

Излучение пучков сверхзвуковых солитонных волн — генераторов реструктуризации нанокристаллов при бомбардировке атомами и самоорганизация динамической суперрешетки комплексов солитонных колебаний атомов

© О.А. Дубовский, А.В. Орлов

Государственный научный центр РФ — Физико-энергетический институт им. А.И. Лейпунского, Обнинск, Калужская обл., Россия
E-mail: dubov@ippe.ru

Показано, что в кристаллических материалах при высоких уровнях термического и динамического возбуждения колебаний атомов происходит самоорганизация динамической суперрешетки импульсных комплексов солитонных колебаний или, фактически, „солитонного кристалла“. Результаты адаптированы применительно к кристаллической системе альфа-урана. Показано, что при атомной бомбардировке кристаллических материалов в них генерируются пучки таких нелинейных дозвуковых и сверхзвуковых солитонных и бризерных волн. Бризеры и солитоны инициируют пороговые кинетические процессы образования дефектов — поверхностные колебания и испарение поверхностных атомов, многократное отражение бомбардирующих атомов и реструктуризацию нанокристаллов. Полученные результаты могут быть использованы при экспериментальном исследовании микродинамики материалов при высоких динамических и температурных нагрузках методами рассеяния нейтронов и ионов.

Исследования проведены при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований и Правительства Калужской области (проект № 07-02-96404).

1. Введение

Влияние высокоамплитудных колебаний на кинетические процессы неоднократно фиксировалось экспериментально [1]. В классической теории наиболее интересными физическими объектами являются солитоны [2–5]. Солитоны одного из типов [4,5] были экспериментально обнаружены в спектрах неупругого рассеяния нейтронов в кристаллах альфа-урана при высоких температурах 530 К [6]. В [7] с использованием оригинальной инвертированной процедуры решения нелинейных уравнений при старте с низкоамплитудного крыла солитона при потенциале Леннарда–Джонса (ПЛД) атом-атомного взаимодействия были найдены амплитудные характеристики солитонов обычного „одногоорбого“ вида и нового, „двугорбого“ типа. В квантовой теории ряд связанных многофононных состояний нового типа (бифононов, трифононов и т.д.) предсказан в работах авторов и экспериментально обнаружен в спектрах рассеяния нейтронов и фотонов [8,9].

2. Самоорганизация динамической мультисолитонной суперрешетки колебаний атомов в кристаллах

В настоящей работе применен метод молекулярной динамики с использованием ПЛД с точными асимптотиками при предельно больших и предельно малых межатомных расстояниях в отличие от других потенциалов, используемых в теории нелинейных колебаний с неточными асимптотиками. Решение соответствующей

системы нелинейных динамических уравнений для двумерных (2D) кристаллов показало, что при высоких динамических нагрузках происходит самоорганизация динамических мультисолитонных суперрешеток (ДМССР) сжатия и разрежения. Аналогом ДМССР первого типа может быть „экситонный кристалл“ — самоорганизованная суперрешетка экситонов Ванье–Мотта и Френкеля, генерируемая в кристалле мощным лазерным облучением [10]. В газодинамике и гидродинамике аналогом является дорожка вихрей Кармана. Аналогом или динамическим следствием ДМССР разрежений представляется образование суперрешетки вакансий и пор в кристаллических материалах, рассматривавшейся в [11] в кинетическом феноменологическом подходе. При исследовании ряда увеличивающихся 2D-кристаллов было обнаружено, что при превышении критического размера формируется ДМССР с постоянной этой суперрешетки, превышающей постоянную решетки кристалла. Динамические зависимости показывают, что солитонные фронты сходятся, группируясь в периодических узлах ДМССР. Результаты адаптированы к кристаллической структуре альфа-урана [6].

На рис. 1–4 представлены результаты решения системы нелинейных динамических уравнений движения атомов в 2D-кристалле с гексагональной плотной упаковкой. На рисунках представлены зависимости от времени τ смещений атомов X на центральной линии узлов 2D-кристалла вдоль этой оси.

