

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ДИСКРЕТНЫХ БРИЗЕРОВ РАЗЛИЧНОГО ТИПА В НАНОВОЛОКНЕ КРИСТАЛЛА Pt₃Al

П. В. Захаров^{a,b}, М. Д. Старостенков^b, С. В. Дмитриев^{c,d},*
Н. Н. Медведев^b А. М. Ерёмин^a

^a Алтайская государственная академия образования им. В. М. Шукшина
659333, Бийск, Россия

^b Алтайский государственный технический университет им. И. И. Ползунова
656038, Барнаул, Россия

^c Институт проблем сверхпластиности металлов Российской академии наук
450001, Уфа, Россия

^d Национальный исследовательский Томский государственный университет
634050, Томск, Россия

Поступила в редакцию 9 февраля 2015 г.

Известно, что в молекулярно-динамической модели кристалла Pt₃Al можно возбудить дискретный бризер (ДБ) с мягким типом нелинейности (ДБ1), который характеризуется высокой степенью локализации на одном легком атоме (Al), неподвижностью, а также частотой, лежащей в щели фононного спектра и убывающей с ростом амплитуды ДБ. В данной работе продемонстрирована возможность возбуждения в нановолокне Pt₃Al дискретного бризера с жестким типом нелинейности (ДБ2), который локализован на нескольких легких атомах, может перемещаться по кристаллу и имеет частоту выше фононного спектра, растущую с увеличением амплитуды ДБ. Примечательно, что наличие свободных поверхностей нановолокна не препятствует существованию в нем ДБ1 и ДБ2. Рассмотрены столкновения двух ДБ2, движущихся навстречу друг другу с равными скоростями, а также столкновение ДБ2 со стоячим ДБ1. Два сталкивающихся ДБ с жестким типом нелинейности почти упруго отталкиваются, теряя при взаимодействии лишь незначительную часть своей энергии. ДБ2 также отражается от стоячего ДБ1, при этом наблюдается частичное рассеяние энергии бризеров в подрешетку Al. Полученные результаты свидетельствуют о том, что ДБ могут переносить энергию по кристаллу на значительные расстояния. При столкновении двух и более ДБ величина энергии, локализованной в пространстве, может достигать нескольких электронвольт, что позволяет ставить вопрос об участии ДБ в структурных трансформациях кристалла.

DOI: 10.7868/S0044451015080064

1. ВВЕДЕНИЕ

Среди различных видовnanoобъектов в последнее время особый интерес вызывают нановолокна [1–8]. Под нановолокнами обычно понимают протяженный кристалл, поперечный размер которого не превышает 100 нм и в котором практически отсутствуют дефекты [1]. Они применяются в целом

ряде областей: медицине, биоинженерии, электронике, в фильтрации газов и жидкостей, в создании композиционных материалов [6]. Широта области применения нановолокон вызвана уникальным набором их свойств. Прочность нановолокон возрастает при уменьшении диаметра и приближается к теоретическому пределу [2–8]. Возможность существования объектов солитонного типа (пространственно-локализованных нелинейных возбуждений решетки) в нановолокнах остается слабо изученной в силу сложности проведения натурных эксперимен-

*E-mail: zakharovpv@rambler.ru

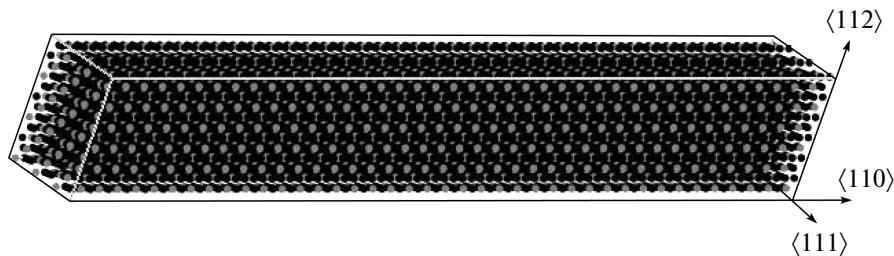


Рис. 1. Расчетная ячейка нановолокна Pt₃Al с указанием кристаллографических направлений. Черным цветом обозначены атомы Pt, серым — Al

