

## **ЗАКЛЮЧЕНИЕ**

Исследования показали, что все рассмотренные лекарственные препараты обладают в некоторой степени фотосенсибилизирующими свойствами при возбуждении в полосу поглощения в УФ и видимом спектральном диапазоне.

Помимо описанных средств изучался также препарат фукорцин. Фукорцин – комбинированный препарат, получаемый из фенола, борной кислоты, резорцина, ацетона, раствора фуксина, этилового спирта и дистиллированной воды [3]. Следует отметить, что состав препарата может быть существенно отличен от приведённого в результате производства, так как некоторые указанные в составе вещества неустойчивы к воздействию света. Были измерены спектры поглощения и люминесценции препарата, установлено, что хромофоры устойчивы к воздействию света, однако люминесценция незначительная и, вероятно, определяется несколькими веществами, установить вклад определённого вещества в люминесценцию не удалось.

### **Литература**

1. Плавский В.Ю., Третьякова А.И., Микулич А.В., Плавская Л.Г., Юдина Н.А., Инновационные методы повышения противомикробной активности антибактериальных препаратов. Инновац. технологии в медицине.2013Т.1.
2. Красновский А. А. мл. Фотодинамическая регуляция биологических процессов: первичные механизмы // Проблемы регуляции в биологических системах / Под общей ред. А. Б. Рубина. – М.-Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2006. – 480 с.
3. Интернет-адрес: <http://ru.wikipedia.org/wiki/Фукорцин>

## **МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ АНИЗОТРОПИИ ПОРОГОВОЙ ЭНЕРГИИ СМЕЩЕНИЯ В ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛАХ**

**М. А. Дайняк**

### **ВВЕДЕНИЕ**

Параметром, характеризующим скорость развития радиационных каскадов, является величина пороговой энергии смещения атома из своего узла кристаллической решётки  $E_d$ . Чем выше эта величина, тем больший порог имеется для начала развития каскада, тем меньше будет иметь материал радиационных повреждений при данной энергии налетающих частиц.  $E_d$ , как правило, в несколько раз превышает величину энергии термического (равновесного) создания дефектов. [1]

При сообщении налетающей частицей атому матрицы достаточной энергии, атом покинет свой узел решётки. Если энергия меньше  $E_d$ , то в ходе релаксации напряжений и термической диффузии образованная пара Френкеля может спонтанно рекомбинировать, т.к. атом не покинул зону неустойчивости.

Вследствие анизотропии кристалла  $E_d$  сильно зависит от направления смещения атома. В источниках указывают, как правило, энергию смещения, усреднённую по всем кристаллографическим направлениям.

## МОДЕЛЬ РАСЧЁТНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

Для расчёта пороговой энергии смещения был выбран метод молекулярной динамики (МД) за его наглядность, относительную простоту реализации. В качестве потенциалов межатомного взаимодействия металлов были взяты соответствующие ЕАМ потенциалы (метод погруженного атома – МПА), созданные и опубликованные различными авторами. Преимуществом МПА по сравнению с парными потенциалами является эффективный учет многочастичного взаимодействия, что позволяет описывать уменьшение энергии связи, приходящейся на одну связь, при увеличении координационного числа. Он также дает правильную оценку энергии образования вакансии, так как он к ней подгоняется. Он подгоняется также ко всем упругим постоянным [2].

Расчёт проводился для трёх переходных металлов – железа (ОЦК), никеля и золота (ГЦК). Для расчёта пороговой энергии смещения создавалась модель кристаллита в виде кристаллической матрицы. В данной системе выбирался атом решётки, ближайший к центру кристаллита. Выбранному атому придавалась скорость в различных направлениях, соответствующая определенной энергии. Выбранные направления лежат в двух перпендикулярных плоскостях, параллельных плоскостям (001) и (010). Направления выражались в градусах в сферической системе координат. Придаваемая энергия постепенно увеличивалась с шагом 2 эВ. По углу шаг составлял 22,5 градуса. В силу симметрии кристаллической ячейки расчёт проводился от 0 до 67,5° по углу  $\varphi$  и от 90° до 22,5° по углу  $\theta$  (см. рисунок 1). Интервал энергий составлял от 6 до 50 эВ (для железа), от 12 до 100 эВ (для никеля).

