

01;05

Локализованные колебательные моды в двумерной модели упорядоченного сплава Pt₃Al

© Н.Н. Медведев, М.Д. Старостенков,
П.В. Захаров, О.В. Пожидаева

Бийский педагогический государственный университет, Бийск
Алтайский государственный технический университет, Барнаул
E-mail: nnt42@ Rambler.ru

Поступило в Редакцию 14 сентября 2010 г.

С помощью компьютерных экспериментов методом молекулярной динамики показано, что в двумерной модельной решетке упорядоченного сплава Pt₃Al, при периодическом внешнем воздействии определенной частоты, возбуждаются дискретные бризеры. Энергия атомов алюминия, несущих нелинейную локализованную моду, может более чем на порядок превосходить среднюю энергию атомов платины.

Возможность локализации колебательной энергии, возникающей благодаря ангармонизму в нелинейных моделях идеальных кристаллических решеток, впервые теоретически была показана в работе [1]. Решения нелинейных дифференциальных уравнений, описывающие динамику кристаллических решеток различных размерностей и дающие локализованные в пространстве и строго периодические по времени колебания многих или отдельных атомов решетки, называют дискретными бризерами (ДБ), внутренними локализованными модами, нелинейными локализованными возбуждениями и т. д. [2]. Мы называем эти решения дискретными бризерами или нелинейными локализованными колебательными модами (НЛКМ).

Чаще всего для получения бризерных решений рассматриваются модели кристаллических решеток, в которых атомы взаимодействуют лишь со своими ближайшими соседями [1,2]. В настоящей работе НЛКМ получены в двумерной модели кристаллической решетки упорядоченного сплава Pt₃Al, которая отражает различные свойства интерметаллида и в которой атомы взаимодействовали посредством дальнедействующих потенциалов.

Известно, что щель в фононном спектре (ФС) двумерных моделей биатомных кристаллов, обладающих трансляционной симметрией, расширяется по мере „уменьшения“ массы атомов одного из компонентов [3–6], благодаря чему создаются условия для возникновения устойчивых дискретных бризеров, частота которых находится внутри запрещенной зоны ФС. Очевидно, что манипуляции с массой атомов модельного кристалла — прием несколько искусственный, однако результаты, полученные в [3–6], позволяют ставить вопрос о создании моделей реальных биатомных кристаллов (например, Pt₃Al) с разбросом масс компонентов, достаточным для существования широкой запрещенной зоны в ФС.

Целью настоящей работы является выявление методом молекулярной динамики возможности и условий возбуждения НЛКМ в двумерной модельной кристаллической решетке упорядоченного сплава Pt₃Al [7–9].

Рассматривалась ячейка размером 40 × 40 частиц, с помощью которой моделировалась плоскость (111) решетки ГЦК. Она условно разбивалась на 10 одинаковых узких прямоугольных областей шириной четыре и высотой 40 межатомных расстояний. На границы расчетного блока накладывались периодические условия. Это значит, что если атом находится на краю ячейки, например на ее правой стороне, то он взаимодействует не только с соседями, находящимися слева от него, но и с атомами на противоположной стороне ячейки.

Атомы двумерного кристалла упорядоченного сплава взаимодействовали посредством парных потенциалов Морзе:

$$\varphi_{PQ}(r_{ij}) = D_{PQ} \left\{ \left(\beta_{PQ} \exp(-\alpha_{PQ} r_{ij}) - \frac{1}{2} \right)^2 - \frac{1}{4} \right\}, \quad (1)$$

параметры которых рассчитывались с учетом семи координационных сфер по методике, предложенной в [10,11]: $\alpha_{PtPt} = 1.5820 \text{ \AA}^{-1}$, $\beta_{PtPt} = 102.89$, $D_{PtPt} = 0.710 \text{ eV}$, $\alpha_{AlAl} = 1.0266 \text{ \AA}^{-1}$, $\beta_{AlAl} = 27.498$, $D_{AlAl} = 0.3180 \text{ eV}$, $\alpha_{PtAl} = 1.3501 \text{ \AA}^{-1}$, $\beta_{PtAl} = 63.124$, $D_{PtAl} = 0.5048 \text{ eV}$. При радиусе обрезки потенциала 16 Å параметр гексагональной решетки составлял $a = 2.78' \text{ \AA}$. Явный вид гамильтониана системы:

$$H(r_{ij,p_i}, t) = 10362 \cdot 10^{-8} \left(\sum_{i=1}^{3N/4} \frac{m_i^{Pt} u_i^2}{2} + \sum_{i=1}^{N/4} \frac{m_i^{Al} u_i^2}{2} \right) + \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \varphi_{PQ}(r_{ij}), \quad (2)$$

