

05

Взаимодействие движущихся дискретных бризеров с вакансией в двумерном кристалле

© А.А. Кистанов, С.В. Дмитриев, А.С. Семенов,
В.И. Дубинко, Д.А. Терентьев

Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа, Россия
Санкт-Петербургский государственный политехнический университет,
Россия

Мирнинский политехнический институт, филиал Северо-Восточного
федерального университета им. М.К. Аммосова, Мирный, Россия
ННЦ Харьковский физико-технический институт, Харьков, Украина
SCK-CEN, Nuclear Materials Science Institute, Boeretang 200, Mol, B2400,
Belgium

E-mail: andrei.kistanov.ufa@gmail.com

Поступило в Редакцию 13 марта 2014 г.

Для двумерного моноатомного кристалла с морзевским межатомным взаимодействием изучено взаимодействие движущихся дискретных бризеров (ДБ) с вакансией, расположенной в том же плотноупакованном атомном ряду, по которому движется ДБ. Показано, что ДБ, движущиеся со скоростью меньше определенного значения, упруго отталкиваются от вакансии, а ДБ, имеющие скорость больше пороговой, рассеиваются на вакансии. Установлено, что ДБ, взаимодействуя с вакансией, понижает энергетический барьер миграции вакансии.

Дискретный бризер (ДБ) — это пространственно локализованная колебательная мода большой амплитуды в бездефектной нелинейной решетке [1]. В настоящее время быстро растет число работ по изучению свойств ДБ в различных кристаллах [2], включая NaI [3–9], Si и Ge [10], фуллерит C₆₀ [11], углеродные нанотрубки [12], графен [13,14], графан [15], ГЦК металлы Ni и Nb [16] и интерметаллиды [17,18]. Концепция ДБ начинает активно использоваться для объяснения различных физических явлений в кристаллах [19–22]. Следует отметить, что в реальных физических системах исследуются не строго периодические ДБ, а квазибризеры, имеющие конечное время жизни [23].

Существование ДБ обеспечивается наличием ангармонизмов меж-атомных сил, приводящих к зависимости частоты колебаний атомов от амплитуды. Для достаточно больших амплитуд колебаний частота ДБ находится вне фононного спектра кристалла. В этих условиях ДБ не возбуждает фононных мод, что и определяет его большое время жизни.

В работе [24] показана возможность существования ДБ с частотами выше фононного спектра в двумерном моноатомном кристалле. В данной работе, в рамках той же модели кристалла, изучается взаимодействие движущихся ДБ с вакансией.

Рассматривается модель двумерного плотноупакованного кристалла. Расчетная ячейка с периодическими граничными условиями содержит 160×160 атомов, имеющих две степени свободы — компоненты вектора перемещения в плоскости кристалла. ДБ возбуждается в центре расчетной ячейки, а на ее периферии вводится вязкое трение для поглощения малоамплитудных колебаний, излучаемых ДБ.

Взаимодействие атомов описывается парным потенциалом Морзе

$$V(r) = D(e^{-2\alpha(r-r_m)} - 2e^{-\alpha(r-r_m)}), \quad (1)$$

где r — расстояние между парой атомов, D , α , r_m — параметры потенциала. Функция $V(r)$ имеет минимум при $r = r_m$, глубина минимума (энергия разрыва связи) равна D , а параметр α определяет жесткость межатомной связи. Далее используются безразмерные единицы длины, энергии и времени, выбранные так, что $D = 1$, $r_m = 1$ и масса атома равна единице. Рассмотрено значение $\alpha = 5$, для которого равновесное межатомное расстояние в кристалле равно $a = 0.98813$, при радиусе обрезки потенциала, равном 5.5.

Атомы одного из плотноупакованных рядов кристалла нумеруются индексом n , как показано на рис. 1. Начальные условия для движущегося ДБ задаются следующим образом [25]:

$$x_n(t) = \cos[\omega t + \varphi_0 + \delta(n - x_0)]x_n^0, \quad y_n = 0, \quad \dot{y}_n = 0, \quad (2)$$

где ω — частота ДБ, лежащая выше фононного спектра кристалла; φ_0 — начальная фаза колебаний; δ — параметр, определяющий разность фаз колебаний соседних атомов; значения x_n^0 определены выражениями

$$x_n^0 = (-1)^n T_n^0 + S_n^0, \quad T_n^0 = \frac{A}{\cosh[\beta(n - x_0)]}, \quad S_n^0 = \frac{-B(n - x_0)}{\cosh[\gamma(n - x_0)]}, \quad (3)$$