тов. Численные эксперименты по исследованию таких возбуждений, как правило, проводятся в объеме кристалла и вопрос о возможности их существования в нановолокнах, где заметную роль играют свободные поверхности, остается неизученным. В рамках данного исследования рассматриваются дискретные бризеры (ДБ) в нановолокне Pt₃Al. Под ДБ понимаются нелинейные локализованные незатухающие колебания большой амплитуды в бездефектных дискретных системах [9]. Однако в реальных кристаллах следует говорить о квазибризерах, имеющих конечное время жизни и нестрогую периодичность колебаний во времени [10]. В дальнейшем квазибризеры будут для краткости обозначаться ДБ.

ДБ можно разделить на два типа по характеру зависимости их частоты от амплитуды. 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 [11–13], Pt₃Al [14–32], а также в графене и графане [33–35]. Бризеры с жестким типом нелинейности существуют в чистых металлах с ГЦК-, ОЦК-, ГПУ-структурами. Исследования, связанные с ДБ, в последнее время вышли на более высокий уровень. Результаты многочисленных недавних работ говорят о том, что ДБ существуют практически во всех кристаллах [14–32]. Есть все основания полагать, что ДБ найдут применение для объяснения различных физических явлений в кристаллах.

Целью настоящей работы является доказательство возможности возбуждения ДБ с жестким типом нелинейности в нановолокне Pt₃Al и изучение

взаимодействия ДБ с мягким и жестким типами нелинейности друг с другом.

2. МОДЕЛЬ И МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

Рассматриваемая модель представляла собой нановолокно Pt₃Al со сверхструктурой L1₂ на основе ГЦК-решетки (рис. 1) размером 225.71 × 29.32 × 20.73 Å³, содержащее 8640 атомов. Вдоль нановолокна задавались периодические граничные условия, а его поверхность была свободной. Атомы взаимодействовали посредством парного потенциала Морзе:

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

где D — энергия связи, соответствующая глубине потенциальной ямы, α — параметр, определяющий жесткость межатомных связей, r определяет равновесное межатомное расстояние. Для сплава Pt₃Al параметры потенциала взяты из работы [30]: $D_{\text{AlAl}} = 0.318$ эВ, $\beta_{\text{AlAl}} = 27.4979$, $\alpha_{\text{AlAl}} = 1.02658$ Å⁻¹, $D_{\text{PtPt}} = 0.710$ эВ, $\beta_{\text{PtPt}} = 102.89$, $\alpha_{\text{PtPt}} = 1.582$ Å⁻¹, $D_{\text{PtAl}} = 0.5048$ эВ, $\beta_{\text{PtAl}} = 163.124$, $\alpha_{\text{PtAl}} = 1.3501$ Å⁻¹. Эти параметры вычислялись по стандартной методике [30, 36] из условий

$$\frac{1}{2} \sum_{i=1}^z \eta_i \varphi_{V=V_0} = E_S, \quad \frac{1}{2} \sum_{i=1}^z \eta_i \left(\frac{\partial \varphi}{\partial V} \right)_{V=V_0} = 0, \quad (2)$$

$$-V_0 = \left(\frac{\partial P_S}{\partial V} \right) = K_0.$$

Здесь E_S — энергия сублимации атомов кристалла при нулевой температуре, K_0 — объемный модуль упругости, V_0 — равновесный объем. Межатомное расстояние 2.83 Å. Массы атомов платины и алюминия: $m_{\text{Pt}} = 195.23$ а. е. м., $m_{\text{Al}} = 26.97$ а. е. м. Постоянная ГЦК-решетки $a_0 = 3.99$ Å.

