

Государственное образовательное учреждение
Высшего профессионального образования
Московский государственный строительный университет
Ассоциация московских вузов

Утверждаю
Проректор по УМР и МД

_____ Гагин В.И.
«__» _____ 2009 г.

ОТЧЕТ

о выполнении подраздела мероприятий по социальному
обслуживанию населения в части предоставления
образовательных услуг жителям города Москвы

Подраздел №11.5.2.4. *«Формирование инновационных
направлений исследований и разработок в области
строительных нанотехнологий и материалов»*
(Научно-информационный материал)

Научный руководитель подраздела	Проф.каф. физики МГСУ Должность	Телефон	Подпись Дата	Павлючко А.И. ФИО
Заместитель научного руководителя подраздела	М.н.с. НИЦ «Информ- техпроект» Должность	Телефон	Подпись Дата	Муминова С.Р. ФИО

Москва, 2009 г.

Под научным руководством и при непосредственном участии проф. Каф. физики Павлючко А.И. (отв.исполнитель М.н.с. НИЦ «Информтехпроект» Муминова С.Р.) в рамках подраздела 11.5.2.4. были разработаны, коллегиально рассмотрены и протестированы, а также вручены для практического использования заинтересованным специалистам строительного комплекса Москвы научно-информационные и научно-образовательные материалы по вопросам формирования инновационных направлений исследований и разработок в области строительных нанотехнологий и материалов на примере защитных нанопокровов строительных металлоконструкций.

СОДЕРЖАНИЕ

1. Введение	4
2. Основная часть	7
2.1. Разработка численной модели структуры напыляемой поверхности	7
2.2 Разработка алгоритмов расчета свойств напыляемой поверхности с помощью методов квантовой молекулярной динамики	16
2.3. Численные исследования взаимодействия наночастиц различной природы и размеров с защищаемым металлом	24
3. Заключение	48
4. Рекомендуемая литература	50

ВВЕДЕНИЕ

Научно-техническая революция 21 века в значительной степени связана с широким внедрением нанотехнологий и наноматериалов в различных областях науки и техники и, в первую очередь, в ведущих отраслях машиностроения, в индустрии строительных материалов, в промышленном и гражданском строительстве [1–42]. В частности, проведенные литературные и патентные исследования свидетельствуют, что металлы с многослойными композитными нанопокрывтиями, создаваемых на поверхности металлов с помощью электромагнитных инжекторов наночастиц, могут обладать уникальными эксплуатационными и прочностными свойствами.

В настоящее время на практике используются два метода упрочнения материалов.

Первый из них связан с уменьшением в материале числа дислокаций и переводе его в монокристаллическое состояние.

Второй метод связан с значительным увеличением числа дислокаций в материале, значительным уменьшением размеров отдельных кристаллов до наноразмеров и переводом материала в нанокристаллическое состояние. Например, формирование (спекания) материала из нанопорошков позволяет получать уникальные прочностные и эксплуатационные характеристики. Однако этот метод достаточно сложен и непригоден для получения используемых в строительстве крупноразмерных и сложных металлических профилей.

В рамках нашего проекта было проведено изучение закономерностей формирования нанопокрывтий, создаваемых на поверхности металлов с помощью инжектора, ускоряющего наночастицы с помощью электромагнитных волн сантиметрового диапазона.

При соприкосновении движущейся наночастицы с напыляемой поверхностью одновременно протекает несколько физических процессов.

Во-первых, направленная скорость движения атомов наночастицы переходит в ненаправленные (тепловые) скорости движения атомов наночастицы и напыляемой поверхности. Иными словами, кинетическая энергия движения наночастицы превращается в тепловую энергию движения атомов. Следует отметить, что скорость этого превращения очень велика и время полного превращения кинетической энергии в тепловую составляет, в зависимости от размеров наночастицы, от нескольких десятков до нескольких сотен пикосекунд.

Во-вторых, полученная тепловая энергия может привести к полному или частичному расплавлению наночастицы и частичному расплавлению соприкасающейся с ней напыляемой поверхностью. При этом следует учитывать тот факт, что температура плавления наночастиц меньше, чем макрочастиц и быстро падает с уменьшением размеров наночастицы. Это связано с тем, что в наночастице значительное число атомов находится на поверхности и, поэтому, связано меньшим числом связей с другими атомами наночастицы. Если скорость движения наночастицы невелика и в результате выделяется небольшая тепловая энергия, то ее недостаточно для расплавления наночастицы и напыляемой поверхности. В этом случае может происходить лишь частичное разрушение кристаллической структуры наночастицы.

В третьих, за счет небольших размеров наночастицы происходит быстрая передача скоростей движения ее атомов внутренним слоям металла. То есть, происходит быстрое охлаждение наночастицы и соприкасающейся с ней напыляемой поверхностью. Время этого охлаждения мало и всего лишь в 10 раз больше скорости превращения кинетической энергии движения наночастицы в тепловую энергию. В

зависимости от размеров наночастицы это время лежит в интервале от нескольких сотен до нескольких тысяч пикосекунд.

В четвертых, силы взаимодействия между атомами наночастицы и напыляемой поверхности стремятся упорядоченно расположить атомы наночастицы относительно атомов напыляемой поверхности. Этот процесс эффективен лишь в первое время взаимодействия наночастицы с напыляемой поверхностью, когда еще велика скорость теплового движения атомов. Если с течением времени, когда скорость теплового движения атомов существенно понизится, будет сохранено (заморожено) неправильное (аморфное) расположение атомов, то оно будет далее сохранено на протяжении длительного промежутка времени. Отметим, что эффективность упорядочивающего действия межатомных сил быстро падает с увеличением числа атомов в наночастице. Иными словами, чем больше атомов, тем труднее (менее вероятно) правильно их расположить за небольшое время, когда еще достаточно велика скорость их теплового движения.

Скорость протекания данных четырех физических процессов существенно зависит от размеров наночастицы, ее начальной температуры и скорости движения. Поэтому, получаемое состояние напыляемой поверхности металла существенно зависит от параметров технологического процесса.

С помощью численных расчетов методами молекулярной динамики нами было показано, что меняя эти параметры можно получать различное (нанокристаллическое и аморфное) состояние напыляемой поверхности и существенно увеличивать ее поверхностную прочность. В результате были определены технологические параметры работы инжектора наночастиц необходимые для получения нанопокровов с заданными свойствами.

2. ОСНОВНАЯ ЧАСТЬ

2.1. Разработка численной модели структуры напыляемой поверхности

При описании взаимодействия напыляемых частиц с защищаемой поверхностью удобно пользоваться методами молекулярной динамики, так как исходная задача является динамической, включающей в себя движение наночастицы и ее взаимодействие с поверхностью вещества.

В основе метода молекулярной динамики лежат следующие предположения [43]:

1) Предполагается, что для описания движения молекул может быть применена классическая механика.

2) Предполагается, что возможно представление межмолекулярного взаимодействия в форме классических потенциальных сил.

3) Предполагается, что точное знание траектории движения частиц системы на больших промежутках времени не является необходимым для получения результатов макроскопического (термодинамического характера). Это предположение связано с тем, что из-за ошибок округления при вычислениях на ЭВМ и, что самое главное, из-за сильной неустойчивости уравнений движения получение точных траекторий частиц в численном эксперименте в принципе невозможно.

4) Предполагается, что симметричные функции координат (например, полная кинетическая энергия системы E) «почти постоянны» на многообразии $H = E$ (H – гамильтониан системы) и, что, следовательно, осреднение какой либо величины по части этого многообразия практически эквивалентно осреднению по всему многообразию, т.е. эквивалентно микроканоническому осреднению.

5) Предполагается, что среднее по части поверхности $H = E$ и среднее по времени от упомянутых выше величин совпадают.

Важным свойством метода молекулярной динамики является его замкнутость. Варьируя при постоянном значении полной энергии системы начальные данные, число частиц, форму пространства, в котором они находятся, а также меняя точность интегрирования системы уравнений движения, возможно оставаясь все время в рамках используемого подхода, т.е. только средствами численного эксперимента, получить представление о качестве того или иного результата. Замкнутость метода молекулярной динамики и очевидная простота его оснований по сравнению со статистико-механическими теориями, описывающими такую же физическую систему, позволяют использовать метод молекулярной динамики для проверки последних наравне с обычным физическим экспериментом.

За полувековой период своего развития метод молекулярной динамики продемонстрировал исключительно большие возможности, позволив успешно решить большое число задач, не доступных традиционным подходам статистической механики, для одноатомных, многоатомных и полимерных систем во всех известных фазовых состояниях.

Одной из областей применения метода молекулярной динамики являются задачи связанные динамикой взаимодействия металлических систем, в том числе с нашей задачей описывающей взаимодействие движущейся наночастицы с поверхностью вещества.

Опишем, далее, используемый нами алгоритм расчета.

Первым этапом решения задачи в методе молекулярной динамики является задание начальных условий, включающих в себя координаты и скорости каждой частицы. Генерация начальных условий является

отдельной и весьма нетривиальной задачей, так как начальное расположение частиц и их скорости существенно влияют на свойства полученного компьютерного материала. Задание начальных условий происходит на двух масштабных уровнях, которые условно можно назвать макро- и микроскопическим.

На макроскопическом уровне задается внешняя форма объектов моделирования и их макроскопические скорости. В нашем случае задается две группы атомов.

Первая (меньшая по своему числу) группа атомов задает напыляемую частицу. Предусмотрена вариация формы, размера и скорости движения напыляемой частицы относительно поверхности. Начальное расположение атомов в частице в большинстве случаев соответствует ее кристаллическому строению без дислокаций. Важной характеристикой частицы является ее скорость движения, так как она моделирует регулируемый технологический показатель процесса. При расчетах используются различные частицы с распределением по размерам соответствующим распределению по размерам нанопоршка, применяемого в технологическом процессе.

Вторая (большая по своему числу) группа атомов задает защищаемую поверхность. Предусматривается различное начальное расположение атомов в защищаемой поверхности соответствующее случаю попадания напыляемой частицы на кристаллический участок поверхности, на микротрещину или участок с дислокацией, а также вблизи микротрещины или участка с дислокацией.

При проведении расчетов предполагается использование в расчетах нанопорошков и защищаемых поверхностей с различным химическим составом атомов соответствующим, например, марке защищаемой стали.

На микроуровне задается небольшое хаотичное отклонение атомов от положения равновесия и скорости хаотического движения (тепловое движение). Скорость каждой частицы в начальный момент времени складывается из макроскопической скорости, мало изменяющейся от частицы к частице, и случайной компоненты, получаемой при помощи генератора случайных чисел. Случайная компонента характеризуется девиацией скоростей заданным значением среднеквадратического отклонения скорости от ее среднего значения, определяющим интенсивность хаотического (теплого) движения.

В наших расчетах предполагается задание различных скоростей хаотического (теплого) движения атомов напыляемой частицы и защищаемой поверхности соответствующее различным их температурам определяемым режиму технологического процесса.

Практика показывает, что качество расчетов получаемых в методе молекулярной динамики зависит от задания начальных случайных значений координат и скоростей атомов. Желательно, например, что бы случайное распределение атомов по скоростям было близко к максвелловскому распределению.

Существуют различные алгоритмы задания начальных случайных значений координат и скоростей атомов. Вычислительная практика показала, что удобен следующий прием. В начале координаты и скорости всех атомов задаются соответствующими их правильному (макроскопическому) значению. Далее для небольшого числа атомов, в соответствии с датчиком случайных чисел задаются скорости отличные от их макроскопических скоростей. Это отличие должно быть таким, что бы суммарные кинетические энергии этих атомов равнялись энергии теплового движения атомов напыляемой частицы и защищаемой

поверхности соответствующее их температурам в технологическом процессе.

После этого делается небольшое число (от 10 до 100) шагов предварительного цикла получения новых координат и скоростей атомов метода молекулярной динамики. При этом используется время интегрирования намного большее, чем в основном цикле получения новых координат и скоростей атомов. Обычно этого бывает достаточно, чтобы все результирующие скорости были не равны нулю, и, более того, имелось распределение молекул по скоростям близкое к максвелловскому распределению. Координаты атомов при этом также перемешиваются, образуя почти случайное распределение, так как время интегрирования берется таким, чтобы на каждом шаге удерживалось не более одного – двух верных (по сравнению с точным решением уравнений движения) знаков.

