

УДК 538.913

М.Д. СТАРОСТЕНКОВ**, А.И. ПОТЕКАЕВ*,****, С.В. ДМИТРИЕВ***,****,
П.В. ЗАХАРОВ*****, А.М. ЕРЕМИН*****, В.В. КУЛАГИНА*****

ДИНАМИКА ДИСКРЕТНЫХ БРИЗЕРОВ В КРИСТАЛЛЕ Pt₃Al¹

Исследование дискретных бризеров (ДБ) с мягким (ДБ1) и жестким (ДБ2) типами нелинейности в кристалле Pt₃Al показало ряд их принципиальных отличий. В отличие от локализованного на одном атоме, неподвижного и устойчивого ДБ1, дискретный бризер ДБ2 локализован, в основном, на четырех атомах Al и вытянут вдоль одного из плотноупакованных рядов кристалла. Однако ДБ2 имеет возможность перемещения на сотни нанометров вдоль одного из плотноупакованных направлений. Локализуя значительную энергию, бризеры ДБ1 и ДБ2 в течение всего периода жизни медленно ее излучают. Столкновение ДБ2 и ДБ1 вызывает излучение части их энергии в подрешетку Al, причем большую часть энергии теряет ДБ2, который разрушается быстрее, чем ДБ1. ДБ2 могут эффективно транспортировать энергию по кристаллу, а столкновение ДБ приводит к значительной ее локализации в кристалле. Возможность переноса энергии по кристаллу на значительные расстояния может приводить, таким образом, к структурным трансформациям в удалении от очага возбуждения подобных локализованных объектов.

Ключевые слова: дискретный бризер, локализация энергии, нелинейная динамика, метод молекулярной динамики.

Введение

В последнее время значительное внимание уделяется изучению нелинейного объекта – дискретного бризера, который представляет собой локализованное в пространстве незатухающее колебание большой амплитуды в бездефектной нелинейной дискретной системе [1]. В кристаллах следует говорить о квазибризерах, имеющих конечное время жизни и нестрогую периодичность колебаний во времени [2]. Растет число гипотез об участии ДБ в различных процессах в твердых телах. ДБ могут повышать каталитические свойства наночастиц с неупорядоченной структурой, приводить к радиационно-стимулированному росту пор в металлах, вносить вклад в диффузию, транспортировать электрический заряд, приводить к отжигу дефектов, снижать энергетический барьер химических реакций в кристаллических твердых телах и т.д.

ДБ имеют большое время жизни потому, что их частота лежит вне фононного спектра кристалла. ДБ можно разделить на два типа по характеру зависимости их частоты от амплитуды [3]. У ДБ1 частота уменьшается с увеличением его амплитуды, следовательно, они могут существовать только в кристаллах со щелью в фононном спектре, причем их частота лежит в щели фононного спектра. У ДБ2 частота увеличивается с увеличением амплитуды, при этом они могут иметь частоты как в щели (если таковая имеется), так и выше фононного спектра. ДБ1 могут возбуждаться в биатомных кристаллах [4, 5], а также в графене и графене [6]. ДБ2 существуют в монокристаллических системах и в чистых металлах [7–9].

Целью настоящей работы является изучение динамики ДБ с мягким и жестким типами нелинейности в кристалле интерметаллида Pt₃Al, а также оценка вероятности их возбуждения в состоянии термодинамического равновесия.

Модель и методика эксперимента

В качестве модели выбран объемный сплав Pt₃Al со сверхструктурой L1₂ на основе ГЦК-решетки. Расчетная ячейка модели имеет размеры 225.71×29.32×20.73 Å и содержит 14500 атомов.

Ось X модели соответствовала кристаллографическому направлению $\langle 110 \rangle$, ось Y – $\langle 111 \rangle$, ось Z – $\langle 113 \rangle$. Использовались периодические граничные условия. Межатомное взаимодействие задавалось посредством парного потенциала Морзе:

¹ Исследование выполнено в рамках научного проекта № 166 программы Министерства образования и науки РФ «Формирование государственных заданий высшим учебным заведениям в части проведения научно-исследовательских работ» и при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 15-58-04033 Бел_мол_а.

$$\phi(r_{ij}) = D\beta \exp(-\alpha r_{ij}) (\beta \exp(-\alpha r_{ij}) - 2),$$

где D , β и α – параметры потенциала; r_{ij} – расстояние между атомами i и j .