где параметр A определяет амплитуду ДБ, параметр B определяет амплитуду смещений центров колебаний атомов, параметры β и γ

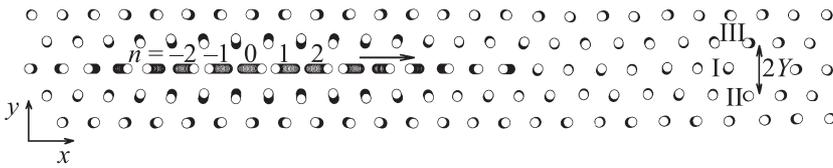


Рис. 1. Стробоскопическая картина движения атомов рассматриваемого кристалла, показывающая ДБ, движущийся вдоль плотноупакованного атомного ряда в направлении вакансии. Перемещения атомов увеличены в 4 раза. Три атома, соседних с вакансией, занумерованы римскими цифрами. Для оценки потенциального барьера миграции атома I в вакантный узел исследуется эволюция во времени расстояния между атомами II и III, обозначенного $2Y$.

задают степень пространственной локализации ДБ, а x_0 — его начальное положение. При $x_0 = 0$ ДБ центрирован на атоме, а при $x_0 = 1/2$ посередине между двумя соседними атомами. Функции T_n^0 и S_n^0 в (3) описывают амплитуды колебания и смещения центров колебания атомов соответственно. Отметим, что скорость ДБ зависит от δ , и при $\delta = 0$ имеем неподвижный ДБ.

Для представления результатов моделирования вычислялись функции

$$T_n = (x_{n,\max} - x_{n,\min})/2, \quad S_n = (x_{n,\max} + x_{n,\min})/2, \quad (4)$$

где $x_{n,\max}$ и $x_{n,\min}$ — это максимальное и минимальное значения (квази)периодической функции $x_n(t)$, описывающей движение n -го атома плотноупакованного ряда. Все атомы, кроме выделенного плотноупакованного ряда, имеют нулевые начальные перемещения и скорости.

На рис. 1 показана постановка численного эксперимента. Стробоскопическая картина движения атомов рассматриваемого кристалла показывает ДБ, движущийся слева направо в направлении вакансии. Три атома, соседних с вакансией, занумерованы римскими цифрами. Для оценки потенциального барьера миграции атома I в вакантный узел исследуется эволюция во времени расстояния между атомами II и III, обозначенного $2Y$.

Нами проведены численные эксперименты по взаимодействию ДБ с вакансией для различных значений параметра δ . Заметим, что скорость ДБ практически линейно зависит от δ и может быть аппроксимирована как $V_{\text{ДБ}} = 41\delta$.