Моделирование процесса взаимодействия напыляемой наночастицы с защищаемым веществом проводится в рамках N-V-T ансамбля, где N – число атомов в «базовой» кубической частице объема V при температуре T при заданном потенциале взаимодействия $U(r)$. Последний является сферически-симметричным парным потенциалом $U(r_{ij})$, где $r_{ij} = |r_i - r_j|$ – расстояние между атомами i и j. Выбор потенциала взаимодействия частиц является наиболее важным этапом построения численной модели и, как правило, вызывает немало дискуссий. Взаимодействие частиц описывается посредством потенциалов взаимодействия, основным свойством которых является отталкивание при сближении и притяжение при удалении.

Несомненное преимущество метода частиц по сравнению с методами, основанными на концепции сплошной среды, заключается в том, что он требует значительно меньше априорных предположений о свойствах материала. Действительно, использование только простейшего

потенциала взаимодействия (например, типа Леннарда-Джонса) позволяет моделировать такие сложнейшие эффекты, как пластичность, образование трещин, разрушение, температурное изменение свойств материала, фазовые переходы и др. Для описания каждого из этих эффектов в рамках сплошной среды требуется отдельная теория, в то время как при моделировании методом частиц эти эффекты получаются автоматически, в результате интегрирования уравнений движения. В частности, необратимость механических процессов достигается за счет перехода механической энергии длинноволновых движений материала в тепловую энергию хаотического движения частиц.

При решении уравнений в методе молекулярной динамики используется численное решение системы уравнений, описывающих движение отдельных атомов, с силами соответствующими выбранному потенциалу взаимодействия. Повышение точности численного решения системы дифференциальных уравнений по схеме Коши обеспечивается за счет перехода от системы уравнений Ньютона к системе уравнений Гамильтона, в которой координаты и скорости движения частиц рассматриваются как независимые переменные. При этом происходит понижение порядка системы дифференциальных уравнений со второго до первого порядка при удвоении числа уравнений.

В нашем алгоритме предусмотрено использование граничных условий моделирующих большие размеры защищаемой поверхности по сравнению с напыляемой на нее наночастицей. Математически это задается в виде «непроницаемых стенок», отражающих все движущиеся на нее атомы. Для этого вводится потенциал взаимодействия между атомом и неподвижной стенкой. Быстрый рост этого потенциала при сокращении расстояния между атомом и стенкой обеспечивает отталкивание движущихся на нее атомов.

При проведении вычислений по методу молекулярной динамики весьма важным показателем является длительность счета (т.е. числа шагов), при котором сохраняется возможность осреднения по части поверхности $H = E$. Увеличение времени интегрирования приводит не только к дрейфу фазового вектор (координата, скорость) системы по различным (хотя и близким) фазовым траекториям на поверхности $H = E$, но и к схождению этой поверхности. Алгоритма метода молекулярной динамики хотя формально и сохраняют неизменным значение полной энергии системы E . Однако, накопление погрешностей при численном интегрировании системы уравнений движения приводят к медленному изменению полной энергии системы. Поэтому возникает необходимость применения алгоритмов сохраняющих полную энергию системы и позволяющих увеличивать время интегрирования, оставаясь на поверхности $H = E$. Такой алгоритм производит контроль энергии системы через некоторое, например, через 1000, шагов интегрирования и коррекцию скоростей движения частиц таким образом, что бы полная энергия системы возвращалась к ее начальному значению.

Результатом вычислений производимых в методе молекулярной динамики являются траектории движения атомов, которые в наших расчетах имеют самостоятельный интерес, так как они определяют результат взаимодействия наночастицы с защищаемой поверхностью. В используемом нами алгоритме предусматривается снятие через фиксированные промежутки времени серии «снимков» определяющих координаты атомов.

Анализ данных «снимков» позволяет сделать вывод о характере взаимодействия напыляемой наночастицы с защищаемой поверхностью: останется ли наночастица связанной с поверхностью либо «отскочет» от нее, какие изменения произойдут в структуре кристаллической решетки

защищаемой поверхности после ее взаимодействия с наночастицами и после возможного внедрения в нее наночастиц, а также результирующую нанокристаллическую структуру защищаемой поверхности.

В дальнейшем предусмотрен анализ прочностных свойств получаемых нанокристаллических поверхностей защищаемого вещества с помощью разработанных нами алгоритмов, описанных выше в предыдущем разделе.

Используемые нами алгоритмы молекулярно-динамического моделирования допускают распараллеливание. Это позволяет сокращать время вычислений при использовании кластеров, состоящих из взаимодействующих друг с другом компьютеров. При этом возможно использование двух различных способов распараллеливания.

В первом случае распараллеливается алгоритм расчета сил, действующих на частицы, на выполнение которого приходится основное время выполнения программы (более 80%). Этот метод является универсальным и может применяться для любых программ молекулярной динамики. Метод распараллеливания заключается в следующем. На каждый параллельно выполняющийся процесс выделяется определенное число частиц, для которых рассчитываются силы и интегрируются уравнения движения. После каждого шага по времени процессы должны обмениваться друг с другом обновленными координатами частиц. Процесс обмена может быть достаточно долгим в случае использования медленных сетевых протоколов. Именно эта причина является препятствием для эффективного распараллеливания программ молекулярной динамики вообще. Однако, если число частиц достаточно велико, то данный метод все же дает ощутимый рост производительности при расчете на кластере по сравнению с расчетом на персональном компьютере.

Второй метод распараллеливания основан на том, что большинство расчетов в методе молекулярной динамики требует усреднения по начальным условиям. Траектории с различными начальными условиями могут рассчитываться параллельно на разных вычислительных узлах. Этот метод не требует постоянного обмена данными между процессами, и затраты времени на сетевые коммуникации оказываются минимальны. При реализации данного метода один из вычислительных узлов выделяется в качестве диспетчера. В функции диспетчера входит формирование начальных условий, пересылка их остальным процессам, сбор результатов, их последующее усреднение и дополнительная обработка. При этом диспетчером может являться узел с относительно медленным процессором, но подключенный к наиболее быстрой сетевой шине.

В производимых нами вычисления взаимодействия напыляемых наночастиц с защищаемой поверхностью эффективно использование второго способа распараллеливания, так как данные расчеты предусматривают девиацию размеров, форм, скоростей движения напыляемых наночастиц, девиацию температур напыляемых наночастиц и защищаемой поверхности, а также мест попадания напыляемых наночастиц в защищаемую поверхность.

2.2 Разработка алгоритмов расчета свойств напыляемой поверхности с помощью методов квантовой молекулярной динамики

Для расчета прочностных свойств нанопокровтий, создаваемых на поверхности защищаемого металла с помощью ионных пушек, авторами отчета был создан алгоритм расчета с использованием квантовой молекулярной динамики. В основе этого алгоритма лежат следующие положения.

1) Атомы в твердых кристаллических телах не имеют поступательного и вращательного движения, а совершают только колебательные движения относительно локальных минимумов энергии.

2) Атомы являются квантовыми объектами и, поэтому, не имеют траекторий движения. Можно знать лишь вероятность обнаружения атома в той или иной области пространства.

3) Иногда атомы могут совершать дальние «перескоки» из одного локального минимума энергии в другой. Вероятность такого «перескока» определяется кинетической энергией движения атома и высотой потенциального барьера разделяющего локальные минимумы энергии.

4) Точное решение уравнения Шредингера, описывающее большую нанокристаллическую систему невозможно. Поэтому, необходимо использование приближенных полуэмпирических схем, описывающих движения атомов.

5) В нашей схеме вероятность «перескока» атома из одного локального минимума энергии в другой определяется вероятностью наличия у него определенной кинетической энергии E и высотой потенциального барьера ΔE , разделяющего локальные минимумы энергии.

6) Граничные условия, задающие особенности решаемой задачи, задаются поведением внешних атомов, ограничивающих рассматриваемый нанокристалл. Задавая такие атомы неподвижными и медленно (адиабатически) меняя расстояния между этими атомами можно моделировать силы растяжения или сжатия действующие на нанокристалл.

7) Высота потенциального барьера ΔE , разделяющего локальные минимумы энергии определяется координатами атомов и потенциальной энергией взаимодействия атомов $U(r)$. Последняя является сферически-симметричным парным потенциалом $U(r_{ij})$, где $r_{ij} = |r_i - r_j|$ - расстояние между атомами i и j , имеющим один минимум энергии, например, потенциалом типа Ленард-Джонса.

Рассмотрим, далее, особенности реализации этого метода при проведении вычислений на ЭВМ.

На первом этапе решения задачи определяются начальные координаты атомов, соответствующие строению рассматриваемого нанокристалла. При этом производится задание атомов в узлах соответствующей кристаллической решетки нанокристалла. Предполагается задание дислокаций в кристаллической решетке нанокристалла и микротрещин между отдельными нанокристаллами.

Химический состав атомов задается маркой рассматриваемого металла. Возможно задание отдельных нанокристаллов различного кристаллического и химического строения, например гетороструктур, состоящих из нанокристаллов титана и железа.

Исходя из химического состава двух взаимодействующих атомов программа определяет коэффициенты потенциала взаимодействия между ними.

Далее пользователем программы задается ось вдоль которой будет производится сжатие или растяжение нанокристалла. После этого

программой определяются неподвижные атомы на двух противоположных плоскостях, перпендикулярных оси сжатия или растяжения. В процессе работы программы производится медленное (адиабатическое) изменение координат этих атомов. Силы сжатия или растяжения нанокристалла определяются суммой сил действующих на одну из граней с неподвижными атомами со стороны всех остальных подвижных атомов.

Кроме того на начальном этапе пользователем вводится начальная термодинамическая температура системы. По этой температуре программа определяет сумму начальных кинетических энергий колебательных движений атомов.

Основной этап выполнения программы сводится к циклическому перебору всех подвижных атомов и вычислению для них вероятностей переходов из одного локального минимума энергии в другой. При этом для каждого из подвижных атомов выполняется следующая последовательность действий.

1) С помощью генератора случайных чисел задается новое возможное положение атома в нанокристалле. Для уменьшения времени расчета рассматриваются лишь те возможные положения, расстояния от которых до старого положения не превышают величину L , равную, например, периоду кристаллической решетки.

2) Рассчитывается высота потенциального барьера ΔE , разделяющего локальные минимумы энергии по изменению потенциальной энергии атома при переходе из старого в новый в новое положение. Для ускорения вычисления этой величины предусмотрено вычисление потенциальной энергии взаимодействия только с теми атомами, расстояния до которых не превышают некоторое критическое расстояние R , определяемое конкретным видом потенциала взаимодействия между атомами.

3) Для данного атома задается (с помощью генератора случайных чисел) случайное значение кинетической энергии его движения E и вычисляется вероятность нахождения у атома этого значения энергии по формуле

$$w_1 = \exp(-E/kT),$$

4) Вычисляется вероятность перехода атома из старого в новый локальный минимум энергии по формуле

$$w_2 = \exp(-\Delta E/E).$$

где k – постоянная Больцмана и T – термодинамическая температура нанокристалла.

5) С помощью генератора случайных чисел получается некоторое случайное число w , лежащее в диапазоне от 0 до 1. Если произведение вероятностей w_1 и w_2 превышает это число w , то тогда полагается, что атом перешел из старого в новый локальный минимум энергии.

6) Если атом перешел из старого в новое положение, то тогда программа запоминает новые координаты атома. Кроме того, уменьшается суммарная кинетическая энергия колебательных движений атомов на величину ΔE . По новой суммарной кинетической энергии колебательных движений атомов вычисляется новое значение термодинамической температуры рассматриваемого нанокристалла.

7) Шаги процедуры 1 – 6 выполняются до тех пор пока атом не перейдет в новое положение.

8) После завершения перебора всех атомов программа производит перестановку неподвижных атомов, соответствующих граням нанокристалла, в новые положения. Это позволяет моделировать силы растяжения или сжатия действующие на нанокристалл.

9) Через некоторое, заданное пользователем, полное число циклов по вычислению новых координат подвижных атомов вычисляются силы

сжатия или напряжения действующие на нанокристалл. Эти силы равны сумме сил действующих на одну из граней с неподвижными атомами со стороны всех остальных подвижных атомов. Для ускорения времени вычисления этой силы предусмотрено вычисление сил действующий на неподвижный атом со стороны только тех подвижных атомов, расстояния от которых до данного неподвижного атома не превышают некоторое критическое расстояние R , определяемое конкретным видом потенциала взаимодействия между атомами. После этого в некотором файле запоминаются координаты всех атомов, образующих «моментальный снимок» расположения атомов в кристалле.

