

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ  
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО  
ОБРАЗОВАНИЯ «МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ  
УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ М.В.ЛОМОНОСОВА»

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

КАФЕДРА ОБЩЕЙ ФИЗИКИ

Дипломная работа

**«Теоретическое исследование формирования  
золотых наноконтактов при постоянной  
температуре»**

Выполнил студент

605 группы:

Дроздов Олег Вячеславович

---

Научный руководитель:

к.ф.-м.н. С. В. Колесников

---

Допущен к защите

Зав. кафедрой \_\_\_\_\_

МОСКВА

2015

## Оглавление

<b>Введение</b>	<b>3</b>
<b>Глава 1. Теоретические и экспериментальные исследования металлических наноконтактов</b>	<b>4</b>
<b>Постановка задачи</b>	<b>8</b>
<b>Глава 2. Методика компьютерного моделирования наноструктур при постоянной температуре</b>	<b>9</b>
2.1 Метод молекулярной динамики . . . . .	9
2.2 Термостаты . . . . .	11
2.2.1 Масштабирующий термостат . . . . .	11
2.2.2 Термостат Берендсена . . . . .	11
2.2.3 Термостат Андерсена . . . . .	12
<b>Глава 3. Результаты и обсуждение</b>	<b>13</b>
3.1 Моделирование канонического ансамбля с использованием различных термостатов . . . . .	13
3.2 Растяжение золотого наноконтакта вдоль направления $[110]$ . . . . .	16
3.3 Растяжение золотого наноконтакта с горизонтальным смещением . . . . .	16
3.3.1 Смещение вдоль направления $[1\bar{1}0]$ . . . . .	16
3.3.2 Смещение вдоль направления $[001]$ . . . . .	19
3.4 Растяжение золотого наноконтакта с вращением . . . . .	21
<b>Результаты и выводы</b>	<b>23</b>
<b>Приложение</b>	<b>24</b>
<b>Литература</b>	<b>31</b>

# Введение

В современном мире трудно переоценить значимость электронных устройств для хранения, воспроизведения и передачи информации. Одним из основных направлений в физике конденсированного состояния вещества является теоретическое исследование возможности создания структур для производства более ёмких накопителей и увеличение скорости их работы. Использование металлических наноструктур открывает путь для развития подобных устройств. Существуют различные наноструктуры, претендующие на их будущее применение в электронике, такие как: нанокластеры, нанопровода, наноконтакты и тд. Данная работа посвящена изучению формирования наноконтактов. Для определения оптимальных условий для изготовления наноконтактов требуется детальное теоретическое исследование диффузионных процессов на атомном уровне. При исследовании образования контакта механическим способом, одним из важнейших с практической точки зрения является вопрос о влиянии таких факторов, как скорость и направление растяжения. Экспериментально было установлено, что при растяжении вдоль определённых направлений контакт формируется значительно более длинным и стабильным.

Настоящая работа посвящена исследованию формирования золотых наноконтактов при постоянной температуре в широком диапазоне динамических условий растяжения. Определяются наиболее подходящие скорости и направления растяжения.

# Глава 1

## Теоретические и экспериментальные исследования металлических наноконтактов

Начало исследованиям атомных контактов было положено в работе [1], где впервые было описано получение золотых наноконтактов, имеющих проводимость равную минимально возможному значению (кванту проводимости  $G_0 = \frac{2e^2}{h}$ ). Они существовали ограниченное время при достаточно низкой температуре. Статья так же примечательна тем, что в ней впервые был предложен экспериментальный метод определения структуры атомных контактов и показана возможность формирования атомных наноконтактов длиннее одного атома.

Существует несколько способов формирования наноконтактов, в их числе СТМ (скинирующая туннельная микроскопия), АСМ (атомно-силовая микроскопия), ПЭМ (просвечивающая электронная микроскопия) и метод механически управляемого разрыва. Методы АСМ и СТМ позволяют не только создавать, но и исследовать атомные контакты. С помощью СТМ удаётся создавать нанопровода длиной до 10 атомов всего за несколько секунд. Одновременно с этим данный метод позволяет определять проводимость контакта, которая при растягивании уменьшается дискретно с шагом  $G_0$  и выходит на плато при формировании линейного контакта [2] (Рис.1).

Однако, не всю информацию о формировании контакта можно получить экспериментальными методами. Некоторые вопросы может прояснить только теоретическое исследование, моделирование. Например, теоретически [3, 4] было установлено, что удлинение нанопровода происходит за счёт разрыва связей внутренних атомов, а в формировании самого контакта участвуют атомы, находящиеся на поверхности.

Очень важным фактором при формировании наноконтакта является температура процесса. При низких температурах не активизируются диффузионные процессы,

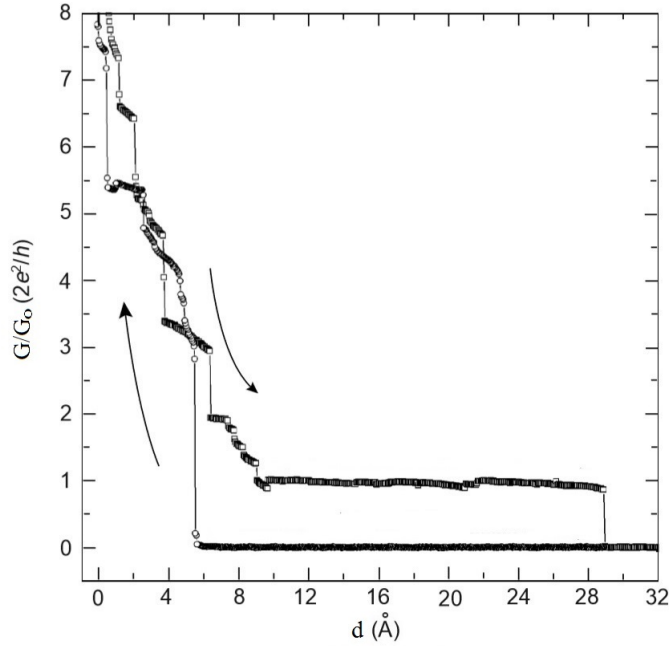


Рис. 1: Относительная проводимость  $\frac{G}{G_0}$  в зависимости от смещения ( $d$ ) двух электродов при формировании золотого наноконтакта при температуре 4.2 К.

позволяя контакту дольше оставаться в растянутом состоянии, в то же время он становится более хрупким и дальнейшее воздействие может его разорвать. При повышении температуры контакт становится более тягучим, но поверхностная диффузия атомов может приводить к неустойчивости атомной цепочки. На примере меди было установлено, что контакт формируется с меньшим напряжением при температуре 200 К [5].

В современных теоретических работах производятся попытки более детально смоделировать эксперимент и найти причины несовпадения теории и эксперимента в классических работах. Например в статье [6] авторы смещают один из электродов в горизонтальном направлении (Рис. 3).

Не менее важен вопрос о том, какие металлы позволяют формировать атомные контакты лучше. Чтобы это оценить измеряются различные физические величины. Например, в одной из статей предлагается оценивать отношения силы разрыва в бесконечной цепочке к силе разрыва кристалла [7]. В более поздней работе [8] в роли параметра для оценки вводится отношения энергии связи в цепочке к энергии связи в кристалле. Опираясь на эти критерии было установлено, что при механическом подходе к формированию контактов лучшим материалом является золото, после него идут иридий и платина, в то время как серебро и медь плохо подходят для создания атомных наноконтактов.

