

УДК 532.6: 541.183/.183.7

**МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
РАСТЕКАНИЯ НАНОКАПЕЛЬ СВИНЦА ПО ПОВЕРХНОСТИ
МЕДИ**

В. М. Самсонов, Т. Е. Самсонов

Тверской государственной университет

Кафедра теоретической физики

С использованием метода молекулярной динамики и потенциала сильной связи исследовалось растекание наночастиц расплава свинца по грани (100) монокристалла меди. Построены кинетические зависимости для радиусов четырех нижних монослоев. В отличие от работы других авторов, в которой растекание свинца по меди моделировалось с использованием молекулярной динамики и метода погруженного атома, наши результаты демонстрируют явление псевдочастичного смачивания при растекании свинца по указанной выше грани монокристалла меди. Вместе с тем, полученные нами результаты согласуются с имеющимися экспериментальными данными по смачиванию поверхности меди свинцом в макроскопических системах и нашими собственными оценками равновесного краевого угла смачивания с использованием уравнения Юнга.

Ключевые слова: *расплав свинца, поверхность меди, псевдочастичное смачивание, прекурсионный слой, молекулярная динамика.*

1. Введение. Растекание жидкости по поверхности твердого тела является важной составной частью ряда технологических процессов, включая пайку, сварку, нанесение покрытий, получение композиционных материалов. Вместе с тем, это явление представляет интерес и с фундаментальной точки зрения, прежде всего, в связи с явным противоречием между движением линии трехфазного контакта (периметра смачивания) и принятым в гидродинамике условием прилипания. В бывшем Советском Союзе имелись две научных школы, которые занимались экспериментальными и теоретическими исследованиями процесса растекания: школа П.А. Ребиндера, возглавляемая затем Б.Д. Суммом [1, 2], и школа А.И. Быховского, автора монографии [3]. В настоящее время в нашей стране

исследования в области кинетики и механизмов растекания практически не проводятся, несмотря на отмеченную выше практическую значимость данного явления. Следует также отметить, что именно представителями школы П.А. Ребиндера – Е.Д. Щукиным и В.С. Ющенко – еще в 70-х гг. были выполнены пионерские исследования, посвященные применению метода молекулярной динамики к изучению кинетики растекания [4, 5]. Разумеется, учитывая ограниченные возможности компьютерной техники того времени, объектами исследования в указанных работах являлись даже не наноклапты, а очень малые двумерные кластеры, содержащие всего 19 атомов. В 90-х гг. с использованием методов Монте-Карло и молекулярной динамики мы моделировали растекание наноклапты, состоящих из нескольких сотен атомов или взаимодействующих центров модельных полимерных молекул, а к настоящему времени с использованием высокопроизводительных, но серийных компьютеров, мы можем моделировать растекание наноклапты, содержащих до 40 тысяч атомов. С использованием суперкомпьютеров этот предел был увеличен на порядок [6].

Обычно [1-3], кинетика растекания макроскопических каплеы описывают степенными законами для размера смоченной площади, динамического контактного угла и высоты каплеы. В частности, в интересующем нас случае малых осесимметричных каплеы для радиуса периметра смачивания r_p степенной закон можно представить в виде:

$$r_p = At^n, \quad (1)$$

где A и n – постоянные, характерные для каждого режима смачивания, t – время растекания. В процессе растекания малой, но макроскопической каплеы размером порядка 1мм, т.е. каплеы, для которой можно пренебречь влиянием гравитационного поля, последовательно сменяются три режима растекания: кинетический ($n = 1$), инерционный ($n = 0.5$) и вязкий [1]. Последний режим является наиболее продолжительным и наиболее важным с практической точки зрения. В случае ограниченного (частичного) смачивания (равновесный краевой угол смачивания $\theta_e > 0$) вязкий режим обычно характеризуется значением $n = 0.1$, тогда как неограниченному смачиванию отвечает $n = 0.25$. Каждому режиму растекания соответствует линейный участок зависимости $\lg r_p$ от $\lg t$. Обычно наблюдаемые значения показателя степени n , характерные для различных случаев растекания, представлены в таблице 1.