Параметры D , β и α определялись из следующих условий:

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

где E_S – энергия сублимации атомов кристалла; K_0 – объемный модуль упругости; P_s – давление изоэнтропического сжатия; V_0 и V – удельные объемы в начальном и деформированном состоянии; η_i – число атомов в i -й координационной сфере.

Возбудить ДБ в кристалле можно, задавая группе из n атомов определенные начальные смещения или начальные скорости. В данном случае ДБ1 будем возбуждать в центре кристалла путем отклонения атома Al вдоль направления $\langle 100 \rangle$ на 0.72 \AA , т.е. точный профиль ДБ задаваться не будет. При этом ДБ1 в кристалле Pt₃Al не будет обладать мобильностью и не сможет перемещаться по кристаллу. Возбуждение ДБ2 возможно вдоль плотноупакованных направлений: $\langle 110 \rangle$, $\langle 0\bar{1}1 \rangle$, $\langle \bar{1}01 \rangle$, $\langle \bar{1}10 \rangle$. В выбранной модели в колебаниях ДБ2 принимают участие несколько атомов «легкой подрешетки». В этом случае ДБ2 смогут перемещаться по кристаллу на значительные расстояния, практически не рассеивая своей энергии. Для возбуждения подвижного ДБ2 будем отклонять из положения равновесия два атома Al на 0.9 и 0.85 \AA в противоположные стороны вдоль плотноупакованного направления.

Результаты и их обсуждение

Для модельного сплава Pt₃Al параметры потенциалов взяты из [10–12]:

$$\begin{aligned} D_{\text{AlAl}} &= 0.318 \text{ эВ}, & \beta_{\text{AlAl}} &= 27.4979, & \alpha_{\text{AlAl}} &= 1.02658 \text{ \AA}^{-1}, \\ D_{\text{PtPt}} &= 0.710 \text{ эВ}, & \beta_{\text{PtPt}} &= 102.89, & \alpha_{\text{PtPt}} &= 1.582 \text{ \AA}^{-1}, \\ D_{\text{PtAl}} &= 0.5048 \text{ эВ}, & \beta_{\text{PtAl}} &= 63.124, & \alpha_{\text{PtAl}} &= 1.3501 \text{ \AA}^{-1}. \end{aligned}$$

Полагалось, что массы атомов платины и алюминия равны $m_{\text{Pt}} = 195.23$ а.е.м., $m_{\text{Al}} = 26.97$ а.е.м., а постоянная кристаллической решетки $a_0 = 3.99 \text{ \AA}$.

Рассмотрим характеристики дискретных бризеров и их взаимодействие. К наиболее важным характеристикам ДБ1 и ДБ2 можно отнести время их жизни в кристалле, величину локализованной энергии, степень пространственной локализации, а также зависимость частоты от амплитуды колебаний.

Относительно степени локализации ДБ установлено, что ближайшие соседи атома Al имеют гораздо меньшие амплитуды колебаний и, следовательно, энергию. Это означает, что в ДБ1 энергия практически полностью локализуется на одном атоме Al (до 85 % от общей энергии ДБ). Как следствие – неподвижность ДБ1 и высокая устойчивость к возмущениям. Иная ситуация в ДБ2. В результате переходного процесса происходит перераспределение энергии на 4 атома Al плотноупакованного направления. Колебания совершаются с частотой 13.8 ТГц , то есть с частотой выше фононного спектра кристалла. Отметим, что атомы совершают колебания вдоль плотноупакованного ряда, в котором возбужден ДБ2. Полученный ДБ2 обладает некоторым начальным импульсом в сторону атома с меньшим начальным отклонением. Обладая подвижностью, ДБ2 является менее устойчивым по сравнению с ДБ1 в силу своей меньшей локализации.

Таким образом, в отличие от локализованного на одном атоме, неподвижного и устойчивого ДБ1 дискретный бризер ДБ2 локализован, в основном, на четырех атомах Al и вытянут вдоль одного из плотноупакованных рядов кристалла.

Известно, что дискретные бризеры способны локализовать значительную энергию. На рис. 1 показаны зависимости энергии ДБ1 и ДБ2 от времени. Несложно видеть, что бризеры в течение всего периода жизни медленно излучают энергию. Отметим, что время жизни бризера ДБ1 вдвое превышает соответствующую величину бризера ДБ2, в то время как энергия ДБ2 практически вдвое выше энергии бризера ДБ1. Временная зависимость обнаруживает, что энергия ДБ с течением времени достигает некоторого наименьшего значения, а затем быстро рассеивается, приводя к разрушению ДБ. При этом пороговое значение энергии для ДБ1 составляет $\sim 0.8 \text{ эВ}$, а для ДБ2 –

~ 1.8 эВ. Можно полагать, что выброс в решетку такой энергии может приводить к активации различных процессов, например движению дислокаций.