В альфа-уране [6] граничная энергия дисперсионной ветви гармонических колебаний с волновым вектором в направлении $[01\xi]$ имеет энергию $\hbar\omega_{\max} = 10.6 \text{ meV}$. При известной массе урана M и параметре решетки

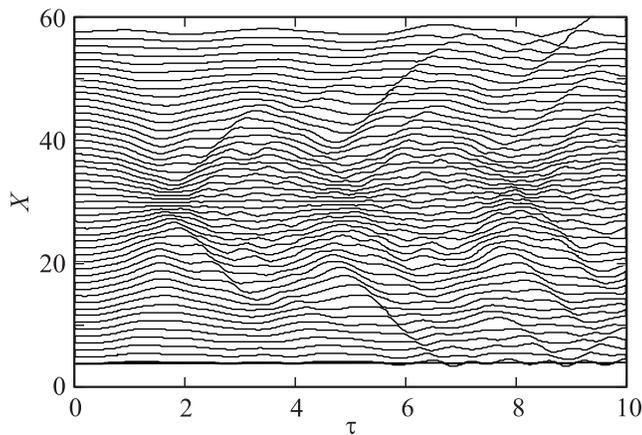


Рис. 1. Динамическая мультисолитонная суперрешетка сжатий при $N = 50 \times 10$.

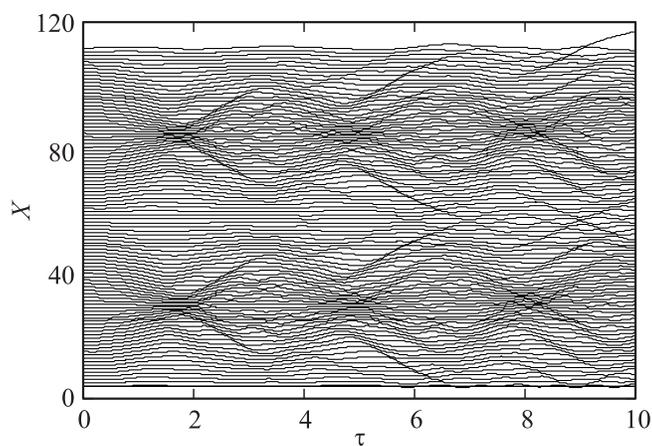


Рис. 2. То же, что на рис. 1, при $N = 100 \times 10$.

$a \cong 2.85 \text{ \AA}$ при ПЛД $V(R) = \varepsilon[(R_0/R)^{-12} - (R_0/R)^{-6}]$ получаем из соотношения $\omega_{\max} = 2[18\varepsilon/(Ma^2)]^{1/2}$ значение $\varepsilon \cong 0.7 \text{ eV}$. При этом звуковая скорость $\tilde{v}_s = 2.25 \cdot 10^5 \text{ cm/s}$, и переводной коэффициент для скорости из безразмерных единиц равен $C = (\varepsilon/M)^{1/2} = 5.34 \cdot 10^4 \text{ cm/s}$.

На рис. 1–4 смещения представлены в единицах a и время в единицах $\tau_0 = a\sqrt{M/\varepsilon}$. На рис. 1 сплошными линиями показаны зависимости от времени смещений атомов на центральной линии узлов 2D-кристалла с числом атомов $N = 50 \times 10$. Возбуждение системы, начальные смещения и скорости атомов при сжатии определялись с использованием ранее развитого авторами метода. Обращают на себя внимание три сгущения динамических зависимостей. После этих сгущений наблюдаются расходящиеся фронты солитонных колебаний со сверхзвуковыми скоростями $v = 8.3\text{--}12.5\sqrt{M/\varepsilon} > v_s$. Отметим, что при меньших размерах кристалла такие сгущения не наблюдались, т.е. присутствует пороговый эффект. На рис. 2 представлены аналогичные динамические зависимости для кристалла с увеличенными размерами