Как отмечено в нашем обзоре [7], компьютерное моделирование процессов растекания было стимулировано примечательными результатами эллипсометрических экспериментов А.М. Казабат [8]. В соответствии с результатами этих экспериментов, для области периметра смачивания наноразмерных по толщине каплей олигомерных жидкостей – полидиметилсилоксантов (ПДМС) характерно явление динамического расслоения. При этом для радиуса r_1 первого (нижнего) монослоя наблюдается диффузионный закон $r_1 \sim t^{1/2}$, не характерный для вязкого режима растекания макроскопических каплей. В дальнейшем (см. обзор [7]). Следуя А.М. Казабат, большинство исследователей предполагало, что этот закон должен выполняться для всех случаев растекания наноразмерных каплей, включая растекание осесимметричной, первоначально сферической нанокapли диаметром порядка 1 нм. Однако в нашей работе [9] на основе молекулярно-динамического (МД) моделирования леннард-джонсовских наноразмерных каплей было достаточно убедительно показано, что диффузионный закон $r_1 \sim t^{1/2}$ не является универсальным, хотя он действительно часто наблюдается в компьютерных экспериментах.

Таблица 1. Обычно наблюдаемые законы макроскопического растекания

Тип смачивания	Экспериментальные данные по n
Полное смачивание	
Малые капли (радиальные)	0.23-0.26
Малые капли (линейные)	0.30-0.35
Большая капля (радиальная)	0.12-0.15
Неполное (частичное) смачивание	
Малые капли (радиальные)	0.10-0.12

С фундаментальной и прикладной точек зрения особый интерес представляет растекание в металлических системах, т.е. растекание каплей расплава одного металла (Me1) по поверхности другого (Me2). В некоторых металлических системах наблюдается явление псевдочастичного смачивания [10], когда на поверхности Me2 (подложке) образуется мономолекулярный или полимолекулярный слой

из атомов Me1, по которому проходит дальнейшее растекание капли, завершающееся частичным смачиванием ($\theta_e > 0$), при условии что не происходит дальнейшее распространение прекурсионного монослоя.

Ранее [11] с использованием молекулярной динамики и потенциала сильной связи [12] мы моделировали растекание нанокapель расплава меди по поверхности никеля. Для моделирования использовалась разработанная нами компьютерная программа, подробно описанная в [13]. В отличие от работы [14], в которой использовался метод погруженного атома, мы не наблюдали в указанной системе явления псевдокапильного смачивания. Однако особый интерес представляет изучение растекания свинца по поверхности меди. В работе [15] было проведено сравнительное молекулярно-динамическое исследование растекания нанокapель свинца по граням (100) и (111) монокристалла меди. Согласно результатам указанной работы, в обоих случаях наблюдается неполное смачивание. Однако на грани (111) нанокapли свинца формировали выраженный прекурсионный бислой, что является основным признаком псевдокапильного смачивания, тогда как на грани (100) наблюдался четко выраженный край капли без каких-либо признаков псевдокапильного смачивания. При этом в подтверждение своих результатов, авторы работы [15] ссылались на работу [16], посвященную экспериментальному исследованию смачивания твердой меди расплавом свинца. Однако как будет показано ниже, частичное смачивание чистой ювенильной поверхности меди расплавом свинца не согласуется с имеющимися экспериментальными данными по поверхностным натяжениям твердой меди, расплава свинца и межфазному натяжению на границе медь (т) – свинец (ж), где символами «т» и «ж» обозначены твердая и жидкая фазы, соответственно. Вывод, сделанный с использованием уравнения Юнга, согласуется с нашими молекулярно-динамическими результатами моделирования растекания нанокapель свинца по грани меди (100) с использованием потенциала сильной связи.

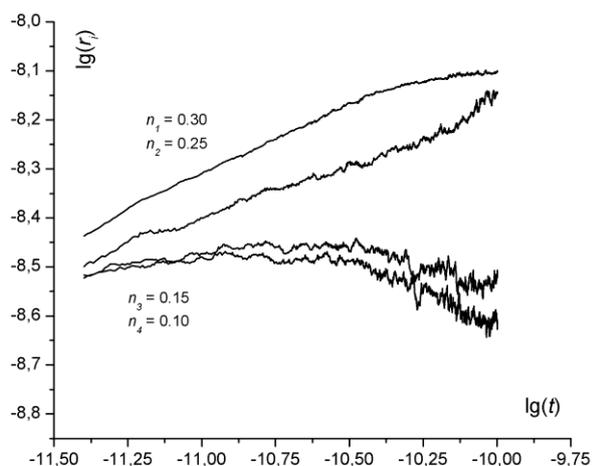
2. Детали моделирования. В данной работе растекание нанокapель расплава свинца по грани (100) жесткой решетки меди с периодом, отвечающим отрелаксированной структуре и примерно равным значению для соответствующей объемной фазы, представленному в [17], моделировалось с использованием многочастичного потенциала – потенциала сильной связи [12] и

