

¹Алтайский государственный гуманитарно-педагогический университет им. В.М. Шукшина²Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова³Оренбургский государственный университет

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ДВИЖУЩЕГОСЯ ДИСКРЕТНОГО БРИЗЕРА С ТОЧЕЧНЫМ ДЕФЕКТОМ В КРИСТАЛЛЕ СОСТАВА A_3B

Методом молекулярной динамики изучаются взаимодействия движущегося дискретного бризера с точечным дефектом в кристалле состава A_3B на примере Pt_3Al . Проблема взаимодействия солитонных объектов с топологическими дефектами в кристалле является важной для оценки перспектив использования таких солитонов, как дискретный бризер, в технологических процессах.

В качестве точечного дефекта выступал межузельный атом Al, помещенный в тетраэдрическую пустоту данного кристалла. Для возбуждения движущегося дискретного бризера отклонялись из положения равновесия два атома Al на величину 0,5–1 Å и 1 Å в противоположные стороны вдоль плотноупакованного направления, тем самым задавалась начальная скорость движения дискретного бризера по кристаллу. Возбуждение движущегося дискретного бризера возможно вдоль плотноупакованных направлений: $\langle 110 \rangle$, $\langle 011 \rangle$, $\langle 101 \rangle$, $\langle 110 \rangle$. В выбранной модели в колебаниях движущегося дискретного бризера принимают участие несколько атомов «легкой подрешетки». В этом случае движущиеся дискретные бризеры смогут перемещаться по кристаллу на значительные расстояния, практически не рассеивая своей энергии.

Полученные данные позволяют судить о влиянии движущегося дискретного бризера на точечный дефект в кристалле в зависимости от его скорости, энергии и удаленности от дефекта. Тем самым открывают перспективу использования подобных объектов в качестве анализатора чистоты сплава и дефектных структур в кристаллах состава A_3B . Кроме того подобные объекты могут быть использованы для переноса энергии или информации вдоль кристалла.

Ключевые слова: дискретный бризер, квази-бризер, точечный дефект, молекулярная динамика.

Введение

В последнее время значительное внимание уделяется изучению нелинейного объекта – дискретного бризера (ДБ), который представляет собой локализованное в пространстве незатухающее колебание большой амплитуды в бездефектной нелинейной дискретной системе [1]. В реальных моделях кристаллов следует говорить о квази-бризерах, имеющих конечное время жизни и нестрогую периодичность колебаний во времени [2]. Предполагается, что ДБ участвуют в различных процессах твёрдых телах. В частности, 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 твёрдых телах и т. д.

ДБ можно разделить на два типа по характеру зависимости их частоты от амплитуды [3]. У ДБ мягкого типа частота уменьшается с увеличением его амплитуды (такие ДБ могут существовать только в кристаллах имеющих щель в фононном спектре: их частота лежит в щели

фононного спектра и поэтому их называют щелевыми), а у ДБ жесткого типа происходит обратное (они могут иметь частоты, как в щели, так и выше фононного спектра). ДБ с мягким типом нелинейности могут возбуждаться в биатомных кристаллах, например, в NaCl [3], Pt_3Al [4]–[13], а также в графене и графане [14]–[15]. Бризеры с жестким типом нелинейности существуют в чистых металлах с ГЦК, ОЦК, ГПУ структурах. Движущийся ДБ – это частный случай дискретного бризера с жестким типом нелинейности. Целью настоящей работы является изучение взаимодействия движущегося дискретного бризера с точечным дефектом в кристалле состава A_3B на примере Pt_3Al .

Модель и методика эксперимента

Рассматриваемая модель представляла собой объемный кристалл Pt_3Al со сверхструктурой $L1_2$ на основе ГЦК решетки. Расчетная ячейка размером 225,71 x 29,32 x 20,73 Å содержала 8640 атомов (рис. 1). В качестве точечного дефекта выступал межузельный атом Al, внедренный в эту структуру. Ось X модели соответствовала $\langle 110 \rangle$, ось Y – $\langle 111 \rangle$, ось Z – $\langle 112 \rangle$. Использовались периодические граничные усло-

вия. Межатомное взаимодействие задавалось посредством парного потенциала Морзе:

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

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

Параметры D , β и α определялись из следующих условий:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \sum_{i=1}^z \eta_i \phi_{V=V_0} &= E_s, \quad \frac{1}{2} \sum_{i=1}^z \eta_i \left(\frac{\partial \phi}{\partial V} \right)_{V=V_0} = \\ &= 0, \quad -V_0 \cdot \left(\frac{\partial P_s}{\partial V} \right) = K_0. \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь E_s – энергия сублимации атомов кристалла; K_0 – объемный модуль упругости; P_s – давление изэнтропического сжатия; V_0 и V – удельные объемы в начальном и деформированном состоянии; η_i – число атомов в i -ой координационной сфере.

