

ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

УДК 538.913

Н.Н. МЕДВЕДЕВ****, М.Д. СТАРОСТЕНКОВ**, А.И. ПОТЕКАЕВ*, П.В. ЗАХАРОВ***,
А.В. МАРКИДОНОВ****, А.М. ЕРЕМИН***

ЛОКАЛИЗАЦИЯ ЭНЕРГИИ В УПОРЯДОЧЕННЫХ КОНДЕНСИРОВАННЫХ СИСТЕМАХ: СПЛАВЫ СОСТАВА A_3B СО СВЕРХСТРУКТУРОЙ $L1_2$

Проанализирована локализация энергии в упорядоченных конденсированных системах на примере сплавов состава A_3B со сверхструктурой $L1_2$. Для упорядоченных сплавов Pt_3Al и Ni_3Al со сверхструктурой $L1_2$, обладающих трансляционной симметрией, методом молекулярной динамики рассмотрена возможность локализации энергии фоновых колебаний в подрешетке алюминия и возникновения локализованной моды, совершающей колебания с частотой, входящей в щель фононного спектра, при этом не являющейся дискретным бризером. Исследованы проявления ангармонизма во взаимодействии между атомами и связанные с ними особенности перераспределения энергии между подрешетками упорядоченных сплавов. Установлено, что в упорядоченных сплавах стехиометрии A_3B со сверхструктурой $L1_2$, в фононном спектре которых имеется щель, возможна локализация энергии колебаний на подрешетке атомов сорта B . Для таких сплавов, находящихся при определенной температуре в состоянии термодинамического равновесия, характерен локальный эффект спонтанной локализации энергии (эффект перераспределения энергий между подрешетками).

Ключевые слова: локализация энергии, моделирование, ангармонизм.

Введение

В настоящее время известно два основных типа локализации энергии колебаний атомов в конденсированных системах: на дефектах кристаллической решетки в форме линейных колебаний и на отдельных атомах или группе атомов строго периодических во времени нелинейных колебаний в обладающей трансляционной симметрией кристаллической решетке. Последние называют нелинейными локализованными модами, внутренними локализованными модами, дискретными бризерами (ДБ) и т.п. [1, 2].

Естественно, важны особенности обоих типов локализации. Явления, связанные с локализацией энергии линейных колебаний на дефектах кристаллической решетки, давно и подробно изучены [1–3]. Исследования особенностей нелинейных локализованных мод привлекают в настоящее время все более пристальное внимание [3]. Так, локализованные на дефектах колебательные моды являются точными решениями уравнений, линеаризованных вблизи равновесных положений атомов. При малых амплитудах эти моды не взаимодействуют с другими линейными модами (по принципу суперпозиции) и, следовательно, не обмениваются энергиями с фоновыми колебаниями кристаллической решетки. Следовательно, такие колебательные моды могут существовать достаточно долго при низких температурах. В то же время колебания другого типа – ДБ – существуют в бездефектном кристалле, не обмениваются энергией с фононами, так как их частота колебаний находится за пределами фононного спектра решетки. Модели систем, в которых возможно возбуждение ДБ, являются, как правило, биатомными [4, 5].

По исследованию поведения конденсированных систем в слабоустойчивом состоянии вблизи границы потери устойчивости выполнен большой цикл работ [6–32]. Статические или динамические дефекты структуры вследствие их взаимодействия в этом слабоустойчивом состоянии не только оказывают влияние на структурно-фазовые превращения в системе, но и порой определяют канал превращения. Фактически, структура распределения динамических дефектов определяет структуру дочерней фазы при превращении. Эти динамические дефекты взаимодействуют друг с другом, задавая, по существу, в слабоустойчивом состоянии ансамбль элементов длиннопериодической структуры системы.

В [6–32, 33] на примере модельного идеального кристалла упорядоченного сплава состава A_3B со сверхструктурой $L1_2$ показана возможность существования локализации энергии линейных колебаний на подрешетке легких атомов типа B . Обмена энергиями между оптическими колебаниями легких атомов и акустическими колебаниями тяжелых атомов не происходит из-за того, что оптическая и акустическая части фононного спектра разделены запрещенной зоной.

В настоящей работе рассмотрены эффекты спонтанной локализации энергии на дискретных бризерах и подрешетках упорядоченных сплавов стехиометрии A_3B , находящихся в состоянии термодинамического равновесия.

Модель и методика моделирования

Концепция локализации энергии нелинейных колебаний, которая возникает благодаря ангармонизму, доказала возможность существования дискретных бризеров в идеальных бездефектных кристаллических системах. В биатомных кристаллах частота дискретных бризеров входит, как правило, в щель фононного спектра, которая появляется при большой разнице масс атомов компонентов. Таким образом, локализация энергии в идеальной конденсированной системе связана с нелинейными колебаниями атомов. Следовательно, их частота лежит за пределами фононного спектра кристалла.