разработанной нами компьютерной программы, описанной в [13]. Для МД моделирования растекания первоначально сферическая нанокляпка расплава свинца помещалась вблизи поверхности монокристалла меди (с зазором порядка эффективного атомного диаметра), и под действием силового поля подложки начиналось ее растекание. Обычно [7] при компьютерном моделировании растекания радиус нижнего монослоя r_1 отождествляют с радиусом периметра смачивания r_p . Однако такое отождествление будет физически адекватным только в том случае, когда при растекании не формируется выраженный прекурсионный слой, в частности прекурсионный монослой, характерный для псевдочастичного смачивания. С учетом этого, следуя [6, 15], мы определяли радиусы четырех нижних монослоев, полагая, что радиус четвертого монослоя r_4 можно отождествить с радиусом периметра смачивания капли. В качестве обоснования такого выбора можно отметить, что даже в макроскопическом случае величину краевого угла смачивания принято определять не непосредственно на подложке, а на некотором расстоянии от нее, отвечающем радиусу действия сил, которым капля подвергается со стороны подложки. В отсутствие прекурсионного слоя и динамического расслоения значения r_i для всех четырех нижних монослоев ($i = 1, 2, 3, 4$) будут близки по величине.

3. Результаты моделирования. На рис. 1 представлены зависимости $\lg r_i$ от $\lg t$ для четырех нижних монослоев ($i = 1, 2, 3, 4$), полученных в наших компьютерных экспериментах. Рис. 1 демонстрирует наличие режимов растекания, которым отвечают линейные, в некотором приближении, участки зависимости $\lg r_i$ от $\lg t$. При представлении результатов значения радиусов монослоев измерялись в метрах, а время в секундах.

Из рисунка видно, что кинетические зависимости для двух нижних монослоев близки друг к другу и, в некотором приближении, конгруэнтны. Хотя, как и следовало ожидать, скорость растекания нижнего монослоя несколько превышает скорость растекания второго монослоя. Вместе с тем, кинетические зависимости для третьего и четвертого монослоев существенно отличаются от первых двух. Более того, на завершающей стадии растекания радиусы третьего и четвертого монослоев даже уменьшаются. Это означает, что при растекании в рассматриваемой системе образуется прекурсионный бислой, на котором формируется оставшаяся часть капли. Другими словами, в

отличие от работы [15], в которой на основании молекулярно-динамического моделирования делается вывод, что при растекании в системе Pb/Cu (100) наблюдается частичное смачивание без каких-либо признаков образования прекурсионного слоя, в соответствии с результатами наших исследований, в рассматриваемой системе наблюдается псевдочастичное смачивание: неполное смачивание происходит не на «чистой» поверхности меди, а на подложке, покрытой прекурсионным бислоем. Данный вывод подтверждается результатами работы [10], в которой псевдочастичное смачивание наблюдается в ряде систем, в том числе и в системе Pb / Cu (100).



Р и с . 1 . Кинетика растекания четырех нижних монослоев капли расплава свинца, содержащей 5000 атомов по грани меди (100). Абсолютная температура $T = 700$ К. Верхняя кривая отвечает первому (нижнему) монослою, нижняя – четвертому. Показатели степени n_i найдены по линейным участкам соответствующих зависимостей.