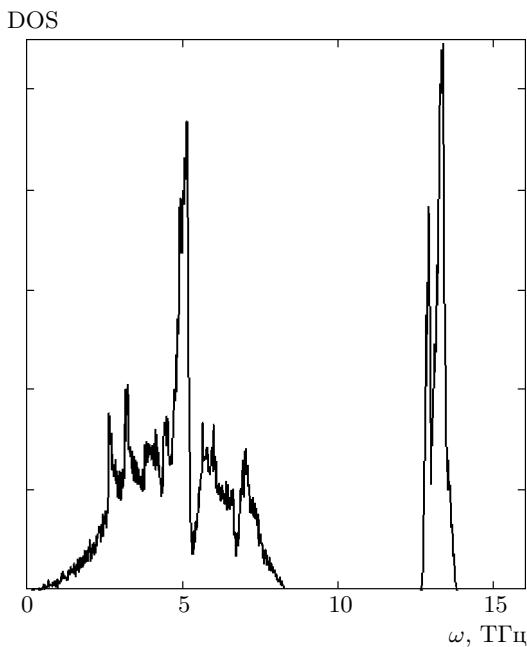


Рис. 2. Плотность фононных состояний модельного кристалла Pt₃Al

Для запуска ДБ начальные условия задавались в нановолокне при нулевой температуре. Из-за неточности использованных начальных условий небольшая часть энергии, данной кристаллу в нулевой момент времени, рассеивалась в виде малоамплитудных колебаний.

Как отмечалось в работе [28], необходимым условием для существования щелевых ДБ в кристаллах является наличие достаточно широкой щели в фононном спектре. В многокомпонентных кристаллах со значительной разницей масс компонент щель в фононном спектре, как правило, имеется. Плотность фононных состояний, рассчитанная для кристалла Pt₃Al, представлена на рис. 2. Щель в фононном спектре располагается в интервале от 8.2 до 12.6 ТГц. Таким образом, кристалл Pt₃Al обладает широкой запрещенной зоной в фононном спектре, что создает благоприятные условия для наличия щелевых ДБ в данном кристалле. Как показано в работах [28, 30], щелевые ДБ в Pt₃Al локализованы практически на одном атоме легкой подрешетки Al и поляризованы вдоль кристаллографического направления ⟨100⟩. На атоме Al, совершающем колебания с большой амплитудой, сосредоточено до 85 % всей энергии ДБ, при этом в согласованных колебаниях участвует около 20 атомов

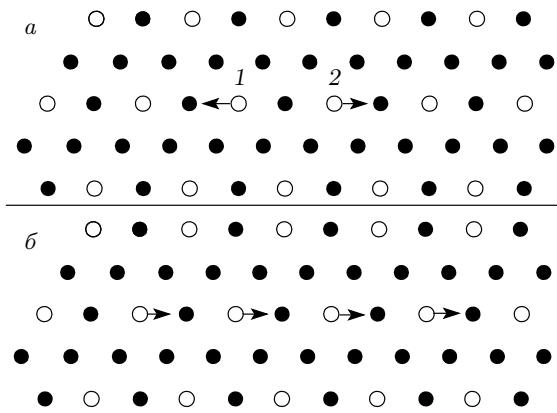


Рис. 3. Плоскость (111) кристалла Pt₃Al: *a* — начальные условия для возбуждения подвижного ДБ2 с жестким типом нелинейности, *б* — движущийся ДБ2, возникший после переходного процесса через 2 пс

криスタлла, на которые приходится оставшаяся часть энергии. Отметим, что это ДБ с мягким типом нелинейности (ДБ1), т. е. с увеличением амплитуды их частота уменьшается.

Условия возбуждения и существования ДБ1 подробно рассмотрены в работах [25–32]. В данной работе ДБ1 возбуждался в центре нановолокна, т. е. на максимальном расстоянии от поверхности кристалла, путем отклонения атома Al вдоль направления ⟨100⟩ на 0.72 Å. ДБ1 в кристалле Pt₃Al не обладает мобиностью и не может перемещаться по кристаллу. Он активно взаимодействует с дефектами кристаллической структуры [37, 38].

