

И. И. МАРЧЕНКО, ас. НТУ «ХПИ»

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ МЕТОД ИДЕНТИФИКАЦИИ ПОВЕРХНОСТНЫХ АТОМОВ ДЛЯ ОБРАБОТКИ ДАННЫХ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Предлагается метод обработки данных, полученных в результате моделирования процессов формирования тонких пленок методом молекулярной динамики, для нахождения поверхностных атомов материала. Данный метод был протестирован для ряда типичных примеров и показал корректные результаты. Результаты работы предложенного метода могут быть использованы для нахождения плотности, шероховатости, микронапряжений и пр.

Ключевые слова: математическое моделирование, молекулярная динамика, вычислительный алгоритм.

Введение. В настоящее время для исследования эффектов, происходящих при осаждении наноразмерных плёнок, широкое распространение получил метод молекулярной динамики (МД) [1–2]. Так, авторами в работах [3–4] был сформулирован метод молекулярной динамики с цветным шумом, который позволяет адекватно моделировать процесс осаждения металлических пленок в широком диапазоне температур. Результатом работы МД является в заданные моменты времени координаты всех атомов моделируемого образца.

Однако для получения макроскопических характеристик материала, таких, как плотность, шероховатость, величина удельной поверхности и пр. необходимо определить атомы, формирующую поверхность материала. В случае, когда материал имеет сложную дефектную структуру, задача нахождения таких частиц становится нетривиальной. Поэтому целью данной работы было разработка методов компьютерного анализа структуры поверхностных слоев.

Алгоритм идентификации поверхностных атомов. Исходными данными для идентификации поверхностных атомов являются линейные размеры расчетной ячейки (x_s, y_s, z_s) и координаты частиц $\mathbf{x}_s^{(i)}$, где $i=1..N$ – порядковый номер частицы, N – количество частиц в моделируемом образце.

В данной работе в качестве критерия принадлежности атома поверхности предложено использовать значение электронной плотности вокруг данной частицы. Для нахождения ее значения следует осуществить переход от непрерывного пространства к дискретному. То есть расчетная ячейка разбивается на k блоков, каждый из которых имеет линейные размеры $(cell_x, cell_y, cell_z)$. Линейные размеры выбираются таким образом,

чтобы в любой блок не могло попасть больше одного атома. Также необходимо, чтобы в расчетной ячейке помещалось целое количество блоков, то есть $x_s / cell_x$, $y_s / cell_y$ и $z_s / cell_z$ являлись натуральными числами.

В качестве структуры данных для организации блоков используется 3-хмерный массив $D_{i,j,k}$, где i, j, k – индексы в данном массиве, $i \in [0, x_s / cell_x]$, $j \in [0, y_s / cell_y]$, $k \in [0, z_s / cell_z]$. Вещественные координаты расчетной ячейки $D_{i,j,k}$ могут быть найдены при помощи следующего выражения:

$$coord(i, j, k) = \left(i \cdot \frac{x_s}{cell_x}, j \cdot \frac{y_s}{cell_y}, k \cdot \frac{z_s}{cell_z} \right). \quad (1)$$

Характеристикой ячейки $D_{i,j,k}$ выступает значение электронной плотности ρ , которая приходится на геометрические координаты данной ячейки. Поэтому массив D будем в дальнейшем называть картой электронной плотности.

Для нахождения значения ячейки $D_{i,j,k}$ карты электронной плотности используется формула

$$D_{i,j,k} = \sum_{n=1}^N \psi^{(n)}(|\mathbf{x}^{(n)} - coord(i, j, k)|). \quad (2)$$

где $\psi^{(n)}(r)$ – функция электронной плотности для частицы n , r – расстояние между рассматриваемой ячейкой и n -м атомом материала. Вокруг атома функция электронной плотности $\psi^{(n)}(r)$ может быть аппроксимирована Гауссианом

$$\psi^{(n)}(r) = \exp(-\beta r^2) \quad (3)$$

где β – константа, выбираемая таким образом, чтобы плотность существенно уменьшалась и была близко к нулю на расстоянии превышающем α – постоянную кристаллической решетки.