$N = 100 \times 10$. Видно, что в динамических зависимостях образуется уже шесть сгущений в трех временных промежутках в двух областях пространства. После этих сгущений также наблюдаются солитонные фронты со сверхзвуковыми скоростями $v = 7.8\text{--}9.4\sqrt{M/\varepsilon} > v_s$. Сравнение рис. 1 и 2 указывает на начальный этап формирования ДМССР. На рис. 3 динамические зависимости представлены для еще больших нанокристаллов с $N = 150 \times 10$. Видны уже девять областей узлов ДМССР со строгой периодичностью по времени в трех временных интервалах и в трех пространственных областях при скоростях расходящихся солитонных фронтов $v = 7.6\text{--}8.8\sqrt{M/\varepsilon} > v_s$.

Аналогичное развитие ДМССР наблюдалось при начальных смещениях и начальных скоростях атомов, соответствующих разрежению. На рис. 4 представлена динамическая зависимость смещений атомов для того же кристалла, что и на рис. 3. Видно, что в трех вре-

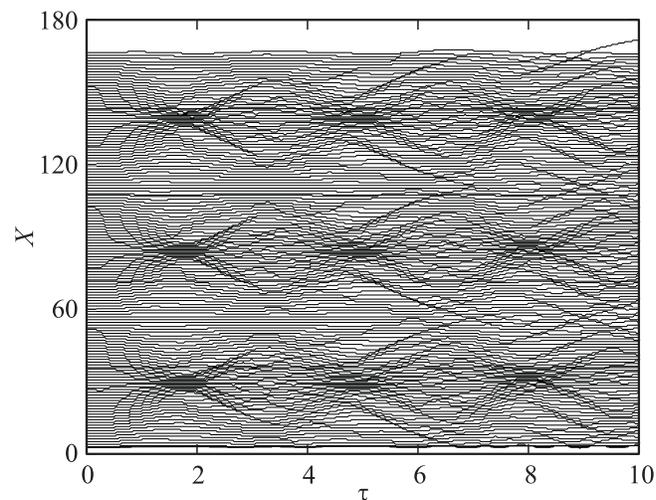


Рис. 3. То же, что на рис. 1, при $N = 150 \times 10$.

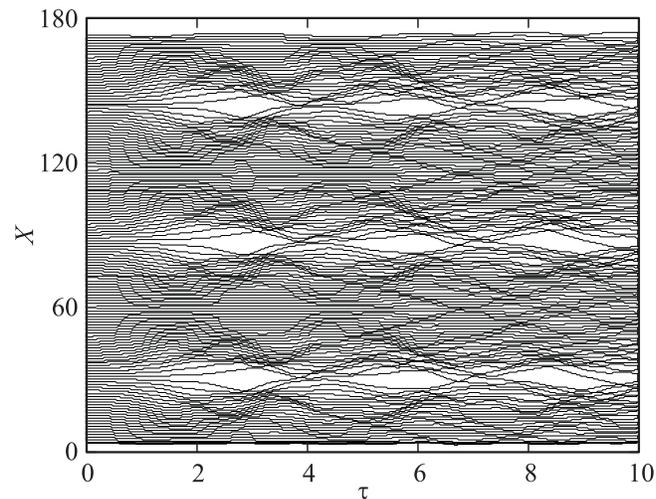


Рис. 4. Динамическая мультисолитонная суперрешетка разрежений при $N = 150 \times 10$.

менных интервалах в трех пространственных областях формируется ДМССР разрежений.

