

УДК 548.0 : 536.42

© 1990

АНГАРМОНИЧЕСКИЕ ЭФФЕКТЫ И ПЛАВЛЕНИЕ АТОМНОЙ ЦЕПОЧКИ

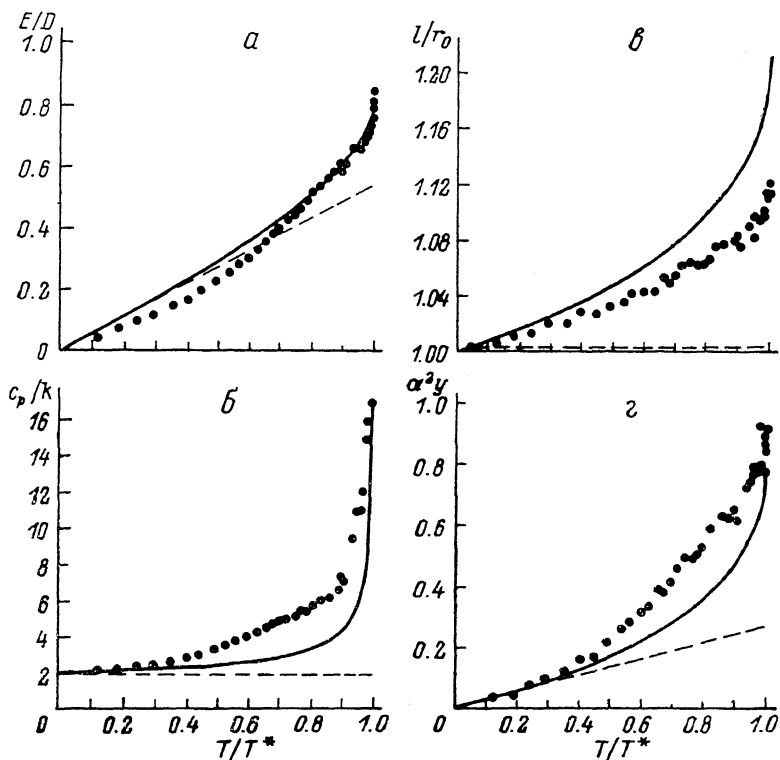
В. С. Жуков

Методом молекулярной динамики изучена температурная эволюция к критической точке структурного превращения одномерного кристалла из 100 атомов с морзевским потенциалом взаимодействия. При постоянном нулевом давлении на границах получены температурные зависимости полной энергии, теплоемкости, среднего расстояния между соседями, среднеквадратичного относительного смещения. Проведено сравнение с результатами теории самосогласованных фононов в псевдогармоническом приближении. Установлены существенное проявление ангармонизма решеточных колебаний, их определяющий вклад в нелинейное поведение термодинамических и структурных характеристик кристалла в предпереходной области.

Развитие ангармонизма решеточных колебаний в твердых телах приводит к возникновению динамической неустойчивости и структурному фазовому переходу. Эти представления о микроскопическом механизме причин структурной перестройки лежат в основе теории самосогласованных фононов, предсказывающей нелинейное поведение различных характеристик кристалла в предпереходной области [1-7]. Молекулярно-динамический эксперимент представляет большие возможности в плане проверки на микроскопическом уровне выводов и результатов теоретического рассмотрения. Удобным объектом таких сравнительных исследований является одномерная атомная цепочка. Ранее методом молекулярной динамики изучался фазовый переход типа смещения в одномерной атомной решетке с двухъямным потенциалом [8, 9]. В детальных экспериментах было проведено моделирование процессов разрыва предварительно растянутого одномерного кристалла с морзевским и леннард-джонсовским потенциалами взаимодействия [10-12]. В этих работах выявлен флуктуационный характер разрушения, который связан с возникновением энергетической аномалии, локализованной на небольшой группе атомов, формирующейся за несколько периодов колебаний. Теория самосогласованных фононов является теорией типа среднего поля, не учитывающей флуктуационные эффекты. Поэтому, имея в виду задачу сравнения, необходимо при молекулярно-динамическом моделировании четко разделить флуктуационные явления и вклад ангармонических эффектов в развитие динамической нестабильности атомной решетки.

В данной работе методом молекулярной динамики изучена температурная эволюция к границе структурной устойчивости одномерной цепочки из 100 атомов, взаимодействующих посредством морзевского потенциала с параметрами $D=10$, $\alpha r_0=6$ и постоянным нулевым давлением на концах. Численное интегрирование уравнений движения выполнялось по конечно-разностной схеме Бимона [13]. В процессе пошагового нагрева при температуре выше 0.1 в цепочке появляются разрывы, которые не стабилизируются, и через несколько десятков колебаний в данном месте происходит воссоединение цепочки в единую систему. За разрыв принималось состояние, когда межатомное расстояние превышало $1.5r_0$. Таким способом цепочка постоянно делится на несколько фрагментов, длина и положение которых флуктуирует случайным образом. В этом температурном диапа-

зоне вычисление средних по времени и ансамблю величин осуществлялось в пределах фрагментов, усреднение по которым дает окончательное значение исследуемой характеристики. Таким способом были получены зависимости кинетической, потенциальной энергии, среднего расстояния между ближайшими соседями, среднеквадратичных относительных смещений как функции полной энергии на одну частицу вплоть до значений, когда размеры отдельных фрагментов становились минимальными — до двух атомов. Данная процедура позволила отделить в результатах молекулярно-динамического эксперимента флуктуационные явления и выделить в исследованных зависимостях только вклады, обусловленные ангармоническим тепловым движением во всем температурном диапазоне существования кристаллического состояния.