Известно, что в фононном спектре идеальной биатомной конденсированной системы присутствуют оптические ветви колебаний атомов с меньшей массой [6–33]. В случае упорядоченного сплава состава A_3B со сверхструктурой $L1_2$ акустические и оптические ветви разделены запрещенной зоной. Если возбудить оптические колебания малой амплитуды более легких атомов, то из-за наличия щели их энергия не будет передаваться подрешетке тяжелых атомов. Таким образом, происходит локализация энергии на подрешетке более легких атомов. Если возбудить высокоамплитудные колебания более легких атомов, то большая часть энергии также будет локализоваться на подрешетке легких атомов, так как именно они являются носителями ДБ, а частота их колебаний находится в щели фононного спектра кристалла.

Таким образом, в модели упорядоченного сплава состава A_3B со сверхструктурой $L1_2$ удается показать возможность возбуждения квазигармонических локализованных мод большой амплитуды. Это происходит благодаря наличию щели в плотности состояний фононного спектра кристалла. Его подрешетки при большой разнице масс атомов сортов A и B могут обладать сильно различающимися энергиями.

Выберем упорядоченные сплавы Pt_3Al и Ni_3Al со сверхструктурой $L1_2$ в упорядоченном состоянии в качестве модельных объектов исследования. Исследование проведем с помощью компьютерного моделирования методом Монте-Карло [5], аналогично выполненным ранее [6–33]. Трехмерная модель упорядоченного сплава состава A_3B со сверхструктурой $L1_2$ будет представлять собой ячейку размером $16 \times 16 \times 15$ частиц. На границах модельного кристалла будем использовать периодические граничные условия, что эффективно соответствует бесконечной системе. Начальную температуру будем задавать скоростями атомов так, чтобы каждый атом имел начальную скорость, равную среднеквадратичной скорости в соответствии с распределением Максвелла, но увеличенной в $\sqrt{2}$ раз. Направления скоростей будем определять случайным образом, при условии равенства нулю суммарного импульса системы. Взаимодействие между атомами сорта P и сорта Q зададим парными потенциалами Морзе:

$$\Phi_{PQ}(r_{ij}) = D_{PQ}\beta_{PQ} \exp(-\alpha_{PQ}r_{ij}) (\beta_{PQ} \exp(-\alpha_{PQ}r_{ij}) - 2). \quad (1)$$

Параметры D_{PQ} , β_{PQ} , α_{PQ} потенциала (1) для пар взаимодействующих атомов Al–Al, Pt–Pt могут быть вычислены из условий

$$\frac{1}{2} \sum_{i=1}^z \eta_i U_{V=V_0} = E_S, \quad \frac{1}{2} \sum_{i=1}^z \eta_i \left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_{V=V_0} = 0, \quad K_0 = -V_0 \left(\frac{\partial P_S}{\partial V} \right), \quad (2)$$

где E_S – энергии сублимации атомов; K_0 – объемный модуль упругости; η_i – число атомов в i -координационной сфере; z – число учитываемых сфер; P_S – давление изоэнтропического сжатия; V_0 и V – удельные объемы в начальном и деформированном состояниях.

Если всестороннее давление изменит длину связи на величину x , приходящийся на один атом объем станет $V = k_1(a_0 + x)^3$. Естественно, радиус произвольной координационной сферы будет изменяться пропорционально $(a_0 + x)$, т.е. $r_i = \sqrt{2}k_i(a_0 + x)$, где коэффициент k_i позволит вычислить радиус i -координационной сферы r_i . Подставив (1) в (2) и осуществив несложные преобразования, получим систему уравнений

$$\left\{ \begin{array}{l} \beta_{PQ} = \frac{\sum_{i=1}^z k_i \eta_i e^{-\alpha_{PQ} k_i \sqrt{2} a_0}}{\sum_{i=1}^z k_i \eta_i e^{-2\alpha_{PQ} k_i \sqrt{2} a_0}}, \\ D_{PQ} = -\frac{2E_S}{\beta_{PQ} \sum_{i=1}^z \eta_i \left(\beta_{PQ} e^{-2\alpha_{PQ} k_i \sqrt{2} a_0} - 2e^{-\alpha_{PQ} k_i \sqrt{2} a_0} \right)}, \\ 9k_1 a_0 K_0 - 2D_{PQ} \beta_{PQ} \alpha_{PQ}^2 \sum_{i=1}^z \eta_i k_i^2 \left(2\beta_{PQ} e^{-2\alpha_{PQ} k_i \sqrt{2} a_0} - e^{-2\alpha_{PQ} k_i \sqrt{2} a_0} \right) = 0. \end{array} \right. \quad (3)$$

Варьируя параметр α_{PQ} , можно найти промежуточные значения β_{PQ} и D_{PQ} . Как только с достаточной точностью будет выполняться последнее условие в системе уравнений (3), полученные значения параметров можно считать найденными.

Величины межатомного расстояния a_0 , энергии сублимации атомов кристалла при нуле Кельвина E_S и объемного модуля упругости K_0 для моноатомных металлов известны [34], что дает возможность найти потенциалы межатомного взаимодействия в парах атомов Al–Al, Pt–Pt.