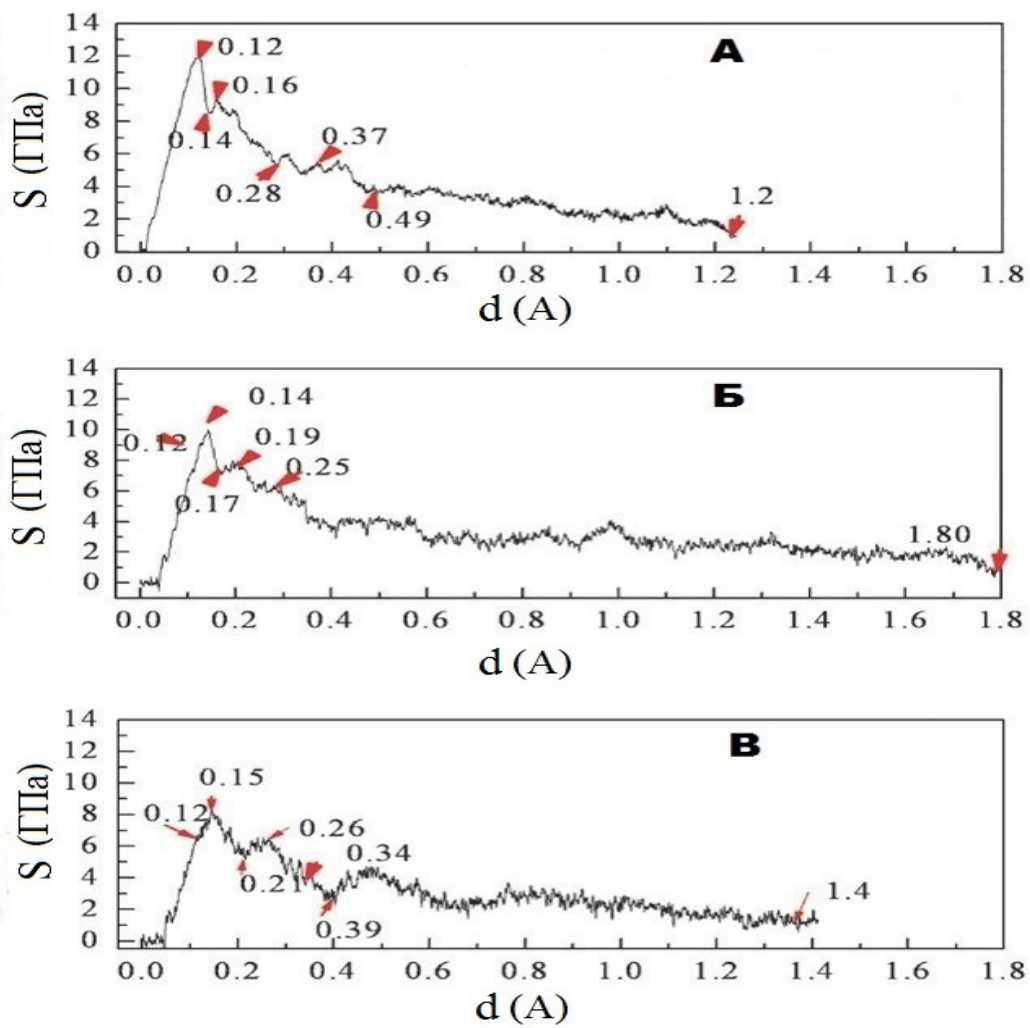


Рис. 2: . Зависимость механического напряжения ( $S$ ) наноконтакта от растяжения ( $d$ ) при различных температурах: (А) 100К, (Б) 200К, (В) 300К .

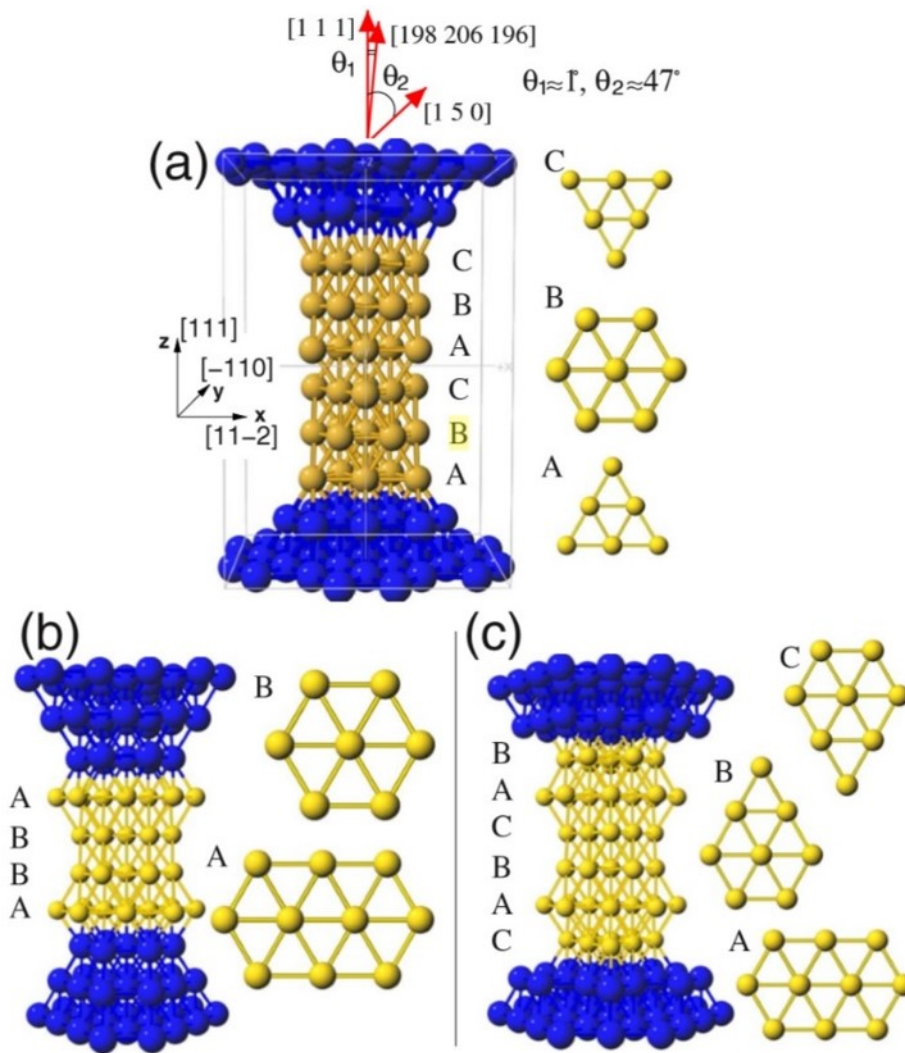


Рис. 3: Начальные конфигурации и направления растяжения, синим цветом обозначены закреплённые атомы, жёлтым – свободные.

## Постановка задачи

Основной целью данной работы является определение диапазонов скоростей и направлений растяжения и вращения контакта, в которых он формируется более длинным и стабильным, в частности, были поставлены следующие задачи:

1. Разработать комплекс программ для реализации алгоритма молекулярной динамики, дополнить её термостатами для моделирования систем при постоянной температуре.
2. Провести моделирование растяжения наноконтактов в широком диапазоне внешних условий и выявить зависимости между результатами моделирования контакта и внешними условиями растяжения.