В кристалле Pt₃Al удалось возбудить также и ДБ с жестким типом нелинейности (далее обозначаемый ДБ2), т. е. при увеличении амплитуды расчет частота его колебаний, которые осуществляются вдоль направления ⟨100⟩. В отличие от ДБ1, в колебаниях ДБ2 принимают участие несколько атомов легкой подрешетки. ДБ2 могут перемещаться по кристаллу на значительные расстояния, практически не рассеивая своей энергии. Для возбуждения подвижного ДБ2 отклонялись из положения равновесия два атома Al на величину 0.9 и 1 Å в противоположные стороны вдоль направления ⟨110⟩, как показано на рис. 3*a* (цифрами 1 и 2 обозначены атомы, выведенные из положения равновесия в нулевой момент времени). Атомы возбуждались в той же плоскости и в том же атомном ряду, что и для ДБ1. В результате переходного процесса происходит перераспределение энергии на 4 атома Al (рис. 3*b*). Колебания совершаются с частотой 13.8 ТГц, т. е. вы-

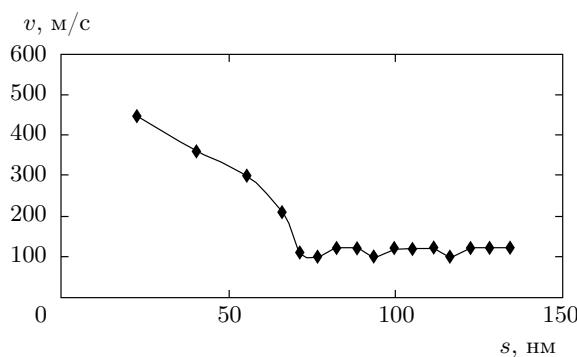


Рис. 4. Зависимость скорости ДБ2 от пройденного им расстояния в кристалле Pt_3Al вдоль направления $\langle 110 \rangle$

ше фононного спектра кристалла. Полученный ДБ2 обладает некоторым начальным импульсом в сторону атома с меньшим начальным отклонением, таким образом, формируется ДБ2, движущийся в направлении $\langle 110 \rangle$.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Проанализируем динамику подвижного ДБ2 с жестким типом нелинейности в кристалле Pt_3Al . Важными характеристиками ДБ являются его время жизни и максимальное расстояние, на которое он способен переместиться по кристаллу вдоль направления $\langle 110 \rangle$. На рис. 4 приведена зависимость скорости движения ДБ от пройденного им расстояния, а на рис. 5 — зависимость амплитуды от пройденного расстояния.

В силу периодических граничных условий ДБ2 способен неограниченное количество раз проходить по расчетной ячейке. Обратим внимание, что начальная скорость движения ДБ по кристаллу достигает 450 м/с, однако в дальнейшем происходит ее снижение и приближение к значению 110–120 м/с, при этом ДБ2 медленно излучает энергию в подрешетку Al. Изменение амплитуды происходит плавно в течение всего времени жизни ДБ, но снижение амплитуды колебаний атомов до 0.4 Å приводит к его разрушению. Объяснить это можно тем, что с уменьшением амплитуды ДБ2 его частота также уменьшается и входит в оптическую ветвь фононного спектра, что приводит к возбуждению фононов и быстрому излучению энергии в легкую подрешетку кристалла.

Таким образом, показано, что ДБ2 с жестким типом нелинейности способен перемещаться на зна-

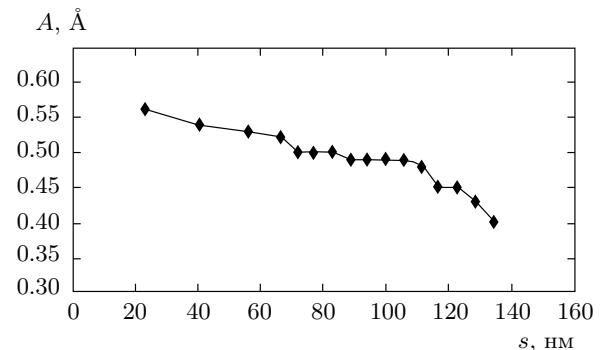


Рис. 5. Зависимость амплитуды колебаний атомов ДБ2 от пройденного ими расстояния в кристалле Pt_3Al вдоль направления $\langle 110 \rangle$

чительные расстояния в нановолокне Pt_3Al . При этом его разрушение приводит к локальному нагреву подрешетки Al, с последующим рассеиванием энергии по всему кристаллу.