Соответственно, если растекание завершается псевдочастичным смачиванием, то под радиусом периметра смачивания капли следует понимать не радиус нижнего монослоя, а радиус третьего или четвертого монослоя, отвечающий краю капли, а не прекурсионного слоя. Для четвертого монослоя $n_4 = 0.10$, что согласуется с приведенными в таблице 1 значениями показателя степени n , которые наблюдались экспериментально при неполном смачивании в

макроскопических системах. Сделанные на основании рис. 1 выводы, полностью согласуются с профилем нанокапли свинца на поверхности меди, представленным на рис. 2

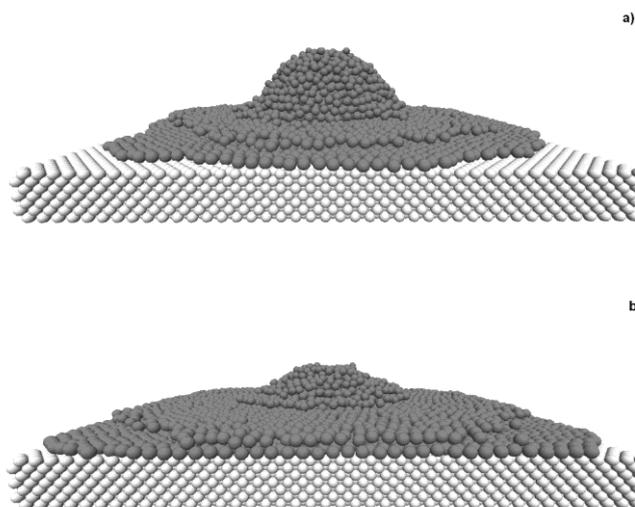


Рис. 2. Снимки моделируемых нанокапель свинца, содержащих 5000 атомов, в процессе растекания по грани монокристалла меди (100) при температуре $T = 700\text{K}$.

На рис. 3 кинетическая зависимость для радиуса четвертого монослоя r_4 сравнивается с кинетической зависимостью для радиуса капли r_4' , рассчитанному по данным из работы [15]. Как видно из рис. 3, найденное нами значение показателя степени $n_4 = 0.10$ хорошо согласуется со значением $n_4' = 0.10$, полученным по данным для $r_4'(t)$, взятым из работы [15]. В данной работе кинетическая зависимость для r_4 в двойных логарифмических переменных не строилась, и авторы априори полагали, что $n_4 = 0.5$, следуя, как уже отмечалось выше, выводу, сделанному в работе [8] применительно к растеканию квазипланарных олигомерных капель.

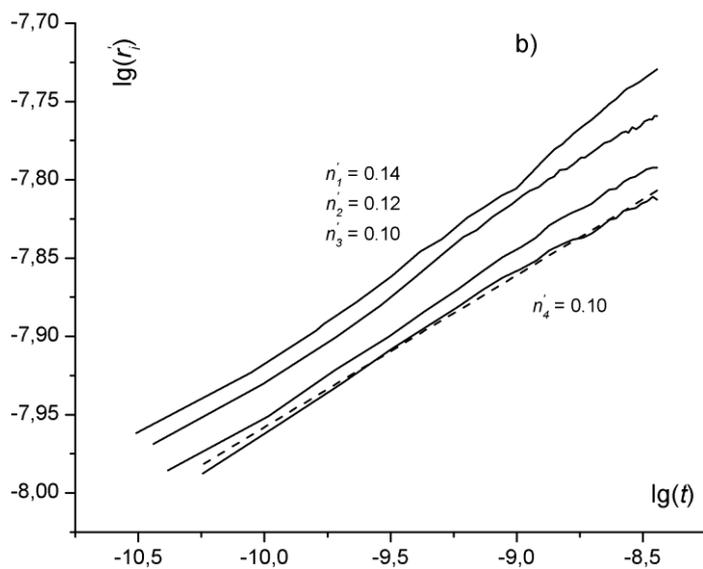
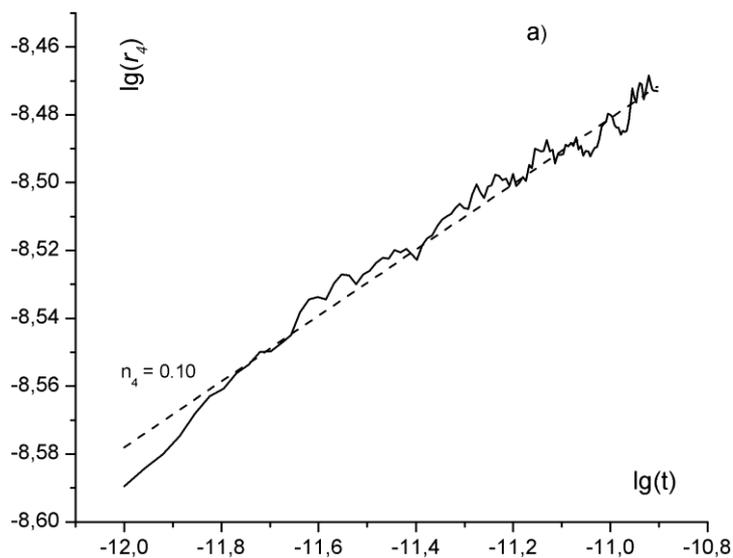
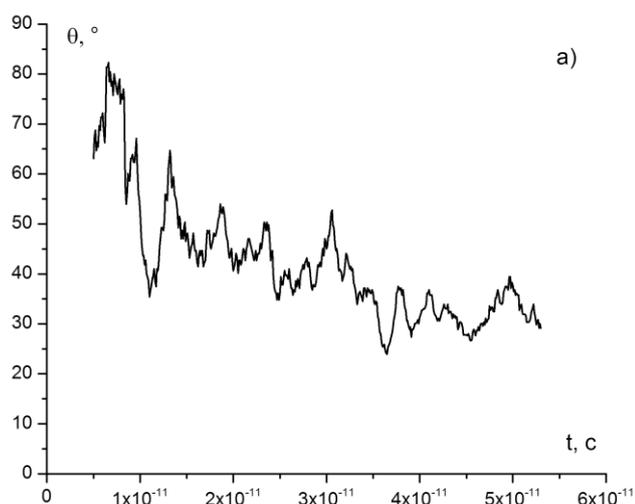