## Глава 2

# Методика компьютерного моделирования наноструктур при постоянной температуре

### 2.1 Метод молекулярной динамики

Основным методом, использованным в данной работе, является метод молекулярной динамики [9], известный ещё с середины прошлого века. Появления этого метода относят к пионерским работам Олдера и Вайнрайта [10], предложивших в 1957 году метод вычисления фазовых траекторий систем твёрдых шаров. Классический метод молекулярной динамики исходит из сопоставления реальному молекулярному объекту математического образа системы материальных точек, движение которых описывается системой уравнений Ньютона:

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \mathbf{F}_i \quad (1)$$

Если рассматривать малый интервал времени ( $dt$ ), то силу  $\mathbf{F}$  можно считать постоянной. Величина интервала времени должна быть значительно меньше любого из периодов движения, свойственного системе. В данной работе  $dt = 1 \times 10^{-14} \text{ c} = 10 \text{ фс}$ . Значение силы  $\mathbf{F}_i(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n)$ , зависящей только от координат, можно рассчитать, зная потенциальную энергию  $U(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n)$  системы:

$$\mathbf{F}_i = - \frac{\partial U(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n)}{\partial \mathbf{r}_i} \quad (2)$$

Потенциалы взаимодействия берутся в форме Клери-Росато [11]:

$$E_C = \sum_i (E_R^i + E_B^i) \quad (3)$$

$$E_B^i = - \left\{ \sum_j \xi_{\alpha\beta}^2 \exp \left[ -2q_{\alpha\beta} \left( \frac{r_{ij}}{r_0^{\alpha\beta}} - 1 \right) \right] \right\}^{1/2} \quad (4)$$

$$E_R^i = \sum_j \left[ A_{\alpha\beta}^1 \left( \frac{r_{ij}}{r_0^{\alpha\beta}} - 1 \right) + A_{\alpha\beta}^0 \right] \exp \left[ -p_{\alpha\beta} \left( \frac{r_{ij}}{r_0^{\alpha\beta}} - 1 \right) \right] \quad (5)$$

Для расчётов использовались параметры межатомного взаимодействия, представленные в работе [12].

Решение системы дифференциальных уравнений первого порядка может быть получено с помощью применения оператора эволюции:

$$\Gamma(t) = e^{iLt} \Gamma(0) \quad (6)$$

$$iL = \dot{\Gamma} \Delta_{\Gamma} \quad (7)$$

где  $iL$  - оператор Лиувилля и  $\Gamma$  многомерный вектор независимых переменных (координат и скоростей). Обычно, результат действия оператора эволюции на координаты не может быть посчитан аналитически. В таком случае используется разложение в ряд по малому параметру  $\Delta t = t/P$ , которое применяется  $P$  раз:

$$\Gamma(t) = \prod_{i=1}^P \left( \prod_s e^{iL_s \Delta t} \right) \Gamma(0) \quad (8)$$

и вносит ошибку  $t^n/P^{n-1}$  при разложения до  $n$ .

Используя гамильтонов формализм, оператор эволюции Лиувилля записывается следующим образом:

$$iL = \sum_{i=1}^N \mathbf{v}_i \nabla_{\mathbf{r}_i} + \sum_{i=1}^N \left[ \frac{\mathbf{F}_i(\mathbf{r})}{m_i} \right] \nabla_{\mathbf{v}_i} \quad (9)$$

Применяя формулу Троттера [13]:

$$e^{A+B} = \lim_{N \rightarrow \infty} \left( e^{\frac{A}{N}} e^{\frac{B}{N}} \right)^N \quad (10)$$

где  $A$  и  $B$  необязательно коммутирующий операторы, получим разложение оператора эволюции:

$$e^{iL\Delta t} = e^{iL_1 \frac{\Delta t}{2}} e^{iL_2 \Delta t} e^{iL_1 \frac{\Delta t}{2}} \quad (11)$$

здесь  $iL_1 = \sum_{i=1}^N \left[ \frac{\mathbf{F}_i(\mathbf{r})}{m_i} \right] \nabla_{\mathbf{v}_i}$  и  $iL_2 = \sum_{i=1}^N \mathbf{v}_i \nabla_{\mathbf{r}_i}$

В явном виде приближённый оператор эволюции, позволяющий получить коор-

динаты и скорости за время  $\Delta t$  записывается следующим образом:

$$\mathbf{r}(\Delta t) = \mathbf{r}(0) + \Delta t \mathbf{v}(0) + \frac{\Delta t^2}{2m} \mathbf{F}[\mathbf{r}(0)] \quad (12)$$

$$\mathbf{v}(\Delta t) = \mathbf{v}(0) + \frac{\Delta t^2}{2m} (\mathbf{F}[\mathbf{r}(0)] + \mathbf{F}[\mathbf{r}(\Delta t)]) \quad (13)$$

Таким образом мы приходим к скоростному методу Верле [14].

## 2.2 Термостаты

Температура в молекулярной системе определяется через среднюю кинетическую энергию, приходящуюся на одну степень свободы:

$$k_B T_0 = \frac{2 \langle K \rangle}{s}, \quad (14)$$

где

$$\langle K \rangle = \frac{1}{t_{calc}} \int_0^{t_{calc}} K(t) dt, \quad (15)$$

$$K(t) = \sum_{i=1}^N \frac{m_i \mathbf{v}_i^2(t)}{2}, \quad (16)$$

$s = 3N - 6$  – полное число степеней свободы системы. Для поддержания постоянной температуры модельной системы необходимо взаимодействие с внешней средой, термостатом. При этом уравнения движения модифицируются определённым образом.

### 2.2.1 Масштабирующий термостат

Простейшим способом сохранения кинетической энергии системы является использование масштабирующего термостата [15]. Для этого скорости умножаются на фактор  $S = (\frac{T_{ref}}{T})^{1/2}$ , где  $T_{ref}$  – требуемая температура. После чего система релаксируется некоторое число шагов, далее процедура повторяется.

### 2.2.2 Термостат Берендсена

Поместим теперь модельную систему в вязкую жидкость. Тогда уравнения Ньютона можно заменить на уравнения Ланжевена [16], т.е. рассматривать движение атомов как движение броуновских частиц:

$$\frac{dr_{i,\alpha}}{dt} = v_{i,\alpha} \quad (17)$$

$$m_i \frac{dv_i}{dt} = F_{i,\alpha} - \gamma v_{i,\alpha} + \frac{R_{i,\alpha}(t)}{m_i} \quad (18)$$

где

$$\langle R_{i,\alpha}(t) \rangle = 0 \quad (19)$$

$$\langle R_{i,\alpha}(t) R_{j,\beta}(t + \tau) \rangle = 2m_i \gamma k_B T_{ref} \delta(\tau) \delta_{ij} \delta_{\alpha\beta} \quad (20)$$

Следствием ланжевеновской динамики является термостат Берендсена [17]. В основе его работы лежат следующие соотношения:

$$\frac{dK}{dt} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \left[ \sum_{i,\alpha} \frac{1}{2} m_i v_{i,\alpha}^2(t + \Delta t) - \sum_{i,\alpha} \frac{1}{2} m_i v_{i,\alpha}^2(t) \right] \quad (21)$$

После элементарных преобразований и учитывая формулу для дисперсии  $R_{i,\alpha}$ , получаем:

$$\left( \frac{dT}{dt} \right) = 2\gamma(T_{ref} - T) \quad (22)$$

Что равносильно дополнительному слагаемому в уравнениях Ньютона:

$$\frac{dr_{i,\alpha}}{dt} = v_{i,\alpha} \quad (23)$$

$$m_i \frac{dv_i}{dt} = F_{i,\alpha} - \gamma \left( \frac{T_{ref}}{T} - 1 \right) v_{i,\alpha} \quad (24)$$

Параметр  $\gamma$  является характеристикой термостата, обратным временем релаксации.

### 2.2.3 Термостат Андерсена

Рассмотрим метод моделирования при постоянной температуре, предложенный Андерсеном [18]. Связь системы с термостатирующей средой осуществляется за счёт стохастических столкновений, которые испытывают случайные атомы. Между столкновениями система является микроканоническим ансамблем и движется согласно обычным законам Ньютона. Стохастические столкновения гарантируют, что система не нарушает распределение Гиббса. Связь системы с термостатом характеризуется частотой случайных столкновений  $\nu$ . Последовательные столкновения не коррелированы, следовательно распределения интервалов времени между ними является Пуассоновым [19, 20].

$$P(t, \nu) = \nu e^{-\nu t} \quad (25)$$

Где  $P(t, \nu)dt$  – вероятность того, что следующий удар произойдёт в интервале от  $t$  до  $t+dt$ .