Существует проблема расчета параметров потенциала Морзе с помощью системы уравнений (3) для пар атомов Pt–Al, так как величины a , E_S , K_0 для упорядоченных сплавов Pt₃Al и Ni₃Al неизвестны. В [35] показано, что при любых лежащих в интервале между относящимися к Al и относящимися к Pt значениях величин a , E_S , K_0 найденные с помощью системы уравнений (3) параметры потенциала Морзе позволяют построить устойчивые трехмерные модели упорядоченного сплава Pt₃Al, причем в каждой из них возможно возбуждение ДБ. Следовательно, для получения качественной картины эффектов, связанных с нелинейными локализованными модами в рассматриваемом сплаве, достаточно в (2) взять произвольный набор величин a , E_S , K_0 , значения которых являются промежуточными между значениями для алюминия и платины.

Потенциал Морзе для рассматриваемой задачи выбран не случайно [36–38]. Он достаточно универсален, с его помощью можно моделировать различные процессы в металлах и их свойства. Сравнение его с другими, в том числе и многочастичными потенциалами, например Клери – Розатто [39], не выявило особенных преимуществ последних [36–38]. Кроме того, дискретные бризеры могут обладать достаточно большой энергией (порядка 10 эВ). Как было установлено [40], потенциал Морзе позволяет корректно моделировать взаимодействие атомов с энергией до 14 эВ.

Результаты и их обсуждение

Параметры потенциалов межатомного взаимодействия в упорядоченных сплавах Pt₃Al и Ni₃Al со сверхструктурой $L1_2$ рассчитывались с учетом семи координационных сфер. Радиус обреза потенциала был выбран равным 7.58 Å. Для взаимодействия одноименных атомов были получены следующие значения параметров потенциала Морзе:

	Pt–Pt	Ni–Ni	Al–Al
α	1.5820 Å ⁻¹	1.3660 Å ⁻¹	1.02658 Å ⁻¹
β	102.89	41.0494	27.4979
D	0.710 эВ	0.4705 эВ	0.318004 эВ

Для взаимодействия разноименных атомов (основываясь на среднеарифметических значениях величин a , E_S , K_0) при межатомном расстоянии $a \approx 2.84$ Å ($a \approx 2.62$) были получены следующие значения параметров потенциала Морзе:

	Pt–Al	Ni–Al
α	1.3501 Å ⁻¹	1.5405 Å ⁻¹
β	63.124	65.123
D	0.5048 эВ	0.3966 эВ

О спонтанном возбуждении дискретных бризеров

В [33] показана возможность локализации энергии на нелинейных колебательных модах большой амплитуды атомов алюминия, имеющих поляризацию колебаний [100] в упорядоченном сплаве Pt_3Al . Дискретные бризеры возбуждались при начальной температуре (равной нулю Кельвина). Считается, что ДБ могут спонтанно возбуждаться в некоторых кристаллах, находящихся в условиях термодинамического равновесия [41].

Оценим возможность возбуждения высокоамплитудных колебаний одного из атомов упорядоченного сплава Ni_3Al при температуре 0 К. На рис. 1 показан характер колебаний атома Al, отклоненного на 1.1 Å от положения равновесия в начальный момент времени в направлении [100]. Уже в течение первого периода колебаний значительная часть энергии (~ 3 эВ из 11 эВ) рассеивается в никелевой подрешетке, при этом кинетическая и потенциальная энергии составляют примерно по 1.5 эВ. Остальной частью энергии в течение нескольких периодов колебаний продолжает обладать возбужденный атом алюминия.

Около десятка колебаний рассматриваемого атома происходят со значительной амплитудой, при этом частота его колебаний (~ 9.5 ТГц) попадает в щель фононного спектра (рис. 2). В конце первой пикосекунды амплитуда колебаний начинает уменьшаться, частота колебаний увеличивается (до величины ~ 10 ТГц) и оказывается в разрешенной части фононного спектра.

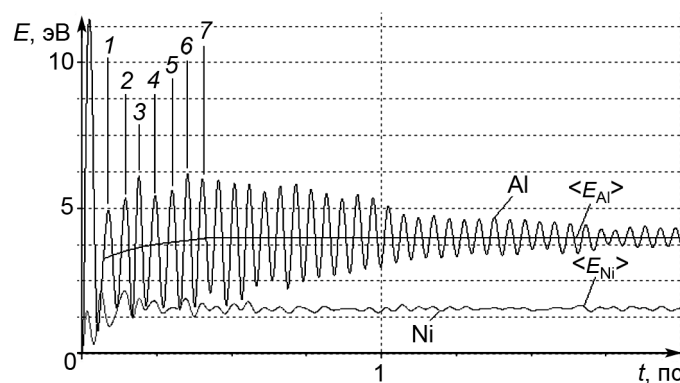


Рис. 1. Изменение кинетической энергии с течением времени атомов Al и Ni в упорядоченном сплаве Ni_3Al . Цифрами отмечены начала полупериодов колебаний атома Al

Очевидно, что энергия колебаний не рассеивается в никелевой подрешетке, так как средняя энергия этой подрешетки $\langle E_{Ni} \rangle$ остается постоянной величиной ~ 1.5 эВ. Следовательно, энергия рассеивается в подрешетке Al.