Рис. 3. Кинетическая зависимость для радиуса четвертого монослоя: а – наши результаты для нанокapли, содержащей 5000 атомов; б – результат работы [15] для капли, состоящей из 65000 атомов.

Помимо радиуса растекающейся капли, важным кинетическим параметром для нее является динамический контактный угол $\theta(t)$. Его предельное (равновесное) значение θ_e называется равновесным краевым углом смачивания. На рис. 4 кинетическая зависимость $\theta(t)$, найденная для нанокapли, состоящей из 5000 атомов, сравнивается с зависимостью $\theta_p(t)$, представленной в [15] и полученной на основе МД результатов для капель, состоящих из 65000 атомов свинца. Хотя, как и следовало ожидать, растекание нанокapли меньшего размера происходит значительно быстрее, наши результаты и результаты [15] предсказывают близкие значения θ_e .



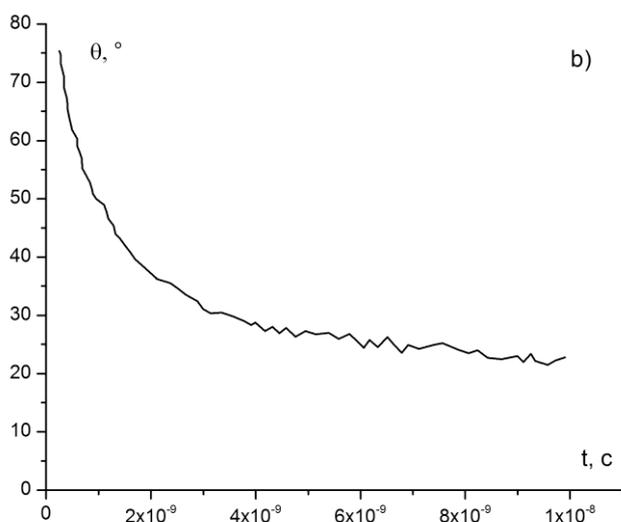


Рис. 4. Кинетическая зависимость для динамического контактного угла θ : а – наши результаты; б – результаты работы [15].
Температура $T = 700\text{K}$.

Таким образом, молекулярно-динамическое моделирование той же системы, что и в работе [15], предсказывает близкое значение показателя степени n , характеризующего кинетику изменения радиуса периметра смачивания. Вместе с тем, как наши значения показателей степени n_i ($i = 1, 2, 3, 4$), так и значения n , найденные нами по зависимости $r_i'(t)$ из [15] согласуются по величине со значением 0.1, характерным для малых, но макроскопических капель в случае частичного смачивания [1, 2].