# Глава 3

## Результаты

### 3.1 Моделирование канонического ансамбля с использованием различных термостатов

Прежде чем перейти непосредственно к исследованию факторов влияющих на формирование наноконтакта, необходимо определить, какой из вышеописанных термостатов больше подходит для решения данной задачи. Тестирование различных термостатов происходило на двух модельных системах. Первая представляла собой поверхность золота (001), которая релаксировалась при температуре 300 К. В рамках первой модели термостаты показали себя одинаково хорошо, система достаточно быстро ( $\sim 1000$  шагов) достигала требуемой температуры и сохраняла её постоянной. Было проверено, нарушают ли используемые термостаты распределения Максвелла по модулю скорости, и установлено, что лучше всего распределению Максвелла отвечает термостат Берендсена (Рис. 4).

В качестве второй системы была выбрана модель наноконтакта, приближенная к экспериментальной. Из золота вырезалась цилиндрическая заготовка длиной 9 нм и диаметром 3.6 нм, ось симметрии которой совпадает с направлением [110]. В середине заготовки был произведён надрез, чтобы локализовать область формирования контакта. По два слоя сверху и снизу были закреплены. Термостатировались только верхние и нижние десять слоев для того, чтобы исключить влияние термостатов непосредственно на область образования наноконтакта. Моделирование происходило при постоянной скорости растяжения в  $v_z = 2 \times 10^{-1}$  м/с по оси z. В рамках тестовых расчётов было установлено, что масштабирующий термостат и термостат Андерсена не подходят для моделирования таких систем. При их использовании возникает большая разность скоростей в приграничных слоях между термостатируемой и нетермостатируемой областью, вследствие чего именно там происходит разрыв заготовки. При использовании термостата Берендсена этого не происходит, так как в нём

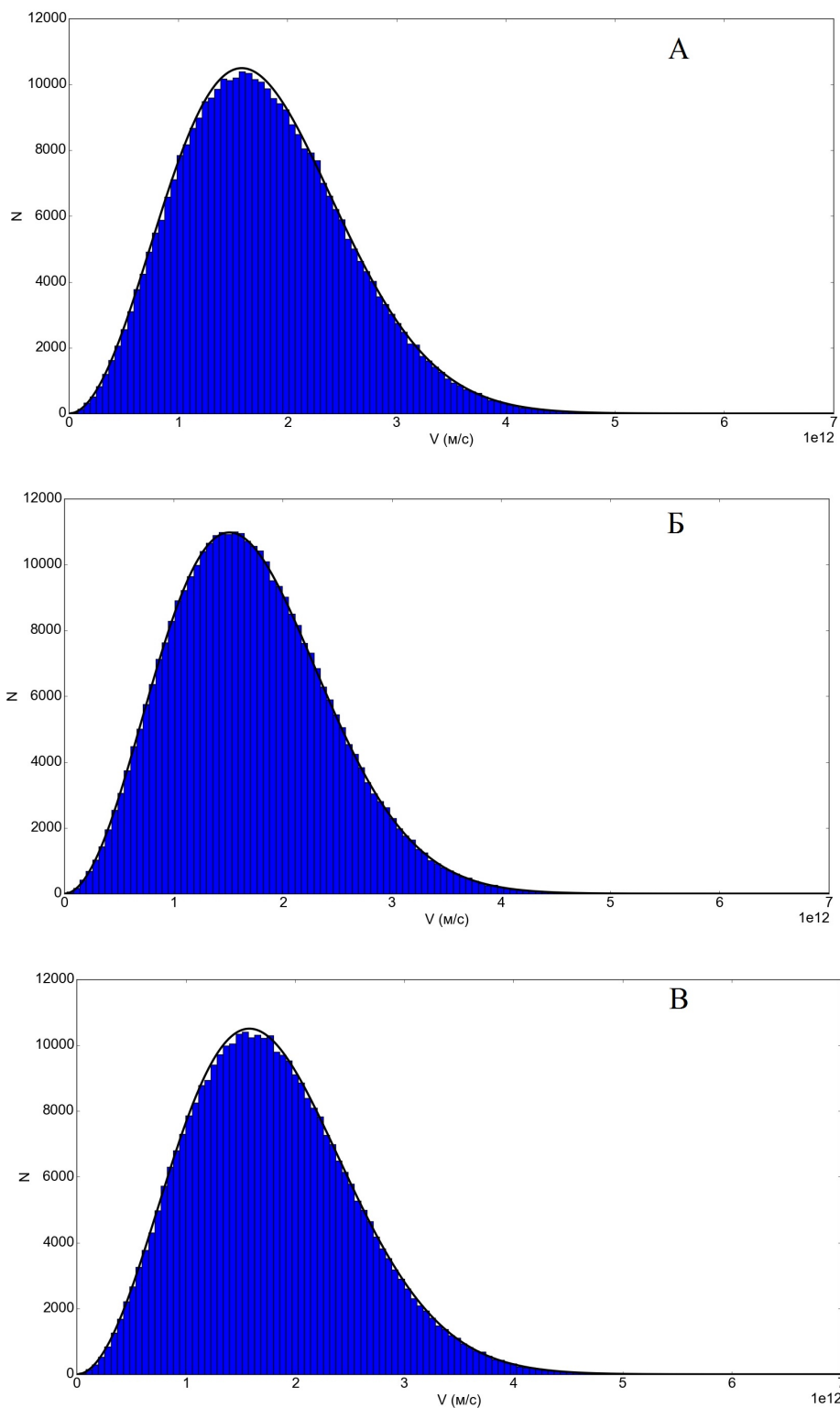


Рис. 4: Распределение количества частиц ( $N$ ) по модулю скорости ( $V$ ) при моделировании с использованием масштабирующего термостата (А), термостата Берендсена (Б) и термостата Андерсена (Б). Сплошной линией обозначено теоретическое распределение Максвелла для данной температуры.

скорости изменяются через производную, что приводит к сглаживанию неоднородности скоростей. В результате, в качестве основного термостата для моделирования процесса растяжения наноконтакта был выбран термостат Берендсена.

## 3.2 Растяжение золотого наноконтакта вдоль направления $[110]$

На первом этапе исследования формирования золотых наноконтактов заготовка подвергалась растяжению в направлении  $[110]$ , без смещения. Было установлено, что непосредственно перед началом образования одноатомного контакта происходит формирование структуры, практически сохраняющей кристаллическую форму, длиной свыше 1 нм и шириной в 2-3 атома в области разрыва (Рис. 5А). Эти результаты хорошо согласуются с экспериментальными данными [21]. При дальнейшем растяжении вышеописанная структура начинает утончаться, образуя наноконтакт толщиной в один атом и длиной до нескольких атомов, после чего происходит разрыв (Рис. 5Б). В момент разрыва контакта наблюдается скачок температуры в области его формирования (Рис. 5В) из-за увеличения скоростей атомов в момент разрыва. В дальнейшем температура вновь выравнивается за счёт термостатирования. Также в момент разрыва наноконтакта наблюдается скачок потенциальной энергии системы (Рис. 5Г) вследствие резкого уменьшения числа атомных связей в контакте.