Возбуждение движущегося ДБ возможно вдоль плотноупакованных направлений: $\langle 110 \rangle$, $\langle 011 \rangle$, $\langle 101 \rangle$, $\langle 110 \rangle$. В выбранной модели в колебаниях движущегося ДБ принимают участие несколько атомов «легкой подрешетки». В этом случае движущиеся ДБ смогут перемещаться по кристаллу на значительные расстояния, практически не рассеивая своей энергии. Для возбуждения движущегося ДБ отклонялись из положения равновесия два атома Al на величину 0,5–1 Å и 1 Å в противоположные стороны вдоль плотноупакованного направления, как показано на рис. 2 (цифрами 1 и 2 обозначены атомы, выведенные из положения равновесия в нулевой момент времени, цифрой 3 обозначен точечный дефект в виде межузельного атома Al, внедренный в тетраэдрическую пустоту кристалла).

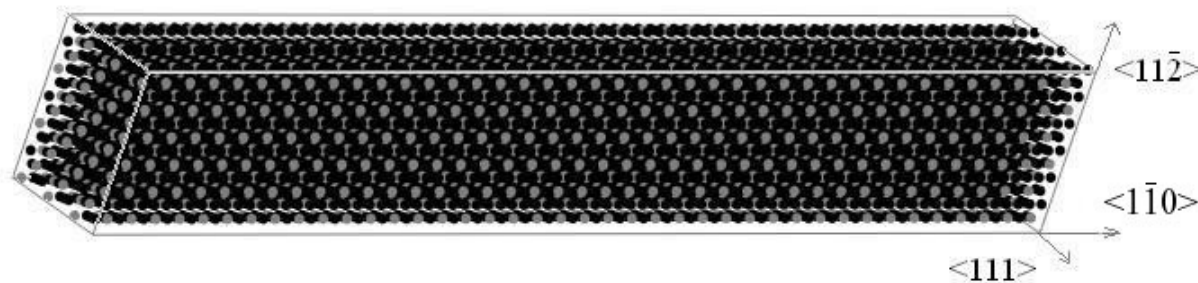


Рисунок 1. Вид объемной модели расчетной ячейки кристалла Pt_3Al с указанием кристаллографических направлений, черным цветом обозначены атомы Pt, серым – Al.

Результаты и их обсуждения

Нами получены зависимости энергии движущегося дискретного бризера в период столкновения с точечным дефектом, времени движения ДБ по кристаллу, частоты и амплитуды колебаний атомов, находящихся вблизи точечного дефекта от отклонений одного из атомов Al (0,5–1 Å) на одном из которых было проведено возбуждение движущегося дискретного бризера, а так же от скорости движения ДБ по кристаллу.

На рис. 3а приведена зависимость t (времени движения движущегося ДБ до первого столкновения с дефектом в пс) от Δ (отклонения абсциссы правого атома Al в Å при фиксированном отклонении левого атома Al в 1 Å от положения равновесия), а на рис. 3б приведена зависимость t от v (скорость движения движущегося ДБ по кристаллу в Å/пс).

На рис. 4а приведена зависимость ϵ (энергия движущегося ДБ непосредственно при столкновении с дефектом в эВ) от v , а на рис. 4б приведена зависимость ϵ от Δ . На рис. 5 приведена зависимость v от Δ .

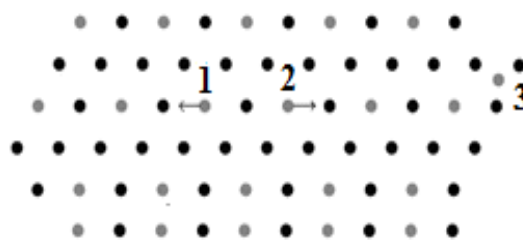


Рисунок 2. Плоскость (111) кристалла Pt_3Al : начальные условия для возбуждения движущегося ДБ вдоль направления $\langle 110 \rangle$.