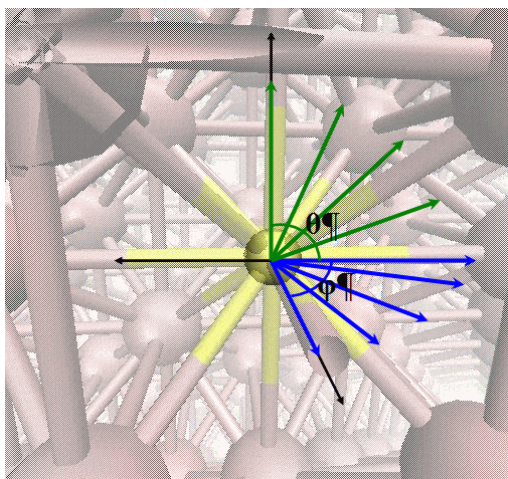


Рис. 1. Направления скоростей выбранного атома матрицы

Расчёт модели проводился на компьютере с использованием программы XMD. XMD представляет собой одну из программ, реализующих метод МД. Программа распространяется свободно в исходных кодах. Разработана Джоном Рифкиным (John Rifkin) в университете штата Коннектикут в США. Программа работает в консольном режиме.

Выходные файлы визуализировались и анализировались с помощью программ MS Excel и OriginLab. Для упрощения процесса анализа выходных файлов также была написана

программа на языке Object Pascal. Для трёхмерной визуализации просчётов использовалась программа VMD.

Размер моделируемого нанокристалла составлял в нанометрах приблизительно  $4,5 \times 4,5 \times 4,5$ . Для ОЦК решётки число атомов в модели составляло 5488, для ГЦК решётки 6912. Шаг по времени составлял 1 фемтосекунду. Моделируемый промежуток времени составлял: для установления температуры – 50 фс, для моделирования динамики – 1000 - 1250 фс, для релаксации – 50 фс. Моделируемый ансамбль – NVT. Температура для расчёта 300 К. При моделировании использовались свободные граничные условия.

В качестве выходного параметра использовалось расстояние рассматриваемого атома от его начального положения. Если после достаточного времени моделирования оно оказалось больше радиуса ячейки Вигнера-Зейтца, то считаем, что атому сообщилась энергия, не меньшая, чем  $E_d$ . Дальнейшая задача состояла в определении для каждого направления минимальной энергии, при которой атом покидает свой узел и не возвращается.

## РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Полученное распределение пороговой энергии  $E_d$  по углам для металлов, участвовавших в расчёте, выглядит следующим образом:

Табл. 1

Направление, градус		$E_d$ , эВ		
$\varphi$	$\theta$	Железо	Никель	Золото
0	90	8	30	14

22,5	90	14	36	18
45	90	12	34	12
67,5	90	16	46	16
0	67,5	18	42	16
22,5	67,5	22	74	26
45	67,5	14	50	16
67,5	67,5	18	92	18
0	45	12	34	16
22,5	45	26	24	14
45	45	8	62	26
67,5	45	16	30	14
0	22,5	14	34	18
22,5	22,5	12	56	20
45	22,5	12	46	22
67,5	22,5	12	40	22
<b><math>E_d</math> среднее, эВ</b>		<b>14,6</b>	<b>45,6</b>	<b>18</b>

Для того, чтобы проанализировать анизотропию  $E_d$  наглядно, была построена круговая диаграмма для металлов на фоне фрагментов их кристаллических решёток (рис. 2, 3).