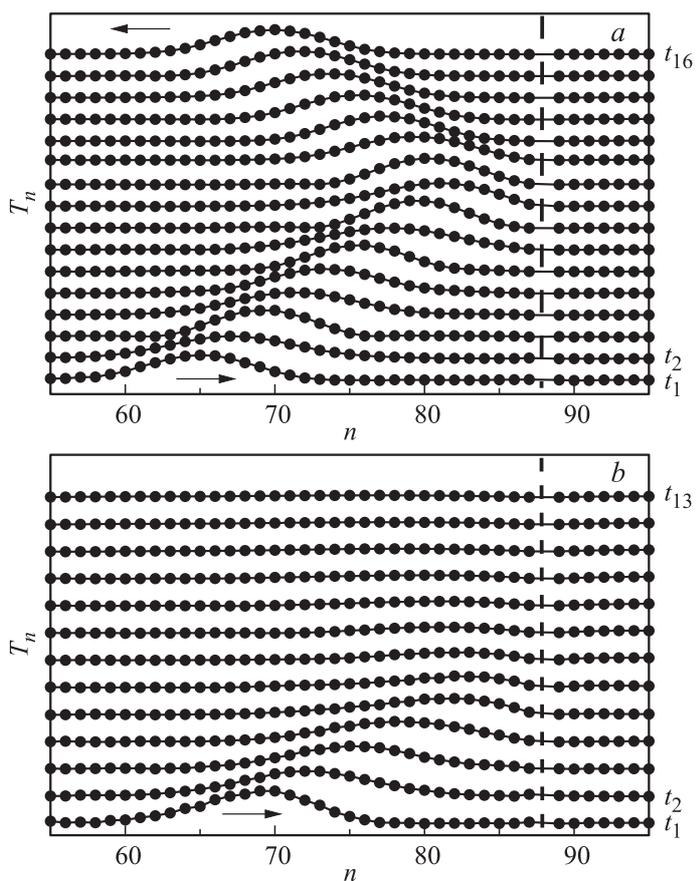


Рис. 2. Пример взаимодействия ДБ с вакансией, положение которой отмечено вертикальной пунктирной линией. Параметры возбуждения ДБ см. в тексте. На *a* скорость движения ДБ в 2 раза меньше, чем на *b*. *a* — практически упругое отталкивание ДБ от вакансии, *b* — ДБ рассеивается на вакансии.

Два примера взаимодействия ДБ с вакансией приведены на рис. 2. Функции T_n даны со сдвигом по вертикали для различных моментов времени с интервалом $\Delta t = 5.07$. Положение вакансии показано вертикальной пунктирной линией. Параметры выражения (3), использо-

ванные для задания начальных условий, следующие: a — $A = 0.2565$, $B = 0.015$, $\beta = \gamma = 0.25$, $\omega = 19.52$, $x_0 = 1/2$, $\delta = 0.02\pi$; b — то же, кроме $\delta = 0.04\pi$. Таким образом, на a ДБ имеет скорость в два раза выше, чем на b . В случае a происходит практически упругое отталкивание ДБ от вакансии, а в случае b ДБ рассеивается на вакансии.

Было установлено, что для ДБ, инициированных со значениями $\delta \leq 0.035\pi$ ($V_{DB} \leq 4.51$), происходит упругое отталкивание от вакансии, а для $\delta \geq 0.04\pi$ ($V_{DB} \geq 5.15$) ДБ рассеивается на вакансии. Остальные параметры выражения (3) не изменялись при задании начальных условий.

Нами исследовано, влияет ли ДБ на высоту потенциального барьера, который должен преодолеть атом I (рис. 1), чтобы занять вакантное решеточное положение. Для ответа на поставленный вопрос анализировалось расстояние между атомами II и III, обозначенное $2Y$, как функция времени. Увеличение данного расстояния, очевидно, облегчает прохождение атома I в вакантный узел. Более того, согласно известным расчетам, даже при симметричном колебательном изменении расстояния между атомами II и III вокруг равновесного значения, происходит повышение вероятности преодоления потенциального барьера при наличии возмущений, вызванных взаимодействием ДБ с кристаллическими дефектами [26,27]. При этом свободная энергия системы (в нашем случае — атомов, окружающих вакансию) уменьшается вследствие увеличения вибрационной энтропии атомов, что отражает статистическую природу эффекта и имеет весьма общий характер [28].

Вычисление свободной энергии активации миграции вакансии при взаимодействии ее с ДБ выходит за рамки данного сообщения, но основную идею его уменьшения можно проиллюстрировать геометрически. На рис. 3 представлены зависимости $\Delta Y(t/\theta) = Y(t/\theta) - Y_0$, где Y_0 — равновесное значение половины расстояния между атомами II и III, а θ — период колебания ДБ, для a $\delta = 0.02\pi$ и b $\delta = 0.04\pi$, что соответствует фрагментам a и b на рис. 2. Отметим, что в случае a , когда ДБ упруго отталкивается от вакансии, $\Delta Y(t) > 0$ в течение порядка 10^2 периодов колебания ДБ. В случае b , когда ДБ разрушается при взаимодействии с вакансией, $\Delta Y(t)$ осциллирует около нулевого значения в течение порядка 10^2 периодов колебания ДБ. И в том и в другом случае можно говорить об эффективном понижении активационного барьера миграции вакансии, но в случае a барьер понижается более эффективно, как следует из дальнейшего рассмотрения.