Из данных зависимостей видно:

1. При изменении Δ – отклонение абсциссы правого атома Al от положения равновесия на величину 0,825–1 Å движущийся ДБ доходит до дефекта, упруго сталкивается с ним, взаимодействует с дефектом порядка 0,63 пс и движется в противоположную сторону, при этом взаимодействии отдает часть своей энергии порядка 0,113 эВ. Энергия движущегося ДБ в период первого столкновения с дефектом варьируется от 2 до 2,9 эВ. При взаимодействии движущегося ДБ с точечным дефектом он отдает около 5% своей энергии дефекту, а затем продолжает свое движение в противоположную сторону. Частота колебаний атомов вблизи точечного дефекта варьируется от 12,65 до 12,85 ТГц, а их амплитуда варьируется от 0,025 до 0,08 Å. При данном взаимодействии, движущегося ДБ с дефектом, его скорость движения варьируется от 3,19 до 5,20 Å/пс.

2. При изменении Δ – отклонение абсциссы правого атома Al от положения равновесия на величину 0,725–0,8 Å движущийся ДБ доходит до дефекта, сталкивается с ним, взаимодействует с дефектом порядка 1,26 пс и разрушается. При вза-

имодействии движущегося ДБ с точечным дефектом дискретный бризер отдает около 7% своей энергии дефекту, а затем разрушается. Частота колебаний атомов вблизи точечного дефекта варьируется от 12,58 до 12,67 ТГц, а их амплитуда варьируется от 0,03 до 0,045 Å. При данном взаимодействии, движущегося ДБ с дефектом, его скорость движения варьируется от 4,85 до 5,20 Å/пс.

3. При изменении Δ – отклонение абсциссы правого атома Al от положения равновесия на величину 0,5–0,7 Å движущийся ДБ проходит расстояние, которое варьируется от 21,8 до 39,83 Å и разрушается, до дефекта он не доходит и соответственно не взаимодействует с ним. Энергия движущегося ДБ при данном взаимодействии варьируется от 1,25 до 0,98 эВ, а его скорость движения варьируется от 2,8 до 4,51 Å/пс. Частота колебаний атомов вблизи точечного дефекта варьируется от 3,5 до 5,5 ТГц, а их амплитуда варьируется от 0,005 до 0,028 Å.

В таблице 1 приведены средние значения скорости движения ДБ по кристаллу, средняя энергия движущегося ДБ при столкновении с дефектом, средняя амплитуда и частота колебаний атомов вблизи точечного дефекта.