Температура как функция полной энергии имеет вид возрастающей зависимости, достигающей определенного предельного значения, которое выступает в качестве температурной критической точки потери структурной устойчивости данной одномерной решетки. Для получения плавной температурной зависимости было проведено сглаживание посредством построения методом наименьших квадратов полинома второй степени в каждой экспериментальной точке с привлечением соседних. Производная от полинома давала величину теплоемкости при данном значении температуры. Температура $kT^*/D=0.375$, соответствующая обращению теплоемкости в бесконечность, определена как критическая. По полученной плавной кривой все измеренные зависимости от полной энергии были перестроены как функции относительной температуры T/T^* . На рисунке представлены зависимости, полученные в псевдогармоническом приближении теории самосогласованных фононов [14] (сплошные линии) и в молекулярно-динамическом эксперименте полной энергии цепочки (а), теплоемкости (б), равновесного расстояния между ближайшими атомами (в), среднеквадратичного относительного смещения (г). Для сравнения штриховой линией даны зависимости, вычисленные в гармоническом приближении без учета ангармонизма колебаний.

Из этого рисунка видно, что зависимости, полученные молекулярно-динамическим моделированием и вычисленные аналитически из теории самосогласованных фононов, хорошо совпадают, проявляя нелинейное поведение в предпереходной области, отражая нарастание ангармонического вклада в динамику решетки при подходе к критической точке. Особенно сильное различие между гармонической и ангармонической теориями наблюдается в графиках теплоемкости и среднего расстояния между соседями. Близость данных молекулярно-динамического эксперимента с результатами теории самосогласованных фононов, основанной на рассмотрении ангармонизма решеточных колебаний, убедительно подтверждает реальность проявления ангармонических эффектов. В количественном плане необходимо отметить заметное расхождение температур критической точки: 0.375 при моделировании и 0.537 из теории, что может быть объяснено приближением теории, которая в разложении потенциальной энергии по смещениям учитывает только четные слагаемые.

В результате молекулярно-динамического моделирования температурной эволюции к критической точке атомной одномерной цепочки получено хорошее совпадение с результатами теории самосогласованных фононов. Подтверждены известное ранее по другим экспериментам существенное проявление ангармонизма решеточных колебаний, их определяющий вклад в нелинейное поведение термодинамических и структурных характеристик кристалла в предпереходной области, необходимость рассмотрения ангармонических эффектов при описании микроскопических механизмов структурных превращений в твердых телах.

Список литературы

- [1] Плакида Н. М., Аксенов В. Л. // ФТТ. 1973. Т. 15. № 9. С. 2575—2582.
- [2] Кондратьев В. В. // ФТТ. 1974. Т. 16. № 2. С. 384—391.
- [3] Берча Д. М., Марьян М. И. // ФТТ. 1982. Т. 24. № 5. С. 1265—1269.
- [4] Жуков В. С. // ФТТ. 1982. Т. 24. № 5. С. 1281—1285.
- [5] Malinowska-Adamska C. // Acta Phys. Hung. 1986. V. 59. N 3—4. P. 257—272.
- [6] Igarashi A., Minakata T., Kaneko Y. // J. Phys. Soc. Jap. 1985. V. 54. N 11. P. 4193—4204.
- [7] Moleko L. K., Glude H. R. // Phys. Rev. B. 1984. V. 30. N 8. P. 4215—4229.
- [8] Koehler T. R., Gillis N. S. // Phys. Rev. B. 1976. V. 13. N 9. P. 4183—4187.
- [9] Weyrich K. H., Siems R. // Ferroelectrics. 1984. V. 55. P. 1001—1004.
- [10] Мелькер А. И., Михайлин А. И., Золотаревский Н. Ю. // ФТТ. 1979. Т. 21. № 5. С. 1545—1547.
- [11] Лагунов В. А. // ФТТ. 1986. Т. 28. № 11. С. 3466—3472.
- [12] Мелькер А. И., Иванов А. В. // ФТТ. 1986. Т. 28. № 11. С. 3396—3402.
- [13] Veeman D. // Comput. Phys. 1976. V. 20. N 2. P. 130—139.
- [14] Плакида Н. М. // Статистическая физика и квантовая теория поля. М., 1973. С. 205—240.

Уральский лесотехнический институт
им. Ленинского комсомола
Свердловск

Поступило в Редакцию
11 октября 1989 г.
В окончательной редакции
12 июля 1990 г.