

01.07.10

Упругие диполи в модели монокристаллической и аморфной меди

© Р.А. Кончаков¹, Н.П. Кобелев², В.А. Хоник¹, А.С. Макаров¹

¹ Воронежский государственный педагогический университет, Воронеж, Россия

² Институт физики твердого тела РАН, Черногловка, Россия

E-mail: konchakov.roman@gmail.com

(Поступила в Редакцию 30 июня 2015 г.)

Методом молекулярной динамики определены характерные значения компонент тензора упругой поляризуемости точечных дефектов в кристаллической и аморфной меди, определяющие изменение компонент тензора упругости при введении дефектов. Выявлена связь тензора упругой поляризуемости с основным параметром межузельной теории — сдвиговой восприимчивостью. Путем анализа тензоров упругой поляризуемости дефектов в кристаллической и аморфной меди показано, что в некристаллической структуре присутствуют специфические атомные конфигурации, которые при деформации проявляются аналогично упругим диполям (межузельным атомам в гантельной конфигурации) в монокристаллической меди.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ (задание № 3.114.2014/К на выполнение научно-исследовательской работы в рамках проектной части государственного задания в сфере научной деятельности).

1. Введение

Упорядоченность в пространственном расположении атомов в кристаллах определяет наличие дальнего порядка. Любое нарушение этого порядка можно трактовать как образование дефектов структуры. Широко известно, что дефекты структуры влияют на механические, электрические, магнитные и другие свойства кристаллических материалов. Структурно-чувствительные свойства аморфных сплавов также не определяются только химическим составом, а зависят от многих факторов. Все большую популярность приобретает идея о том, что структурные „дефекты“, которые в определенной степени сродни дефектам в кристаллических твердых телах, могут существовать и в аморфных сплавах. Возникает, однако, трудность прямой идентификации „дефектов“ аморфной структуры, которые чаще всего понимаются не как собственно дефекты (т.е. отклонения от некоей „идеальной“ некристаллической структуры), а как ее неотъемлемые специфические элементы. При этом экспериментальные исследования, направленные на прямое изучение структуры некристаллических материалов, сколько-нибудь значимой информации о структурных „дефектах“ не дают [1,2]. Поэтому на первый план выходит анализ компьютерных моделей некристаллических структур.

Так, в работах [3–5] предлагается способ определения атомных конфигураций, которые по ряду параметров существенно отличаются от средних для всей неупорядоченной структуры и поэтому могут трактоваться как „дефекты“. В ходе компьютерного моделирования авторы выявили в структуре аморфных сплавов три типа дефектов: а) области, соответствующие положи-

тельным вариациям гидростатического давления, были названы „*p*-дефектами“ (аналог межузельных дефектов в кристаллах), б) области с отрицательными вариациями давления — „*n*-дефекты“ (аналог вакансий в кристаллах) и в) области с сильной сдвиговой деформацией — „*t*-дефекты“ (аналог расщепленного междоузлия или упругого диполя). Области аморфной структуры с отрицательными вариациями давления также называют свободным объемом. Теория свободного объема широко используется в феноменологическом описании некоторых аспектов релаксационных явлений, протекающих в металлических стеклах [6,7]. Дальнейшие исследования аморфной структуры, выполненные как с помощью компьютерного моделирования, так и анализа различных экспериментальных данных, подтвердили возможность существования „дефектов“ в реальных некристаллических системах [8,9]. Однако, несмотря на определенные результаты, вопрос идентификации структурных „дефектов“ в некристаллических материалах остается до сих пор по существу открытым даже на концептуальном уровне.

Весьма перспективным для анализа релаксационных явлений в металлических некристаллических материалах является подход, основанный на межузельной теории Гранато [10,11]. Предполагается, что плавление металлических кристаллов происходит в результате быстрой генерации межузельных атомов в гантельной конфигурации [12], которые сохраняют индивидуальность в расплаве и стекле, полученном закалкой расплава [13]. Тогда изменение ряда свойств стекла в результате релаксации можно вполне успешно интерпретировать как следствие изменения концентрации „дефектов“ типа межузельных гантелей [14]. С другой стороны, как

известно, межузельные гантели представляют собой частный случай „упругих диполей“ — локальных областей структуры, точечная симметрия которых ниже точечной симметрии матричной структуры и которые поэтому взаимодействуют с внешним полем упругих напряжений [15]. Недавние исследования тепловых эффектов, возникающих при нагреве металлических стекол, показали, что теоретический подход, основанный на предположении о наличии в них упругих диполей, замороженных при закалке расплава, весьма хорошо описывает имеющиеся экспериментальные данные [16,17].