Наблюдая поведение рассматриваемой дискретной атомной системы в течение вычислительного эксперимента, легко заметить, что отклоненный атом, обладая значительной энергией, в течение первого полупериода колебаний смещает со своих мест соседей, на что расходует некоторую часть своей энергии. Дальнейшие несколько колебаний он совершает в условиях восстановления порядка расположения окружающих его соседей. Потенциальная энергия при этом идет на увеличение средней кинетической энергии подрешетки алюминия $\langle E_{Al} \rangle$ (рис. 1). Более детально рассмотреть условия, в которых происходят колебания атома, позволяет рис. 2. На нем показано изменение модуля результирующей силы, действующей со стороны кристаллической решетки на совершающий высокоамплитудные колебания атом. Сила ме-

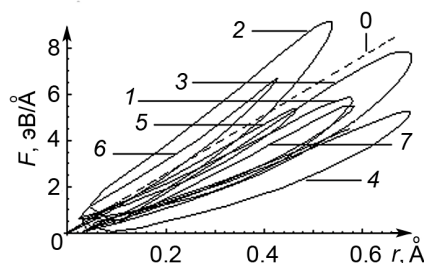


Рис. 2. Зависимости модуля силы F , действующей на атом алюминия, совершающий колебания с поляризацией [100], от расстояния r относительно положения равновесия. Цифрами отмечены номера полупериодов колебания атома (см. рис.1). Цифрой 0 отмечен наклон линейной зависимости для фононных колебаний с той же поляризацией

няется нелинейно в зависимости от отклонения относительно положения равновесия. Естественно, меняется и тангенс угла наклона касательной к этим кривым, который соответствует мгновенному значению коэффициента упругости или мгновенному значению квадрата частоты (если пытаться для каждого положения атома записать дифференциальное гармоническое уравнение, описывающее его движение в данной точке). Символом 0 отмечена линия, отображающая зависимость силы, действующей на атом алюминия, который совершает фоновые колебания с поляризацией [111]. Заметим, что эта мода имеет минимальную частоту в оптической части фонованого спектра. На рис. 2 видно, как нерегулярно меняется угол наклона касательных, т.е. мгновенная частота колебаний атома. Большинство из этих частот меньше частоты фоновых колебаний, а это означает, что средняя частота колебаний атома алюминия за первую пикосекунду попадает в щель фонованого спектра (рис. 3).

Поскольку время от времени частота колебаний атомов алюминия оказывается в оптической части спектра (в полупериоды 2 и 6 на рис. 2), это приводит к рассеянию энергии в алюминиевую подрешетку. Из рис. 1 видно, что начиная с обозначенного цифрой 1 полупериода рассеянием энергии в оптическую часть спектра, т.е. в подрешетку никеля, можно пренебречь.

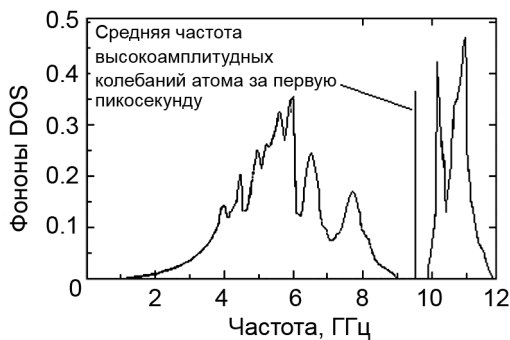


Рис. 3. Плотность фоновых состояний модели Ni_3Al

Заметим, что атом алюминия, в принципе, может совершить несколько колебаний с частотой, которая попадает в щель фонованого спектра, но при этом дискретных бризеров не появляется, так как колебания являются затухающими. Подчеркнем, что возбудить дискретные бризеры в модельном сплаве Ni_3Al невозможно ни при каких условиях. Важно также отметить следующее. В ходе теоретического нахождения показанных на рис. 2 зависимостей при фоновых колебаниях величину первоначального отклонения атома от положения равновесия уменьшают до тех пор, пока величина отклонения не перестанет влиять на угловой коэффициент

линейной функции зависимости силы от смещения атома. Это влияние становится малозаметным лишь при очень малых отклонениях (порядка 0.01 \AA). Это значит, что даже при малых температурах щель между дисперсионными кривыми сужается, независимо от того, возможно ли в данном кристалле возбудить бризер или нет. Если изначально модельной ячейке сплава Ni_3Al сообщить некоторую температуру (от 200 K и выше), то с достаточно высокой вероятностью в межузельном пространстве время от времени будет появляться атом алюминия. Эти события сопровождаются характерными всплесками на температурной кривой соответствующей подрешетки, которые подобны всплескам, показанным на рис. 4. Как правило, в моменты таких всплесков на радиальном распределении атомов в кристалле обнаруживается появление межузельного атома [35]. Оказавшись на большом расстоянии от своего положения равновесия, атом алюминия совершает несколько быстро затухающих колебаний, при этом их частота может оказаться в запрещенной зоне фонованого спектра.