Далее рассмотрим взаимодействие двух зеркально симметричных ДБ2, движущихся навстречу друг другу. При первом столкновении ДБ2 происходит их упругое отталкивание друг от друга (см. рис. 6). При столкновении происходит рассеяние части их энергии в подрешетку Al. Это хорошо заметно при сравнении рис. 6a и рис. 6g, откуда видно, что амплитуды ДБ2 до столкновения составляли 0.6 Å, а после столкновения — 0.45 Å. Повторное столкновение ДБ приводит к разрушению одного из них. В этом процессе играет роль не только уменьшение амплитуды колебаний ДБ2, но и разогрев подрешетки Al в процессе их движения по кристаллу. Рассматривая столкновение ДБ2 с ДБ1 (рис. 7), обратим внимание на большую устойчивость ДБ1, поляризованного вдоль направления $\langle 100 \rangle$. В результате столкновения ДБ2 замедлил скорость своего движения до 120 м/с, а его амплитуда уменьшилась до 0.55 Å. Повторные столкновения не приводили к таким же значительным потерям энергии ДБ2, однако время его жизни не превысило 350 пс. ДБ1 практически не терял свою энергию в результате столкновений и мог существовать в течение 2000–2500 пс.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Методом молекулярной динамики показана возможность возбуждения дискретных бризеров с мягким (ДБ1) и жестким (ДБ2) типами нелинейности в нановолокне Pt_3Al . Свободные поверхности нановолокна не влияют на существование в нем двух

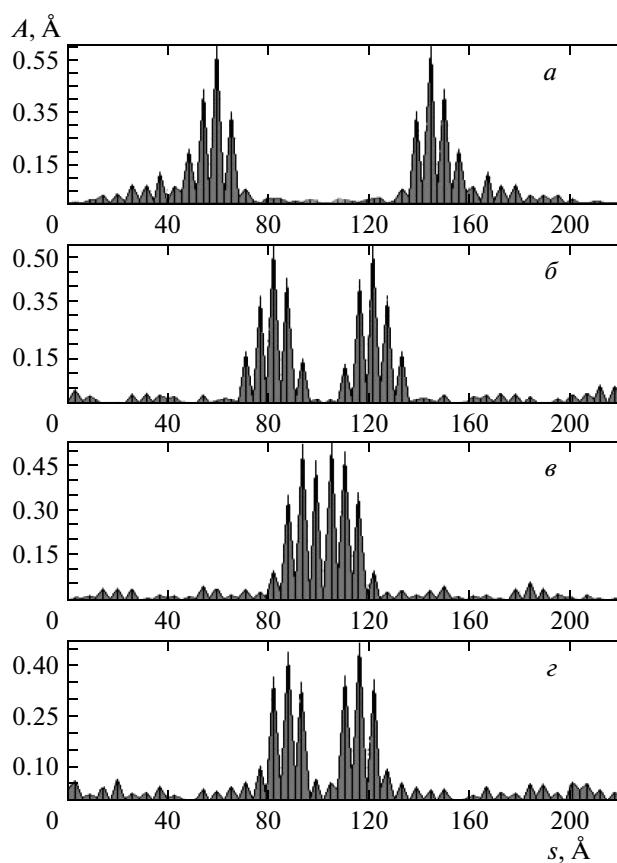


Рис. 6. Столкновение двух зеркально симметричных ДБ2, движущихся навстречу друг другу вдоль направления $\langle 110 \rangle$ кристалла Pt₃Al. Вдоль оси абсцисс отложено расстояние вдоль направления $\langle 110 \rangle$, вдоль оси ординат амплитуда колебаний атомов: *а* — формирование ДБ2 через 4 пс после начала эксперимента, *б* — сближение ДБ2 через 8 пс, *в* — столкновение двух ДБ2 через 10 пс, *г* — расходжение двух ДБ2 в разные стороны после столкновения через 16 пс от начала эксперимента

типов ДБ. Продемонстрирована возможность перемещения ДБ2 на сотни нанометров в направлении $\langle 110 \rangle$ со скоростью в диапазоне от 450 до 100 м/с.

Изучена динамика подобных солитонных объектов. При первом взаимодействии друг с другом ДБ2 отталкиваются, теряя часть своей энергии, повторное столкновение приводит к разрушению одного из них. Столкновение ДБ2 и ДБ1 также вызывает излучение части их энергии в подрешетку Al, причем большую часть энергии теряет ДБ2, который разрушается быстрее, чем ДБ1.