Исходя из изложенного, представляет интерес выявить упругие диполи в компьютерной модели некристаллической металлической структуры. Поскольку вопрос оказывается достаточно сложным, его анализ естественно произвести на примере простого однокомпонентного металла. Для упругих диполей известны их характерные особенности. В первую очередь, как упоминалось выше, это более низкая симметрия упругого диполя в сравнении с окружающей структурой. Ранее в работе [18] нами был выполнен анализ структурных „дефектов“ в аморфной меди с точки зрения их симметрии. Были рассчитаны λ -тензоры (однозначно характеризующие симметрию дефекта) точечных дефектов в монокристаллической меди и показано, что в аморфной меди присутствуют локальные атомные структуры, имеющие λ -тензоры, аналогичные λ -тензору межузельной гантели в монокристалле. Вторая особенность упругих диполей состоит в их высокой податливости по отношению к сдвиговой деформации [19]. Это означает, что атомы, образующие упругий диполь, при сдвиговом нагружении испытывают дополнительные неоднородные (индуцированные) смещения. Основная задача настоящей работы состоит в поиске в аморфной структуре атомных конфигураций, которые могут быть идентифицированы как упругие диполи с точки зрения их взаимодействия с внешним напряжением, и наличия областей индуцированной деформации.

2. Методика эксперимента

Как отмечено выше, основным характерным свойством упругих диполей является их способность взаимодействовать с полем внешних напряжений σ_{kl} . В результате этого взаимодействия, помимо однородной деформации, возникают (в случае малых деформаций) дополнительные индуцированные деформации $\varepsilon_{ij}^{\text{ind}}$, связанные с локальным нарушением симметрии кристалла в области упругих диполей:

$$\varepsilon_{ij}^{\text{ind}} = n\gamma_{ijkl}\sigma_{kl}, \quad (1)$$

где n — атомная концентрация упругих диполей, γ_{ijkl} — диаэластическая податливость, которая является усредненной характеристикой разнонаправленных упругих диполей. В случае однонаправленных диполей тензор γ_{ijkl} является характеристикой отдельного диполя.

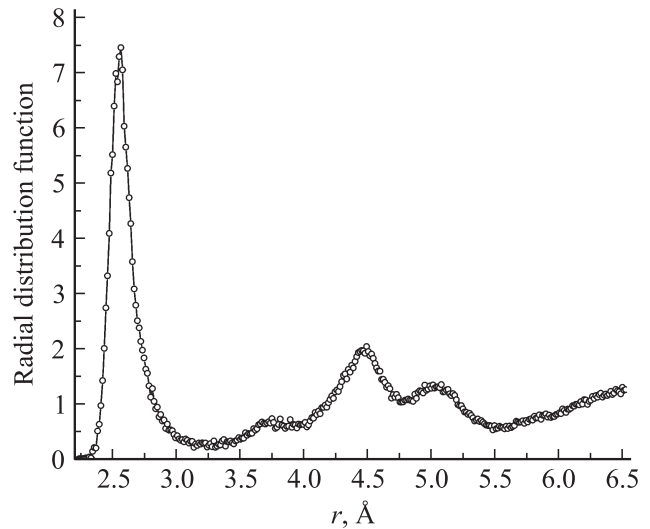


Рис. 1. Функция радиального распределения для аморфной меди.

Аналогично, при наличии однородной деформации ε_{kl} , упругие диполи приводят к возникновению неоднородных, так называемых индуцированных напряжений,

$$\sigma_{ij}^{\text{ind}} = n\alpha_{ijkl}\varepsilon_{kl}. \quad (2)$$

В этой формуле диаэластическая поляризуемость α_{ijkl} является наглядной характеристикой упругого диполя, так как прямо характеризует изменение упругих модулей [20]

$$C_{ijkl}^{\text{id}} = C_{ijkl} - n\alpha_{ijkl}, \quad (3)$$

где C_{ijkl}^{id} и C_{ijkl} — соответственно тензоры упругости идеального кристалла и кристалла с упругими диполями, концентрация которых равна n . Тензоры α_{ijkl} и γ_{ijkl} связаны соотношением

$$\gamma_{ijkl} = S_{ijnm}\alpha_{nmpq}S_{pqkl}, \quad (4)$$

где S_{ijnm} — тензор упругой податливости. В формулах (2) и (3) поляризуемость α_{ijkl} является либо усредненной характеристикой разнонаправленных диполей, либо характеристикой данного вида однонаправленных диполей. В качестве критерия того, что данная атомная конфигурация может являться упругим диполем, мы предлагаем использовать характерные значения компонент тензоров диаэластической податливости и поляризуемости, определяемые уравнениями (1) и (2).