Таким образом, появление мод с частотами, лежащими в запрещенной зоне плотности фоновых состояний, не может служить доказательством спонтанного возбуждения дискретных бризеров в кристалле, что отличается от принятого в [41].

О локализации и распределении энергии фоновых колебаний в подрешетках

Покажем, что наличие запрещенной зоны в фонованом спектре является достаточным условием для возбуждения оптических колебаний, локализованных на подрешетке легких атомов сорта B в кристалле состава A_3B . Проиллюстрируем это на примере модельного кристалла Ni_3Al . В его фонованом спектре имеется довольно узкая запрещенная зона (см. рис. 2), поэтому возбудить дискретные бризеры в кристалле Ni_3Al не удастся. Однако существует принципиальная возможность локализации энергии на оптических колебаниях атомов алюминия, как это видно на рис. 1. На рис. 4, а показан разброс средних значений энергии колебаний атомов подрешеток в 3D-модели упорядоченного сплава Ni_3Al . Масса атома алюминия примерно в 2 раза меньше массы атома никеля, поэтому даже незначительные начальные отклонения атомов Al от положения равновесия вызывают

возмущение соседних атомов никеля. Разброс энергий колебаний (рис. 4) получен путем малых отклонений каждого атома Al из положения равновесия на расстояние порядка 0.05 \AA .

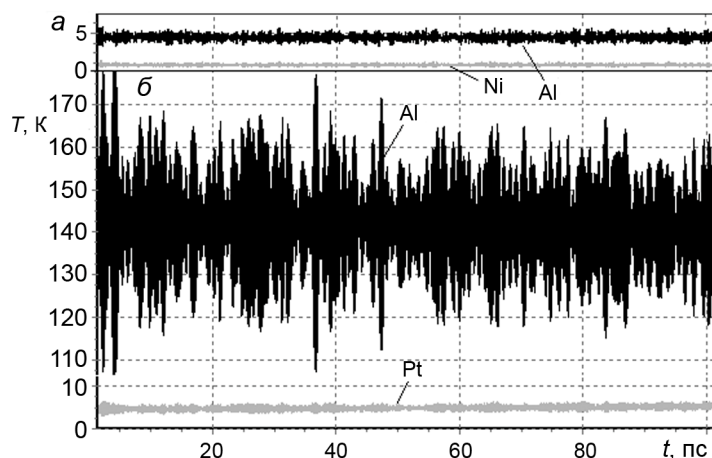


Рис. 4. Локализация фононных колебаний в подрешетке Al в 3D-модели сплава: *a* – Ni_3Al ; *б* – Pt_3Al

Много легче получить локализацию энергии колебаний на подрешетке атомов сорта *B* в упорядоченных сплавах A_3B с широкой запрещенной зоной фононного спектра при температуре 0 К. Для этого достаточно возбудить колебания атомов Al с большой амплитудой, например, вдоль направления [111]. В процессе затухания таких колебаний вся энергия будет рассеиваться в подрешетке Al [33]. Температура в этой подрешетке может превышать $\sim 140 \text{ K}$ (рис. 4, *б*), а температура подрешетки Pt при этом может не превышать $\sim 5 \text{ K}$ [33].

Другие виды спонтанной локализации (перераспределения) энергии фононных колебаний по подрешеткам упорядоченного сплава Pt_3Al показаны на рис. 5. Несложно увидеть, что энергия фононных колебаний может локализоваться предпочтительно как на подрешетке атомов Al, так и на подрешетке атомов Pt.