Как видим, используемая нами процедура построена таким образом, что атомы будут, в основном, совершать небольшие колебательные движения относительно своих положений равновесия, определяемых локальным минимумом энергии, так как вероятность таких движений значительно выше, чем больших перемещений, за счет малых значений энергий ΔE и E . Если атом на предыдущем шаге отклонился от своего положения равновесия, то для следующего шага возрастает вероятность возврата его к данному положению равновесия, так как соответствующее этому перемещению изменение значения энергии ΔE имеет отрицательное значение, что соответствует переходу атома к локальному минимуму энергии.

И лишь изредка будут возникать условия для перехода атома из одного локального минимума энергии в другой приводя к возникновению или уничтожению дислокации в структуре нанокристалла. При повышении температуры вероятность таких процессов будет увеличиваться.

Описанный алгоритм приводит к тому, что при растяжении системы подвижные атомы будут двигаться вслед за неподвижными атомами, расположенными по граням нанокристалла. Возникающая при этом

избыточная потенциальная энергия деформации будет постепенно перераспределяться по всему объему кристалла.

Если в структуре кристалла имеется микротрещина, то вероятность перехода атома из одного локального минимума энергии в другой при растяжении кристалла в области микротрещины значительно выше, чем в теле кристалла. Это связано с тем, что в области микротрещины изменение высоты потенциального барьера ΔE разделяющего два локальных минимума энергии значительно ниже чем в теле кристалла, так как исходный локальный минимум энергии не глубок по своей величине. Данное обстоятельство обусловлено тем, что в области микротрещины атом связан не полным возможным числом химических (металлических) связей с другими атомами.

Таким образом, применяемая нами для решения задачи об определении прочностных свойств нанокристаллов квантовая молекулярная динамика по своей математической формулировке полностью соответствует физической картине явлений происходящих при этом явлений. Мы ожидаем, что предложенный нами алгоритм будет более эффективным (быстрым), чем традиционный метод молекулярной динамики. Это связано с тем, что в традиционном методе молекулярной динамики значительное время уходит на вычисление не существующих у реальных атомов характеристик – а именно траекторий движения.

Следует ожидать, что наш подход будет эффективным и при решении задач фазовых переходов, например, при изменении структуры кристаллической решетки при нагревании кристалла, или перехода его в жидкое состояние. Кроме того, предложенный здесь алгоритм применим не только к металлам, но и другим объектам, например, бетонам, аморфным телам, и так далее.

Результатов расчета по предложенному здесь алгоритму является зависимость силы действующей в нанокристалле от его удлинения (сжатия). Данная зависимость, дает полное описание прочностных свойств нанокристалла: предел прочности, предел текучести, участки пластической деформации и другие величины. Анализ данных «моментальных снимков», характеризующих мгновенное расположение атомов, позволяет сделать вывод о характере строения кристаллической решетки нанокристалла для данных состояний.

Описанный здесь алгоритм квантовой молекулярной динамики имеет возможности значительные резервы ускорения при реализации его в виде программ для ЭВМ. Например, можно значительно ускорить самую медленную часть алгоритма – вычисление потенциальной энергии взаимодействия заданного атома с другими атомами. Для этого можно разбить весь объем на ячейки равные нескольким периодам кристаллической решетки и хранить для каждой ячейки список попадающей в нее атомов и их декартовы координаты атомов. При вычислении потенциальной энергии взаимодействия заданного атома с другими атомами следует учитывать лишь те атомы, которые содержатся в одной ячейке с заданным атомом либо в соседних с ним ячейках. При переходе атома в другую ячейку его номер и декартовы координаты атомов переносятся в список соответствующей ячейки. Ячейки могут быть расположены в памяти в виде трехмерного массива, в соответствии с осями x , y , z декартовой системы координат. Поэтому не возникает проблемы поиска ячейки для заданного атома, так как она определяется его декартовыми координатами. Следует отметить, что данная процедура ускорения вычислений требует небольшого (двухкратного) увеличения объема используемой оперативной памяти.

Кроме того, описанный здесь алгоритм может быть эффективно распараллелен. Это позволяет добиться значительного ускорения его работы на кластере (суперкомпьютере, состоящего из нескольких взаимодействующих друг с другом процессоров). Это связано с тем, что вычисления новых координат для атомов могут производиться параллельно (независимо друг от друга) если атомы располагаются достаточно далеко друг от друга. Для этого нужно отдельным процессорам передавать на вычисление большие группы атомов, расположенным достаточно далеко друг от друга.

При использовании описанных выше ячеек, содержащих номера и координаты попадаемых в них атомов, следует передавать отдельным процессорам для вычисления атомы попадающие не в соседние ячейки. Для этого должен быть организован некоторый цикл, который в зависимости от числа используемых процессоров, делит ячейки на далекие друг от друга. Данный цикл, начальная организация данных и получение моментальных снимков должно производиться на главном (управляющем) процессоре кластера. А связанным с ним подчиненным процессорам нужно передавать на вычисление новые координаты отдельных атомов.

Перед началом вычислений главный процессор должен передать подчиненным процессорам номера и координаты передаваемых им на вычисления атомов. После завершения вычислений подчиненные процессоры должны передать главному процессору новые координатами атомов. Этот процесс обмена может быть достаточно долгим в случае использования медленных сетевых протоколов. Однако, если число атомов достаточно велико, то данный метод все же дает ощутимый рост производительности при расчете на кластере по сравнению с расчетом на персональном компьютере.

2.3. Численные исследования взаимодействия наночастиц различной природы и размеров с защищаемым металлом

Нами проводились численные исследования взаимодействия наночастиц различной формы и размеров с напыляемой металлической напыляемой поверхностью при использовании разработанного в ЗАО «Техносистема Н» инжектора наночастиц «Луч-5» (см. рис. 1), включающего в себя генератор электромагнитных волн сантиметрового диапазона, контейнер для наночастиц и волновод, в котором производится ускорение наночастиц электромагнитным полем.

Вычисления были проведены с использованием свободно распространяемого под лицензией GNU GENERAL PUBLIC LICENSE программного комплекса LAMMPS [44].

Для моделирования процессов, происходящих при напылении наночастиц на защищаемую поверхность, проводились вычисления взаимодействия железных и алюминиевых наночастиц с напыляемой поверхностью. При этом рассчитывалось взаимодействие наночастиц кубической и сферической формы с размерами 1, 5 и 10 нм и с числом атомов от нескольких сот до 10000 атомов с железной прямоугольной поверхностью с размерами 50 x 50 x 25 нм, содержащей от 220000 до 230000 атомов.

Нами рассматривались случаи попадания наночастицы на монокристалл железа, на дислокацию, представляющую собой границу раздела двух кристаллических зерен железа с различной ориентацией кристаллической решетки, и на микротрещину шириною 1 нм между двумя кристаллическими зернами железа с различной ориентацией кристаллической решетки.

Для моделирования параметров технологического процесса были изучены случаи низких (200 м/с), средних (600 м/с) и высоких (800 м/с) скоростей напыления наночастиц на защищаемый металл. При этом исследовались случаи низкой (300 К), средней (500 К) и высокой (700 К) температуры напыляемых наночастиц.

Всего было выполнено около 500 расчетов, соответствующих различной комбинации вышеперечисленных параметров. Данные расчеты позволили выявить общие физические закономерности, происходящие при напылении наночастиц на металл, а также количественные и качественные зависимости получаемых результатов от размера, формы, химической природы, скорости и температуры наночастиц. Были определены параметры технологического процесса напыления наночастиц, при которых происходит существенная модификация поверхности защищаемого металла и резкое увеличение его поверхностной прочности. Показано, что, меняя размеры, скорость и температуру наночастиц можно получать различную (нанокристаллическую и аморфную) структуру защищаемой поверхности.

При соприкосновении движущейся наночастицы с напыляемой поверхностью одновременно протекает несколько физических процессов.

Во-первых, направленная скорость движения атомов наночастицы переходит в ненаправленные (тепловые) скорости движения атомов наночастицы и напыляемой поверхности. Иными словами, кинетическая энергия движения наночастицы превращается в тепловую энергию движения атомов. Следует отметить, что скорость этого превращения очень велика и время полного превращения кинетической энергии в тепловую составляет, в зависимости от размеров наночастицы, от нескольких десятков до нескольких сотен пикосекунд.

Во-вторых, полученная тепловая энергия может привести к полному или частичному расплавлению наночастицы и частичному расплавлению соприкасающейся с ней напыляемой поверхностью. При этом следует учитывать тот факт, что температура плавления наночастиц меньше, чем макрочастиц и быстро падает с уменьшением размеров наночастицы. Это связано с тем, что в наночастице значительное число атомов находится на поверхности и, поэтому, связано меньшим числом связей с другими атомами наночастицы. Если скорость движения наночастицы невелика и в результате выделяется небольшая тепловая энергия, то ее недостаточно для расплавления наночастицы и напыляемой поверхности. В этом случае может происходить лишь частичное разрушение кристаллической структуры наночастицы.

В третьих, за счет небольших размеров наночастицы происходит быстрая передача скоростей движения ее атомов внутренним слоям металла. То есть происходит быстрое охлаждение наночастицы и соприкасающейся с ней напыляемой поверхностью. Время этого охлаждения мало и всего лишь в 10 раз больше скорости превращения кинетической энергии движения наночастицы в тепловую энергию. В зависимости от размеров наночастицы это время лежит в интервале от нескольких сотен до нескольких тысяч пикосекунд.

В четвертых, силы взаимодействия между атомами наночастицы и атомами напыляемой поверхности стремятся упорядоченно расположить атомы наночастицы относительно атомов напыляемой поверхности. Этот процесс эффективен лишь в первое время взаимодействия наночастицы с напыляемой поверхностью, когда еще велика скорость теплового движения атомов. Если с течением времени, когда скорость теплового движения атомов существенно понизится, будет сохранено (заморожено) неправильное (аморфное) расположение атомов, то оно будет далее

сохранено на протяжении длительного промежутка времени. Отметим, что эффективность упорядочивающего действия межатомных сил быстро падает с увеличением числа атомов в наночастице. Иными словами, чем больше атомов, тем труднее (менее вероятно) правильно их расположить за небольшое время, когда еще достаточно велика скорость их теплового движения.

Скорость протекания данных четырех физических процессов существенно зависит от размеров наночастицы, ее начальной температуры и скорости движения. Поэтому получаемое состояние напыляемой поверхности металла существенно зависит от параметров технологического процесса. Меняя эти параметры, можно получать различное (нанокристаллическое и аморфное) состояние напыляемой поверхности и существенно увеличивать ее поверхностную прочность.

Проиллюстрируем далее эти общие выводы на конкретных примерах с помощью графических иллюстраций результатов взаимодействия наночастиц с напыляемой поверхностью. На рисунках 2 — 12 приведено расположение атомов через 10000 пикосекунд после удара наночастицы о поверхность напыляемого металла, когда завершаются все структурные превращения в наночастице и напыляемом металле. Атомы железа изображены черным цветом и атомы алюминия изображены красным цветом. В обозначениях рисунков указываются:

- 1 форма наночастицы (куб или сфера);
- 2 природа наночастицы (Fe — железо или Al — алюминий);
- 3 число атомов в наночастице (N);
- 4 начальная скорость наночастицы (V) в м/с;
- 5 начальная температуры наночастицы (T) в градусах Кельвина;
- 6 форма напыляемой железной поверхности (монокристалл, дислокация или микротрещина шириною 1 нанометр).

Рассмотрим сначала взаимодействие наночастиц различной формы и температуры, но с одной и той же низкой скоростью движения (200 м/с) с напыляемой поверхностью.

Будем, в основном, рассматривать наночастицы с размером 10 нм, так как доля наночастиц меньшего размера в нанопорошках обычно невелика.

