- 8 В. Хаханов, І. Хаханова, Є. Литвинова, М. Лобур, Г. Хаханова. Схемотехнічне проектування і моделювання НВІС. Підручник. – Режим доступу: <http://cad.lp.edu.ua/project/m1.pdf>
- 9 Качан О. Я. Принципы формирования микро- и наносистем. – 2016. – 284 с.
- 10 П. Кособуцький, М. Лобур, С. Чумаченко. Статистичне проектування мікроелектромеханічних систем. Навчальний посібник. – Режим доступу: <http://cad.lp.edu.ua/project/m2.pdf>
- 11 Мироненко И. Г., Суходольский В. Ю., Холуянов К. К. Автоматизированное проектирование узлов и блоков РЭС

- средствами современных САПР: учеб. пособие для вузов / под ред. И. Г. Мироненко. – Москва: Высшая школа, 2002. – 391 с.
- 12 Нано- и микросистемная техника. От исследований к разработкам: сборник статей / под ред. П.П. Мальцева. – М.: Техносфера, 2005. – 592 с.
- 13 І. Ш. Невлюдов, В. А. Палагін. Мікросистемна техніка та нанотехнології. – Режим доступу: <http://openarchive.nure.ua/bitstream/document/9555/1/MST.pdf>