

Modelování vzniku tenké vrstvy CuZr atom po atomu

Pavla Macháňová¹

1 Úvod

Tato práce se věnuje modelování vzniku tenké vrstvy CuZr pomocí klasické molekulární dynamiky. Simulovala jsem přilétání jednotlivých atomů Cu a Zr na krystalický měděný substrát. Sledovala jsem závislost struktury vzniklé vrstvy na energii přilétajících atomů a na podílu Cu a Zr mezi nimi.

2 Zkoumaná látka

Materiál CuZr (měď a zirkonium) může být pro určité složení příkladem kovového skla, které má řadu užitečných vlastností. Některé z nich byly měřené na experimentálně (impulsní magnetronové naprašování) připravené látce CuZr v současné práci Zemana et al. (2017). Materiál vykazoval vysokou tvrdost, hladkost a hydrofóbní povrch. Tyto vlastnosti jsou dobrou motivací k dalšímu zkoumání této látky.

3 Metody simulace

Pevné látky je možno simulovat na základě klasické molekulární dynamiky atom po atomu. Díky této metodě můžeme spočítat chování během interakcí mezi klasickými částicemi. Studie zabývající se systémy tvořenými mnoha atomy jsou zjednodušeny s využitím výpočetní techniky, která numericky řeší rovnice popisující pohyb simulovaných atomů. Pro popis interakcí mezi atomy jsem použila empirické potenciály, které popisují energii jako funkci pozic jader atomů, viz Buckinghamův potenciál:

$$U(r) = Ae^{\frac{-r}{\rho}} - Cr^{-6} \quad (1)$$

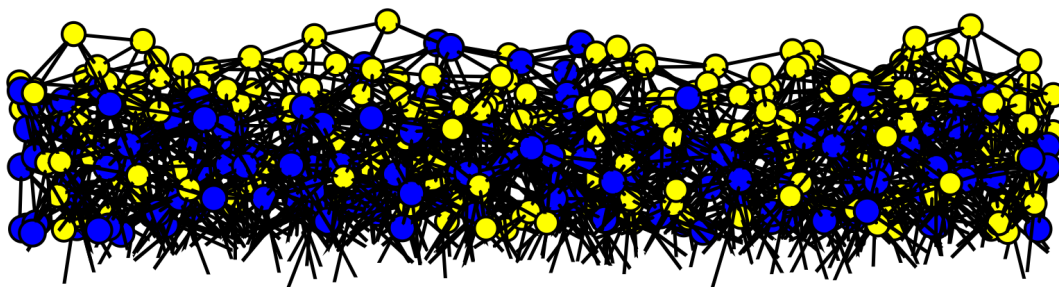
Konstanty A , ρ a C jsou kladné a musí být vhodně naftovány pro konkrétní dvojici prvků. Parametr r je vzdálenost mezi atomy. Využila jsem empirický potenciál naftovaný pro CuZr v publikaci Mendeleev et al. (2007). Simulace jsem prováděla s využitím programu LAMMPS, jehož první verzi představil ve své práci Plimpton (1995).

4 Výsledky a diskuze

Simulovala jsem vznik tenké vrstvy na měděném substrátu tvořeném 2000 atomy s krystalickou strukturou (kubická plošně centrovaná mřížka). V obou částech simulací jsem nechala na substrát dopadat 3000 atomů Cu a Zr. V první části jsem nechala atomy Cu a Zr přilétat v poměru 1:1 a zkoumala jsem vliv jejich energie (v rozsahu 0.1 – 100 eV). Ukázalo se, že s rostoucí energií přilétajících atomů se stával materiál homogennější ve svém objemu, ale hetero-