$i \neq j.$

Здесь $m_i^{\text{Pt}} = 195.23$ а.м.у. и $m_i^{\text{Al}} = 26.97$ а.м.у. — массы атомов Pt и Al соответственно, u_i (Å/ps) — скорость i -атома. Расчет кинематических величин проводился по схеме Эйлера, с шагом численного интегрирования $\Delta t = 0.005$ ps.

Периодическое воздействие на атомы одной из граничных областей модельного кристалла по направлению $[\bar{1}10]$, вдоль которого расположили ось $(0x)$, на частотах, которые могут иметь ДБ и близких к ним, задавалось посредством выражения:

$$u_x[i] = u_x[i] + u_0 \sin^2\left(\frac{1}{2} \omega_e t\right), \quad (3)$$

где ω_e — частота внешнего воздействия, $u_x[i]$ — составляющая скорости i -атомов, находящихся не далее 4 \AA от левой границы ячейки.

На противоположной стороне от первой области, области „внешнего“ воздействия, размещался „холодильник“ — часть ячейки, где атомы обладали низкой кинетической энергией. В этой части расчетного блока скорости частиц уменьшались в 5 раз после каждой итерации. Размеры „холодильника“ варьировались достаточно широко от одной до восьми областей.

Указанный „холодильник“ выполнял три функции. Во-первых, охлаждал ячейку. Во-вторых, благодаря периодичности граничных условий „внешнее“ воздействие возбуждало колебания с двух сторон ячейки. Благодаря „холодильнику“ возбуждение колебаний с одной из сторон блокировалось. В-третьих, эта часть ячейки играла роль некой массивной сверхупругой среды, которая тормозила дрейфовое движение атомов ячейки, вызываемое постоянным периодическим воздействием на одну из ее сторон.

Отметим, что благодаря периодическим граничным условиям, при однонаправленном движении атомов, например вдоль оси $(0x)$, ячейка остается на месте, а движутся лишь атомы, занимая места впереди стоящих соседей. У атомов четвертого вертикального ряда последней области нет впереди стоящих соседей, они перемещаются на противоположную сторону ячейки, на исходное место атомов первого ряда первой области. Последовательное перемещение двух вертикальных атомных рядов из конца в начало ячейки возвращает первую область к исходной конфигурации расположения атомов. В некоторых случаях это приводит к повторяемости получаемых результатов с течением времени счета.

Сделаем некоторые пояснения относительно частоты внешнего воздействия ω_e . Дело в том, что в биатомных кристаллах, при большом соотношении масс его компонент, частота НЛКМ не может принимать произвольные значения запрещенной зоны ФС. Частоты, которые может иметь ДБ, лежат в узком диапазоне верхней части запрещенной зоны, которая расширяется (сужается) по мере увеличения (уменьшения) соотношения масс атомов компонентов кристалла [3,12]. Известно также, что если существуют факторы, вызывающие затухание колебаний НЛКМ, например температура, отличная от 0 К, то затухание происходит с возрастанием частоты. Таким образом, чтобы получить максимальную продолжительность колебаний ДБ, необходимо сообщить более „легкому“ атому кристалла максимально возможную амплитуду колебаний. Максимальной амплитуде соответствует минимальная частота, с которой может совершать колебания атом, несущий НЛКМ [12]. Чем уже частотный диапазон колебаний НЛКМ, тем менее они устойчивы, даже при отсутствии факторов, вызывающих затухание. Заметное уменьшение амплитуды колебаний у таких бризеров происходит в течение нескольких периодов.