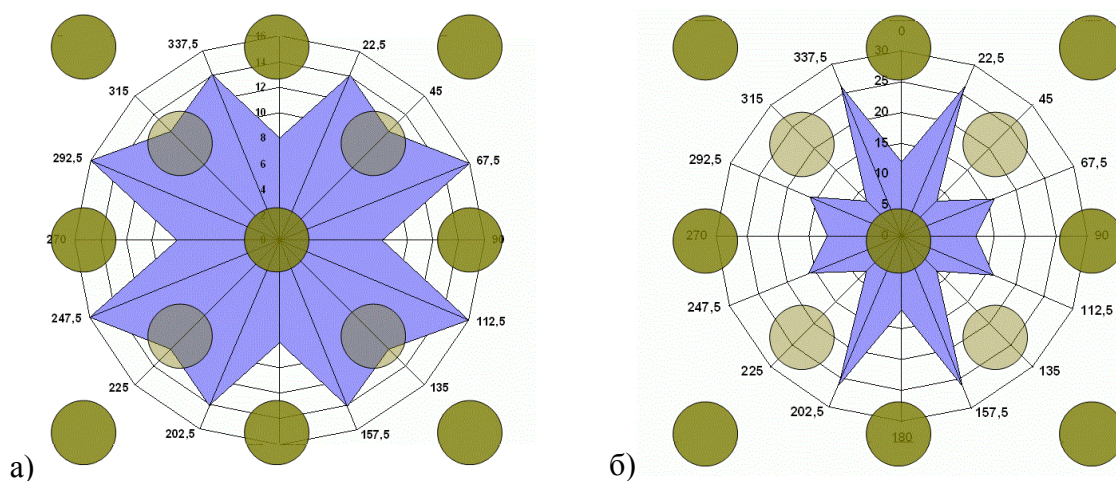


Рис. 2. Величина  $E_d$  для ОЦК железа при 300К при различных углах  $\varphi$  и фиксированном угле  $\theta$ : а)  $\theta = 90^\circ$ , б)  $\theta = 45^\circ$ . Атомы, находящиеся не на одном уровне с атомом, которому придается энергия, выделены светлым оттенком

Средняя пороговая энергия смещения может определяться различными способами [3]. Мы использовали наиболее распространенный из них, который заключается в нахождении среднего арифметического пороговых энергий смещения, получаемых для каждого из рассматриваемых направлений. По различным источникам, экспериментальные значения пороговой энергии для железа составляют 17-22 эВ [3], для никеля около 25 эВ, для золота около 20 эВ.

Заметное отличие значения  $E_d$  при кристаллографически эквивалентных углах, например, при угле  $\varphi = 22,5^\circ$  и  $\varphi = 67,5^\circ$  и фиксированном

угле  $\theta = 90^\circ$  объясняется недостаточной статистикой по температурным колебаниям.

Стоит также отметить, что при заданных условиях расчёта наблюдался перескок атома только в ближайшее междоузлие, исключая попадание в поры ячейки.

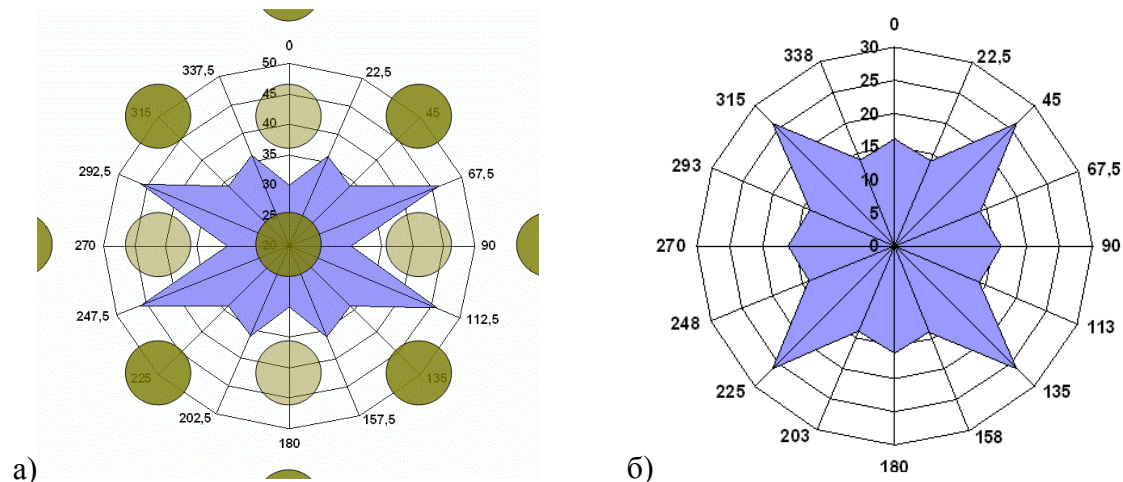


Рис. 3. Величина  $E_d$  для ГЦК металлов при 300К при различных углах  $\phi$  и фиксированном угле  $\theta$ : а) никель,  $\theta = 90^\circ$ , б) золото,  $\theta = 45^\circ$

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Анизотропия величины  $E_d$  – её неотъемлемая черта, объясняемая анизотропией кристалла. Она будет большей в тех кристаллических направлениях, которые характеризуются большей атомной плотностью и на пути по которому выбитому атому нужно сместить большее число атомов-соседей и на большее расстояние.

## Литература

1. Интернет-адрес: <http://solidbase.karelia.ru/edu/X-rays/Элучебник/Структура/IV.htm>
2. Назаров А.А., Мулюков Р.Р. Атомистическое моделирование материалов, наноструктур и процессов нанотехнологии: учебное пособие для студентов-физиков, Уфа, 2010.
3. К. Nordlund, J. Wallenius, L. Malerba Molecular dynamics simulations of threshold displacement energies in Fe // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 246 (2006) С. 322–332.