Для реализации компьютерной модели кристаллической и аморфной меди был использован популярный пакет классической молекулярной динамики LAMMPS [21] с межатомным потенциалом взаимодействия типа eam (embedded atom method) [22], который уже был успешно использован нами в работах [18,23]. Модель аморфной меди была получена следующим образом. Монокристалл из 4000 атомов ($10 \times 10 \times 10$ трансляций элементарной

ячейки) плавился и выдерживался при температуре 2000 К в течение 10 ns. Затем осуществлялось охлаждение до 0 К со скоростью 10^{13} К/с. Интегрирование уравнений движения осуществлялось методом Верле [24], шаг интегрирования по времени выбран равным 2 fs, что соответствует примерно 0.015 периода колебаний атомов. Контроль температуры осуществлялся термостатом Нозе–Гувера (Nose–Hoover) [25,26], контроль давления производился баростатом Берендсена (Berendsen) [27]. На рис. 1 показана функция радиального распределения полученной модели аморфной меди, демонстрирующая характерные особенности некристаллической структуры. Дальнейшие расчеты проводились методом квазистатической релаксации модельной системы при нулевой температуре. Минимизация потенциальной энергии системы (релаксация структуры), в результате которой атомы занимали устойчивые положения, производилась методом наискорейшего спуска (steepest descent algorithm).

3. Результаты и обсуждение

Алгоритм расчета тензоров α_{ijkl} и γ_{ijkl} был отработан на примерах межузельной гантели и вакансии в монокристаллической меди. При однородной деформации модельной системы как целого вблизи структурного дефекта возникает дополнительная индуцированная деформация. На рис. 2 показаны однородная деформация простого сдвига вблизи межузельной гантели (a) и индуцированные деформации в виде дополнительного поворота пары гантельных атомов (b). Для расчета тензора упругой поляризуемости α_{ijkl} по формуле (2) нужно знать тензор индуцированных напряжений, который можно вычислить как $\sigma_{kl}^{ind} = \sigma_{kl}^{relaxed} - \sigma_{kl}^{initial}$, где $\sigma_{kl}^{initial}$ — тензор напряжений в случае однородной деформации без релаксации структуры (отвечающий структуре a на рис. 2) и $\sigma_{kl}^{relaxed}$ — тензор напряжений после релаксации (структура b на рис. 2). Для определения тензоров $\sigma_{kl}^{initial}$ и $\sigma_{kl}^{relaxed}$ формируется идеальная кристаллическая решетка, в которую внедряется один дефект, например, межузельная гантель с ориентацией $\langle 010 \rangle$, и делается релаксация структуры, допускающая изменение объема. Полученная структура подвергается сдвиговой деформации без релаксации атомных позиций, в нашем случае величина деформации составляла 1% (т.е. режим упругой деформации). Результат такой однородной деформации показан на рис. 2, a. При этом $\sigma_{kl}^{initial}$ — тензор напряжений для такой однородно деформированной структуры. Далее осуществляется релаксация этой однородно деформированной структуры без изменения геометрических размеров. В результате происходит некоторое дополнительное смещение атомов, которое мы и называем неоднородными или индуцированными смещениями. Для полученной в результате такой релаксации структуры (на рис. 2, b) вычислялся тензор $\sigma_{kl}^{relaxed}$. Компоненты тензора напряжений σ_{ij} рассчитывались по вириальному

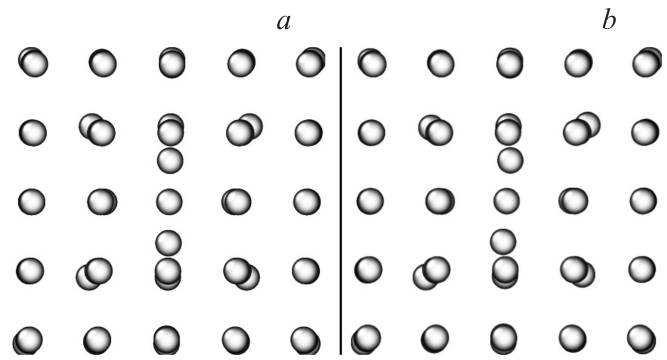


Рис. 2. Однородная деформация типа простого сдвига (a) и индуцированная деформация вблизи межузельной гантели (b) в компьютерной модели монокристаллической меди.

соотношению

$$\sigma_{ij} = \sum_k^N \frac{m_k v_{ki} v_{kj}}{V_0} \sum_k^N \frac{r_{ki} f_{kj}}{V_0}, \quad (5)$$

где m — масса атома, N — число атомов, k — номер атома, v_{ki} — компоненты его скорости, f_{kj} — компоненты действующей на него силы, r_{ki} — компоненты радиуса-вектора, соединяющего атомы j и i , V_0 — объем модельной системы.

Из рис. 2 видно, что основная часть неоднородных смещений — это поворот пары дефектных атомов межузельной гантели. Угол поворота межузельной гантели при неоднородной деформации примерно в 6 раз больше угла, соответствующего однородной деформации бездефектного кристалла. Похожий модельный расчет с другим межатомным потенциалом в работе [20] дал оценку отношения этих углов около 15.