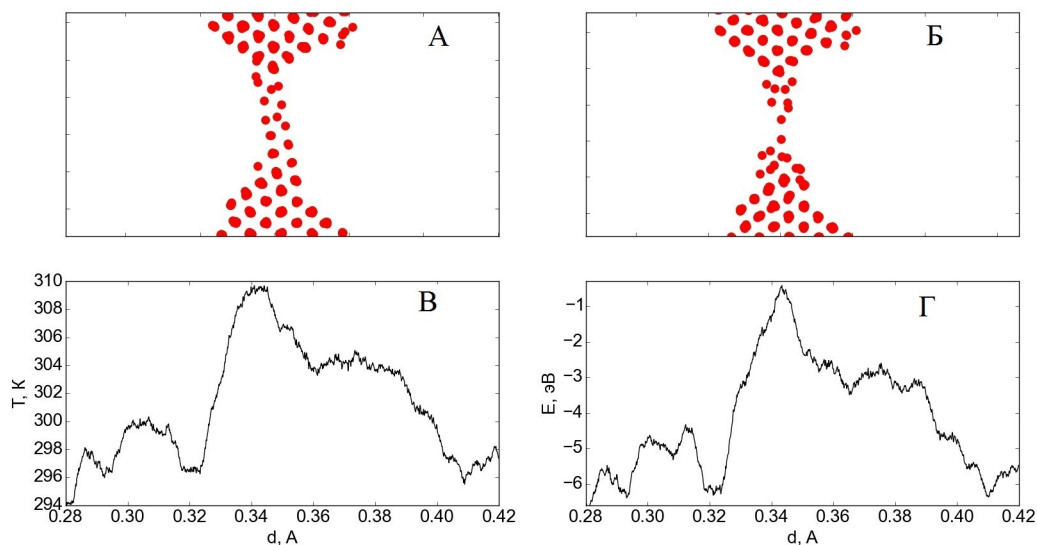


Рис. 5: Структура наноконтакта:(А) в момент начала образования атомного контакта, (Б) непосредственно перед разрывом; (В) зависимость температуры (Т) и (Г) потенциальной энергии (Е) от удлинения контакта (d). Потенциальная энергии наноконтакта отсчитывается от потенциальной энергии в момент разрыва.

### 3.3 Растяжение золотого наноконтакта со смещением

В реальном эксперименте очень сложно добиться смещения контакта в каком-либо конкретном кристаллографическом направлении. Это происходит в силу того, что проволока является макроскопической системой и малейшие дефекты могут повлечь появление деформаций сдвига и кручения, что приводит к неопределённости направления растяжения. Обычно, в теоретических работах этот факт не учитывается и исследуются только контакты растянутые вдоль направлений  $[100]$ ,  $[110]$  и  $[111]$ . В представленной работе была поставлена цель изучить этот вопрос более подробно, моделируя растяжения с дополнительным смещением. Модель, на которой проводились исследования растяжения со смещениями такая же, как в пункте 3.1. Дополнительные смещения производятся вдоль направлений  $[001]$  и  $[1\bar{1}0]$ .

#### 3.3.1 Смещение вдоль направления $[1\bar{1}0]$

При моделировании растяжения с дополнительным смещением менялся угол между направлением  $[110]$  и реальным направлением растяжения. В зависимости от этого угла строились изображения области образования контакта (Рис. 6). Угол



изменяется от 2 до 10 градусов с шагом 2 градуса. Исследование растяжения контакта со смещением в направлении  $[1\bar{1}0]$  показало, что учёт последнего сильно влияет на процесс формирования контакта. Уже при угле смещения в 2 градуса становятся заметны характерные особенности этого смещения. Во-первых, кристаллическая структура области образования контакта очень быстро разрушается, практически не образуя устойчивого наноконтакта. При увеличении угла смещения не успевают образовываться пирамидальные структуры и основания контакта получаются более плоскими. Можно также отметить, что не происходит формирования переходной области растяжения контакта, как это происходило при растяжении без дополнительного смещения (Рис.5), так как заготовка раскалывается в самом нестабильном месте. Во-вторых, одноатомный контакт перед разрывом существует недолго что по-видимому связано с деформацией его структуры. Получившиеся в результате моделирования контакты похожи на экспериментально полученные при растяжении контакта вдоль направлений  $[100]$  и  $[111]$ , которые являются невыгодными для образования наноконтактов. Одноатомный контакт вытягивается тем длиннее, чем больше угол дополнительного смещения, становясь при этом менее стабильным (Рис. 6).

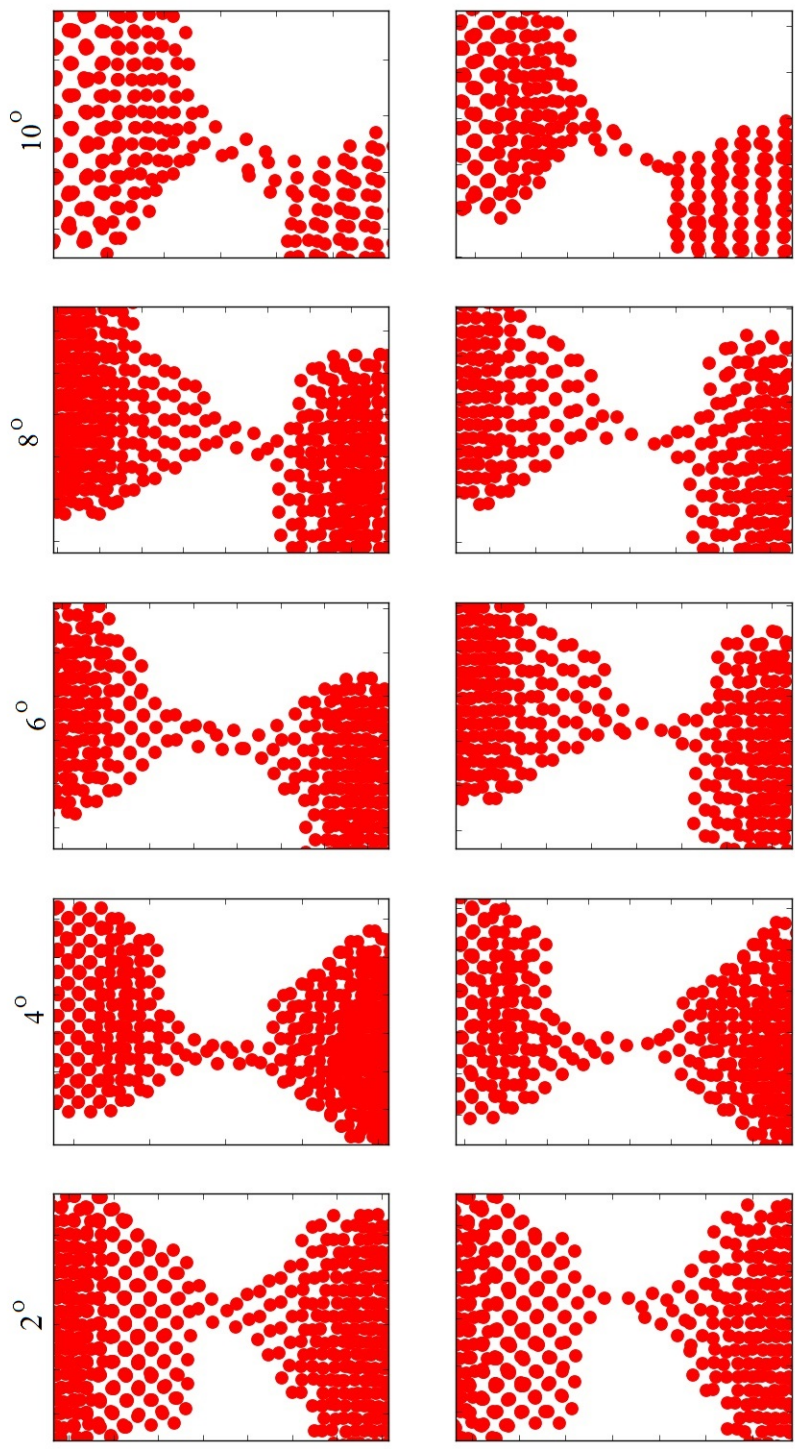


Рис. 6: Структура нанопровода в момент начала образования атомного контакта (вверху) и непосредственно перед разрывом (внизу) в зависимости от угла смещения вдоль направления  $[1\bar{1}0]$ .