У рассматриваемого нами сплава соотношение масс компонентов таково, что колебания неустойчивы, диапазон частот колебаний ДБ очень узок (рис. 1). В фононном спектре двумерной модельной решетки сплава Pt₃Al частоты НЛКМ лежат приблизительно в диапазоне $72 < \omega_b < 75$ THz. Ширина частотного диапазона ДБ $\Delta\omega_b \approx 3$ THz, что составляет менее 10% от ширины запрещенной зоны. Для сравнения: при тридцатикратном соотношении масс компонентов упорядоченного сплава диапазон НЛКМ достигает 60% от значительно большей ширины запрещенной зоны ФС [12].

Условия возбуждения ДБ существенным образом зависят от размеров „холодильника“. Рассмотрим два предельных случая.

1. Размеры „холодильника“ велики. На рис. 2 показан процесс возбуждения ДБ, когда „холодильник“ включает в себя 8 областей. Частота воздействия $\omega_e = 78.5$ THz, т.е. находится выше максимальной частоты диапазона ДБ, показанного на рис. 1. Тем не менее НЛКМ достаточно хорошо возбуждаются. Это связано с тем, что та часть ячейки, в которой возбуждаются ДБ, оказалась сжатой периодическим воздействием (3) с одной стороны и „холодильником“ — с другой. Это приводит к изменению ФС модельного кристалла и, в частности, к повышению частот запрещенной зоны [4]. Преодолев максимум,

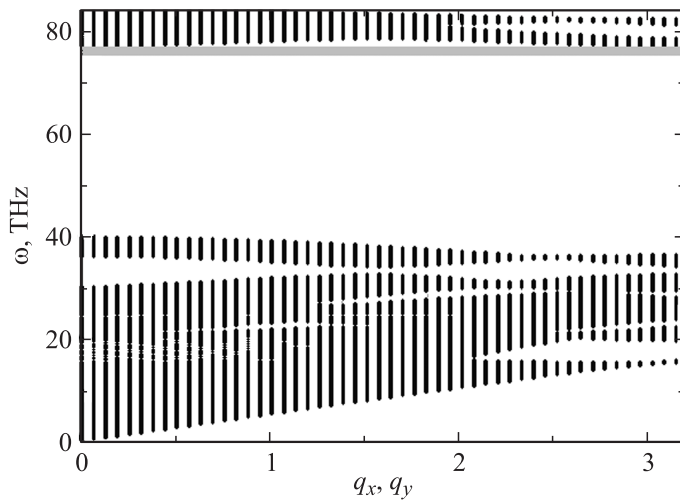


Рис. 1. Спектр малоамплитудных колебаний двумерной модели кристаллической решетки упорядоченного сплава Pt_3Al . Просканирована первая зона Бриллюэна $\pi \leq q_x, q_y \leq \pi$. Шаг изменения величин проекций волнового вектора q_x, q_y равен $\pi/50$. Показана проекция полученных поверхностей на плоскость (q_x, ω) . Точками показаны частоты фоновых колебаний ω . В спектре имеется щель, запрещенная зона, в верхней части которой серой полосой выделен диапазон частот ДБ.

амплитуда ДБ медленно уменьшается по мере перемещения атомов холодильника и уменьшения степени деформации сжатой части ячейки. На это накладывается еще один фактор: из зоны периодического воздействия (3) уходит один из двух изначально там находившихся вертикальных атомных рядов, в связи с чем интенсивность воздействия падает. Имеет место возбуждение ДБ во второй области с несколько меньшей амплитудой.

2. Размер „холодильника“ мал. На рис. 2 показан процесс возбуждения НЛКМ, когда „холодильник“ включает в себя одну область — последнюю. Возбуждение начинается также быстро, как и в первом случае. Частота воздействия $\omega_e \approx 66$ THz несколько ниже минимальной частоты диапазона, отмеченного серым цветом на рис. 1. Это благодаря тому, что в момент включения периодического воздействия (3)