3. Излучение пучков сверхзвуковых солитонных волн при бомбардировке кристаллов атомами

Солитоны, участвующие в периодическом формировании и развале ДМССР, определяют также микродинамику кинетических диффузионных процессов в кристаллах, структурных фазовых переходов и динамику разрушения кристаллических материалов, в частности процессов испарения поверхностных атомов непосредственно вблизи соответствующих энергетических порогов. Ранее ПЛД нами использовался для исследования роли солитонных и бризерных колебаний в различных динамических и кинетических процессах [12]. Исследовалась серфинг-диффузия легких примесных атомов на сверхзвуковых солитонных волнах кристаллической решетки тяжелых атомов. Также исследовалась сложная динамика процесса взрывного разрушения кристаллических материалов, предваряемого серией микровзрывов, инициируемых солитонами. При исследовании взрывного разрушения кристаллических материалов было обнаружено распространение бесфононных солитонов — ранних предвестников перед фронтом разрушения.

В настоящей работе показано, что при атомной бомбардировке одномерных (1D) кристаллов в них генерируются пучки сверхзвуковых высокоамплитудных солитонных и бризерных волн. ПЛД используется для исследования бризерных и солитонных колебаний ограниченного одномерного кристалла, в котором, как и при генерации солитона Тода, крайний атом на первой границе неподвижен, а последний атом на второй границе взаимодействует с бомбардирующим атомом (БА). Показано, что увеличение энергии БА приводит к генерации пучков сверхзвуковых бризеров сжатия, дозвуковых бризеров разрежения и вторичных солитонов с последовательно уменьшающимися амплитудами. На второй, свободной границе происходит взаимная конверсия бризеров сжатия и разрежения. Бризеры после отражения от закрепленной границы кристалла при выходе обратно на бомбардируемую свободную границу инициируют пороговые кинетические процессы образования дефектов — нестационарные поверхностные колебания с отрывом и возвращением поверхностных атомов, а при большей энергии — и полным испарением поверхностных атомов. При этом бризеры при выходе на свободную границу инициируют процессы многократного отражения БА. В спектральной плотности бризеры проявляются как отдельные ветви, дополнительные к квазиоднофононным дисперсионным кривым. Исследована динамика изменения плотности материала при распространении бризеров и солитонов. Результаты адаптированы к кристаллической решетке U при бомбардировке атомами

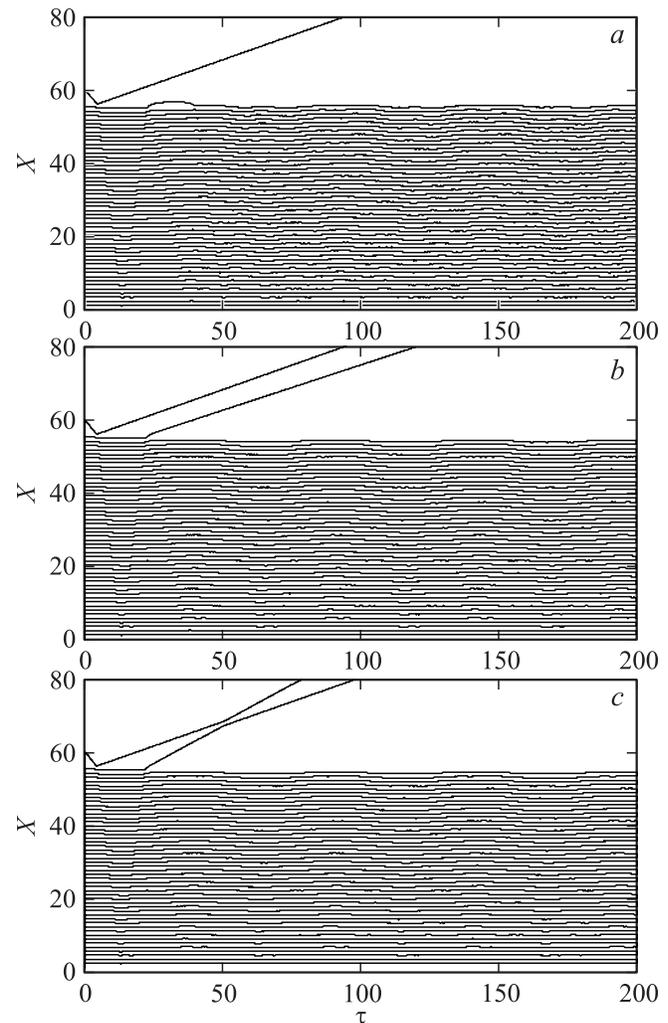


Рис. 5. Кинетические процессы бризерного испарения поверхностных атомов. $\tilde{v}_b^s = 0.87\tilde{v}_s$ (a), $0.9\tilde{v}_s$ (b) и $0.95\tilde{v}_s$ (c).