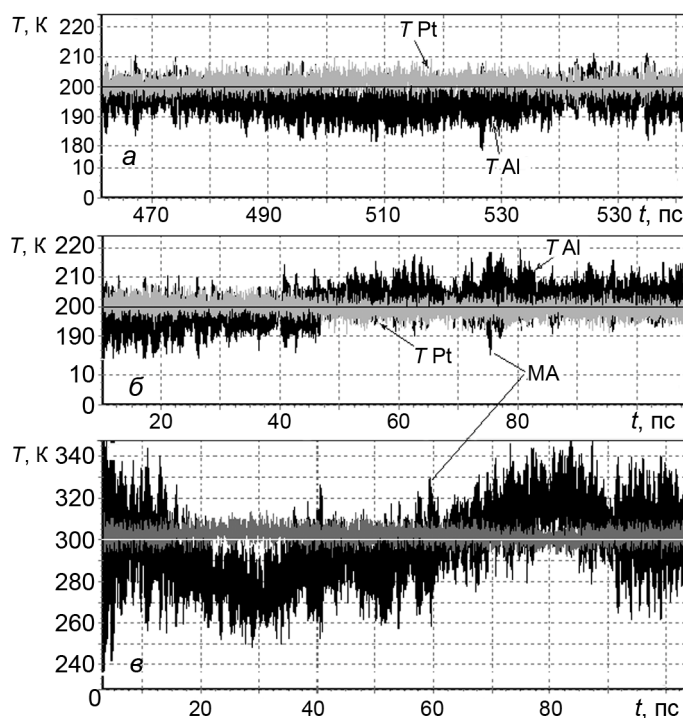


Рис. 5. Различные случаи перераспределение энергии между подрешетками Pt и Al

Локализация энергии на подрешетке определяется, видимо, ангармонизмом межатомного взаимодействия (нелинейностью возвращающей силы при колебаниях атомов). Известно, что в статистической физике в наиболее общей форме теорема о равнораспределении энергий может быть представлена в виде [42]

$$\left\langle x_m \frac{\partial H}{\partial x_n} \right\rangle = \delta_{mn} k_B T, \quad (4)$$

где H – гамильтониан системы; δ_{mn} – символ Кронекера; k_B – постоянная Больцмана; угловые скобки $\langle \dots \rangle$ обозначают усреднение, которое может относиться как к среднему по времени, так и более общему усреднению по ансамблю в фазовом пространстве. Используемое требование эргодичности подразумевает эквивалентность обоих этих усреднений. Естественно, что эта общая формулировка теоремы верна в случае микроканонических ансамблей [42], которыми являются рассматриваемые в данной работе модели.

Для ангармонического осциллятора потенциальная энергия не является квадратичной функцией смещения q (обобщенная координата, которая показывает отклонение от положения равновесия). Такие осцилляторы позволяют более широко взглянуть на закон равнораспределения энергий [43]. Рассмотрим функцию потенциальной энергии вида

$$U = Cq^S, \quad (5)$$

где C и S – произвольные действительные постоянные. В этом случае закон равнораспределения приводит к выражению

$$k_B T = \left\langle q \frac{\partial U}{\partial q} \right\rangle = \left\langle q \cdot SCq^{S-1} \right\rangle = \left\langle SCq^S \right\rangle = S \langle U \rangle. \quad (6)$$

Таким образом, средняя потенциальная энергия равна $k_B T/S$, а не $k_B T/2$, как для потенциала гармонического осциллятора (для которого $S = 2$). Очевидно, что в этом случае средняя кинетическая энергия атомов будет отличаться от величины $k_B T/2$. Это, в свою очередь, означает, что действующая на совершающие колебания атом возвращающая сила имеет нелинейный характер. При колебании атома алюминия с поляризацией [111] действующая на него сила проявляет «мягкую нелинейность» (при больших амплитудах колебаний), при этом величина S немного больше 2. При поляризации [100] также возможно появление «мягкой нелинейности», но уже другого знака (если соседний атом совершает синфазные колебания). В этом случае величина S немного меньше 2.

На рис. 5, а средняя кинетическая энергия атомов подрешетки платины выше средней кинетической энергии подрешетки Al. На рис. 5, б показан переход от преобладания энергии колебаний подрешетки Pt к преобладанию энергии подрешетки Al. На рис. 5, в – увеличение эффекта перераспределения энергий между подрешетками с уменьшением размеров модельной ячейки. MA – межузельные атомы.

Очевидно, что локализация энергии колебаний атомов (перераспределение энергии между подрешетками) происходит в зависимости от ряда факторов: вида потенциала межатомного взаимодействия и характера его нелинейности, поляризации колебаний атомов и других.

Спонтанно возникшая «мягкая нелинейность» возвращающей силы приводит к перераспределению энергии колебаний между подрешетками кристалла стехиометрии A_3B с щелью в фононном спектре. Благодаря тому, что возможна локализация энергии в таких кристаллах (которая чем выше температура системы, тем менее выражена), поэтому возникает некоторая «инерционность» при возвращении системы в состояние равновесия. Очевидно, что эффект перераспределения энергии — это своего рода флуктуация, которая имеет место лишь в локальных системах. Как и всякая флуктуация, этот эффект может быть выражен тем ярче, чем меньше размеры системы (см. рис. 5, в). На рис. 5 приведен разброс энергий для системы с размером ячейки $14 \times 16 \times 12$ частиц.

Заключение

Дискретные бризеры, как известно, существуют в бездефектном кристалле, не обмениваются энергией с фононами, так как их частота колебаний находится за пределами фононного спектра решетки. Проведены объемные исследования поведения конденсированных систем в слабоустой-

чивом состоянии вблизи границы потери устойчивости. Статические или динамические дефекты структуры вследствие их взаимодействия в слабоустойчивом состоянии не только оказывают влияние на структурно-фазовые превращения в системе, но порой и определяют канал превращения. Фактически, структура распределения динамических дефектов определяет структуру дочерней фазы при превращении. Динамические дефекты взаимодействуют друг с другом, задавая, по существу, в этом слабоустойчивом состоянии ансамбль элементов длиннопериодической структуры системы.