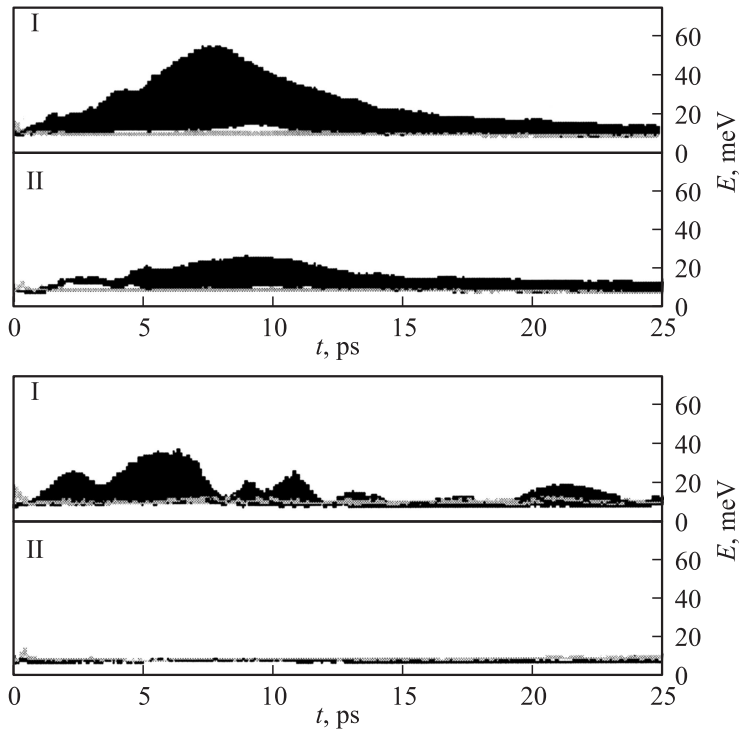


Рис. 2. Возбуждение НЛКМ в модельной ячейке. Показана зависимость средних энергий атомов подрешетки Pt (серая кривая) и средних энергий атомов подрешетки Al (черная кривая) в первых двух областях модельной решетки, номер области отмечен римской цифрой. Верхний рисунок — возбуждение ДБ в ячейке с большим „холодильником“. Начальная температура ячейки 150 К, $u_0 = 0.7 \text{ \AA/ps}$, $\omega_e = 78.5 \text{ THz}$. Нижний рисунок — ДБ в ячейке с маленьким „холодильником“. Начальная температура ячейки 150 К, $u_0 = 0.7 \text{ \AA/ps}$, $\omega_e \approx 66 \text{ THz}$.

возникает возмущение, которое, перемещаясь по кристаллу, слегка его растягивает позади себя. Это растяжение вызывает понижение частот запрещенной зоны фононного спектра [4]. Возбуждение ДБ наблюдается только в первой области.

Если на границу этой же ячейки воздействовать с частотой $\omega_e = 72.2 \text{ THz}$, т.е. с частотой, которая входит в диапазон частот ДБ на