### 3.3.2 Смещение вдоль направления [001]

В случае дополнительно смещения вдоль направления [001] было установлено, что зависимость от угла смещения более плавная, чем в предыдущем случае. Процесс растяжения происходит без раскалывания заготовки. Формируется ярко выраженная переходная зона образования контакта, в которую со временем диффундируют атомы со всей поверхности заготовки. Эти атомы участвуют в формировании нанопроволок шириной в 2-3 атома, при этом их длина превышает 2 нм, а структура долго остаётся похожа на структуру кристалла. При дальнейшем смещении деформация сдвига становится велика и атомные связи с противоположащей направлению смещения стороны начинают рваться. В результате образуется одноатомный нанокontakt длиной в несколько атомов, который сохраняется ограниченное время (Рис. 7). Длина одноатомного контакта зависит от начальной толщины области соединения. Последняя особенность присуща только этому направлению дополнительного смещения и не зависит от угла, проявляясь во всех модельных случаях. Более детальное моделирование момента разрыва показало, что такая структура наноконтакта более стабильна, чем в случае дополнительного смещения в направлении  $[1\bar{1}0]$  и, в то же время, является менее протяжённой, так как дополнительные атомы собираются в основании контакта, формируя пирамидальные структуры, не участвуя в его удлинении. В случае продолжения растяжения оставшиеся связи рвутся, нанокontakt разрушается, оставляя пирамидальные структуры с вытянутыми в направлении контакта вершинами.

Сравнивая полученные по растяжению с дополнительным смещением результаты можно прийти к выводу, что растяжение происходит плавнее и образуются более длинные нанопровода в том случае, когда дополнительное смещение производится вдоль направления с наибольшим расстоянием между атомными слоями. При этом связи между атомами соседних слоёв слабее, что делает заготовку более тягучей и не происходит её раскалывания во время растяжения. Также на образование контакта влияют процессы диффузии атомов по различным поверхностям кристалла. Исходя из этого, можно прийти к заключению, что для различных целей использования наноконтактов можно использовать разные направления дополнительного смещения при растяжении: для стабильных широких нанопроводов лучше подходит направление [001], а для длинных одноатомных контактов – направление  $[1\bar{1}0]$ .

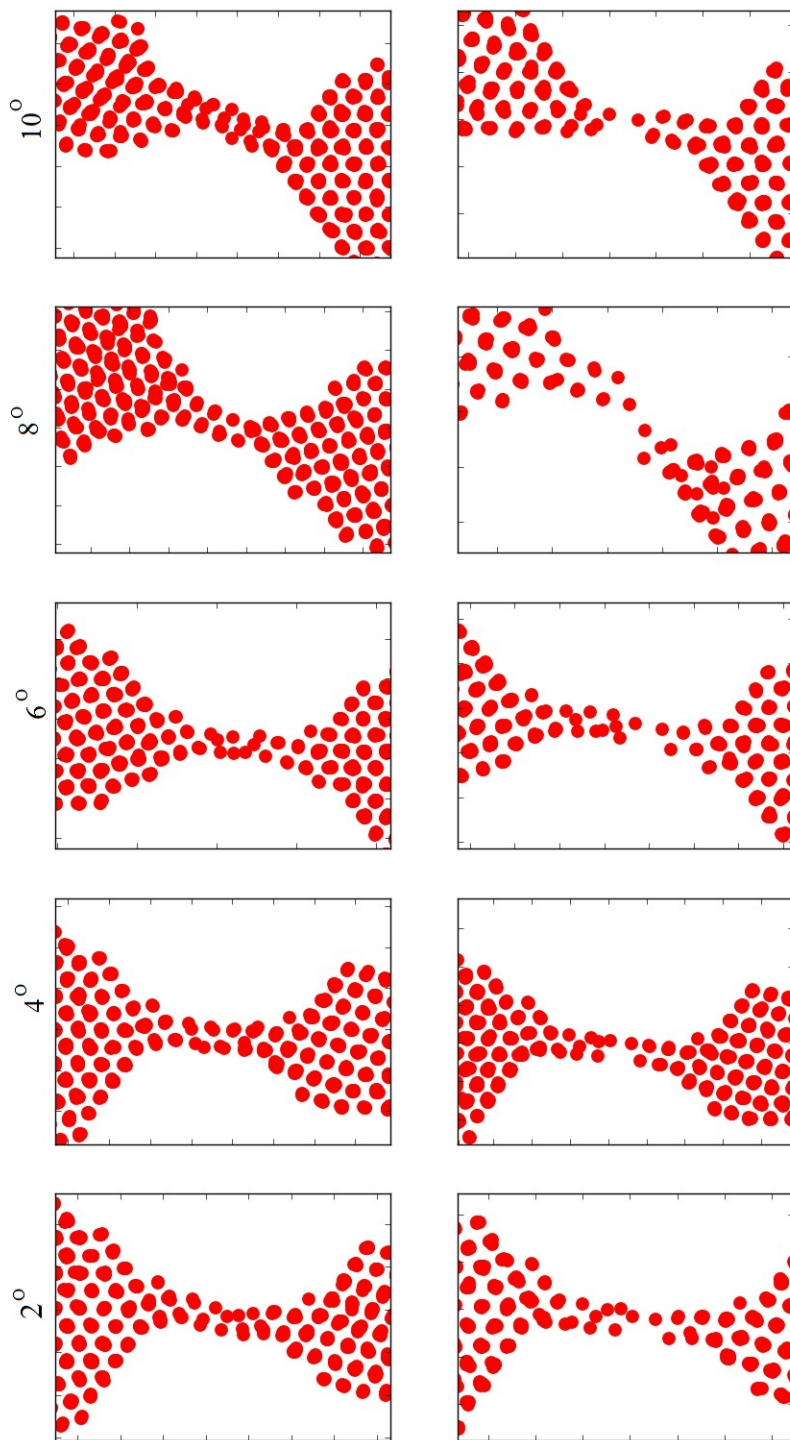


Рис. 7: Структура нанопровода в момент начала образования атомного контакта (сверху) и непосредственно перед разрывом (снизу) в зависимости от угла смещения вдоль направления [001].

### 3.4 Растяжение золотого наноконтакта с вращением

При моделировании растяжения наноконтакта с дополнительным вращением изменялся угол между одинаковыми кристаллографическими направлениями, перпендикулярными направлению  $[110]$ , верхнего и нижнего электрода. В зависимости от этого угла строились изображения области образования контакта (Рис. 8). Угол изменялся в диапазоне от 2 до 10 градусов с шагом 2 градуса. В результате моделирования было установлено, что при вращении электрода в области контакта образуются структуры в виде двух пересекающихся пирамидок, характерные для растяжения контакта вдоль направления  $[111]$ . Так как это направление является невыгодным для формирования контактов, образование длинных атомных цепочек не происходит. Возможно, резкий обрыв наноконтактов обусловлен высоким механическим напряжением, возникающим из-за деформации кручения. Ещё одной характерной особенностью этого варианта растяжения является смещение области формирования контакта от середины к закреплённому электроду. При угле закручивания выше 2 градусов на положения области разрыва больше влияет деформация кручения, нежели место предварительного утончения заготовки. Было установлено, что при дополнительном вращении область формирования контакта нестабильна и её структура далека от кристаллической. Это приводит к тому, что между началом формирования контакта и его разрывом проходит достаточно мало времени. Сравнивая данные результаты и результаты по растяжению без дополнительных смещений и вращений можно сказать, что вращение вносит дестабилизирующий вклад в модельную систему, который приводит к ухудшению формирования атомных наноконтактов. Как следствие можно отметить тот факт, что для создания контактов экспериментально необходимо минимизировать число дефектов, которые могут привести к возникновению деформаций кручения.