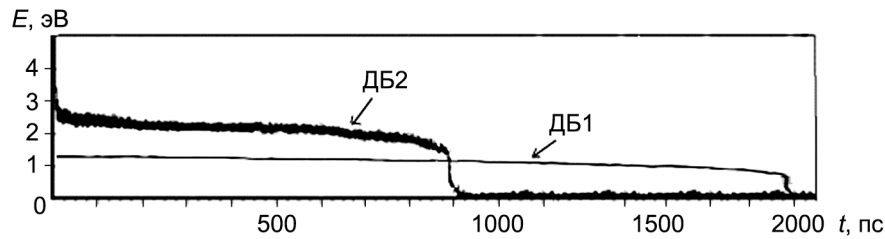


Рис. 1. Зависимость энергии дискретных бризеров от времени жизни

Следует отметить, что ДБ1с мягким типом нелинейности имеет частоту, лежащую в щели фононного спектра кристалла, а частота ДБ2 с жестким типом нелинейности лежит выше этого спектра. На рис. 2 представлены зависимости частот колебаний ДБ1 и ДБ2 от их амплитуды.

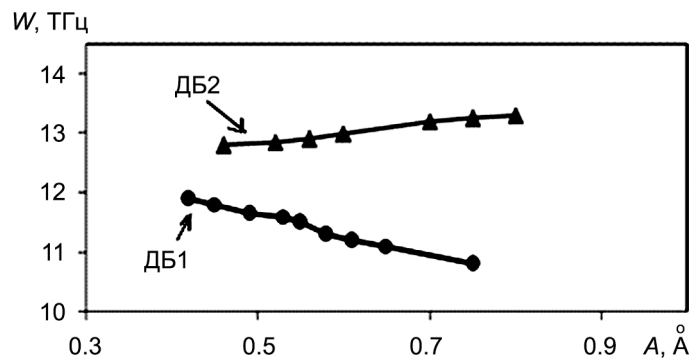


Рис. 2. Зависимость частот ДБ1 и ДБ2 от амплитуды колебаний

Рассмотрим взаимодействие дискретных бризеров. Так как исследуются квазибризеры, то абсолютно упругих взаимодействий ДБ не наблюдается.

Пусть два зеркально симметричных ДБ2 движутся навстречу друг другу вдоль направления $\langle 110 \rangle$. На рис. 3 приведена динамика их взаимодействия через 4 пс (а), 8 пс (б), 10 пс (в) и 16 пс (г) после начала эксперимента. По оси абсцисс отложено их положение вдоль направления $\langle 110 \rangle$, по оси ординат — амплитуда колебаний атомов.

Из рис. 3, а несложно видеть, что на начальном этапе наблюдается упругое взаимодействие дискретных бризеров. Далее происходит взаимодействие с рассеиванием энергии путем передачи части их энергии атомам подрешетки А1. Это очевидно из последовательного сравнения максимумов на рис. 3, на которых значения в максимумах не превышают последовательно 0.60, 0.55, 0.50 и 0.45. Если амплитуды колебаний составляли до столкновения ~ 0.6 Å, то после столкновения — ~ 0.45 Å. Повторное столкновение ДБ приводит к разрушению одного из них. Возможно, это связано с использованием периодических граничных условий. Таким образом, в процессе взаимодействия двух зеркально симметричных ДБ2 играет роль не только уменьшение амплитуды колебаний ДБ2 (диссипация энергии), но и «разогрев» подрешетки А1 в процессе движения ДБ по кристаллу в ходе постоянного рассеивания энергии.

При рассмотрении столкновения ДБ2 с ДБ1 обратим внимание на устойчивость ДБ1, атомные колебания в котором поляризованы вдоль направления $\langle 100 \rangle$. В результате такого столкновения амплитуда колебаний в ДБ2 уменьшается с 0.60 до 0.55 Å. Это означает существенную потерю бризером своей энергии. Повторные столкновения не приводят к столь значительным уменьшениям амплитуды колебаний, т.е. потерям энергии ДБ2. При этом время жизни ДБ2 не превышает 350 пс, в то время как ДБ1 практически не теряет свою энергию в результате столкновений и может существовать в течение 2000–2500 пс.