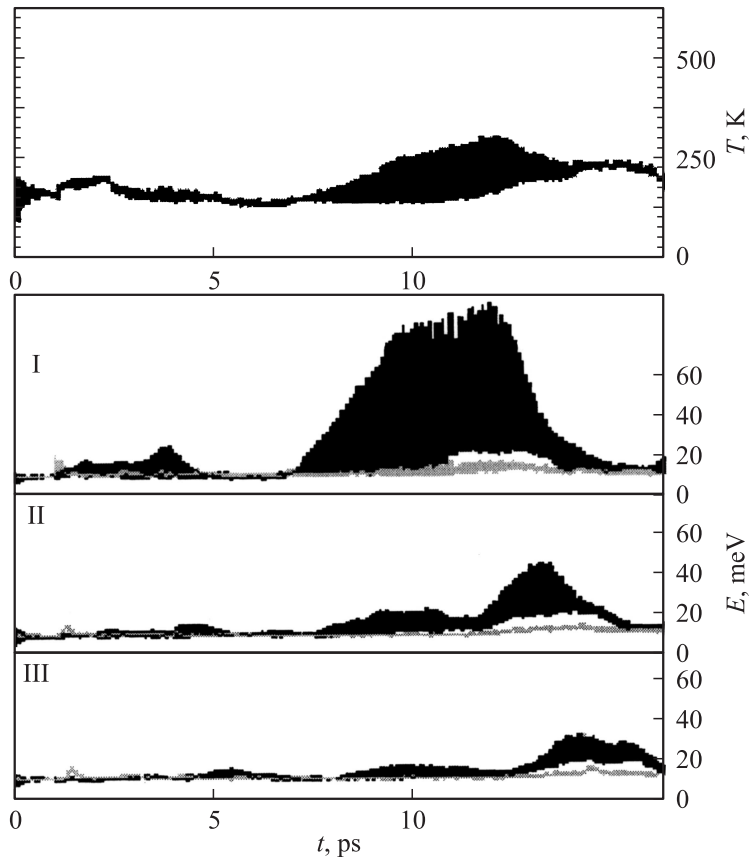


Рис. 3. Возбуждение НЛКМ в модельной ячейке. Верхний рисунок — зависимость температуры от времени. На трех нижних рисунках показано изменение с течением времени средних энергий атомов подрешетки Pt (серая кривая) и средних энергий атомов подрешетки Al (черная кривая) в трех первых областях модельной решетки, номер области отмечен римской цифрой. Начальная температура ячейки 150 K, $u_0 = 0.7 \text{ \AA/ps}$, $\omega_e = 72.2 \text{ THz}$.

рис. 1, то НЛКМ возбуждаются после первого перехода атомного ряда из конца последней области в начало первой (рис. 3). Появление этого ряда компенсирует растяжение кристалла и увеличивает интенсивность „внешнего“ воздействия (см. случай 1). Это можно интерпретировать

как очень быстрое приближение источника колебательной энергии к границе ячейки приблизительно на 2 \AA .

На рис. 3 показаны энергии атомов Al в первых трех областях. Так же как и в случае 1, ДБ быстро теряют энергию по мере увеличения расстояния от источника энергии. Малая проникающая способность НЛКМ объясняется двумя причинами: первая заключается в том, что кристалл плохо восприимчив к колебаниям на частотах запрещенной зоны, вторая — в незначительной продолжительности жизни ДБ.

Легко объясняется бóльшая проникающая способность бризеров, возбуждаемых при сжатии кристалла, чем при его растяжении. Сжатие (растяжение) кристалла влечет за собой некоторое расширение (сужение) запрещенной зоны, что влечет за собой бóльшую (меньшую) устойчивость НЛКМ [4].

В результате проведенных компьютерных экспериментов было установлено, что периодическое воздействие на границу двумерной модели кристаллической решетки Pt_3Al может возбуждать дискретные бризеры, но лишь в непосредственной близости от этой границы.

Глубина проникновения ДБ внутрь двумерной модели упорядоченного сплава зависит от характера деформации последней.

Средняя энергия атомов Al несущих НЛКМ достигала величин, превышающих среднюю энергию атомов Pt более чем в 10–15 раз.

Список литературы

- [1] *Sievers A.J., Takeno S.* // Phys. Rev. Lett. 1988. V. 61. N 8. P. 970.
- [2] *Flach S., Willis C.R.* // Phys. Rep. 1998. V. 295. P. 181.
- [3] *Khadeeva L.Z., Dmitriev C.V.* // Phys. Rev. 2010. V. B 81. P. 214306.
- [4] *Дмитриев С.В., Медведев Н.Н. и др.* // Изв. вуз. Физика. 2008. Т. 51. № 8. С. 73.
- [5] *Медведев Н.Н., Дмитриев С.В., Старостенков М.Д., Захаров П.В.* // Перспективные материалы. 2009. Спец. выпуск (7). С. 213.
- [6] *Медведев Н.Н., Дмитриев С.В., Старостенков М.Д.* // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2007. Т. 4. № 3. С. 100.
- [7] *Лякишев Н.П., Банных О.А., Рохлин Л.Л. и др.* Диаграммы состояния двойных металлических систем. Т. 1. М.: Машиностроение, 1996.
- [8] *Yi X., Wattis J. et al.* // J. Phys. A. Math. Theor. 2009. V. 42. P. 355207.
- [9] *Chauke H.R., Minisini B. et al.* // Intermetallics. 2010. V. 18. P. 417.

- [10] Горлов Н.В. Моделирование на ЭВМ плоских дефектов в упорядоченных сплавах типа A_3B и $A_3B(C)$: Дис. . . . канд. физ.-мат. наук. Томск, 1987. 214 с.
- [11] Царегородцев А.И., Горлов Н.В. и др. // ФММ. 1984. Т. 58. № 2. С. 336.
- [12] Medvedev N.N., Dmitriev S.V., Starostenkov M.D., Sinebnikova A.S., Pozhidaeva O.V. // Proceedings of the 9th International Conference on Modification of Materials With Particle Beams and Plasma Flows (9th CMM). Tomsk, Russia, 2008. P. 173.