На примере модельного идеального кристалла упорядоченного сплава состава A_3B со сверхструктурой $L1_2$ показана возможность существования локализации энергии колебаний на подрешетках атомов и рассмотрены эффекты спонтанной локализации энергии на дискретных бризерах и подрешетках упорядоченных сплавов стехиометрии A_3B , находящихся в состоянии термодинамического равновесия.

Установлено, что в модельном упорядоченном сплаве Ni_3Al при начальной температуре 0 К невозможно возбудить дискретный бризер. Однако в случае высокоамплитудных колебаний атомов алюминия при поляризации [100] возможно попадание их частоты в щель фононного спектра. Естественно, что при высоких температурах в состоянии термодинамического равновесия сплава атомы алюминия, оказавшись в межузельном пространстве и возвращаясь на свое законное место, совершают затухающие колебания с частотой, лежащей в щели фононного спектра. Таким образом, по наличию мод в запрещенной зоне нельзя судить о спонтанном возбуждении дискретных бризеров.

В упорядоченных сплавах стехиометрии A_3B со сверхструктурой $L1_2$, в фононном спектре которых имеется щель, возможна локализация энергии колебаний на подрешетке атомов сорта B . Для таких сплавов, находящихся при определенной температуре в состоянии термодинамического равновесия, характерен локальный эффект спонтанной локализации энергии (эффект перераспределения энергий между подрешетками).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Flach S. and Willis C.R. // *Phys. Rep.* – 1998. – V. 295. – P. 181.
2. Медведев Н.Н., Старостенков М.Д. // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения.* – 2011. – Т. 8. – № 2. – С. 67.
3. Dmitriev S.V. // *Lett. Mater.* – 2011. – V. 1. – No. 2. – P. 78.
4. Dmitriev S.V., Khadeeva L.S., Pshenichnyk A.I., and Medvedev N.N. // *Phys. Solid State.* – 2010. – V. 52. – No. 7. – P. 1499.
5. Medvedev N.N., Starostenkov M.D., Zakharov P.V., and Pozidaeva O.V. // *Tech. Phys. Lett.* – 2011. – V. 37. – No. 2. – P. 98.
6. Дмитриев С.В., Медведев Н.Н., Потекаев А.И. и др. // *Изв. вузов. Физика.* – 2008. – Т. 51. – № 8. – С. 73–79.
7. Дмитриев С.В., Назаров А.А., Потекаев А.И. и др. // *Изв. вузов. Физика.* – 2009. – Т. 52. – № 2. – С. 21–26.
8. Дмитриев С.В., Самсонов А.В., Потекаев А.И. // *Изв. вузов. Физика.* – 2009. – Т. 52. – № 6. – С. 68–82.
9. Дмитриев С.В., Баимова Ю.А., Потекаев А.И. и др. // *Изв. вузов. Физика.* – 2010. – Т. 53. – № 3. – С. 20–25.
10. Потекаев А.И., Кулагина В.В. // *Изв. вузов. Физика.* – 2011. – Т. 54. – № 8. – С. 5–22.
11. Кулагина В.В., Потекаев А.И., Старостенков М.Д., Еремеев С.В. // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения.* – 2011. – Т. 8. – № 3. – С. 20–27.
12. Кулагина В.В., Потекаев А.И., Старостенков М.Д. // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения.* – 2011. – Т. 8. – № 4. – С. 65–70.
13. Потекаев А.И., Кулагина В.В., Старостенков М.Д., Клопотов А.А. // *Изв. вузов. Физика.* – 2011. – Т. 54. – № 4. – С. 11–18.
14. Потекаев А.И., Кулагина В.В., Чаплыгина А.А. и др. // *Изв. вузов. Физика.* – 2012. – Т. 55. – № 11. – С. 7–16.
15. Потекаев А.И., Кулагина В.В., Чаплыгина А.А. и др. // *Изв. вузов. Физика.* – 2012. – Т. 55. – № 7. – С. 78–87.
16. Дмитриев С.В., Баимова Ю.А., Потекаев А.И. и др. // *Изв. вузов. Физика.* – 2013. – Т. 56. – № 2. – С. 60–69.
17. Клопотов А.А., Козлов Э.В., Потекаев А.И., Кулагина В.В. // *Изв. вузов. Физика.* – 2011. – Т. 54. – № 9. – С. 59–69.
18. Потекаев А.И., Старостенков М.Д., Медведев Н.Н. и др. // *Изв. вузов. Физика.* – 2011. – Т. 54. – № 11. – С. 61–67.
19. Потекаев А.И., Старенченко В.А., Кулагина В.В. и др. *Слабоустойчивые состояния металлических систем / под общ. ред. А.И. Потекаева.* – Томск: Изд-во НТЛ, 2012. – 272 с.