После заполнения карты электронной плотности D , в ней можно выделить ячейки, в которых значения суммарной электронной плотности меньше определенного значения ψ_ρ . Данная величина является минимальной, начиная с которой можно считать, что ячейка характеризует заполненную частицами область материала. Значение ψ_ρ для конкретного материала можно найти, взяв значение ячейки $D_{i,j,k}$, координаты которой соответствует геометрическому центру единичной вакансии.

Для хранения результатов анализа создается массив признаков C , размеры которого соответствуют массиву D . Значение ячеек массива C находятся по формуле

$$C_{i,j,k} = \begin{cases} 1, & D_{i,j,l} > \delta_\rho \\ 0, & D_{i,j,l} \leq \delta_\rho \end{cases} \quad (3)$$

где «0» характеризует «пустоту», «1» обозначает, что ячейка принадлежит материалу.

Для нахождения ячеек, которые формируют поверхность материала, используется модификация рекурсивного алгоритма растровой заливки изображений [5].

Данный алгоритм был модифицирован для использования в трехмерном пространстве. В ячейку $C_{i,j,k}$ заносится значение «2», что соответствует «внешнему пустому пространству». Вокруг этой ячейки $D_{i,j,k}$ проверяются соседние $C_{i+\Delta i, j+\Delta j, k+\Delta k}$, $\Delta i = -1, 0, 1$, $\Delta j = -1, 0, 1$, $\Delta k = -1, 0, 1$. Если ячейка $C_{i+\Delta i, j+\Delta j, k+\Delta k}$ содержит характеристику «1», то она изменяет свое значение на «3». Характеристика «3» обозначает то, что данная ячейка участвует в формировании поверхности материала. Если же значение ячейки $C_{i+\Delta i, j+\Delta j, k+\Delta k}$ было равным «0», то идет рекурсивный вызов данной функции, но уже для ячейки $C_{i+\Delta i, j+\Delta j, k+\Delta k}$.

Процедура «раскраски» начинается с верхней части массива, например, с ячейки $C_{0,0,j,z_s/cell_z}$, так как данная ячейка будет всегда принадлежать внешнему пустому пространству. В результате получается 3-мерный массив C , в котором содержится информация о пустотах и их границах.

Непосредственно для нахождения атомов, формирующих поверхность, используется следующий подход. Если ячейка $C_{i,j,k}$ имеет характеристику «3» и вклад в электронную плотность этой ячейки от атома n больше некоторого значения δ_ρ^* , то есть если

$$(C_{i,j,k} = 3) \wedge (\psi^{(n)}(|\mathbf{x}^{(n)} - coords(i, j, k)|) > \psi_\rho^*),$$

то считается, что атом участвует в формировании поверхности материала и добавляется в список атомов S . Пороговое значение электронной плотности ψ_ρ^* можно оценить, разделив ψ_ρ на количество первых соседей в кристаллической решетке для конкретного материала. Последовательно рассматривая для каждого атома ячейки $C_{i,j,k}$, можно выделить все поверхностные атомы. Блок-схема данного алгоритма приведена на рис. 1.