Для вычисления всех компонент тензора поляризуемости по формуле (2) поочередно создавалась соответствующая сдвиговая или продольная деформация и вычислялся тензор индуцированных напряжений σ_{kl}^{ind} . Для межузельной гантели с ориентацией $\langle 010 \rangle$ (наиболее устойчивая конфигурация в ГЦК кристалле) тензор упругой поляризуемости в Фойгтовском обозначении (Voigt notation) имеет вид

$$\alpha_{mn}^{(010)} = 10^3 \times \begin{pmatrix} 0.88 & -0.29 & -0.54 \\ -0.29 & 0.80 & -0.29 \\ -0.54 & -0.29 & 0.88 \\ & & & 2.11 \\ & & & & 3.34 \\ & & & & & 2.11 \end{pmatrix} \text{ GPa}, \quad (6)$$

где $m = (1 \dots 6)$, $n = (1 \dots 6)$. Здесь отброшены компоненты, на два и более порядка отличающиеся от

характерных значений. Если считать, что поляризуемость связана только с поворотом гантели, то для $\langle 010 \rangle$ дефекта нужно бы было ожидать, что член $\alpha_{55}^{(010)}$ будет равен 0, либо существенно меньше остальных. На самом деле он даже больше, т.е. поляризуемость связана не просто с поворотом гантели. Согласно формуле (3), каждая компонента тензора α_{mn} задает величину снижения соответствующего упругого модуля, приходящуюся на единичную концентрацию дефектов. Значения компонент тензора упругой поляризуемости слабо зависят от величины деформации и от размеров модельной системы.

Из анализа компонент тензора $\alpha_{mn}^{(010)}$ следует несколько важных выводов. Во-первых, наибольшее снижение испытывает модуль C_{55} , соответствующий сдвиговой деформации в плоскости перпендикулярной межузельной гантели. Это нетривиальный результат, так как из рис. 2 можно было бы ожидать максимальное снижение модулей C_{44} и C_{66} , соответствующих сдвигу в плоскости межузельной гантели. Во-вторых, снижение сдвиговых модулей C_{44} , C_{55} , C_{66} в несколько раз больше, чем других модулей. Более того, так как компоненты $\alpha_{12}^{(010)}$ и $\alpha_{13}^{(010)}$ отрицательные, то следует ожидать незначительного снижения объемного модуля $B = (C_{11} + 2C_{12})/3$, для которого $\alpha_{mn}^B \sim 0.1$ и небольшое снижение модуля $C' = (C_{11} - C_{12})/2$, для которого $\alpha_{mn}^{C'} \sim 0.58$.

Обратим внимание, что тензор упругой поляризуемости напрямую связан с важнейшим параметром β (сдвиговая восприимчивость) основного уравнения межузельной теории Гранато [10,11]

$$G = G^{id} \exp(-\beta n), \tag{7}$$

где G^{id} и G — модули сдвига идеального бездефектного кристалла и кристалла, содержащего дефекты в концентрации n . Гранатовская сдвиговая восприимчивость β является безразмерным параметром и, как видно из сравнения формул (2) и (7), представляет по существу усредненную упругую поляризуемость, нормированную на величину модуля сдвига. Можно по аналогии ввести безразмерную тензорную восприимчивость

$$\beta_{mn} = \frac{\alpha_{mn}}{C_{mn}}, \tag{8}$$

которая характеризует вклад упругих диполей в изменение соответствующих упругих констант. Для межузельной гантели с ориентацией $\langle 010 \rangle$ она имеет вид

$$\beta_{mn}^{(010)} = \begin{pmatrix} 5.31 & -2.43 & 4.53 & & & \\ -2.43 & 4.83 & -2.43 & & & \\ -4.53 & -2.43 & 5.31 & & & \\ & & & 28.9 & & \\ & & & & 45.9 & \\ & & & & & 28.9 \end{pmatrix}. \tag{9}$$

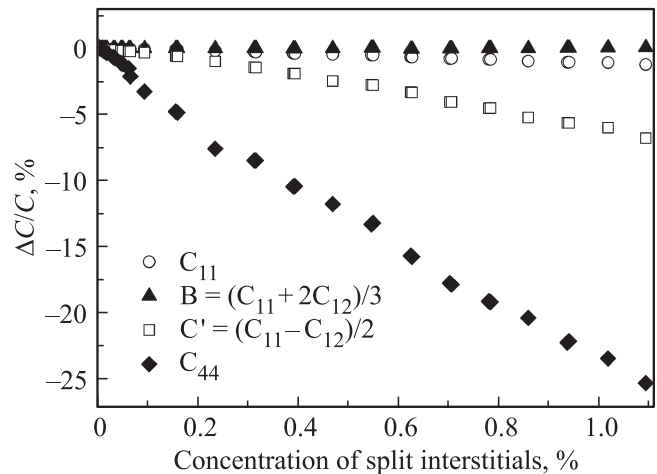


Рис. 3. Расчетные зависимости относительного изменения упругих модулей монокристалла меди от концентрации межузельных гантелей [18].