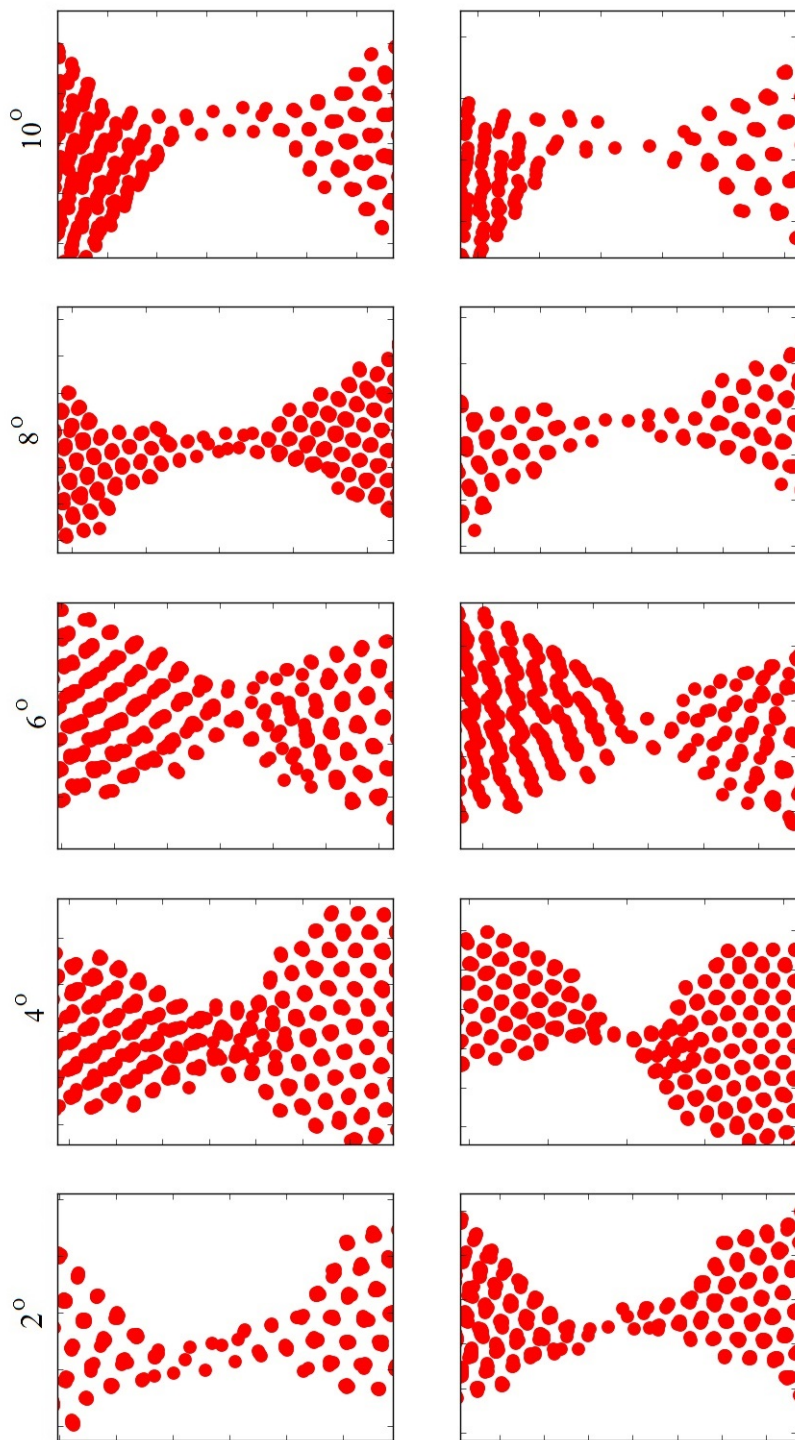


Рис. 8: Структура нанопровода в момент начала образования атомного контакта (сверху) и непосредственно перед разрывом (снизу) в зависимости от угла поворота.

## Результаты и выводы

1. Разработан программный комплекс реализующий метод молекулярной динамики при постоянной температуре. Данный комплекс позволяет решать широкий спектр задач, начиная от изучения фазовых переходов и заканчивая исследованием формирования различных наноструктур.
2. В качестве примера работоспособности программного комплекса было исследовано формирование золотого наноконтакта. При этом было установлено, что:
  - (a) При дополнительном смещении одного из концов проволоки вдоль направления  $[001]$  вытягиваются стабильные нанопровода, имеющие толщину 2-3 атома и сохраняющие структуру близкую к кристаллической. В то время как при дополнительном смещении вдоль направления  $[1\bar{1}0]$  образуются более длинные атомные наноконтакты.
  - (b) При дополнительном закручивании контакта во время растяжения происходит разрушение кристаллической структуры в области контакта, вследствие чего атомные наноконтакты формируются очень плохо.

## Приложение

В данном приложении представлена реализация метода молекулярной динамики на языке программирования Fortran90. Реализована возможность закреплять верхние и нижние слои атомов, задавать скорость растяжения и угол вращения. Также реализованы следующие термостаты: Андерсена, Берендсена и масштабирующий.

Блок отвечающий за последовательный вызов модулей программы:

```
call read_data
call init_random_seed
call maxwell
do k = 1, nsteps
    call pos_vel
if (tau.ne.0d0) then
    call thermo_berendsen
else if (Rf.ne.0d0) then
    call thermo_andersen
else if (iscal.ne.0d0) then
    call thermo_scale
end if
do i = natom - nstat_up + 1, natom
    call rotate
end do
t = 2 * ekin / Nf / kbt
epot = er - ebound
etot = epot + ekin
end do
```

Модуль чтения входных данных

```
subroutine read_data
open(1, file='Input.txt.')
```



```

open(2, file='Coords.txt')
do i = 1, nparam
  read(1, *) parameter(i)
end do
do j = 1, natom
  read(2, *) coords(j), vels(j)
end do
end subroutine read_data

```

Модуль интегрирования уравнений движения

```

subroutine pos_vel
  do i = nstat_down + 1, natom - nstat_up
    x(i) = x(i) + vx(i) * h / 2
    !x(i) = x(i) - sx * nint(x(i) / sx - 0.5)
    y(i) = y(i) + vy(i) * h / 2
    !y(i) = y(i) - sy * nint(y(i) / sy - 0.5)
    z(i) = z(i) + vz(i) * h / 2
    !z(i) = z(i) - sz * nint(z(i) / sz - 0.5)
  end do
call force
  do i = nstat_down + 1, natom - nstat_up
    vx(i) = vx(i) + fx(i) * h / m
    vy(i) = vy(i) + fy(i) * h / m
    vz(i) = vz(i) + fz(i) * h / m
    x(i) = x(i) + vx(i) * h / 2
    !x(i) = x(i) - sx * nint(x(i) / sx - 0.5)
    y(i) = y(i) + vy(i) * h / 2
    !y(i) = y(i) - sy * nint(y(i) / sy - 0.5)
    z(i) = z(i) + vz(i) * h / 2
    !z(i) = z(i) - sz * nint(z(i) / sz - 0.5)
  end do

```

```

do i = natom - nstat_up + 1, natom
  x(i) = x(i) + vx(i) * h
  y(i) = y(i) + vy(i) * h
  z(i) = z(i) + vz(i) * h
end do
return
end subroutine pos_vel

```

Модуль составления списка парных атомов

```

subroutine pairs
do i = 1, natom - 1
  do j = i + 1, natom
    dxt = x(i) - x(j)
    dxt = dxt - sx * nint(dxt / sx)
    dyt = y(i) - y(j)
    dyt = dyt - sy * nint(dyt / sy)
    dzt = z(i) - z(j)
    dzt = dzt - sz * nint(dzt / sz)
    drt = sqrt(dxt**2 + dyt**2 + dzt**2)
    if ((drt.lt.Roff).and.(drt.gt.1e-7)) then
      np = np + 1
      ip(np) = i
      jp(np) = j
    end if
  end do
end do
return
end subroutine pairs