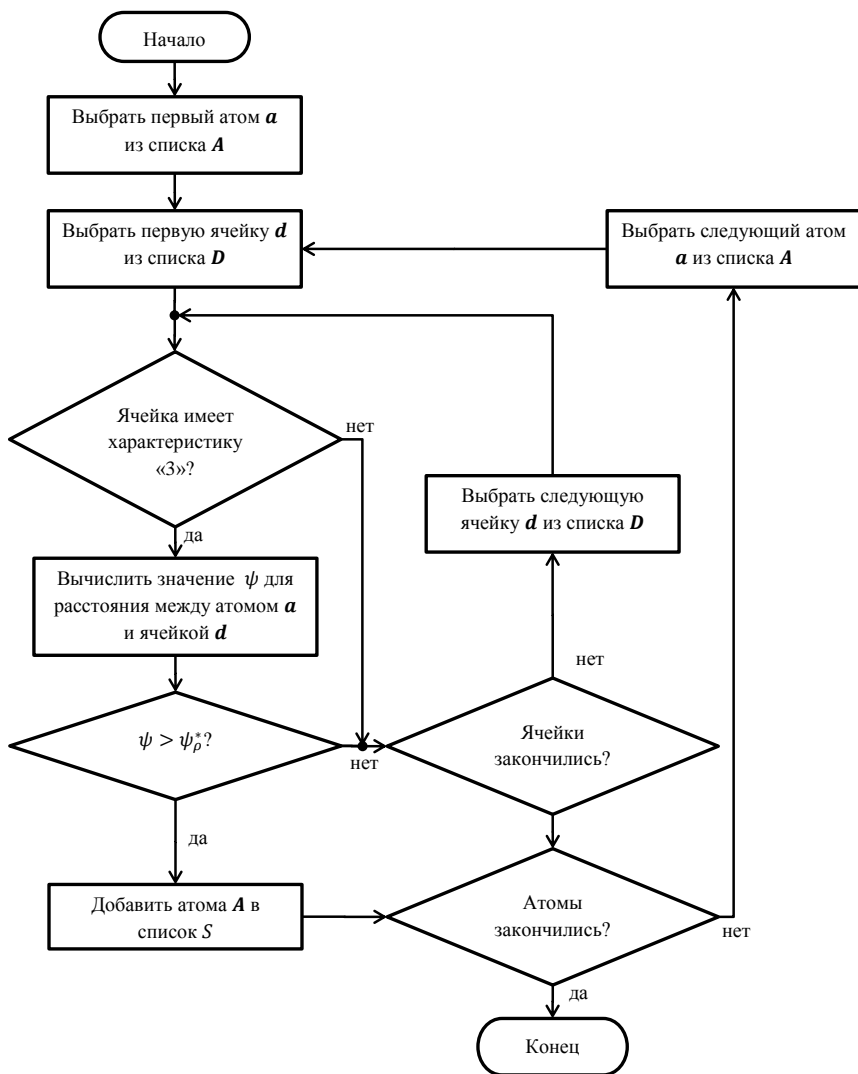


Рис. 1 – Блок-схема алгоритма нахождения поверхностных атомов

Верификация предложенного алгоритма. Разработанные алгоритмы были протестированы для набора типичных задач и для случаев со сложной геометрией поверхности, когда она неоднозначно определена по высоте. Так, на рис. 2 приведен срез микрокристаллита со сложной геометрией.

Для данного тестового примера была построена «карта плотности» (см. рис. 3, *а*), массив характеристик (см. рис. 3, *б*). Его обработка после нахождения поверхности приведена на рис. 3, *в*.

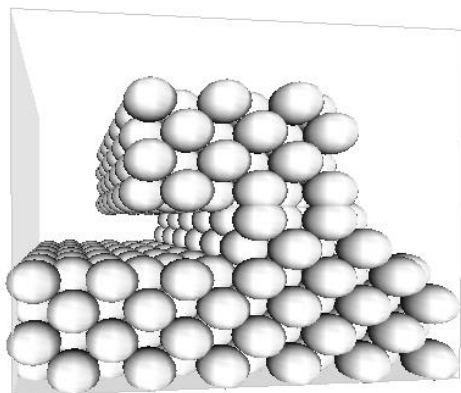


Рис. 2 – Срез материала с внутренней вакансией

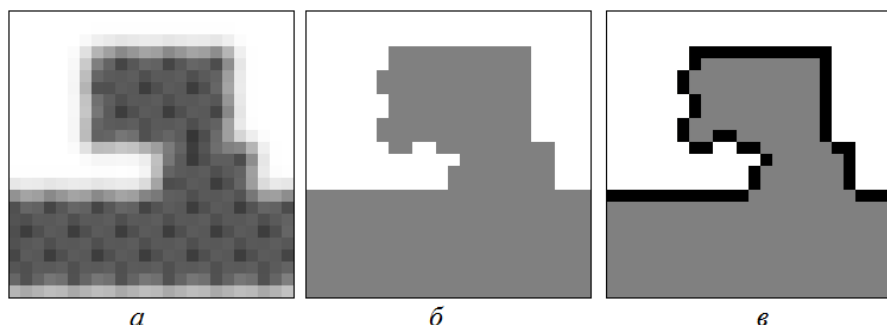


Рис. 3 – Этапы работы алгоритма обнаружения поверхности для сложных поверхностей: *а* – срез карты электронной плотности, *б* – срез массива характеристик до нахождения поверхности, *в* – обработанный массив характеристик