На рис. 2 представлен результат взаимодействия кубической наночастицы с монокристаллической железной поверхностью. Начальная температура наночастицы равна 300 К. Как видно, в этом случае выделяющейся при соударении энергии хватает лишь на частичное нарушение монокристаллической структуры наночастицы. И без того небольшой нанокристалл поперечным размером 10 нм преобразуется в несколько жестко связанных между собой нанокристаллов меньшего размера. При этом наночастица частично деформируется. Кристаллическая структура металла в данном случае практически не получает никаких нарушений.

На границе соприкосновения наночастицы с металлом небольшая часть атомов наночастицы испытывает перекристаллизацию и повторяет кристаллическую структуру металла. Очевидно, что в этом случае будет достигаться достаточно прочное сцепление наночастицы с металлом лишь в случае очень чистой поверхности металла. Если же на поверхности металла будет иметься другой, слабо связанный с ним слой, например окись металла, то прочность связи наночастицы с металлом будет недостаточно большой.

При увеличении начальной температуры наночастицы мы получили в целом аналогичную картину взаимодействия с поверхностью. Небольшая разница состоит лишь в том, что при увеличении начальной температуры наночастицы увеличивается нарушение ее кристаллической структуры и

возрастает ее деформация. Кроме того, на границе соприкосновения наночастицы с металлом растет доля атомов, испытывающих перекристаллизацию и повторяющих кристаллическую структуру металла. За счет этого при росте начальной температуры медленных наночастиц увеличивается сила их сцепления с напыляемой поверхностью.

Сравнение между собой результатов взаимодействия с поверхностью кубических и сферических наночастиц показывает, что разница в форме и двукратная разница в массе практически не влияют на полученные результаты.

На рис. 7 представлены результаты взаимодействия сферической наночастицы с границей раздела двух кристаллических зерен на железной поверхности. В этом случае мы получили такую же зависимость результатов от формы, массы и температуры наночастиц.

Однако при этом на границе соприкосновения наночастицы с металлом атомы наночастицы испытывают перекристаллизацию и повторяют кристаллическую структуру обоих зерен металла. За счет этого будет несколько возрастать поверхностная прочность металла. Это связано с тем, что плоская дислокация на границе металла «запирается» несколькими пересекающимися с ней дислокациями на границе соприкосновения с наночастицей и не будет быстро расти при наличии напряжения в металле. Кроме того, приведенные рисунки показывают, что на небольшой глубине под наночастицей происходит перераспределение атомов между зернами железной поверхности. Это приводит к тому, что плоская граница дислокации у поверхности становится неплоской. Это также приводит к небольшому увеличению поверхностной прочности металла.

На рис. 9 представлены результаты взаимодействия кубической наночастицы с микротрещиной между двумя кристаллическими зернами

на железной поверхности. И в этом случае получается в целом та же зависимость результатов от формы, массы и температуры наночастиц, что в двух вышерассмотренных случаях (попадания наночастицы на монокристалл железа и на границу раздела двух кристаллических зерен на железной поверхности).

Однако в этом случае нарушение структуры наночастицы происходит в основном на границе соприкосновения с двумя зернами железной поверхности. За счет этого форма кристаллической структуры и форма наночастицы искажаются в меньшей степени, чем при попадании на сплошную поверхность. Но за счет этого одновременно растет число атомов наночастицы, испытывающих перекристаллизацию и повторяющих кристаллическую структуру обоих зерен металла.

Кроме того, наночастица «скалывает» атомы с границы микротрещины и «забивает» их во внутрь микротрещины. За счет этого микротрещины «запечатываются» на небольшую глубину, равную примерно половине поперечного размера наночастицы. Очевидно, что этот факт, наряду с перекристаллизацией, приводит к небольшому увеличению поверхностной прочности металла.

Резюмируя в целом, можно отметить, что инъекция наночастиц с низкой начальной скоростью (200 м/с) приводит к формированию на поверхности рыхлого нанокристаллического слоя с небольшой силой связи с поверхностью и с незначительным увеличением поверхностной прочности металла.

Это приводит к выводу о низкой эффективности инжекторов и небольшой скоростью наночастиц (например, инжекторов наночастиц струей сжатого газа) и необходимости перехода к инжекторам с высокой скоростью наночастиц (например, электромагнитных инжекторов).

Рассмотрим, далее, взаимодействие наночастиц различной формы и температуры, но теперь со средней и высокой скоростью движения (600 м/с и 800 м/с), с напыляемой поверхностью.

Получаемые здесь результаты качественно отличаются от результатов для низкой скорости движения (200 м/с). Это связано с тем, что тепловая энергия, выделяемая при взаимодействии наночастицы с поверхностью, достаточна для полного расплавления наночастицы и частичного расплавления соприкасающейся с ней железной поверхности.

Кроме того, появляется зависимость результатов взаимодействия от размеров наночастицы.

На рис. 3 представлен результат взаимодействия кубической наночастицы размером 1 нм и начальной температурой 300 К с монокристаллической железной поверхностью. Как видим, после соударения наночастицы полностью расплавляются и далее испытывают полную перекристаллизацию, приводящую к простому увеличению объема кристаллов поверхности. Это связано с тем, что такие небольшие наночастицы содержат небольшое количество (несколько сот) атомов, которые достаточно просто (вероятно) уложить в правильную кристаллическую структуру.

На рис.4 и 8 приведены результаты взаимодействия наночастиц кубической и сферической формы размером 10 нм, начальной скоростью 800 м/с и начальной температурой 700 К с монокристаллической железной поверхностью и с границей раздела двух кристаллических зерен на железной поверхности. Как видим, после соударения наночастицы полностью расплавляются и далее испытывают частичную перекристаллизацию, приводящую к увеличению объема кристаллов поверхности. Однако в данном случае значительное количество атомов наночастицы не успевают при охлаждении занять позиции в узлах

кристаллической решетки и далее «замораживаются» (остаются) в аморфном состоянии. Это связано с тем, что такие наночастицы содержат большое количество атомов, которые достаточно трудно (маловероятно) уложить за время охлаждения в правильную кристаллическую структуру.

При увеличении размеров наночастицы в аморфном состоянии уже остается подавляющее число атомов, так как их очень маловероятно уложить за время охлаждения в правильную кристаллическую структуру. В этом случае частично расплавляется и кристалл железа, который затем также «замораживается» (остается) в аморфном состоянии.

При изменении начальной температуры наночастиц результат остается практически таким же, за исключением небольшого изменения доли аморфного металла напыляемой поверхности.

Сравнение между собой результатов взаимодействия с поверхностью кубических и сферических наночастиц показывает, что разница в форме и двукратная разница в массе практически не влияют на полученные результаты, а именно: объем получаемого аморфного металла примерно равен объему наночастицы.

Полученные результаты показывают, что наночастицы со средней и высокой скоростью (600 м/с и 800 м/с) прочно сцепляются с напыляемой поверхностью. При этом, в отличие от низких скоростей наночастиц (200 м/с), небольшое загрязнение (окисление) напыляемого металла на толщину, равную нескольким межатомным слоям, не может привести к существенному уменьшению прочности этой связи.

При попадании наночастиц на границу раздела двух кристаллических зерен на железной поверхности (рис. 7 и 8) имеем ту же самую зависимость от формы и начальной температуры наночастиц, что и в случае их попадания на монокристаллическую железную поверхность.

Однако в этом случае в аморфное состояние переходит часть плоской дислокации между двумя кристаллическими зернами поверхности. А это приводит к существенному увеличению поверхностной прочности металла, так как дислокация закрыта аморфным слоем металла и не может развиваться при возникновении напряжения в металле.

На рис. 10 представлены результаты взаимодействия сферической наночастицы с начальной скоростью 800 м/с и с температурой, равной 700 К, с микротрещиной между двумя кристаллическими зернами на железной поверхности. И в этом случае мы наблюдаем ту же самую зависимость от формы и начальной температуры наночастиц, что и в случае их попадания на монокристаллическую железную поверхность или на границу раздела двух кристаллических зерен на железной поверхности.

Но в этом случае в аморфное состояние переходит часть металла между двумя кристаллическими зернами поверхности и «запечатывает» (закрывает) микротрещину на глубину, примерно равную размеру наночастицы. Это также приводит к существенному увеличению поверхностной прочности металла, так как микротрещина частично закрыта аморфным слоем металла и не может развиваться при возникновении напряжения в металле.

При увеличении начальной скорости наночастицы от средней (600 м/с) до высокой (800 м/с) наночастица оказывает большое «разрушительное» влияние на поверхность напыляемого металла, оставляя на его поверхности ударные кратеры. При этом растет доля получаемого аморфного металла, а дислокации и микротрещины залечиваются аморфным металлом на гораздо большую глубину. Одновременно растет сила сцепления наночастиц с металлом и упрочнение поверхностного слоя металла.

В целом, можно отметить, что инъекция наночастиц со средней (600 м/с) и высокой (800 м/с) начальной скоростью приводит к формированию на поверхности прочного нанокристаллического слоя с большой долей аморфного металла, с большой силой связи с поверхностью и с значительным увеличением поверхностной прочности металла. Для получения таких скоростей наночастиц необходимы электромагнитные инжекторы.

На рис. 5 — 6 и 11 — 12 приведены результаты взаимодействия алюминиевых наночастиц кубической и сферической формы размером 10 нм с монокристаллической железной поверхностью и с микротрещиной между двумя кристаллическими зёрнами на железной поверхности. Для сопоставимости расчета с железными наночастицами нами выбирались те же самые начальные температуры (300, 500 и 700 К) и скорости (200, 600 и 800 м/с).

В целом, нами были получены результаты, сходные с результатами, получаемыми для железных наночастиц. Однако имеются и некоторые отличия.

Первое из этих отличий связано с тем, что алюминий имеет меньшую температуру плавления, чем железо. За счет этого при небольшой начальной скорости (200 м/с) алюминиевые наночастицы испытывают большее нарушение структуры кристаллической решетки и большую деформацию, чем железные наночастицы. Одновременно при этих скоростях для алюминиевых наночастиц большее число атомов на границе раздела с металлом испытывает перекристаллизацию и повторяет кристаллическую структуру металла, чем для железных наночастиц. При температуре 700 К и начальной скорости 200 м/с алюминиевые наночастицы испытывают почти полное разрушение и

перекристаллизацию, так как эта температуры близка к температуре плавления алюминиевых наночастиц.

Второе отличие связано с тем, что алюминий имеет меньший атомный вес. За счет этого при прочих равных условиях алюминиевые наночастицы оказывают меньшее разрушающее действие на железную поверхность, чем железные наночастицы. Поэтому следует ожидать, что алюминиевое нанопокрытие железной поверхности будет приводить к меньшему увеличению ее поверхностной прочности по сравнению с железной поверхностью.

Кроме того, следует отметить, что атомы алюминия практически не смешиваются с атомами железа и образуют на железной поверхности отдельный алюминиевый слой. Лишь при большой начальной скорости (800 м/с) алюминиевых наночастиц атомы алюминия перемешиваются с атомами железа. Однако, толщина этого перемешанного слоя не велика и составляет всего несколько атомных слоев.

Поэтому имеется опасность того, что при небольших (200 м/с) и средних (600 м/с) скоростях наночастиц прочность сцепления получаемого алюминиевого покрытия с железной поверхностью будет недостаточно большой.



Рис. 1. Фотография инжектора наночастиц «Луч-5»
производства ЗАО «Техносистема Н».