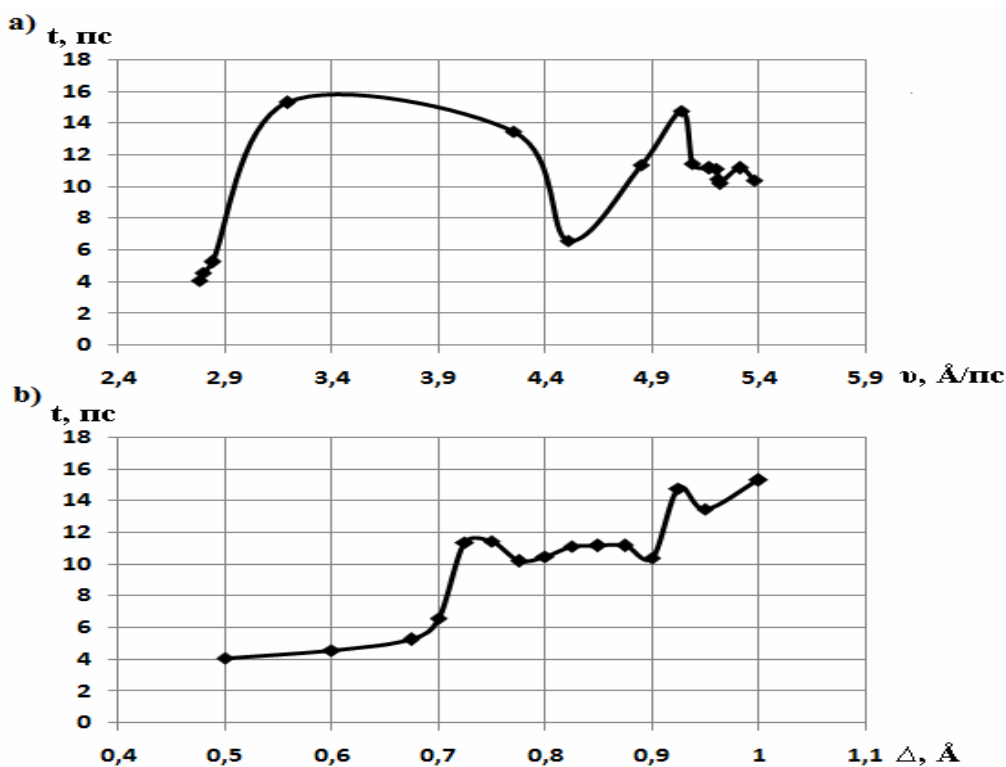


Рисунок 3. а) Зависимость $t(v)$; б) Зависимость $t(\Delta)$.

Из данных табличных числовых значений видно, что при средней скорости движения движущегося ДБ по кристаллу порядка 4,79 А/пс, наблюдается упругое взаимодействие движущегося ДБ с точечным дефектом. Движущийся ДБ доходит до дефекта, взаимодействует с ним и движется назад. При этом взаимодействии средняя амплитуда и частота колебаний атомов вблизи точечного дефекта соответственно равна 0,058 А и 12,76 ТГц. Если скорость движущегося ДБ увеличить до 5,09 А/пс, то движущийся ДБ, дойдя до дефекта, при взаимодействии с ним разрушается. При этом взаимодействии средняя амплитуда и частота колебаний атомов вблизи точечного де-

фекта соответственно равна 0,044 А и 12,63 ТГц. Незначительное уменьшение амплитуды и частоты колебаний близ лежащих атомов с точечным дефектом очевидно связано с тем, что средняя энергия движущегося ДБ при упругом взаимодействии с точечным дефектом равна 2,5 эВ, а для случая, когда ДБ разрушается на дефекте равна 1,93 эВ. При уменьшении скорости движущегося ДБ до 3,38 А/пс, движущийся ДБ не доходит до дефекта и не взаимодействует с ним, при этом амплитуда и частота колебаний близ лежащих атомов с точечным дефектом соответственно равна 0,015 А и 4,58 ТГц, что говорит о очень малом воздействии движущегося ДБ на дефект.

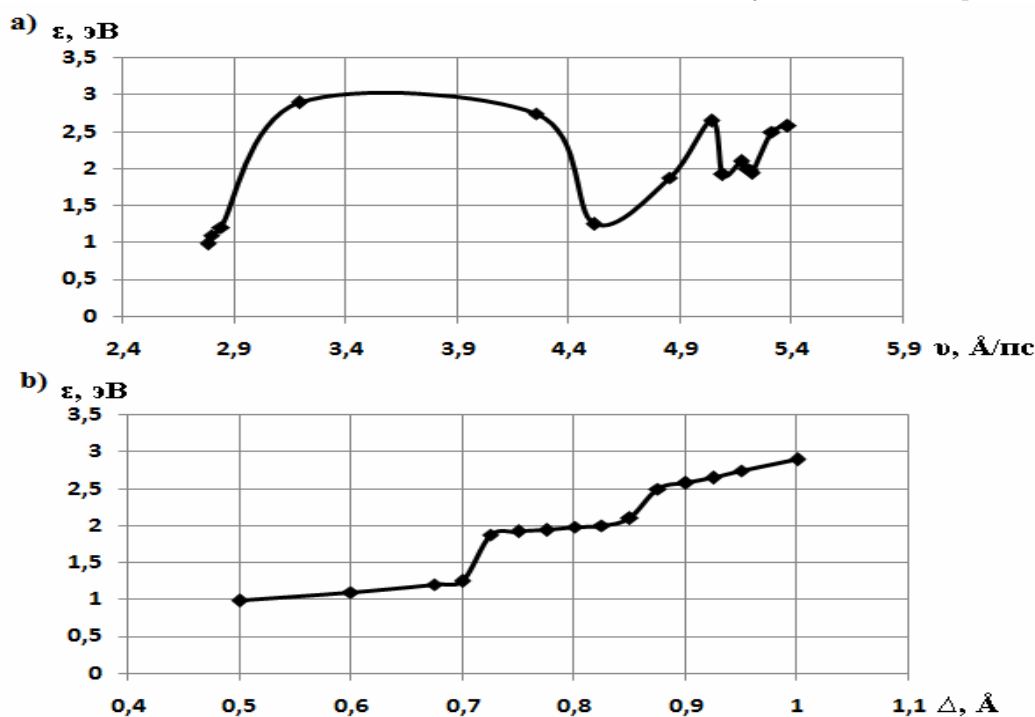


Рисунок 4. а) Зависимость $\epsilon(v)$; б) Зависимость $\epsilon(\Delta)$.