20. Потекаев А.И., Дмитриев С.В., Кулагина В.В. и др. Слабоустойчивые длиннопериодические структуры в металлических системах / под ред. А.И. Потекаева. – Томск: Изд-во НТЛ, 2010. – 308 с.
21. Потекаев А.И., Наумов И.И., Кулагина В.В. и др. Естественные длиннопериодические наноструктуры / под ред. А.И. Потекаева. – Томск: Изд-во НТЛ, 2002. – 260 с.
22. Потекаев А.И., Клопотов А.А., Козлов Э.В., Кулагина В.В. Слабоустойчивые предпериодические структуры в никелиде титана / под ред. А.И. Потекаева. – Томск: Изд-во НТЛ, 2004. – 296 с.
23. Старостенков М.Д., Потекаев А.И., Синица Н.В. и др. // Изв. вузов. Физика. – 2010. – Т. 53. – № 8. – С. 38–47.
24. Старостенков М.Д., Потекаев А.И., Синица Н.В. и др. // Изв. вузов. Физика. – 2011. – Т. 54. – № 2. – С. 41–48.
25. Старостенков М.Д., Потекаев А.И., Синица Н.В. и др. // Изв. вузов. Физика. – 2011. – Т. 54. – № 3. – С. 42–47.
26. Старостенков М.Д., Кулагина В.В., Потекаев А.И. и др. // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2012. – Т. 8. – № 3. – С. 367–374.
27. Старостенков М.Д., Кулагина В.В., Потекаев А.И. и др. // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2012. – Т. 8. – № 4. – С. 503–509.
28. Потекаев А.И., Старостенков М.Д., Кулагина В.В. и др. // Изв. вузов. Физика. – 2013. – Т. 56. – № 6. – С. 14–22.
29. Старостенков М.Д., Кулагина В.В., Потекаев А.И. и др. // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2011. – Т. 8. – № 4. – С. 117–124.
30. Старостенков М.Д., Кулагина В.В., Потекаев А.И. и др. // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2012. – Т. 9. – № 1. – С. 57–66.
31. Макаров С.В., Плотников В.А., Потекаев А.И. // Изв. вузов. Физика. – 2013. – Т. 56. – № 6. – С. 23–30.
32. Потекаев А.И., Иванов Ю.Ф., Клопотов А.А., Волокитин О.Г. // Изв. вузов. Физика. – 2013. – Т. 56. – № 8. – С. 60–65.
33. Medvedev N.N., Starostenkov M.D., Zakharov P.V., and Markidonov A.V. // *Lett. Mater.* – 2013. – V. 3. – No. 1. – P. 34.
34. Киттель Ч. // Введение в физику твердого тела. – М.: Наука, 1978. – 792 с.
35. Медведев Н.Н., Старостенков М.Д. // Изв. вузов. Физика. – 2012. – Т. 55. – № 11/3. – С. 113.
36. Харина Е.Г., Старостенков М.Д., Полетаев Г.М., Ракитин Р.Ю. // ФТТ. – 2011. – Т. 53. – № 11. – С. 980.
37. Халиков А.Р., Дмитриев С.В., Потекаев А.И. // Письма о материалах. – 2013. – Т. 3. – Вып. 3. – С. 225–229.
38. Еремеев С.В., Потекаев А.И. // Изв. вузов. Физика. – 2005. – Т. 48. – № 6. – С. 82–90.
39. Clerf F. and Rosato V. // *Phys. Rev. B.* – 1993. – V. 48. – No. 1. – P. 22.
40. Медведев Н.Н., Старостенков М.Д., Шайхутдинова Т.А. // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2011. – Т. 8. – № 1. – С. 99.
41. Manly M.E., Sievers A.J., Lynn J.W., et al. // *Phys. Rev. B.* – 2009. – V. 79. – No. 13. – P. 134304.
42. Huang K. *Statistical Mechanics.* – 2nd ed. – John Wiley and Sons, 1987. – P. 136–138.
43. Terletsii Y.P. *Statistical Physics* – Translated: N. Fröman. – Amsterdam: North-Holland, 1971. – P. 83–84.

*Сибирский физико-технический институт им. акад. В.Д. Кузнецова
Томского государственного университета, г. Томск, Россия

Поступила в редакцию 29.07.13.

**Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова,
г. Барнаул, Россия

***Алтайская государственная академия образования им. В.М. Шукшина,
г. Бийск, Россия

****Новокузнецкий филиал Томского политехнического университета,
г. Новокузнецк, Россия

*****Бийский технологический институт (филиал)

Алтайского государственного технического университета им. И.И. Ползунова,
г. Бийск, Россия

E-mail: genphys@mail.ru;

Медведев Николай Николаевич, к.ф.-м.н., доцент, доцент;
Старостенков Михаил Дмитриевич, д.ф.-м.н., профессор, зав. кафедрой;
Потекаев Александр Иванович, д.ф.-м.н., профессор, директор;
Захаров Павел Васильевич, к.ф.-м.н., ст. преподаватель;
Маркидонов Артем Владимирович, к.ф.-м.н., доцент, доцент;
Ерёмин Александр Михайлович, к.ф.-м.н., доцент, доцент;