4. Оценки равновесно краевого угла смачивания с использованием уравнения Юнга. Результаты наших молекулярно-динамических экспериментов, свидетельствующие о том, что не только на грани меди (111), но на грани (100) при растекании наночапель свинца также должно наблюдаться псевдочастичное смачивание, подтверждаются экспериментальными данными по смачиваемости поверхности поликристаллической меди расплавом свинца [16]. Согласно [16], в температурном интервале от 800 до 900 °С поверхностное натяжение чисто поверхности твердой меди

$\sigma_s^{(Cu)} = 1800 \text{ мН/м}$, поверхностное натяжение расплава свинца
 $\sigma_l^{(Pb)} = 500 \text{ мН/м}$, а межфазное натяжение на границе твердой меди и
расплава свинца $\sigma_{se}^{(Cu/Pb)} = 340 \text{ мН/м}$. Соответственно, для коэффициента
растекания

$$K = \frac{\sigma_s - \sigma_{sl}}{\sigma_l}$$

свинца по меди находим $K=2,9$. В соответствии с более современными
экспериментальными данными [18], $\sigma_s^{(Cu)} = 1473 \text{ мН/м}$, $\sigma_l^{(Pb)} = 470 \text{ мН/м}$.
Для этих значений поверхностных натяжений $K=2,4$. Таким образом, в
рассматриваемом случае коэффициент растекания заведомо больше
единицы, т.е. он не может интерпретироваться как косинус
равновесного краевого угла смачивания в уравнении Юнга

$$\cos \Theta_\infty = \frac{\sigma_s - \sigma_{sl}}{\sigma_l}.$$

Иными словами, если допустить, что растекание расплава свинца
происходит по чистой поверхности меди, то оно должно завершаться
полным смачиванием. Разумеется, для наноразмерных капель должен
иметь место размерный эффект смачивания. Действительно, на
величину K и $\cos \Theta_g$ влияют как размерная зависимость поверхностного
натяжения расплава σ_l , так и линейное натяжение периметра
смачивания, т.е. только для макроскопических капель будет точно
выполняться равенство $\Theta_g = \Theta_\infty$. Однако даже для нанокapель,
содержащих несколько тысяч атомов, влияние указанных выше
факторов на величину коэффициента растекания K не должно быть
столь значительным, чтобы уменьшить его величину до значений,
меньших единицы. Иными словами, по отношению к расплаву свинца
поверхность меди является высокоэнергетической, что должно
приводить к полному смачиванию как применительно к
макроскопическим каплям, так и для наноразмерных капель.

Примечательно также, что, согласно [16], даже при очень низком
давлении паров свинца, равным 0,1 мм ртутного столба, поверхность
меди должна быть покрыта адсорбционным слоем свинца, что приводит
к существенному уменьшению поверхностного натяжения подложки.
По данным, представленным в работе [16], поверхностное натяжение
меди в присутствии паров свинца равно $\sigma_s^{Cu(Pb)} = 780 \text{ мН/м}$, т.е. оно
примерно в два раза меньше, чем поверхностное натяжение ювенильной

поверхности меди. Соответственно, с использованием этого значения находим $K = \cos \Theta_{\infty} = 0.88$, т.е. $\Theta_{\infty} \approx 28^{\circ}$. Найденное значение хорошо согласуется с экспериментальной температурной зависимостью равновесного краевого угла смачивания, представленной в работе [16]. Согласно [16], $\Theta_{\infty} = 20^{\circ}-30^{\circ}$. Некоторый интервал, а не одно определенное значение Θ_{∞} , указывается здесь потому, что в [16] график зависимости $\Theta_{\infty}(T)$ приводится для температурного интервала от 350°C до 700°C , тогда как оценки поверхностных и межфазного натяжений производились для температурного интервала $800^{\circ}-900^{\circ}\text{C}$. При 700°C указанный график дает значение $\Theta_{\infty} = 30^{\circ}$. Соответственно, значение $\Theta_{\infty} = 20^{\circ}$ отвечает линейной экстраполяции к значению температуры, равному 900°C .

5. Обсуждение результатов. Проведенные нами молекулярно-динамические исследования предсказывают, что при растекании свинца по грани (100) поверхности меди также должно наблюдаться явление псевдочастичного смачивания, связанное с формированием выраженного прекурсионного слоя, по которому происходит растекание оставшейся части капли.