Для сравнения с экспериментальными данными нужно брать усредненное по сдвиговым компонентам β_{44} , β_{55} , β_{66} значение $\beta \sim 34.6$, так как следует ожидать примерно одинаковое число межузельных гантелей с ориентациями $\langle 100 \rangle$, $\langle 010 \rangle$ и $\langle 001 \rangle$. Полученный результат близок к экспериментальному значению $\beta = 28 \pm 5$, полученному по результатам измерений упругих модулей меди в результате мягкого нейтронного облучения монокристаллической меди при гелиевых температурах [28].

Тензорный характер параметра β позволяет качественно понять зависимости различных упругих модулей от концентрации межузельных гантелей (рис. 3), ранее представленные нами в работе [18]. Например, тензор объемной упругости B слабо меняется с концентрацией дефектов, так как для него величина параметра $\beta^B = (\beta_{11} + 2\beta_{12})/3 = 0.15$ близка к нулю. Для сдвигового модуля $C' = (C_{11} - C_{12})/2$ параметр $\beta^{C'} = (\beta_{11} - \beta_{12})/2 = 3.87$, а для модуля сдвига C_{44} величина Гранатовской сдвиговой восприимчивости $\beta^{C_{44}} = (\beta_{44} + \beta_{55} + \beta_{66})/3 = 34.7$, т.е. модуль сдвига C_{44} с ростом концентрации межузельных гантелей снижается гораздо сильнее остальных упругих модулей, в соответствии с экспериментом [28].

Аналогичный расчет по формулам (2) и (8) был проделан для вакансии. Для вакансии компоненты тензора упругой поляризуемости оказались почти на порядок меньше, чем для межузельной гантели:

$$\alpha_{mn}^{vac} = 10^3 \begin{pmatrix} 0.2 & & & & & \\ & 0.2 & & & & \\ & & 0.2 & & & \\ & & & 0.14 & & \\ & & & & 0.14 & \\ & & & & & 0.14 \end{pmatrix} \text{ GPa}, \tag{10}$$

Гранатовский параметр β для вакансии тоже на порядок меньше, чем для гантели:

$$\beta_{mn}^{\text{vac}} = \begin{pmatrix} 1.2 & & & & \\ & 1.2 & & & \\ & & 1.2 & & \\ & & & 1.92 & \\ & & & & 1.92 \end{pmatrix}. \quad (11)$$

Вышеописанный формализм можно использовать для анализа структурных дефектов в аморфном материале. Во-первых, используя соотношение (2), можно оценить концентрацию структурных дефектов в аморфной меди. Для этого нужно сравнить характерные значения тензоров поляризуемости монокристалла с одним дефектом и усредненной интегральной поляризуемостью аморфной меди $n\bar{\alpha}_{mn}^{\text{glass}}$. Для аморфной меди по формуле (2) (несущественные для дальнейшего обсуждения компоненты тензора были отброшены) имеем

$$n\bar{\alpha}_{mn}^{\text{glass}} = 10^3 \times \begin{pmatrix} 171.4 & -70.4 & -83.7 & & & \\ -70.4 & 164.7 & -67.1 & & & \\ -83.7 & -67.1 & 187.3 & & & \\ & & & 198.5 & 5.3 & 6.9 \\ & & & 5.3 & 183.9 & -4.1 \\ & & & 6.9 & -4.1 & 204.0 \end{pmatrix} \text{ GPa}. \quad (12)$$

Из сравнения характерных значений (среднее значение диагональных компонент) тензоров (12) и (6) можно оценить концентрацию в аморфной меди структурных дефектов, аналогичных межзельных гантелям в кристалле, как $n \sim 2.8\%$. Это значение концентрации структурных дефектов сопоставимо с результатом расчета $n \sim 4.4\%$ по формуле (7), выполненным нами ранее в работе [18].

Для расчета тензоров упругой поляризуемости отдельных структурных дефектов в аморфной меди, нужно сначала эти дефектные области определенным образом определить. Разумно использовать для этой цели отмеченное выше свойство упругих диполей — их высокую чувствительность к сдвиговой деформации. На рис. 4 представлены гистограммы модулей неоднородных смещений атомов модельной системы. Для кристалла (рис. 4, *a*) максимум гистограммы лежит вблизи нуля, т.е. лишь малая часть атомов испытывает неоднородные смещения. Такая ситуация сохраняется даже при увеличении концентрации дефектов до величины порядка 1%. Для аморфной меди (рис. 4, *b*) максимум гистограммы приходится на величину приблизительно 0.025 ангстрем, при этом лишь малая часть атомов практически не испытывает неоднородных смещений. Таким образом, большая часть атомов аморф-