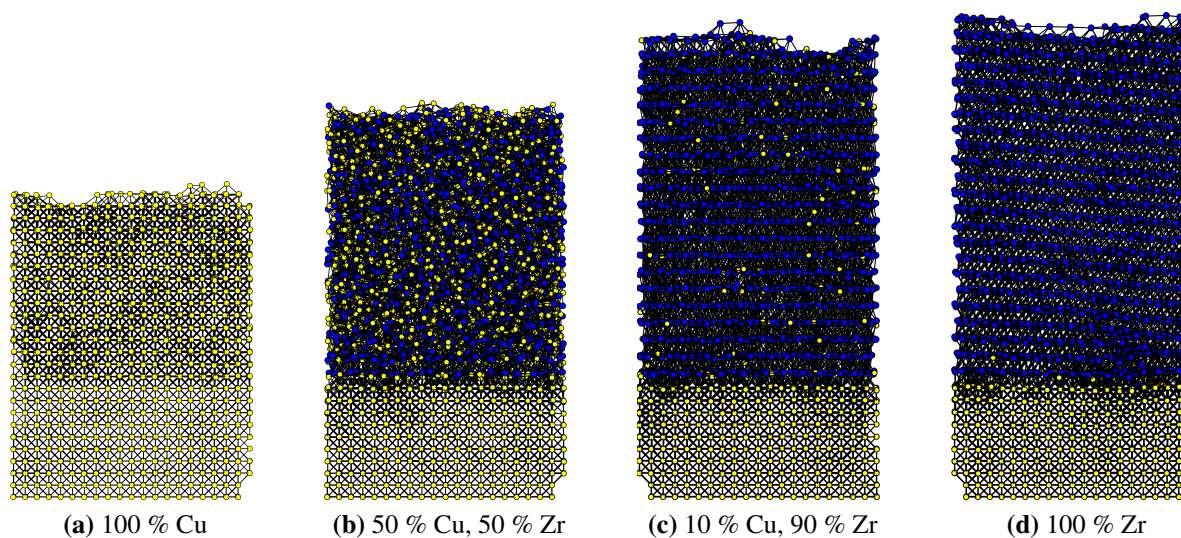
¹ studentka bakalářského studijního programu Aplikované vědy a informatika, obor Aplikovaná a inženýrská fyzika, specializace Fyzikálně matematické modelování, e-mail: pmachano@students.zcu.cz

genější na povrchu, kde docházelo k segregaci mědi (viz Obrázek 1).



Obrázek 1: Vizualizace většinového zastoupení Cu (žlutě) oproti Zr (modře) na povrchu vzniklé tenké vrstvy. Zde příklad pro energii přilétajících atomů 30 eV.

Ve druhé části simulací jsem sledovala vliv poměru Cu a Zr mezi přilétajícími atomy (v rozsahu 100 % Cu až 100 % Zr s krokem 10 %). Atomy přilétaly s energií 1 eV. Na základě simulací jsem zjistila, že vzniklá vrstva bude amorfnní pro podíl Cu 20 – 90 %. Pro zbylé poměry je vrstva krystalická. Tento závěr jsem provedla jak na základě získaných vizualizací (viz Obrázek 2) tak vyšetřením pomocí metody Uspořádání na střední vzdálenost (*Common neighbor analysis*). Výsledky simulace jsou též ve shodě se závěrem práce Zemana et al. (2017), kde byl materiál připraven experimentálně.



Obrázek 2: Vizualizace struktury tenké vrstvy v závislosti na poměru Cu a Zr mezi atomy přilétajícími na substrát

Literatura

- Mendelev, M. I., Sordelet, D. J. and Kramer M. J. (2007) Using atomistic computer simulations to analyze x-ray diffraction data from metallic glasses, *Journal of Applied Physics* 102, 043501
- Plimpton, S. J. (1995) Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics, *Journal of Computational Physics* 117, 1-19, available from: <http://lammps.sandia.gov/>
- Zeman, P., Zítek, M., Zuzjaková, Š. and Čerstvý, R. (2017) Amorphous Zr-Cu thin-film alloys with metallic glass behavior, *Journal of Alloys and Compounds* 696, 1298-1306