Разумеется, как уже отмечалось, необходима некоторая осторожность при сравнении результатов компьютерных экспериментов, относящихся к наноразмерным каплям, и результатов лабораторных экспериментов [16], относящихся к малым, но макроскопическим каплям. Однако поскольку для чистой поверхности меди коэффициент растекания свинца $K < 2$, есть основания полагать, что возможные размерные эффекты в данном случае не могут изменить тип смачивания, т.е. привести к переходу от полного смачивания к неполному. С этой точки зрения результат работы [15], предсказывающий неполное смачивание ювенильной грани меди (100) нанокapлями свинца в отсутствие какого-либо прекурсионного слоя, представляется физически неадекватным.

Необходимо также обсудить возможность сравнения результатов компьютерных экспериментов, относящихся к грани (100) монокристаллической меди, и результатов прямых экспериментов [16], относящихся к смачиванию свинцом поверхности поликристаллической меди. Поверхностные натяжения различных граней металлических монокристаллов и поверхности поликристаллических металлов действительно различаются [19], но это различие не является настолько

существенным, чтобы привести к изменению характера смачивания, т.е. к переходу от неравенства $K < 2$ к неравенству $K = \cos \Theta_{\infty} < 1$.

Следует также отметить, что в наших компьютерных экспериментах и в лабораторных экспериментах [16], рассматриваются два разных механизма псевдочастичного смачивания. В первом случае, подстилающий бислой из атомов свинца отвечает прекурсионному слою, образуемому на первой стадии растекания нанокapли. Во втором случае, поверхность меди была покрыта адсорбционным слоем свинца, образованным путем осаждения атомов из пара. Очевидно, характерное время растекания нанокapель (1 нс) явно недостаточно для формирования парогazовой фазы свинца и соответствующего адсорбционного слоя. Однако удовлетворительного согласия значений равновесного краевого угла смачивания, полученных в компьютерных и лабораторных экспериментах, показывает, что закономерности псевдочастичного смачивания слабо зависят от способа образования моно- или полимолекулярного слоя, представленного веществом капли. Остается дискуссионным вопрос о том, можно ли использовать термин «прекурсионный слой», предложенный в теории растекания [1] применительно к адсорбционному слою или слою, полученному каким-либо иным путем, не связанным с растеканием.

6. Заключение. Таким образом, проведенное нами молекулярно-динамическое исследование и сравнение его результатов с результатами экспериментальной работы [16], позволяет сделать вывод том, что вопреки выводу, сделанному в работе [15], псевдочастичное смачивание должно наблюдаться при растекании свинца по любой грани монокристаллической меди, а также по поверхности поликристаллической меди. Очевидно, существует сходство между псевдочастичным смачиванием и смачиванием поверхности кристалла собственным расплавом. Согласно [20], в ранних работах предполагалось, что в таких системах должно наблюдаться полное смачивание, однако более поздние эксперименты показали, что при смачивании моно- и поликристаллических твердых тел формируется сравнительно малый, но конечный равновесный краевой угол смачивания, заключенный в пределах 20° - 60° . При псевдочастичном смачивании растекание происходит по прекурсионному слою, который экранирует силовое поле основной подложки, представленной другим металлом. Для подтверждения этой гипотезы необходимо более детальное сравнение экспериментальных данных, относящихся к

явлению псевдочастичного смачивания и экспериментальных данных по смачиванию твердых поверхностей собственным расплавом, а также проведение компьютерных экспериментов на системах, воспроизводящих данный случай смачивания. К сожалению, экспериментальные данные как по псевдочастичному смачиванию, так и по смачиванию твердых металлов собственным расплавом, являются весьма скудными, что не позволяет осуществить в полной мере такой замысел.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки Российской Федерации в рамках выполнения государственных работ в сфере научной деятельности и проекта РФФИ №13-03-00119.