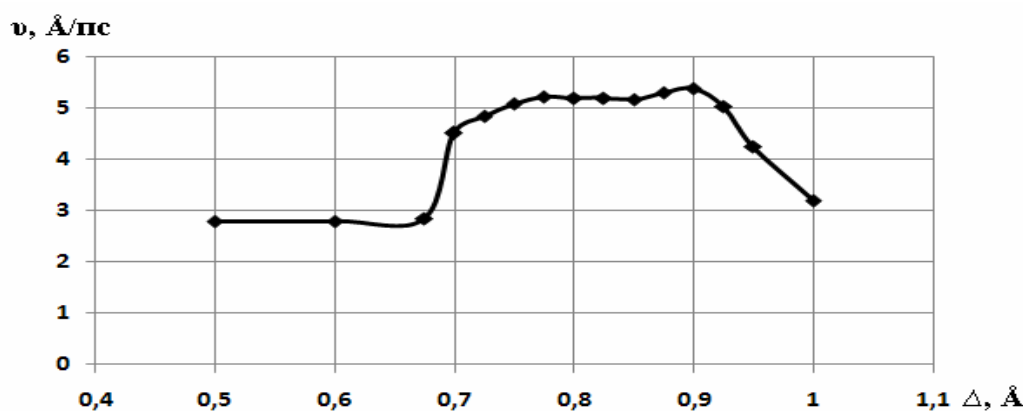


Рисунок 5. Зависимость $v(\Delta)$.

Таблица 1. Средние значения числовых характеристик, движущегося дискретного бризера.

Δ – отклонение атома Al в A	0,825–1	0,725–0,8	0,5–0,7
t_{cp} – средняя скорость движения ДБ по кристаллу в А/пс	4,79	5,09	3,38
ϵ_{cp} – средняя энергия ДБ при столкновении с дефектом в эВ	2,5	1,93	1,13
A_{cp} – средняя амплитуда колебаний атомов вблизи дефекта в А	0,058	0,044	0,015
ν_{cp} – средняя частота колебаний атомов вблизи дефекта в ТГц	12,76	12,63	4,58

Заключение

Методом молекулярной динамики моделируется взаимодействие движущегося дискретного бризера, который является частным случаем дискретного бризера с жестким типом нелинейности, с точечным дефектом в виде межузельного атома Al, помещенным в тетраэдрическую пустоту кристалла состава A_3B на примере Pt_3Al . Для возбуждения движущегося ДБ отклонялись из положения равновесия два атома Al на величину 0,5–1 А и 1 А в противоположные стороны вдоль плотноупакованного направления, тем самым задавалась начальная скорость движения ДБ по кристаллу. Возбуждение движущегося ДБ возможно вдоль плотноупакованных направлений: $\langle 110 \rangle$, $\langle 011 \rangle$,

$\langle \bar{1}01 \rangle$, $\langle \bar{1}10 \rangle$. В выбранной модели в колебаниях движущегося ДБ принимают участие несколько атомов «легкой подрешетки». В этом случае движущиеся ДБ смогут перемещаться по кристаллу на значительные расстояния, практически не рассеивая своей энергии.

Столкновение дискретного бризера с точечным дефектом кристалла не приводит к рассеиванию энергии, а лишь изменяет направление его движение на противоположное. Тем самым открывая перспективу использования подобных объектов в качестве анализатора чистоты сплава и дефектных структур в кристаллах состава A_3B . Кроме того подобные объекты могут быть использованы для переноса энергии или информации вдоль материала.

16.02.2016

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, в рамках проекта № 16-42-220002р_а.