Оценим вероятность возбуждения дискретных бризеров ДБ1 и ДБ2. В соответствии с теорией Аррениуса доля атомов, способных преодолеть энергетический барьер процесса, равна

$$D = e^{\frac{-E_a}{kT}},$$

где k – постоянная Больцмана; T – температура кристалла; E_a – энергия активации процесса. Для ДБ1 величина E_a лежит в интервале 0.8–1.0 эВ. Оценка доли атомов, способных при температуре 1000 К преодолеть энергетический барьер, показывает, что до 0.01 % атомов могут являться носителями ДБ1. Бризер ДБ2 обладает большей энергией активации, чем ДБ1. Минимальная энергия, при которой ДБ2 может стабильно существовать, составляет величину ~ 1.8 эВ. В этом случае вероятность возбуждения ДБ2 в состоянии термодинамического равновесия при температуре 600 К составляет $7.6 \cdot 10^{-19}$. Полученное значение свидетельствует о том, что вероятность возбуждения ДБ2 в состоянии термодинамического равновесия крайне мала, поэтому спонтанное возбуждение ДБ2 без внешних воздействий на кристалл невозможно.

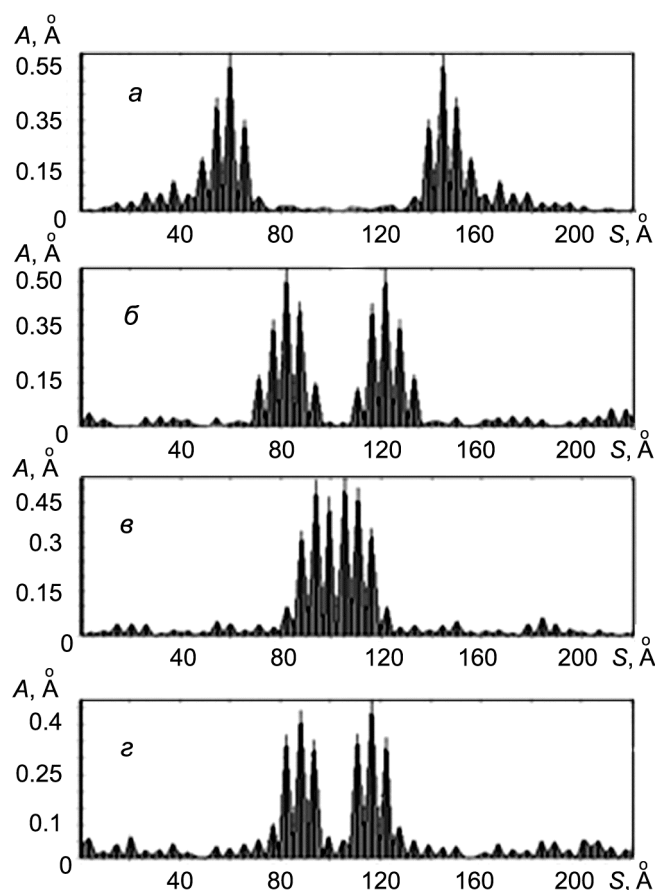


Рис. 3. Столкновение двух ДБ2 вдоль направления $\langle 110 \rangle$: формирование ДБ2 через 4 пс после начала эксперимента (а); сближение через 8 пс (б); столкновение через 10 пс (в); расхождение после столкновения через 16 пс (г)

Заключение

Исследование дискретных бризеров с мягким (ДБ1) и жестким (ДБ2) типами нелинейности в кристалле Pt_3Al показало ряд их принципиальных отличий. В ДБ1 энергия практически полностью локализуется на одном атоме Al (до 85 % от общей энергии ДБ). Как следствие – неподвижность ДБ1 и высокая устойчивость к возмущениям. Иная ситуация в ДБ2. В результате переходного процесса происходит перераспределение энергии на 4 атома Al плотноупакованного направления. Обладая подвижностью, ДБ2 является менее устойчивым по сравнению с ДБ1 в силу своей меньшей локализации. Таким образом, в отличие от локализованного на одном атоме, неподвижного и устойчивого ДБ1 дискретный бризер ДБ2 локализован, в основном, на четырех атомах Al и вытянут вдоль одного из плотноупакованных рядов кристалла. Однако ДБ2 имеет возможность перемещения на сотни нанометров в плотноупакованных направлениях.