```

Модуль расчёта потенциальной энергии

```

subroutine energy
do i = 1, np

```

```

w(i) = cut_off(dr(i), Ron, Roff)
qexp1(i) = - (xi**2) * exp(- 2 * q * ((dr(i) / r0) - 1))
pexp1(i) = (a1 * (dr(i) / r0 - 1) + a0) *
  exp(- p * ((dr(i) / r0) - 1))
Eba(ip(i)) = Eba(ip(i)) - qexp1(i) * w(i)
Eba(jp(i)) = Eba(jp(i)) - qexp1(i) * w(i)
er = er + 2 * pexp1(i) * w(i)
end do
do i = 1, natom
  Eba(i) = sqrt(Eba(i))
  ebound = ebound + Eba(i)
end do
return
end subroutine energy

```

#### Модуль расчёты сил

```

subroutine force
call pairs
call energy
do i = 1, np
  dw(i) = cut_off_div(dr(i), Ron, Roff)
  qexp = -(q * xi**2) * exp(-2 * q * ((dr(i) / r0) - 1))
  pexp = (a1 * p * (dr(i) / r0 - 1) + a0 * p - a1) *
    exp(-p * ((dr(i) / r0) - 1))
  f(i) = ((1 / Eba(ip(i)) + 1 / Eba(jp(i)))
    * (qexp + qexp1(i) * dw(i) / 2) + 2 * (pexp + pexp1(i)
    * dw(i))) / r0 / dr(i)
  f(i) = f(i) * 16
  fx(ip(i))=fx(ip(i))+f(i)*dx(i)
  fx(jp(i))=fx(jp(i))-f(i)*dx(i)
  fy(ip(i))=fy(ip(i))+f(i)*dy(i)

```

```

        fy(jp(i))=fy(jp(i))-f(i)*dy(i)
        fz(ip(i))=fz(ip(i))+f(i)*dz(i)
        fz(jp(i))=fz(jp(i))-f(i)*dz(i)
    end do
    return
end subroutine force

```

Модуль, отвечающий за вращения атомов

```

subroutine rotate
    x_t = x - x0
    y_t = y - y0
    x = x0 + cos(d_theta * pi / 180) * x_t
    + sin(d_theta * pi / 180) * y_t
    y = y0 - sin(d_theta * pi / 180) * x_t
    + cos(d_theta * pi / 180) * y_t
    return
end subroutine rotate

```

Модуль генерации распределения Максвелла

```

subroutine maxwell
do i = nstat_down + 1, n - nstat_up, 2
    call random_number (u1)
    call random_number (u2)
    x(i) = sigma * cos(2 * pi * u1) * sqrt(-2 * log(u2))
    x(i + 1) = sigma * sin(2 * pi * u1) * sqrt(-2 * log(u2))
end do
return
end subroutine maxwell

```

Масштабирующий термостат

```

subroutine thermo_scale
scale = sqrt(t_ref / t)

```

```

do i = nstat_down + 1, nthermo_down
    vx(i) = vx(i) * scale
    vy(i) = vy(i) * scale
    vz(i) = vz(i) * scale
end do
return
end subroutine thermo_scale

```

Термостат Андерсена

```

subroutine thermo_andersen
do i = nstat_down + 1, nthermo_down
    call random_number (R)
    if (R.lt.Rf) then
        call random_number (u1)
        call random_number (u2)
        vx(i) = sigma*cos(2*pi*u1)*sqrt(-2*log(u2)) * 1e10
        call random_number (u1)
        call random_number (u2)
        vy(i) = sigma*cos(2*pi*u1)*sqrt(-2*log(u2)) * 1e10
        call random_number (u1)
        call random_number (u2)
        vz(i) = sigma*cos(2*pi*u1)*sqrt(-2*log(u2)) * 1e10
    end if
end do
return
end subroutine thermo_andersen

```

Термостат Берендсена

```

subroutine thermo_berendsen
lambda = 1 + h / (2 * tau) * (t_ref / t - 1)
do i = nstat_down + 1, nthermo_down
    vx(i) = vx(i) * lambda

```

```
        vy(i) = vy(i) * lambda
        vz(i) = vz(i) * lambda
end do
return
end subroutine thermo_berendsen
```

## Литература

- [1] H. Ohnishi, Y. Kondo, K. Takayanagi, Quantized conductance through individual rows of suspended gold atoms, *Nature* **395**, 780 (1998)
- [2] T. Kizuka, Atomic configuration and mechanical and electrical properties of stable gold wires of single-atom width, *Phys. Rev. B* **77**, 155401 (2008)
- [3] F. Sato et al., Computer simulations of gold nanowire formation: the role of outlayer atoms, *Appl. Phys. A* **81**, 1527 (2005)
- [4] A.L. Klavsyuk et al., Molecular dynamics study of Co-Au and Ag-Au bimetallic atomic chain formation, *Eur. Phys. J. B* **85**, 331 (2012)
- [5] Liu, F. Wang, J. Zhao, L. Jiang, M. Kiguchib and K. Murakoshib, Theoretical investigation on the influence of temperature and crystallographic orientation on the breaking behavior of copper nanowire, *Chem. Phys.* **11**, 6514 (2009)
- [6] F. Tavazza, L. E. Levine and A. M. Chaka, Elongation and breaking mechanisms of gold nanowires under a wide range of tensile conditions, *J. Appl. Phys.* **106**, 04352 (2009)
- [7] S.R. Bahn, K.W. Jacobsen, Chain Formation of Metal Atoms, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 266101 (2001)
- [8] А.Л. Клавсюк, С.В. Колесников, Е.М. Смелова, А.М. Салецкий, Моделирование процесса формирования металлических наноконтактов методом молекулярной динамики, *ФТТ* **53**, 2356 (2011)

- [9] Д.В. Хеерман, Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике, М.: Наука, 1990.
- [10] В.Ж. Alder, Т.Е. Wainright, Phase Transition for a Hard Sphere System, *J. Chem. Phys.* **27**, 1208-1209 (1957).
- [11] F. Cleri, V. Rosato, Tight-binding potentials for transition metals and alloys, *Phys. Rev. B* **48**, 22 (1993).
- [12] N.N. Negulyaev, V.S. Stepanyuk, W. Hergert, P. Bruno, and J. Kirschner, Atomic-scale self-organization of Fe nanostripes on stepped Cu(111) surfaces: Molecular dynamics and kinetic Monte Carlo simulations, *Phys. Rev. B* **77**, 085430 (2008).
- [13] H.F. Trotter, On the product of semi-groups of operators, *Proc. Amer. math. Soc.* **10**, 545 (1959).
- [14] W.C. Swope, H.C. Andersen, P.H. Berens and K.R. Wilson, A computer simulation method for the calculation of equilibrium constants for the formation of physical clusters of molecules: Application to small water clusters, *J. Chem. Phys.* **76**, 637 (1982)
- [15] W.G. Hoover, A.J.C. Ladd and B. Moran, High-Strain-Rate Plastic Flow Studied via Nonequilibrium Molecular Dynamics, *Phys. Rev. Lett.* **48**, 26 (1982).
- [16] И.А. Квасников, Термодинамика и статистическая физика. Том 3. Теория неравновесных систем. М.: Едиториал УРСС, 2003.
- [17] H.J.C. Berendsen, J.P.M. Postma, W.F. van Gunsteren, A.DiNola and J.R. Haak, Molecular dynamics with coupling to an external bath, *J. Chem. Phys.* **81**, 3684 (1984).
- [18] H.C. Andersen, Molecular dynamics at constant pressure and/or temperature. *J. Chem. Phys.* **72**, 2384 (1980).



- [19] W. Weller, An introduction to Probability Theory and Its Application, Vol. 1, Wiley, New York, 1957.
- [20] W. Weller, An introduction to Probability Theory and Its Application, Vol. 2, Wiley, New York, 1966.
- [21] V. Rodrigues, T. Fuhrer, D. Ugarte, Signature of Atomic Structure in the Quantum Conductance of Gold Nanowires, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 4124 (2000).