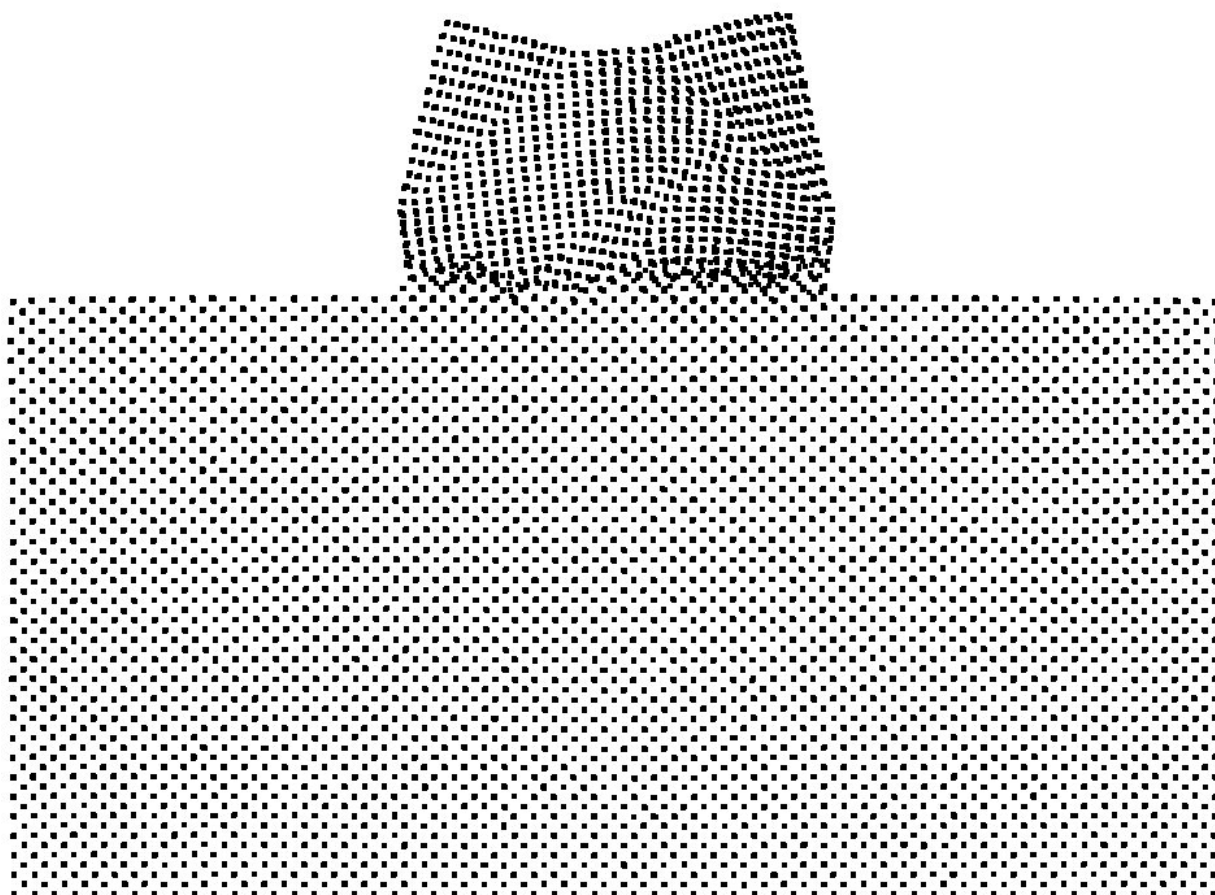


Рис. 2. Результат взаимодействия кубической наночастицы
(Fe, N=8729, V=200 м/с, T=300 К)
с монокристаллической железной поверхностью.

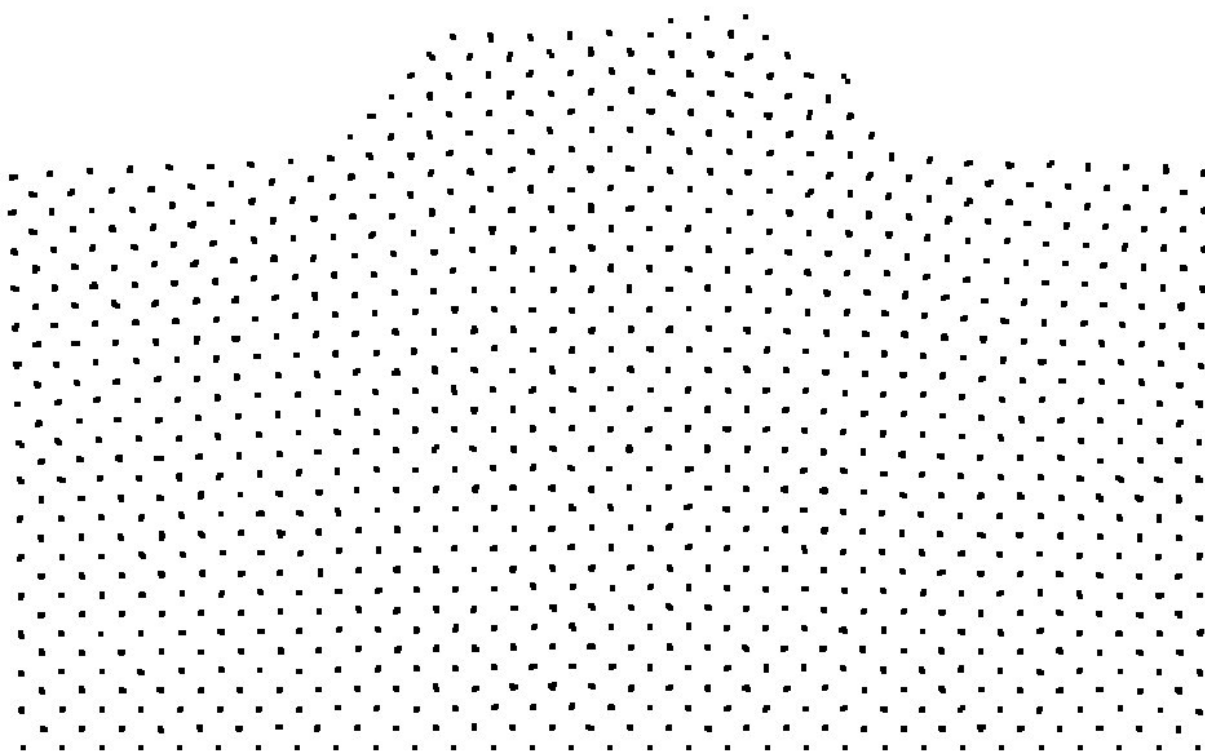


Рис. 3. Результат взаимодействия кубической наночастицы
(Fe, $N=526$, $V=600$ м/с, $T=300$ К)
с монокристаллической железной поверхностью.

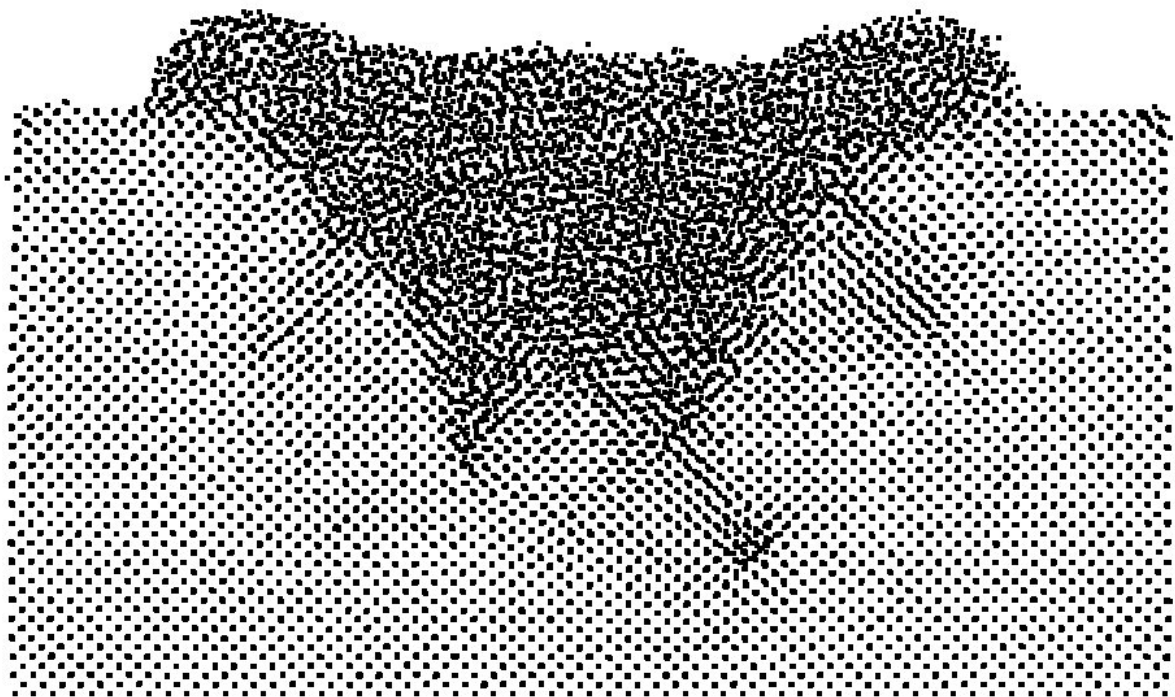


Рис. 4. Результат взаимодействия кубической наночастицы
(Fe, N=8729, V=800 м/с, T=700 К)
с монокристаллической железной поверхностью.

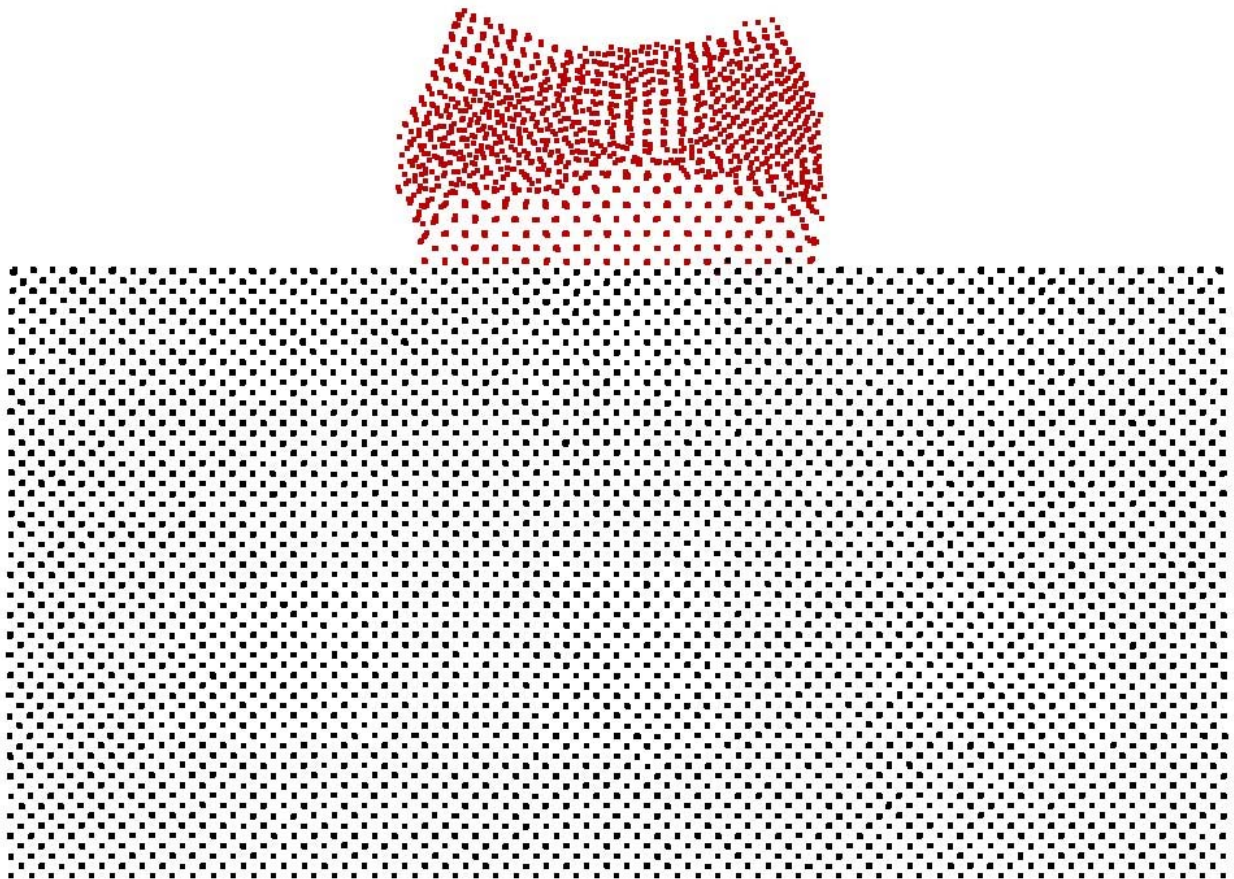


Рис. 5. Результат взаимодействия кубической наночастицы
(Al, N=6083, V=200 м/с, T=300 К)
с монокристаллической железной поверхностью.