Локализуя значительную энергию, бризеры ДБ1 и ДБ2 в течение всего периода жизни медленно ее излучают. При этом время жизни бризера ДБ1 вдвое превышает соответствующую величину бризера ДБ2, в то время как энергия ДБ2 практически вдвое выше энергии бризера ДБ1. Временная зависимость обнаруживает, что энергия ДБ с течением времени достигает некоторого

наименьшего значения, а затем быстро рассеивается, приводя к разрушению ДБ. Столкновение ДБ2 и ДБ1 вызывает излучение части их энергии в подрешетку А1, причем большую часть энергии теряет ДБ2, который разрушается быстрее, чем ДБ1. В процессе взаимодействия двух зеркально симметричных ДБ2 играет роль не только уменьшение амплитуды колебаний ДБ2 (диссипация энергии), но и «разогрев» подрешетки А1 в процессе движения ДБ по кристаллу в ходе постоянного рассеивания энергии.

ДБ2 могут эффективно транспортировать энергию по кристаллу, а столкновение ДБ приводит к значительной ее локализации в кристалле. Можно полагать, что выброс в решетку такой энергии вызовет активацию различных процессов. Возможность переноса энергии по кристаллу на значительные расстояния может приводить, таким образом, к структурным трансформациям в удалении от очага возбуждения подобных локализованных объектов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Sievers A.J. and Takeno S. // *Phys. Rev. Lett.* – 1988. – V. 61. – P. 970.
2. Chechin G.M., Dzhelauhova G.S., and Mehonoshina E.A. // *Phys. Rev. E.* – 2006. – V. 74. – P. 036608.
3. Дмитриев С.В. // *Письма о материалах.* – 2011. – Т. 1. – Вып. 2. – С. 78–83.
4. Khadeeva L.Z. and Dmitriev S.V. // *Phys. Rev. B.* – 2010. – V. 81. – P. 214306.
5. Medvedev N.N., Starostenkov M.D., and Manley M.E. // *J. Appl. Phys.* – 2013. – V. 114. – P. 213506.
6. Liu B., Baimova J.A., Dmitriev S.V., et al. // *J. Phys. D.* – 2013. – V. 46. – P. 305302.
7. Murzaev R.T., Kistanov A.A., Dubinko V.I., et al. // *Comp. Mater. Sci.* – 2015. – V. 98. – P. 88–92.
8. Бaimова Ю.А. Дмитриев С.В., Кистанов А.А. // *Изв. вузов. Физика.* – 2013. – Т. 56. – № 2. – С. 60–69.
9. Потекаев А.И., Дмитриев С.В., Кулагина В.В. и др. *Слабоустойчивые длиннопериодические структуры в металлических системах.* – Томск: Изд-во НТЛ, 2010. – 308 с.
10. Medvedev N.N., Starostenkov M.D., Potekaev A.I., et al. // *Russ. Phys. J.* – 2014. – V. 57. – No. 3. – P. 387–395.
11. Потекаев А.А., Кулагина В.В., Чаплыгина А.А. и др. // *Изв. вузов. Физика.* – 2012. – Т. 55. – № 7. – С. 78–87.
12. Потекаев А.И., Кулагина В.В., Чаплыгина А.А. и др. // *Изв. вузов. Физика.* – 2013. – Т. 56. – № 6. – С. 14–22.

*Национальный исследовательский Томский государственный университет, г. Томск, Россия Поступила в редакцию 28.04.15.

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

E-mail: genphys@mail.ru;

***Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, г. Уфа, Россия

E-mail: dmitriev.sergey.v@gmail.com

****Санкт-Петербургский политехнический университет имени Петра Великого, г. Санкт-Петербург, Россия

*****Сибирский физико-технический институт им. В.Д. Кузнецова

Томского государственного университета, г. Томск, Россия

E-mail: kanc@spti.tsu.ru

*****Алтайская государственная академия образования им. В.М. Шукшина,

г. Бийск, Россия

E-mail: zakharovpv1@rambler.ru; eam77@yandex.ru

*****Сибирский государственный медицинский университет,

г. Томск, Россия

Старостенков Михаил Дмитриевич, д.ф.-м.н., профессор, зав. каф. физики;
 Потекаев Александр Иванович, д.ф.-м.н., профессор, директор СФТИ, профессор ГТУ;
 Дмитриев Сергей Владимирович, д.ф.-м.н., профессор, зав. лабораторией ИПСМ РАН, профессор научно-исследовательской лаборатории «Механика новых материалов» СПбПУ;
 Захаров Павел Васильевич, к.ф.-м.н., доцент каф. ФИИ;
 Ерёмин Александр Михайлович, к.ф.-м.н., доцент, доцент каф. МиМОМ.
 Кулагина Валентина Васильевна, к.ф.-м.н., доцент, доцент.