Список литературы

1. Сумм Б.Д., Горюнов Ю.В. Физико-химические основы смачивания и растекания. М.: Химия, 1976. 232 с.
2. Summ B.D., Samsonov V.M. Concepts of Reh binder's School and Modern Theories of Spreading // Colloids and Surfaces A., 1999. V.160. P. 63-77.
3. Быховский А.И. Растекание. Киев: Наукова думка, 1983. 191 с.
4. Щукин Е.Д., Ющенко В.С. // Коллоидный журнал, 1977. Т.39. №2. С.331.
5. Ющенко В.С., Гривцов А.Г., Щукин Е.Д. // Коллоидный журнал, 1977. Т.39. №2. С.335.
6. Heine D.R., Grest G.S., Webb II E.B. Spreading dynamics of polymer nanodroplets // Physical review E, 2003, V. 68, No 6, P. 061603.
7. Samsonov V.M. On computer simulation of droplet spreading. // Current opinion in colloid and interface science. 2011. V.16. P. 303-309.
8. Heslot F., Fraysse N., Cazabat A.M. Molecular layering in the spreading of wetting liquid drops // Letters to Nature. 1989. V.338. No 4, P.640-647.
9. Самсонов В.М., Жукова Н.А., Дронников В.В. Молекулярно-динамическое моделирование растекания наноразмерных капель по континуальной твердой поверхности. // Коллоидный журнал, 2009, т. 71, №6, С. 817-828.
10. Humfeld K.D., Garoff S., Wynblatt P. Analysis of Pseudopartial and Partial Wetting of Various Substrates by Lead// Langmuir. 2004. V. 20. P. 2726-2729.

11. Самсонов В.М., Самсонов Т.Е., Бембель А.Г. Молекулярно-динамическое моделирование растекания нанокapель меди по поверхности никеля. // Письма в ЖТФ, 2014. Т. 40. Вып. 22. С. 61-68.
12. Cleri F., Rosato V. Tight-binding potentials for transition metals and alloys // Phys. Rev. B. 1993. V. 48. № 1. P. 22-33.
13. Бембель А.Г. Молекулярно-динамическое моделирование структурных и фазовых превращений в свободных нанокластерах и наночастицах на поверхности твердого тела: Дисс... канд. физ.-мат. наук. Тверь, 2011. 173 с.
14. Benhassine M., Saiz E., Tomsia A. P., Coninck J. De. Nonreactive spreading at high temperature: Molten metals and oxides on molybdenum// Langmuir. 2009. V. 25. P. 11450-11458.
15. Webb III E.B., Grest G.S., Heine.D.R. Precursor Film Controlled Wetting of Pb on Cu// Phys. Rev. Lett., 2003. V. 91. P. 236102-236104.
16. G. L. J. Balley, H. C. Watkins. Surface Tensions in the System Solid Copper-Molten Lead. // Proc. Phys. Soc. 1950. V. B 63. P.350-358.
17. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. М.: Наука, 1978. 789 с.
18. Alchagirov A.B., Alchagirov B.B., Taova T.M., Khokonov K.B. Surface energy and surface tension of solid and liquid metals. Recommended values. // Transactions of JWRI (Osaka), 2001. V. 30. P. 287-291.
19. Хоконов Х.Б. Методы измерения поверхностной энергии и натяжения металлов и сплавов в твердом состоянии. // Поверхностные явления в расплавах и возникающих из них твердых фазах. Кишнев: Штиинца, 1974, С.196-249.
20. Найдич Ю.В., Перевертайло В.М., Григоренко Н.Ф. Капиллярные явления в процессах роста и плавления кристаллов. Киев: Наукова думка, 1983. 98 с.

**MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION OF LEAD
NANODROPLETS SPREADING ON COPPER SURFACE**

V. M. Samsonov, T. E. Samsonov

Tver State University

Chair of Theoretical Physics

Using molecular dynamics method and tight-binding potential the spreading of melt lead nanodroplets on copper (100) face was investigated. Kinetic data for the radii of four lower monolayers was obtained. In contrast to other authors (Webb III E. et al. // Phys. Rev. Lett., 2003. V. 91. No 23. P.236102), where the copper spreading was simulated using molecular dynamics and embedded atom method, our results demonstrate phenomenon of pseudopartial wetting during the lead spreading on the above copper face. At the same time, our results agree with available experimental data on the lead wetting of the copper surface by lead melt in macroscopic systems (G. L. J. Balley, H. C. Watkins. // Proc. Phys. Soc. 1950. V. B 63. P.350) and with our estimates of the equilibrium contact angle using the Young equation.

Keywords: *lead melt, copper surface, pseudopartial wetting, precursor film, molecular dynamics.*

Об авторах:

САМСОНОВ Т. Е. – научный сотрудник УНИ Тверского государственного университета;

САМСОНОВ Владимир Михайлович – заведующий кафедрой теоретической физики Тверского государственного университета, доктор физико-математических наук, профессор, e-mail: samsonoff@inbox.ru;