меньшей массы — Fe и H и к кристаллу Fe при БА — водороду.

На рис. 5 представлены результаты численного решения системы нелинейных динамических уравнений при возрастающих значениях энергии БА. Временные зависимости смещений атомов кристаллической решетки в плоскости τ, X представлены сплошными кривыми, а траектория БА — верхней изломанной линией, которая в большем масштабе имеет вид гладкой кривой с видимыми на рисунках асимптотами. Расчеты показали, что фронты сжатия и разрежения движутся равномерно с постоянными скоростями от свободной границы к закрепленной границе и обратно. При этом скорости фронтов сжатия и разрежения различны. Детальный анализ позволяет выделить последовательные фазы взаимной конверсии бризеров и солитонов на свободной границе кристалла и отражение бризеров и солитонов на закрепленной границе с взаимным рассеянием — как свободных элементарных частиц. На рис. 5, a представлены зависимости смещения атомов от времени при

скорости БА $\tilde{v}_b^s = 0.87\tilde{v}_s$, на рис. 5, *b* — при скорости $\tilde{v}_b^s = 0.9\tilde{v}_s$ и на рис. 5, *c* — при скорости $\tilde{v}_b^s = 0.95\tilde{v}_s$. Видно, что с увеличением начальной скорости БА непрерывно увеличивается амплитуда колебаний атомов, и это особенно заметно для граничных атомов на рис. 5. При увеличении энергии БА в узком интервале скоростей развиваются различные стадии порогового процесса образования дефекта — в данном случае сначала процесса отрыва и последующего возвращения поверхностного атома, а затем и полного испарения поверхностного атома. Видно, что первый бризер идет к закрепленной границе и обратно со скоростью $\tilde{v}_p = 5.98\tilde{v}_s$. При подходе к свободной границе этот бризер вновь отражается, выбивая при этом поверхностный атом, который, однако, затем возвращается в основной ансамбль, генерируя при этом новый бризер со скоростью $\tilde{v}_p = 5.24\tilde{v}_s$.

При еще большей скорости БА $\tilde{v}_b^s = 0.9\tilde{v}_s$ происходит полное испарение поверхностного атома (рис. 5, *b*). При увеличении скорости БА возрастает энергия испарившегося атома и запускается уже процесс двукратно отражения БА от кристалла. Из рис. 5, *c* видно, что испарившийся атом со скоростью $\tilde{v}_{f,1} = 0.41\tilde{v}_s$ догоняет отраженный БА, движущийся со скоростью $\tilde{v}_b^f = 0.27\tilde{v}_s$, и ускоряет его, обмениваясь с ним скоростями с соответствующим сдвигом фаз. При этом скорость бризера, выбившего поверхностный атом, $\tilde{v}_p = 6.32\tilde{v}_s$. Очевидно, что при дальнейшем увеличении начальной скорости БА будут происходить процессы испарения двух, трех и т.д. атомов, процессы испарения целых атомных кластеров. Аналогичная динамика с участием солитонов наблюдалась при взрывном разрушении кристаллов.