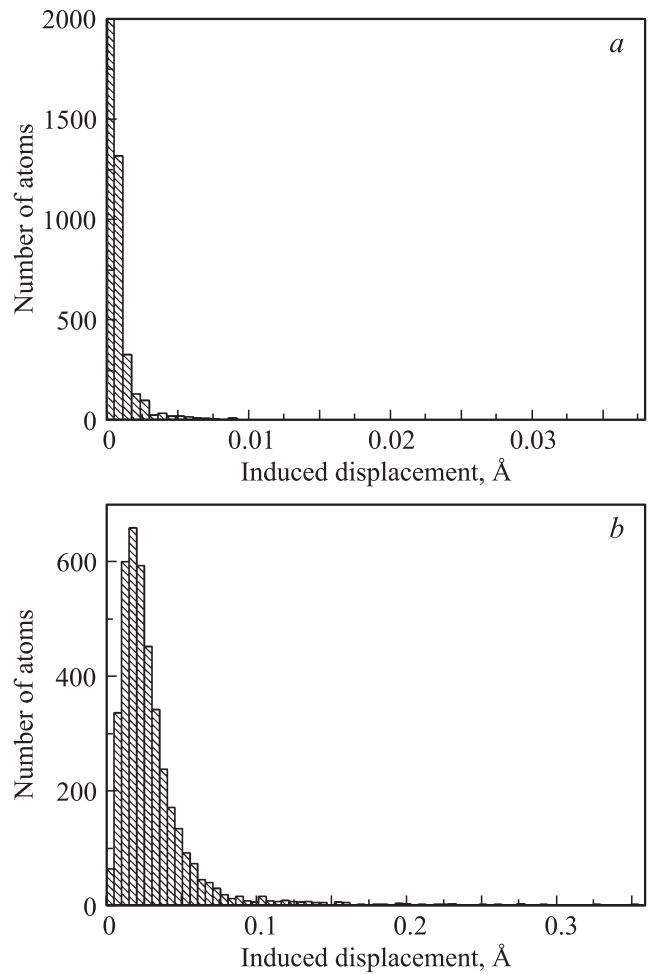


Рис. 4. Гистограммы модуля неоднородных смещений для кристалла с одним дефектом на 4000 атомов (*a*) и для аморфной меди (*b*).

ной меди при сдвиговой деформации приобретает дополнительные неоднородные смещения. Это подтверждает вышеуказанный вывод о том, что в аморфной меди содержится большое количество структурных дефектов.

Если предположить, что эти дефекты распределены равномерно по объему модельной системы, можно оценить характерный размер структурного дефекта. Зная из формулы (7) концентрацию дефектов (порядка 4.4%), легко вычислить, что на один структурный дефект приходится примерно 23 атома, что соответствует размеру дефекта $R_{\text{def}} \sim 1.2a$, где a — постоянная кристаллической решетки. Похожая оценка размеров локальных структурных неоднородностей использовалась в работе [29].

При оценке локального тензора поляризуемости по формуле (2) должен использоваться локальный тензор индуцированных напряжений, т.е. в формуле (5) суммирование осуществляется только по атомам, входящим в состав структурного дефекта. Для межзельной гантели

ориентации $\langle 010 \rangle$ получается

$$\alpha_{mn}^{(010)\text{local}} = 10^3 \times \begin{pmatrix} 0.62 & -0.32 & -0.48 & & & \\ -0.32 & 0.78 & -0.32 & & & \\ -0.48 & -0.32 & 0.62 & & & \\ & & & 0.55 & & \\ & & & & 0.90 & \\ & & & & & 0.55 \end{pmatrix} \text{ GPa.} \quad (13)$$

Значения сдвиговых компонент (а именно они представляют основной интерес) получаются примерно в 3.7 раза меньше, чем в соотношении (6), при этом сохраняется величина их анизотропии (отношение максимальной сдвиговой компоненты к минимальной). Это означает, что лишь около 30% неоднородных деформаций, создаваемых дефектом, заключены внутри области радиусом R_{def} . Оценка локального тензора поляризуемости получается довольно грубая, но появляется возможность сравнить характерные значения локального тензора поляризуемости для структурных дефектов в кристаллической и в аморфной меди.