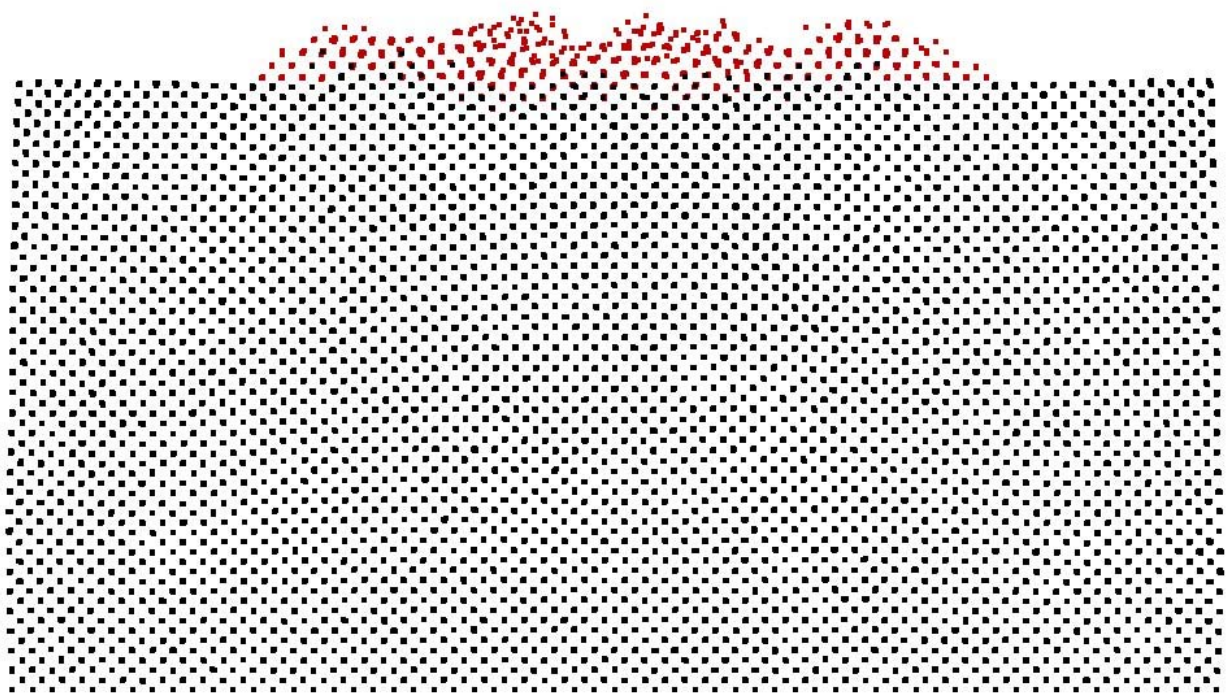


Рис. 6. Результат взаимодействия сферической наночастицы
(Al, $N=3027$, $V=800$ м/с, $T=700$ К)
с монокристаллической железной поверхностью.

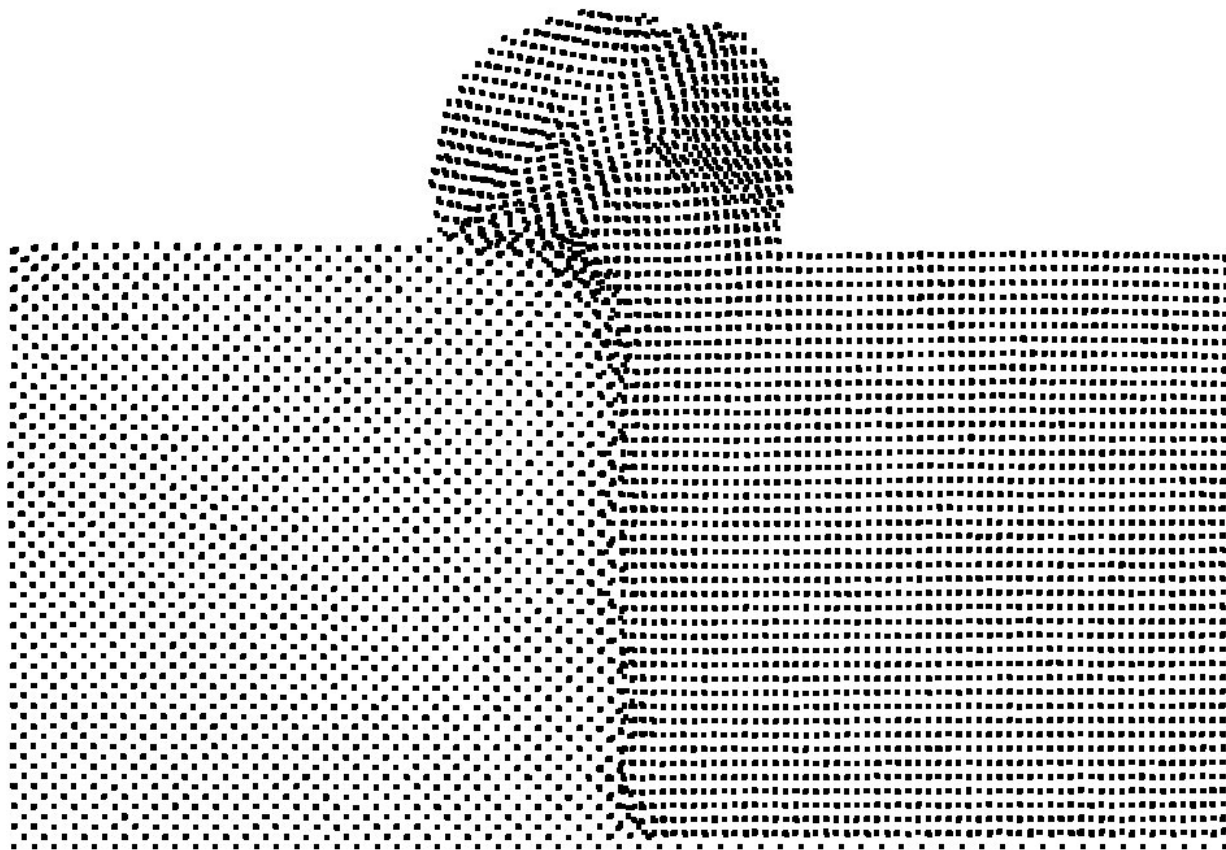


Рис. 7.. Результат взаимодействия сферической наночастицы
(Fe, N=4033, V=200 м/с, T=300 К)
с границей раздела двух кристаллических зерен на железной поверхности.

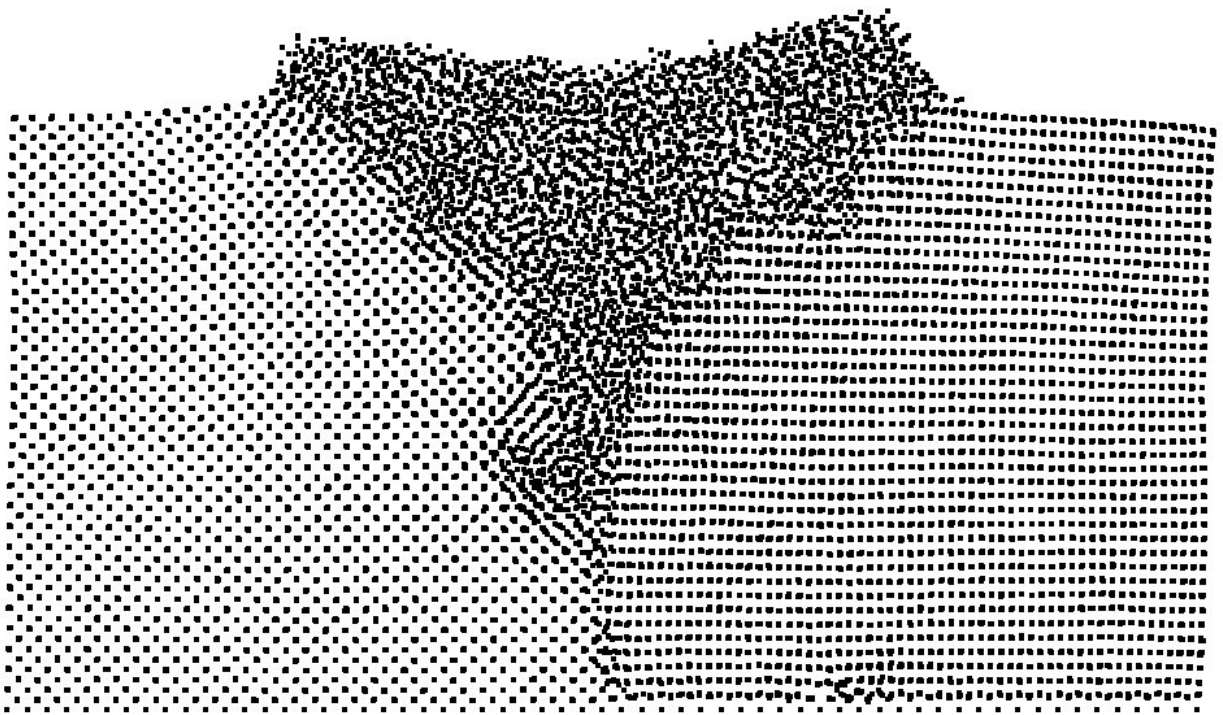


Рис. 8. Результат взаимодействия сферической наночастицы
(Fe, N=4033, V=800 м/с, T=700 К)
с границей раздела двух кристаллических зерен на железной поверхности.

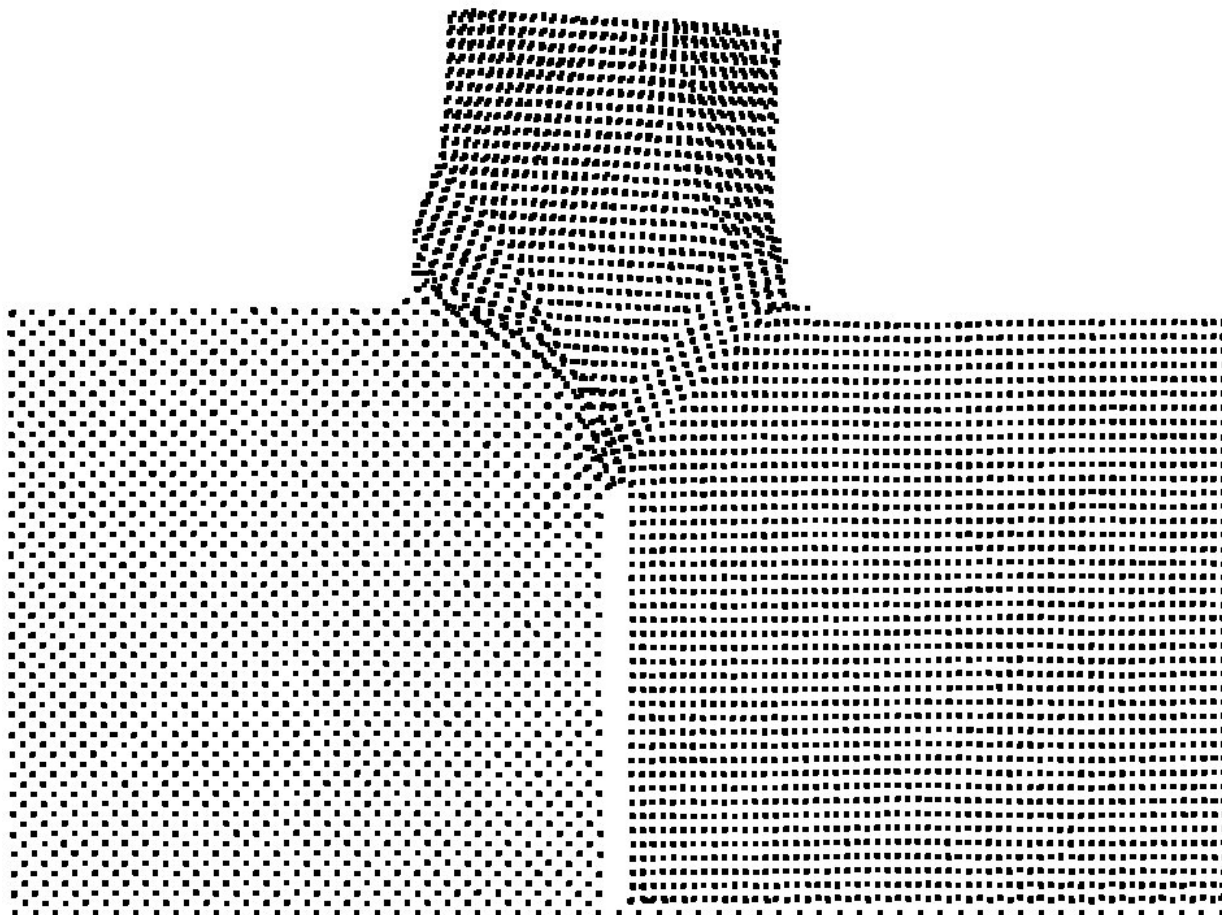


Рис. 9. Результат взаимодействия кубической наночастицы
(Fe, N=8729, V=200 м/с, T=700 К)
с микротрещиной между двумя кристаллическими зёрнами на железной
поверхности.