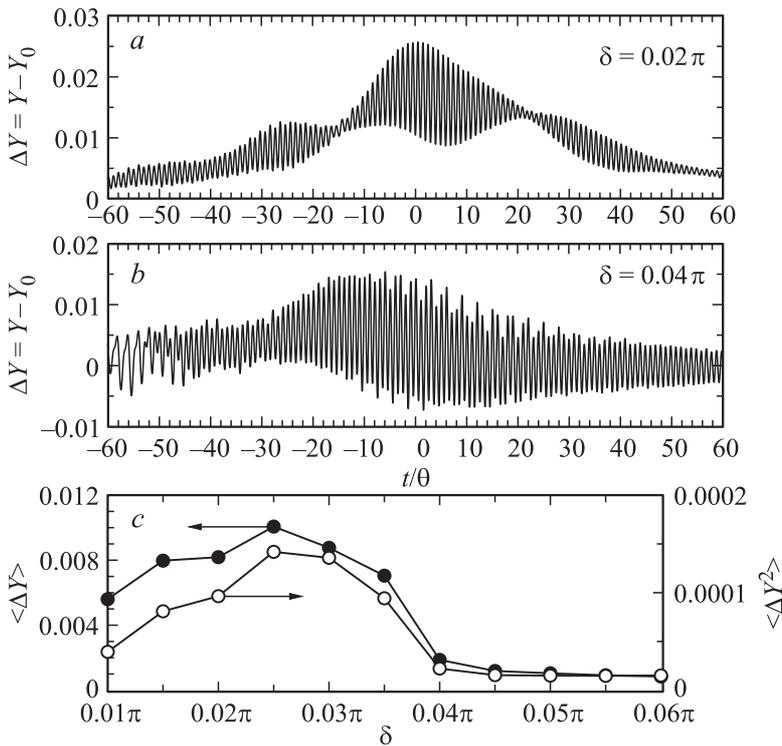


Рис. 3. Зависимость отклонения расстояния Y (см. рис. 1) от равновесного значения Y_0 как функция времени, измеряемого в периодах колебаний ДБ. θ для случаев: a — ДБ упруго отражается от вакансии, b — ДБ рассеивается на вакансии, c — зависимость среднего значения $\langle \Delta Y \rangle$ и среднеквадратичного отклонения $\langle \Delta Y^2 \rangle$ расстояния между атомами II и III от равновесного значения, рассчитанные за время взаимодействия ДБ с вакансией, от δ .

Определим средние и среднеквадратичные изменения $\Delta Y(t)$ за интервал времени $2T$:

$$\langle \Delta Y \rangle = \frac{1}{2T} \int_{-T}^T \Delta Y(t) dt, \quad \langle \Delta Y^2 \rangle = \frac{1}{2T} \int_{-T}^T \Delta Y^2(t) dt \quad (5)$$

соответственно. Начало шкалы времени здесь выбрано в точке максимума функции $\Delta Y(t)$, которая считается моментом столкновения ДБ с

вакансией. Интервал интегрирования определен значением $T = 80\theta$, где θ — период колебаний ДБ, и охватывает отрезок времени, когда $\Delta Y(t)$ заметно отклоняется от нуля.

На рис. 3, с показаны $\langle \Delta Y \rangle$ (темные точки) и $\langle \Delta Y^2 \rangle$ (светлые точки) как функции δ . Хорошо видно, что $\langle \Delta Y \rangle$ и $\langle \Delta Y^2 \rangle$ велики в интервале упругого отскока ДБ от вакансии и резко падают в интервале рассеяния ДБ на вакансии. Большое значение $\langle \Delta Y \rangle$ означает увеличение расстояния между атомами II и III в момент взаимодействия ДБ с вакансией и, следовательно, понижение потенциального барьера миграции вакансии. Наиболее эффективное понижение потенциального барьера миграции вакансии наблюдается в случае, когда ДБ упруго отталкивается от вакансии. В то же время наличие ненулевого квадратичного отклонения $\langle \Delta Y^2 \rangle$, даже в случае рассеяния ДБ на вакансии, приводит к эффективному понижению активационного барьера миграции вакансии [26,27].

Таким образом, методом молекулярной динамики изучено влияние скорости движущегося ДБ на результат его взаимодействия с вакансией. Показано, что для скорости ДБ меньше некоторого порогового значения он упруго отталкивается от вакансии, а при больших скоростях движения он рассеивается на вакансии. Длительность взаимодействия ДБ с вакансией во всех случаях составляет порядка 10^2 периодов колебания ДБ. Изучение расстояния $2Y$ между атомами II и III (рис. 1) в процессе взаимодействия ДБ с вакансией показало, что оно увеличивается в случае упругого отталкивания ДБ от вакансии и осциллирует около равновесного положения в случае, когда ДБ рассеивается на вакансии. И в том и в другом случае можно говорить о снижении активационного барьера миграции вакансии, причем в случае упругого отталкивания ДБ от вакансии барьер снижается более заметно.