Список литературы:

1. Sievers A.J., Takeno S. Intrinsic localized modes in anharmonic crystals // Phys. Rev. Lett. – 1988. – V. 61. – № 8. – P. 970–973.
2. Chechin G. M., Dzhelauhova G. S., and Mehonoshina E. A. Quasibreathers as a generalization of the concept of discrete breathers // Phys. Rev. E. – 2006. – Vol. 74. – P. 36608.
3. Дмитриев С.В., Хадеева Л.З. Щелевые дискретные бризеры в двухкомпонентном двумерном кристалле в состоянии теплового равновесия // Физика твердого тела. – 2011. – Т. 53. – №7. – С. 1353–1358.
4. Медведев Н.Н., Старостенков М.Д., Потекаев А.И., Захаров П.В., Маркидонов А.В., Ерёмин А.М. Локализация энергии в упорядоченных конденсированных системах: сплавы состава A_3B со сверхструктурой $L1_2$ // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2014. – Т. 57, № 3. – С. 92–100.
5. Захаров П.В., Старостенков М.Д., Ерёмин А.М., Маркидонов А.В. Поведение нелинейной локализованной моды вблизи комплексов вакансий в кристалле Pt_3Al // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2014. – Т. 11, № 2. – С. 260–264.
6. Захаров П.В., Старостенков М.Д., Медведев Н.Н., Ерёмин А.М., Маркидонов А.В. Антисимметричный дискретный бризер в кристалле Pt_3Al // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2014. – Т. 11, № 3. – С. 388–393.
7. Захаров П.В., Старостенко М.Д., Медведев Н.Н., Ерёмин А.М., Маркидонов А.В. Влияние низких температур на характеристики дискретного бризера в кристалле Pt_3Al // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2014. – Т. 11, № 4. – С. 533–536.
8. Zakharov P.V., Medvedev N.N., Starostenkov M.D., Eremin A.M. Prospects for the use of dynamic discrete breathers in nanofibers crystals stoichiometry A_3B with the structure of $L1_2$ // 2015 International Siberian Conference on Control and Communications (SIBCON). Proceedings. – Omsk: Omsk State Technical University. Russia, Omsk, May 21?23, 2015. IEEE Catalog Number: CFP15794-CDR. ISBN: 978-1-4799-7102-2.
9. Захаров П.В., Ерёмин А.М., Старостенков М.Д., Маркидонов А.В., Луценко И.С. Квазибризерные состояния в кристалле A_3B при наличии точечных дефектов // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2015. – Т. 12, № 2. – С. 146–152.

10. Захаров П.В., Старостенков М.Д., Дмитриев С.В., Медведев Н.Н., Ерёмин А.М. Моделирование взаимодействия дискретных бризеров различного типа в нановолокне кристалла Pt_3Al // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2015. – Т. 148, вып. 2(8). – С. 252–257.
11. Старостенков М.Д., Потекаев А.И., Дмитриев С.В., Захаров П.В., Ерёмин А.М., Кулагина В.В. Динамика дискретных бризеров в кристалле Pt_3Al // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2015. – Т. 58, № 9. – С. 136–140.
12. Захаров П.В., Ерёмин А.М., Старостенков М.Д., Маркидонов А.В. Компьютерное моделирование нелинейной локализованной колебательной моды большой амплитуды в кристалле Pt_3Al с бивакансией Pt // Компьютерные исследования и моделирование. – 2015. – Т. 7, № 5. – С. 1089–1096.
13. Захаров П.В., Ерёмин А.М., Манаков Н.А., Старостенков М.Д., Маркидонов А.В. Поведение квази-бризерной моды в кристалле Pt_3Al при наличии точечных дефектов // Вестник Оренбургского государственного университета. – №9 (184). – 2015. – С. 38–44.
14. Баимова Ю.А., Ямилова А.Б., Лобзенко И.П., Дмитриев С.В., Чечин Г.М. Двумерные кластеры дискретных бризеров в графене // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2014. – Т.11 (4/2). – С. 599–604.
15. Хадеева Л.З., Дмитриев С.В., Кившарь Ю.С. Дискретные бризеры в деформированном графене // Письма в журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2011. – Т. 94. – Вып. 7. – С. 580–584.

Сведения об авторах:

Захаров Павел Васильевич, доцент кафедры физики и информатики Алтайского государственного гуманитарно-педагогического университета им. В.М. Шукшина, кандидат физико-математических наук

Ерёмин Александр Михайлович, доцент кафедры математики и методики обучения математике Алтайского государственного гуманитарно-педагогического университета им. В.М. Шукшина, кандидат физико-математических наук, доцент

Старостенков Михаил Дмитриевич, заведующий кафедрой физики Алтайского государственного технического университета им. И.И. Ползунова, доктор физико-математических наук, профессор

Манаков Николай Александрович, профессор кафедры общей физики Оренбургского государственного университета, доктор физико-математических наук, профессор

460018, г. Оренбург, пр-т Победы, 13