В рамках этого же направления проводилось исследование солитонного механизма реструктуризации и полной деструкции 2D-кристаллов с ПЛД при атомной бомбардировке. Кристалл в равновесном состоянии моделировался как симметричная система из 46 атомов с гексагональной плотной упаковкой с размером в x -направлении, существенно превышающем размер в y -направлении. Снят видеоклип, на первом этапе которого этот двумерный кристалл в равновесном состоянии при ПЛД-взаимодействии между всеми атомами подвергается двусторонней бомбардировке в x -направлении. При этом наблюдались встречное распространение бризеров и солитонов и деструкция кристалла. Фрагменты этого видеоклипа демонстрируют разрушение кристалла, например неорганического (типа графита), с образованием кристаллов меньшего размера, в которых наблюдаются динамические структуры с той же гексагональной плотной упаковкой. Наряду с наибольшим центральным фрагментом образуются четыре динамически видоизменяющихся фрагмента, каждый из которых состоит из шести атомов углерода и при добавлении водорода может формировать каркас простейшего органического соединения — бензола.

4. Заключение

Обнаружен принципиально новый вид нелинейных колебаний кристаллов с образованием динамической мультисолитонной суперрешетки (ДМССР). Образование ДМССР-сжатий происходит при превышении порогового размера кристалла, и число узлов ДМССР увеличивается с размером кристалла. При соответствующих условиях происходит образование ДМССР-разрежений. Аналогами таких динамических суперрешеток являются суперрешетки экситонов Френкеля, дорожка вихрей Кармана и, как статический аналог или динамическое следствие, суперрешетка пор в кристаллах. В последующем представляет интерес исследование различных характеристик уже самой ДМССР методом рассеяния медленных нейтронов аналогично тому, как вторичным маломощным лазерным пучком исследуются характеристики экситонной суперрешетки, созданной первичным мощным лазерным облучением. Показано, что при атомной бомбардировке 1D-кристаллов в них генерируются пучки сверхзвуковых высокоамплитудных солитонных и бризерных волн. В узком интервале подпороговых энергий бризеры инициируют полное выбивание атомов и образование дефектов типа вакансий. Снят видеоклип реструктуризации и разрушения 2D-кристалла при бомбардировке, генерирующей бризеры. Все результаты адаптированы применительно к кристаллу альфа-урана, в котором экспериментально обнаружены солитонные возбуждения. Результаты могут быть использованы при экспериментальных исследованиях методами рассеяния нейтронов и ионов на кристаллических материалах типа гидридов переходных металлов, соединениях железа и фосфора и т.д.

Список литературы

- [1] S. Ikeda, N. Watanabe. *J. Phys. Soc. Jpn.* **56**, 565 (1987).
- [2] R.K. Dodd, J.C. Eilbeck, J.D. Gibbon, H.S. Morris. *Solitons and nonlinear wave equations*. Academic Press, Inc., N.Y. (1988). 694 p.
- [3] M. Toda. *Theory of nonlinear lattices*. Springer-Verlag, Berlin (1981). 262 p.
- [4] А.М. Косевич, А.С. Ковалев. *ЖЭТФ* **67**, 1793 (1974).
- [5] A.J. Sievers, S. Takeno. *Phys. Rev. Lett.* **61**, 970 (1988).
- [6] M.E. Manley, M. Yethiraj, H. Sinn, H.M. Volz, A. Alatas, J.C. Lashley, W.L. Hults, G.H. Lander, J.L. Smith. *Phys. Rev. Lett.* **96**, 125 501 (2006).
- [7] О.А. Дубовский, А.В. Орлов. *Письма в ЖЭТФ* **87**, 482 (2008).
- [8] V.M. Agranovich, O.A. Dubovsky, A.V. Orlov. *Phys. Lett. A* **119**, 83 (1986).
- [9] A.I. Kolesnikov, M. Prager, J. Tomkinson, I.O. Bashkin, V.Yu. Malyshev, E.G. Ponyatovskii. *J. Phys.: Cond. Matter* **3**, 5927 (1991).
- [10] A.V. Filinov, M. Bonitz, Yu.E. Lozovik. *J. Phys. A: Math. Gen.* **36**, 5899 (2003).
- [11] Ю.В. Конобеев. *ФТТ* **20**, 1560 (1978).
- [12] О.А. Дубовский, А.В. Орлов, В.А. Семёнов. *ФТТ* **45**, 309 (2003).