Список литературы

- [1] Flach S., Gorbach A.V. // Phys. Rep. 2008. V. 467. P. 1.
- [2] Manley M.E. // Acta Mater. 2010. V. 58. P. 2926.
- [3] Manley M.E., Alatas A., Trouw F., Leu B.M., Lynn J.W., Chen Y., Hults W.L. // Phys. Rev. B. 2008. V. 77. P. 214 305.
- [4] Kempa M., Ondrejko J., Bourges P., Ollivier J., Rols S., Kulda J., Margueron S., Hlinka J. // J. Phys.: Condens. Matter. 2013. V. 25. P. 055 403.
- [5] Kiselev S.A., Sievers A.J. // Phys. Rev. 1997. V. 55. P. 5755.
- [6] Khadeeva L.Z., Dmitriev S.V. // Phys. Rev. B. 2010. V. 81. P. 214 306.
- [7] Кистанов А.А., Дмитриев С.В. // Письма в ЖТФ. 2013. Т. 39. В. 13. С. 78.

- [8] Кистанов А.А., Баимова Ю.А., Дмитриев С.В. // Письма в ЖТФ. 2012. Т. 38. В. 14. С. 72.
- [9] Дмитриев С.В., Баимова Ю.А. // Письма в ЖТФ. 2011. Т. 37. В. 10. С. 13.
- [10] Voulgarakis N.K., Hadjisavvas G., Kelires P.C., Tsironis G.P. // Phys. Rev. B. 2004. V. 69. P. 113 201.
- [11] Savin A.V., Kivshar Yu.S. // Phys. Rev. B. 2012. V. 85. P. 125 427.
- [12] Shimada T., Shirasaki D., Kitamura T. // Phys. Rev. B. 2010. V. 81. P. 035 401.
- [13] Baimova J.A., Dmitriev S.V., Zhouk K. // Europhys. Lett. 2012. V. 100. P. 36005.
- [14] Khadeeva L.Z., Dmitriev S.V., Kivshar Yu.S. // JETP. Lett. 2011. V. 94. P. 539.
- [15] Liu B., Baimova J.A., Dmitriev S.V., Wang X., Zhu H., Zhou K. // J. Phys. D: Appl. Phys. 2013. V. 46. P. 305 302.
- [16] Haas M., Hizhnyakov V., Shelkan A., Klopov M., Sievers A.J. // Phys. Rev. B. 2011. V. 84. P. 144 303.
- [17] Дмитриев С.В., Медведев Н.Н., Мулюков Р.Р., Пождаева О.В., Потемкин А.И., Старостенков М.Д. // Изв. вузов. Физика. 2008. Т. 51. № 8. С. 73.
- [18] Дмитриев С.В., Хабеева Л.З., Пшеничник А.И., Медведев Н.Н. // ФТТ. 2010. Т. 52. В. 7. С. 1398.
- [19] Dubinko V.I., Selyshchev P.A., Archilla J.F.R. // Phys. Rev. E. 2011. V. 83. P. 041 124.
- [20] Velarde M.G. // J. Comput. Appl. Math. 2010. V. 233. P. 1432.
- [21] Sievers A.J., Sato M., Page J.B., Rossler T. // Phys. Rev. B. 2013. V. 88. P. 104 305.
- [22] Дмитриев С.В. // Письма о материалах. 2011. Т. 1(2). С. 78.
- [23] Chechin G.M., Dzhelauhova G.S., Mehonoshina E.A. // Phys. Rev. E. 2006. V. 74. P. 036 608.
- [24] Кистанов А.А. // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2014. Т. 11. № 1. С. 9.
- [25] Кистанов А.А., Мурзаев Р.Т., Дмитриев С.В., Дубинко В.И., Хижняков В.В. // Письма в ЖЭТФ. 2014. Т. 99(6). С. 403.
- [26] Dubinko V.I., Dubinko A.V. // Nucl. Instr. Meth. B. 2013. V. 303. P. 133.
- [27] Dubinko V., Shapovalov R. Theory of quodon gas. With application to precipitation kinetics in solids under irradiation / R. Carretero-Gonzalez et al. (eds), Localized Excitations in Nonlinear Complex Systems, Nonlinear Systems and Complexity 7, Springer International Publishing Switzerland, 2014.
- [28] Landau L.D. Statistical Physics. Part 1: Course of Theoretical Physics. V. 5. Pergamon Press, 1969.