Полученные результаты свидетельствуют о том, что ДБ2 могут эффективно транспортировать энергию по кристаллу, а столкновение ДБ приводит

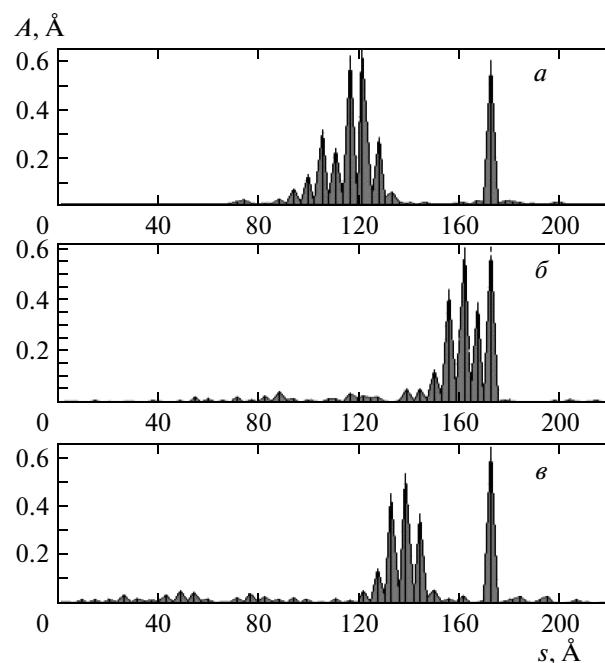


Рис. 7. Взаимодействие ДБ2 с ДБ1 в кристалле Pt₃Al: *а* — начальный момент формирования ДБ2 через 4 пс от начала эксперимента, *б* — момент столкновения двух ДБ через 10 пс эксперимента, *в* — отражение ДБ2 от ДБ1 через 16 пс от начала эксперимента

к еще более значительной локализации энергии в кристалле. Возможность переноса энергии по кристаллу на значительные расстояния может приводить к структурным трансформациям в удалении от очага возбуждения подобных локализованных объектов. Представляется важным изучение взаимодействия движущихся ДБ2 с дефектами кристаллической структуры, что станет предметом отдельного рассмотрения.

П. В. Захаров благодарен за финансовую поддержку РФФИ (грант № 15-32-50523). Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 14-08-90416 Укр_а) и РНФ (грант № 14-13-00982). Работа С. В. Дмитриева выполнена при поддержке фонда Д. И. Менделеева Томского государственного университета в 2014–2015 гг.

ЛИТЕРАТУРА

1. Р. А. Андриевский, А. М. Глезер, УФН **179**, 337 (2009).