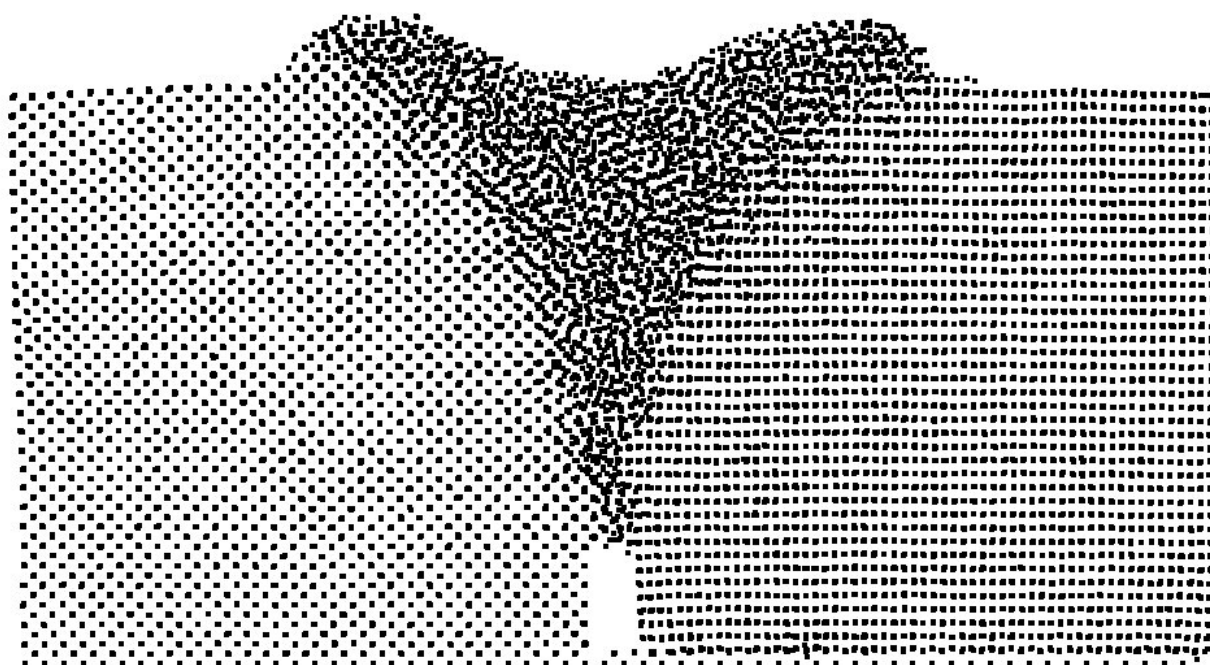


Рис. 10. Результат взаимодействия сферической наночастицы
(Fe, $N=4033$, $V=800$ м/с, $T=700$ К)
с микротрещиной между двумя кристаллическими зёрнами на железной
поверхности.

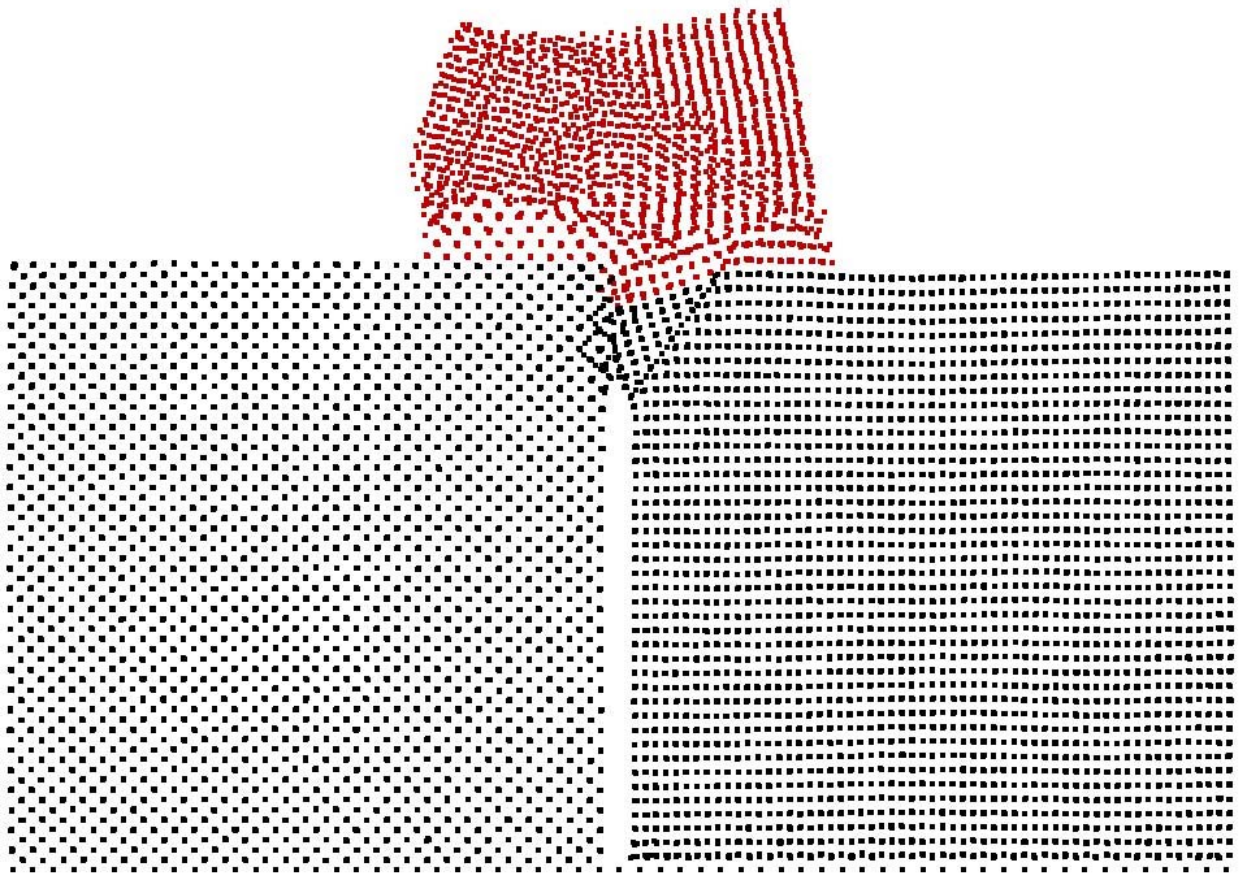


Рис. 11. Результат взаимодействия кубической наночастицы
(Al, N=6083, V=200 м/с, T=300 К)
с микротрещиной между двумя кристаллическими зёрнами на железной
поверхности.

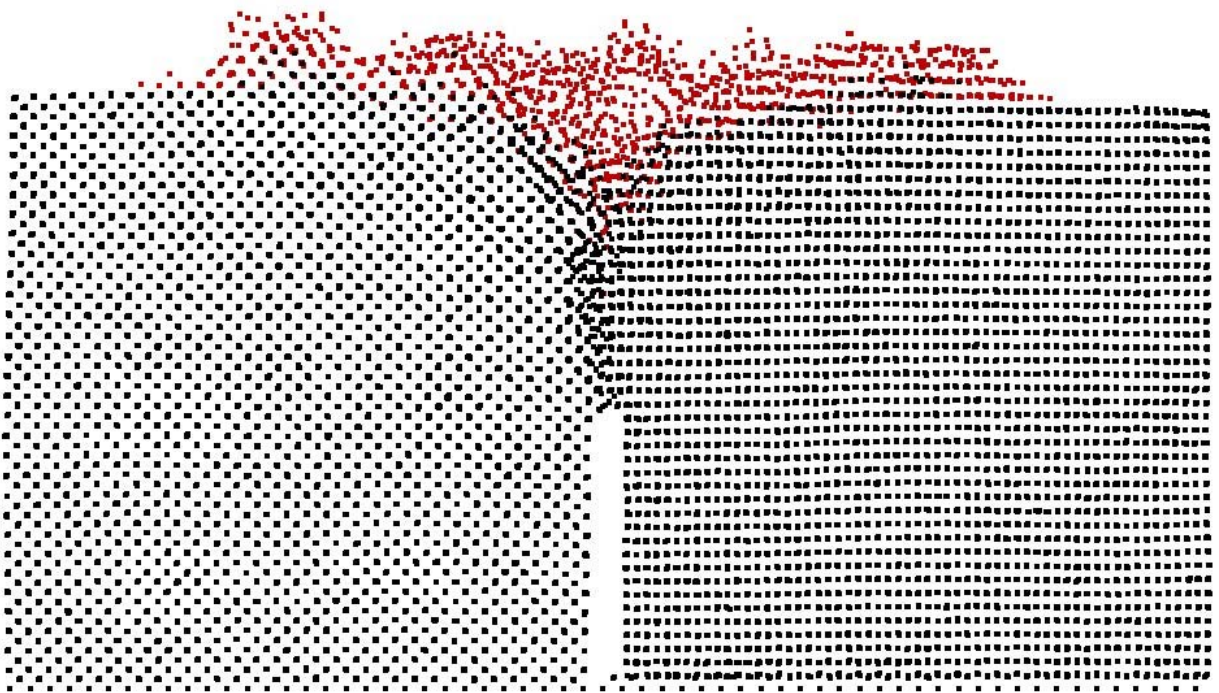


Рис. 12. Результат взаимодействия кубической наночастицы
(Al, N=6083, V=800 м/с, T=700 К)
с микротрещиной между двумя кристаллическими зёрнами на железной
поверхности.

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведенные литературные и патентные исследования свидетельствуют, что металлы с многослойными композитными нанопокрывтиями, создаваемых на поверхности металлов с помощью электромагнитных инжекторов наночастиц, могут обладать уникальными эксплуатационными и прочностными свойствами.

В результате работы по 3 этапу проведены расчеты параметров технологического процесса (энергия и длительность инъекции ионной пушки) получения таких покрытий.

Для моделирования процессов происходящих при напылении наночастиц на защищаемую поверхность нами проводились с помощью методов молекулярной динамики вычисления взаимодействия железных и алюминиевых наночастиц с железной напыляемой поверхностью. При этом рассчитывалось взаимодействие наночастиц кубической и сферической формы с размерами 1, 5 и 10 нм и с числом атомов от нескольких сот до 10000 атомов с железной прямоугольной поверхностью с размерами 50 x 50 x 25 нм, содержащей от 220000 до 230000 атомов.

Нами рассматривались случаи попадания наночастицы на монокристалл железа, на дислокацию, представляющую собой границу раздела двух кристаллических зерен железа с различной ориентацией кристаллической решетки, и на микротрещину шириною 1 нм между двумя кристаллическими зернами железа с различной ориентацией кристаллической решетки.

Для моделирования параметров технологического процесса были изучены случаи низких (200 м/с), средних (600 м/с) и высоких (800 м/с) скоростей напыления наночастиц на защищаемый металл. При этом

исследовались случаи низкой (300 K), средней (500 K) и высокой (700 K) температуры напыляемых наночастиц.

Всего было выполнено около 500 расчетов соответствующих различной комбинации выше перечисленных параметров. Данные расчеты позволили выявить общие физические закономерности происходящие при напылении наночастиц на металл а также количественные и качественные зависимости получаемых результатов от размера, формы, химической природы, скорости и температуры наночастиц. Были определены параметры технологического процесса напыления наночастиц при которых происходит существенная модификация поверхности защищаемого металла и резкое увеличение его поверхностной прочности. Показано, что меняя размеры, скорость и температуру наночастиц можно получать различную (нанокристаллическую и аморфную) структуру защищаемой поверхности.