Далее были отобраны атомы, образующие поверхность материала. Результаты приведены на рис. 4. Как видно из рисунка, разработанные методы позволяют корректно находить поверхность материала со сложной геометрией. Тестовые расчеты для других примеров тоже дали корректные результаты.

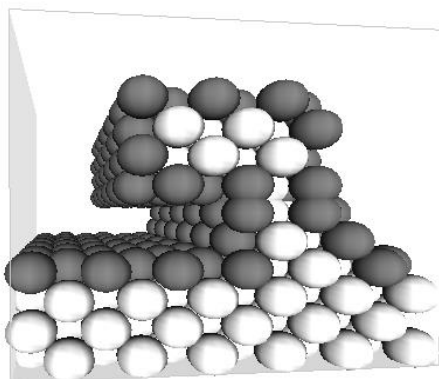


Рис. 4 – Атомы, формирующие поверхность и ограничивающие вакансию. Светлым цветом обозначены атомы внутри материала, серым – поверхностные атомы.

Выводы. Таким образом, в данной работе был предложен вычислительный метод, при помощи которого можно получать координаты частиц, которые формируют поверхность материала. Используя данный метод, могут быть найдены макрохарактеристики материала, такие как плотность, шероховатость, микронапряжения и пр.

Список литературы: 1. Haile J. M. *Molecular Dynamics Simulation: Elementary Methods* / J. M. Haile. - Chichester : Wiley, 1992. – 489 p. 2. Rapaport D. C. *The Art of Molecular Dynamics Simulation* / D. C. Rapaport. – Cambridge: Cambridge University Press, 1996. – 564 p. 3. Марченко И. Г. Молекулярная динамика с квантовой статистикой для исследования динамических свойств металлов / И. Г. Марченко, И. И. Марченко // Вестник ХНУ. – 2010. – № 933 : Сер. «Ядра, частицы, поля». Вып. 4 (48). – С. 41 – 48. 4. Куценко А. С. Компьютерная модель процесса низкотемпературного осаждения металлических пленок из атомно-ионных потоков / А. С. Куценко, И. И. Марченко // Вестник Нац. техн. ун-та "ХПИ" : сб. науч. тр. Темат. вып. : Системный анализ, управление и информационные технологии. – Харьков : НТУ "ХПИ". – 2013. – № 3 (977). – С. 153-158. 5. Павлидис Т. Алгоритмы машинной графики и обработки изображений: Пер. с англ / Т. Павлидис – М. : Радио и связь, 1986. – 400 с.

Bibliography (transliterated): 1. Haile, J. M. *Molecular Dynamics Simulation: Elementary Methods*. New York: Wiley, 1992. Print. 2. Rapaport, D. C. *The Art of Molecular Dynamics Simulation*. New York: Cambridge UP., 1996. Print. 3. Marchenko, I. G., and I. I. Marchenko. "Molekuljarnaja Dinamika S Kvantovoj Statistikoju Dlja Issledovanija Dinamicheskijh Svojstv Metallov." *Vestnik Har'kovskogo Nacional'nogo Universiteta Jadra, Chasticy, Polja* 933.4(48) (2010): 41-48. Print. 4. Kucenko, A. S., and I. I. Marchenko. "Komp'juternaja Model' Processa Nizkotemperaturnogo Osazhdenija Metallicheskijh Plenok Iz Atomno-ionnyh Potokov." *Vestnik Nacional'nogo Universiteta "HPI"* 3.977 (2013): 153-58. Print. 5. Pavlidis, T. *Algoritmy Mashinnoj Grafiki I Obrabotki Izobrazhenij*. Moscow: Radio I Svjaz', 1986. Print.

Посылана (received) 05.12.2014