Для корректного сравнения локальных тензоров $\alpha_{mn}^{\text{local}}$ необходимо, чтобы они были заданы в собственных координатных осях. Для тензора поляризуемости (13) это автоматически выполняется, а для локальных тензоров упругой поляризуемости дефектов в аморфной меди (для которых направления собственных осей неизвестны) можно приближенно оценить собственные значения, используя следующую процедуру: с мелким шагом поворачивается тензор сначала в плоскости $x-y$ и находится положение, в котором максимизируется модуль одной из компонент $\alpha_{44}^{\text{local}}$, $\alpha_{55}^{\text{local}}$, $\alpha_{66}^{\text{local}}$. Если, например, это оказалась компонента $\alpha_{66}^{\text{local}}$, то далее путем вращения в плоскости $y-z$ ищется положение, в котором максимизируется одна из двух оставшихся компонент $\alpha_{44}^{\text{local}}$, $\alpha_{55}^{\text{local}}$. Такая процедура не является точным алгоритмом приведения тензора четвертого ранга к собственным осям, но проверка ее на межзельной гантели в монокристалле показывает, что можно в итоге получить ориентацию, близкую к собственным осям. Вращение тензора поляризуемости выполнялось для его четырехиндексной формы согласно

$$\alpha'_{ijkl} = T_{ig}T_{jh}\alpha_{ghmn}T_{km}T_{ln}, \quad (14)$$

где T_{ij} — матрицы поворота, а далее опять сделан переход к Фойгтовской нотации.

В аморфной меди за ядро каждого структурного дефекта (по аналогии с межзельной гантелью в кристалле) принимались атомы с максимальным неоднородным смещением или пара атомов с большой величиной неоднородных смещений (например, не менее 25% от максимального неоднородного смещения). Структурные дефекты в аморфной меди были идентифицированы как группы атомов, расположенные внутри области размером R_{def} вблизи ядра дефекта. Для того, чтобы показать,

что эти группы атомов похожи на упругие диполи в кристалле, можно сравнить локальные тензоры поляризуемости дефектов в кристаллической и аморфной структурах.

Ниже приведены типичные локальные тензоры α_{mn} для нескольких структурных дефектов в аморфной меди.

$$\alpha_{mn}^{\text{glass local 1}} = 10^3 \times \begin{pmatrix} 2.67 & -0.53 & 2.0 & & & \\ -0.53 & 2.60 & -2.25 & & & \\ -2.0 & -2.25 & 3.54 & & & \\ & & & 2.63 & 0.17 & -0.68 \\ & & & 0.17 & 2.43 & -0.11 \\ & & & -0.68 & -0.11 & 4.71 \end{pmatrix} \text{ GPa.} \quad (15)$$

Как и ранее, здесь отброшены малые или несущественные для дальнейшего обсуждения компоненты тензора.

$$\alpha_{mn}^{\text{glass local 2}} = 10^3 \times \begin{pmatrix} 2.45 & -1.01 & -0.67 & & & \\ -1.01 & 4.03 & -0.69 & & & \\ -0.67 & -0.69 & 3.19 & & & \\ & & & 2.33 & -0.38 & -0.28 \\ & & & -0.38 & 1.83 & 0.20 \\ & & & -0.28 & 0.20 & 2.39 \end{pmatrix} \text{ GPa.} \quad (16)$$

$$\alpha_{mn}^{\text{glass local 3}} = 10^3 \times \begin{pmatrix} 2.85 & -1.10 & -1.27 & & & \\ -1.10 & 2.55 & 0.06 & & & \\ -1.27 & 0.06 & 0.14 & & & \\ & & & 3.37 & -0.15 & 0.30 \\ & & & -0.15 & 2.40 & 0.15 \\ & & & 0.30 & 0.15 & 1.89 \end{pmatrix} \text{ GPa.} \quad (17)$$

Анизотропия сдвиговых компонент для первого дефекта (15) в аморфной меди ~ 1.93 , что близко к величине ~ 1.64 анизотропии сдвиговых компонент тензора (13) для межзельной гантели в монокристалле. Для второго (16) и третьего (17) дефектов анизотропия ~ 1.31 и ~ 1.78 соответственно. Характерные величины тензора поляризуемости в аморфной меди заметно больше, чем в кристалле, что согласуется с данными предыдущей работы [18].

Мы полагаем, что упругие диполи в аморфной меди подобны межзельным дефектам в наиболее устойчивой гантельной конфигурации. При используемых величинах деформаций межзельные дефекты с ориентациями $\langle 110 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$ оказались неустойчивыми, т.е. происходил их переворот в ориентацию $\langle 010 \rangle$. При этом соответствующие компоненты тензора поляризуемости оказывались существенно большими за счет параэластической поляризуемости (скачкообразной переориентации упругих диполей под действием напряжений). В аморфной

меди исследованные дефекты при прилагаемых деформациях были устойчивы, т.е. для дефектов в аморфной меди такая переориентация не наблюдается и компоненты тензора поляризуемости, а также их анизотропия, составляют величины одного порядка по сравнению с таковыми для межузельной гантели ориентацией $\langle 010 \rangle$.