В частности, инжекция наночастиц с низкой начальной скоростью (200 м/с) приводит к формированию на поверхности рыхлого нанокристаллического слоя с небольшой силой связи с поверхностью и с незначительным увеличением поверхностной прочности металла. Это приводит к выводу о низкой эффективности инжекторов и небольшой скоростью наночастиц (например, инжекторов наночастиц струей сжатого газа).

В тоже время, инжекция наночастиц с средней (600 м/с) и высокой (800 м/с) начальной приводит к формированию на поверхности прочного нанокристаллического слоя с большой долей аморфного металла, с большой силой связи с поверхностью и с значительным увеличением поверхностной прочности металла. Для получения таких скоростей наночастиц необходимы электромагнитные инжекторы.

4. РЕКОМЕНДУЕМАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. В.Р.Чечеткин, Д.В.Прокопенко, А.А.Макаров, А.С.Заседателев Биочипы для медицинской диагностики, Российские нанотехнологии, -2006, -1, N 1-2, -С. 13-27.
2. С.П.Громов Супрамолекулярная фотоника краунсодержащих красителей, Российские нанотехнологии, -2006, -1, N 1-2, -С. 29-45.
3. И.П.Суздаев Магнитные фазовые переходы в нанокластерах и наноструктурах, Российские нанотехнологии, -2006, -1, N 1-2, -С. 47-57.
4. Е.И.Григорьев, С.А.Завьялов, С.Н.Чвалун ГПП синтез поли-п-ксилилен-металл (полупроводник) нанокомпозиционных материалов для химических сенсоров, Российские нанотехнологии, -2006, -1, N 1-2, -С. 58-70.
5. Н.П.Лякишев, М.И.Алымов Наноматериалы конструкционного назначения, Российские нанотехнологии, -2006, -1, N 1-2, -С. 71-81.
6. Ф.И.Далидчик, Б.Р.Шуб Сканирующая туннельная микроскопия и спектроскопия несовершенных и взаимодействующих наночастиц (оксиды металлов и углерод), Российские нанотехнологии, -2006, -1, N 1-2, -С. 82-96.
7. А.Л.Асеев Наноматериалы и нанотехнологии для современной полупроводниковой промышленности, Российские нанотехнологии, -2006, -1, N 1-2, -С. 97-110.
8. Л.А.Головань, П.К.Кашкаров, В.Ю.Тимошенко, А.М.Желтиков Двухлучие преломление формы и генерация оптических гармоник в наноструктурах пористых полупроводников, Российские нанотехнологии, -2006, -1, N 1-2, -С. 111-120.

9. М.Г.Спирин, С.П.Бричкин, В.Ф.Разумов Использование обратных мицелл для получения наночастиц золота ультрамалого размера, Российские нанотехнологии, -2006, -1, N 1-2, -С. 121-126.
10. М.В.Алфимов, Р.М.Кадушников, Н.А.Штуркин, М.В.Алиевский, В.П.Лебедев-Степанов Иммитационное моделирование процессов самоорганизации наночастиц, Российские нанотехнологии, -2006, -1, N 1-2, -С. 127-133.
11. И.П.Суздальев, Ю.В.Максимов, В.К.Имшенник, С.В.Новичихин, В.В.Матвеев, Ю.Д.Третьяков, А.В.Лукашин, А.А.Елисеев, А.А.Малыгин, Е.А.Соснов Иерархия строения и магнитные свойства наноструктуры оксидов железа, Российские нанотехнологии, -2006, -1, N 1-2, -С. 134-141.
12. М.И.Магсумов, А.С.Федотов, М.В.Цодиков, В.В.Тепляков, О.А.Шкрёбко, В.И.Уваров, Л.И.Трусов, И.И.Моисеев Закономерности протекания реакции С-субстратов в каталитических нанореакторах, Российские нанотехнологии, -2006, -1, N 1-2, -С. 142-152.
13. М.В.Цодиков, М.А.Передерий, М.С.Карасева, Ю.В.Максимов, И.П.Суздальев, А.А.Гурко, Н.К.Жеваго Формирование нанокластерных железосодержащих катализаторов на углеродных носителях под воздействием СВЧ-излучения, Российские нанотехнологии, -2006, -1, N 1-2, -С. 153-161.
14. А.П.Сафонов, Е.Г.Калинина, Ю.А.Котов, А.М.Мурзакаев, О.Р.Тимошенкова Электрофоретическое осаждение нанопорошков на пористой поверхности, Российские нанотехнологии, -2006, -1, N 1-2, -С. 162-169.

15. В.Г.Куличихин, С.В.Антонов, В.В.Макорова, А.В.Семеков, R.Singh Нанокompозитные гидроколлоидные адгезивы для биомедицинского применения, Российские нанотехнологии, -2006, -1, N 1-2, -С. 170-182.
16. А.В.Якиманский, А.Ю.Меньштова, Т.Г.Евсеева, Н.Н.Шевченко, А.Ю.Билибин Монодисперсные полимерные частицы с ковалентно-присоединенными хромофорными группировками как структурные элементы фотонных кристаллов, Российские нанотехнологии, -2006, -1, N 1-2, -С. 183-190.
17. От тройных интерполиэлектролит-металлических комплексов к нанокompозитам полимер-металл, Российские нанотехнологии, -2006, -1, N 1-2, -С. 191-200.
18. В.В.Иванов, А.С.Кайгородов, В.Р.Хрустов, С.Н.Паранин, А.В.Спирин Прочная керамика на основе оксида алюминия, получаемая с использованием магнитно-импульсного прессования композитных нанопорошков, Российские нанотехнологии, -2006, -1, N 1-2, -С. 201-207.
19. Р.З.Валиев Создание наноструктурных металлов и сплавов с уникальными свойствами, используя интенсивные пластические деформации, Российские нанотехнологии, -2006, -1, N 1-2, -С. 208-216.
20. С.Н.Новиков, С.П.Тимошенко Влияние хемосорбции паров воды на свойства основных материалов микроэлектроники, Российские нанотехнологии, -2006, -1, N 1-2, -С. 217-222.
21. А.Н.Белов, С.А.Гаврилов, В.И.Шевяков Особенности получения наноструктурированного анодного оксида алюминия, Российские нанотехнологии, -2006, -1, N 1-2, -С. 223-227.
22. С.А.Гаврилов, А.А.Шерченков, А.Б.Апальков, Д.А.Кравченко Оптические свойства пленок CdS для солнечных элементов с тонким

адсорбирующим слоем, Российские нанотехнологии, -2006, -1, N 1-2, -С. 228-232.

23. С.А.Зотов, С.П.Тимошенко, Ю.А.Чаплыгин Особенности динамики элементов микро- и наномеханики углового типа с электростатическим возбуждением, Российские нанотехнологии, -2006, -1, N 1-2, -С. 233-239.

24. А.И.Плеханов, В.В.Шелковников Оптические волокна с концевыми фотополимерными микролинзами, Российские нанотехнологии, -2006, -1, N 1-2, -С. 240-244.

25. А.И.Плехонов, Д.В.Калинин, В.В.Сердобинцева Нанокристаллизация монокристаллических пленок опала и пленочных опаловых гетероструктур, Российские нанотехнологии, -2006, -1, N 1-2, -С. 245-251.

26. А.Б.Федотов, Е.Е.Серебрянников, А.А.Иванов, Д.А.Сидоров-Бирюков, А.В.Щербаков, Л.А.Мельников, М.В.Алфимов, А.М.Желтиков Преобразование частоты сверхкоротких лазерных импульсов в наноструктурированных световодах, Российские нанотехнологии, -2006, -1, N 1-2, -С. 252-255.

27. Ю.М.Евдокимов Пространственно упорядоченные формы ДНК и ее комплексов – основа для создания наноконструкций для медицины и биотехнологии, Российские нанотехнологии, -2006, -1, N 1-2, -С. 256-264.

28. Т.Н.Ростовщикова, В.В.Смирнов, В.М.Кожевин, Д.А.Явсин, С.А.Гуревич Межкластерные взаимодействия в катализе наноразмерными частицами металлов, Российские нанотехнологии, -2007, -2, N 1-2, С. 47-60.

29. П.А.Тодуа Метрология в нанотехнологии, Российские нанотехнологии, -2007, -2, N 1-2, -С. 61-69.

30. А.М.Желтиков Развитие технологии фотонно-кристаллических световодов в России, Российские нанотехнологии, -2007, -2, N 1-2, -С. 70-78.
31. В.В.Королев, И.М.Арефьев, А.Г.Рамазанова Магнетокалорический эффект и теплоемкость водной суспензии феррита гадолиния, Российские нанотехнологии, -2007, -2, N 1-2, -С. 79-82.
32. А.В.Быстрова, Е.В.Паршина, Е.А.Татарина, М.И.Бузин, Л.А.Озерина, А.Н.Озерин, А.М.Музафаров Карбосилановые дендримеры с функциональным внешним слоем в качестве основы для получения нанопористых метилсилсесквиоксановых пленок, Российские нанотехнологии, -2007, -2, N 1-2, -С. 83-89.
33. В.А.Герасин, Т.Л.Зубова, Ф.Н.Бахов, А.А.Баранников, Н.Д.Мерекалова, Ю.М.Королев, Е.М.Антипов Структура нанокomпозитов полимер/Na⁺-монтмориллонит, полученных смешением в расплаве, Российские нанотехнологии, -2007, -2, N 1-2, -С. 90-105.
34. Л.Р.Ботвина, М.И.Палымов, М.Р.Тютин, Т.Б.Петерсон, С.А.Тихомиров, Н.А.Соловьев Кинетика разрушения никеля с неоднородной наноструктурой, Российские нанотехнологии, -2007, -2, N 1-2, -С. 106-111.
35. А.С.Кайгородов, В.В.Иванов, С.Н.Панарин, А.А.Ноздрин Роль адсорбатов при импульсном прессовании нанопорошков оксидов, Российские нанотехнологии, -2007, -2, N 1-2, -С. 112-118.
36. С.Н.Кульков, С.П.Бужкова Фазовый состав и особенности формирования структуры на основе стабилизированного диоксида циркония, Российские нанотехнологии, -2007, -2, N 1-2, -С. 119-132.

37. Ю.Н.Степанов Закономерности объединения наночастиц при их флуктуационном плавлении на начальной стадии спекания, Российские нанотехнологии, -2007, -2, N 1-2, -С. 133-135.
38. Н.Н.Герасименко, С.А.Апрелов Фрактальные методы анализа степени упорядоченности нанонструктур, Российские нанотехнологии, -2007, -2, N 1-2, -С. 136-139.
39. И.В.Федотов, А.Б.Федотов, Ю.Н.Кондратьев, В.С.Шевандин, К.В.Дедельский, А.В.Хохлов, А.М.Желтиков, Российские нанотехнологии, -2007, -2, N 1-2, -С. 140-144.
40. Е.Г.Евтушенко, И.Н.Курочкин, Е.А.Донцова, И.А.Будашев, А.В.Еременко, В.А.Головаченко, Д.Г.Полынцев, Д.Р.Тур, Д.В.Пергошов, И.С.Папков, А.Б.Зенин, С.Д.Варфоломеев Наноразмерные пленки антител на основе полиэлектролитов для целей высокочувствительной иммунодиагностики, Российские нанотехнологии, -2007, -2, N 1-2, -С. 145-153.
41. Г.В.Дубачева, М.В.Порус, Л.Г.Соколовская, Л.В.Сиголаева, Д.В.Пергушев, А.А.Ярославов, А.В.Еременко, И.Н.Курочкин, С.Д.Варфоломеев Наноструктурированные пленки полиэлектролитов – основа создания высокочувствительных тирозиназных биосенсоров, Российские нанотехнологии, -2007, -2, N 1-2, -С. 154-159.
42. В.А.Олейников, А.В.Суханова, И.Р.Набиев Флуоресцентные полупроводниковые нанокристаллы в биологии и медицине, Российские нанотехнологии, -2007, -2, N 1-2, -С. 160-173.
43. Метод молекулярной динамики в физической химии (Сб. обзоров, отв. ред. и авт. предисл. Ю. К. Товбин), Москва, Наука, 1996, 333 с.
44. www.cs.sandia.gov/~sjplimp/lammps.html

45. M.I. Mendelev, D.J. Srolovitz, G.J. Ackland and S. Han, J. Mater. Res.
Contact information: mendelev@ameslab.gov.