2. А. И. Потекаев, М. Д. Старостенков, Н. В. Синица и др., Изв. ВУЗов, сер. физ. **53**, 47 (2010).
3. S. J. A. Koh and H. P. Lee, Nanotechnology **17**, 3451 (2006).
4. H. Gleiter, *Deformation of Polycrystals*, Proc. 2nd RISO Inter. Sympos. Metallurgy and Materials Science, ed. by N. Hansen et al., Denmark, Roskilde: RISO Nat. Lab (1981), p. 15.
5. М. Д. Старостенков, А. В. Яшин, Е. А. Дудник, Н. В. Синица, Деформация и разрушение материалов, Вып. 6, 28 (2009).
6. А. Т. Матвеев, И. М. Афанасов, *Получение нановолокон методом электроформования*, Изд-во МГУ, Москва (2010).
7. R. I. Babicheva, K. A. Bukreeva, S. V. Dmitriev et al., Intermetallics **43**, 171 (2013).
8. К. А. Букреева, Р. И. Бабичева, С. В. Дмитриев и др., Письма в ЖЭТФ **98**, 100 (2013).
9. A. J. Sievers and S. Takeno, Phys. Rev. Lett. **61**, 970 (1988).
10. G. M. Chechin, G. S. Dzhelauhova, and E. A. Mehnoshina, Phys. Rev. E **74**, 036608 (2006).
11. M. E. Manley, A. Alatas, F. Trouw et al., Phys. Rev. B **77**, 214305 (2008).
12. M. E. Manley, M. Yethiraj, H. Sinn et al., Phys. Rev. Lett. **96**, 125501 (2006).
13. M. E. Manley, A. J. Sievers, J. W. Lynn et al., Phys. Rev. B **79**, 134304 (2009).
14. А. А. Кистанов, А. С. Семенов, Р. Т. Мурзаев и др., Фундаментальные проблемы современного материаловедения **11**, 322 (2014).
15. А. А. Кистанов, Р. Т. Мурзаев, С. В. Дмитриев и др., Письма в ЖЭТФ **99**, 403 (2014).
16. A. A. Kistanov, S. V. Dmitriev, A. P. Chetverikov et al., Eur. Phys. J. B **87**, 211 (2014).
17. А. А. Кистанов, С. В. Дмитриев, А. С. Семенов и др., Письма в ЖТФ **40**, 58 (2014).
18. А. А. Кистанов, А. С. Семенов, С. В. Дмитриев, ЖЭТФ **146**, 869 (2014).
19. А. А. Кистанов, Фундаментальные проблемы современного материаловедения **11**, 9 (2014).
20. В. И. Дубинко, А. В. Дубинко, С. В. Дмитриев, Письма о материалах **3**, 239 (2013).
21. А. А. Кистанов, С. В. Дмитриев, Письма о материалах **2**, 143 (2012).
22. А. А. Кистанов, С. В. Дмитриев, Письма в ЖТФ **39**, 78 (2013).
23. А. А. Кистанов, Ю. А. Баимова, С. В. Дмитриев, Письма в ЖТФ **38**, 72 (2012).
24. Ю. А. Баимова, С. В. Дмитриев, А. А. Кистанов, А. И. Потекаев, Изв. ВУЗов, сер. физ. **56**, 60 (2013).
25. П. В. Захаров, М. Д. Старостенков, Н. Н. Медведев и др., Фундаментальные проблемы современного материаловедения **11**, 388 (2014).
26. П. В. Захаров, М. Д. Старостенков, А. М. Ерёмин, А. В. Маркидонов, Фундаментальные проблемы современного материаловедения **11**, 260 (2014).
27. М. Д. Старостенков, П. В. Захаров, Н. Н. Медведев, Фундаментальные проблемы современного материаловедения **8**, 40 (2011).
28. Н. Н. Медведев, М. Д. Старостенков, П. В. Захаров, О. В. Пожидаева, Письма в ЖТФ **37**, 7 (2011).
29. Н. Н. Медведев, М. Д. Старостенков, П. В. Захаров, А. В. Маркидонов, Письма о материалах **3**, 34 (2013).
30. Н. Н. Медведев, М. Д. Старостенков, Изв. ВУЗов, сер. физ. **55**, 113 (2012).
31. N. N. Medvedev, M. D. Starostenkov, and M. E. Manley, J. Appl. Phys. **114**, 213506 (2013).
32. N. N. Medvedev, M. D. Starostenkov, A. I. Potekaev, P. V. Zakharov, A. V. Markidonov, and A. M. Eremin, Russ. Phys. J. **57**, 387 (2014).
33. J. A. Baimova, S. V. Dmitriev, and K. Zhou, Europhys. Lett. **100**, 36005 (2012).
34. E. A. Korznikova, J. A. Baimova, and S. V. Dmitriev, Europhys. Lett. **102**, 60004 (2013).
35. G. M. Chechin, S. V. Dmitriev, I. P. Lobzenko, and D. S. Ryabov, Phys. Rev. B **90**, 045432 (2014).
36. А. И. Царегородцев, Н. В. Горлов, Б. Ф. Демьянин и др., ФММ **58**, 336 (1984).
37. П. В. Захаров, М. Д. Старостенков, А. М. Ерёмин, А. В. Маркидонов, Фундаментальные проблемы современного материаловедения **11**, 260 (2014).
38. П. В. Захаров, М. Д. Старостенков, Н. Н. Медведев и др., Фундаментальные проблемы современного материаловедения **11**, 533 (2014).