Для более полной картины можно сравнить локальные тензоры диаэластической податливости γ_{ij} для дефектов в кристаллической и аморфной меди,

$$\gamma_{mn}^{(010)local} = 10^{-3} \times \begin{pmatrix} 0.33 & -0.15 & -0.18 & & & \\ -0.15 & 0.31 & -0.15 & & & \\ -0.18 & -0.15 & 0.33 & & & \\ & & & 0.42 & & \\ & & & & 0.68 & \\ & & & & & 0.42 \end{pmatrix} \text{GPa}^{-1}. \quad (18)$$

Видно, что анизотропия сдвиговых компонент в тензорах (6), (13), (18) приблизительно одинакова и составляет ~ 1.6 . Для аморфной меди

$$\gamma_{mn}^{glass local 1} = 10^{-3} \times \begin{pmatrix} 0.81 & -0.40 & -0.35 & & & \\ -0.40 & 1.47 & -1.14 & & & \\ -0.35 & -1.14 & 1.50 & & & \\ & & & 21.34 & 0.81 & -5.50 \\ & & & 0.81 & 19.87 & -3.38 \\ & & & -5.50 & -3.38 & 38.86 \end{pmatrix} \text{GPa}^{-1}. \quad (19)$$

Характерные значения компонент тензора (19) примерно на порядок превосходят таковые для тензора (18). Таким образом, дефектные области в аморфной меди обладают высокой сдвиговой податливостью. Эти структурные дефекты анизотропны. Их сильная анизотропия указывает на то, что они имеют симметрию ниже кубической. Значения сдвиговых компонент тензора диаэластической податливости на порядок больше, чем для одиночных диполей в монокристалле. Это коррелирует с результатами работы [18], где было показано, что с увеличением концентрации междоузлий заметно растет характерная величина λ -тензора, и в аморфной меди она почти на порядок больше, чем в монокристалле, содержащем одиночные гантели.

Межузельные гантели, как отмечалось выше, являются частным случаем упругих диполей. Поэтому существование упругих диполей в модели некристаллической меди по существу подтверждает межузельную теорию [10], предполагающую плавление кристалла путем генерации межузельных гантелей и соответственно их наличия в стекле, полученном закалкой расплава. Мы полагаем, что именно присутствие значительных неоднородных смещений большей части атомов приводит к значительному снижению модуля сдвига некристаллической структуры $C_{44}^{glass} = 22.1 \text{ GPa}$ в сравнении с исходным кристаллом $C_{44}^{crystal} = 73.2 \text{ GPa}$.

В работе [30] путем анализа функций радиального распределения, нормированных на положение первого максимума, показано, что аморфные материалы разного химического состава имеют схожее расположение пиков, свидетельствующее о возможном единообразии структурных элементов аморфной системы. Поэтому есть основания ожидать применимости полученных качественных результатов моделирования простого однокомпонентного вещества к более широкому кругу многокомпонентных материалов. При этом исследование компьютерных моделей последних остается на повестке дня.

4. Заключение

Полученные результаты показывают, что в аморфной меди существуют малоразмерные структурные дефекты, характеризующиеся значительным анизотропным λ -тензором, обладающие большой сдвиговой податливостью и, таким образом, по своим характеристикам представляющие собой упругие диполи. Установлена связь тензора упругой поляризуемости с основным параметром межузельной теории — сдвиговой восприимчивостью. Анализ полученных результатов приводит к нетривиальному выводу, что сдвиговая деформация в некристаллической меди индуцирует дополнительные неоднородные смещения у большей части атомов аморфной структуры, чего не наблюдается для кристаллического состояния.

Путем анализа тензоров диаэластической поляризуемости и восприимчивости показано, что индуцированные деформации в области упругого диполя типа межузельной гантели не сводятся просто к повороту оси диполя, а являются более сложным процессом, в котором участвует порядка двух десятков атомов. Полученные зависимости упругих модулей от концентрации межузельных гантелей (согласно которым наибольшее снижение с ростом концентрации дефектов испытывают сдвиговые модули) согласуются с экспериментальными данными.

Список литературы

- [1] A. Hirata, L.J. Kang, T. Fujita, B. Klumov, K. Matsue, M. Kotani. *Science* **341**, 376 (2013).
- [2] L. Zhong, J. Wang, H. Sheng, Z. Zhang, S.X. Mao. *Nature* **512**, 177 (2014).
- [3] T. Egami, K. Maeda, V. Vitek. *Phil. Mag. A* **41**, 883 (1980).
- [4] D. Srolovitz, T. Egami, V. Vitek. *Phys. Rev. B* **24**, 6936 (1981).
- [5] T. Egami, V. Vitek. *J. Non-Cryst. Solids* **61–62**, 499 (1984).
- [6] A. Van den Beukel, S. Radelaar. *Acta Met.* **31**, 419 (1983).
- [7] A. Slipenyuk, J. Eckert. *Scripta Mater.* **50**, 39 (2004).
- [8] N. Richard, L. Martin-Samos, G. Roma, Y. Limoge, J. Crocombette. *J. Non-Cryst. Solids* **351**, 1825 (2005).
- [9] Y. Petrusenko, A. Bakai, I. Neklyudov, I. Mikhailovskij, S. Bakai, P. Liaw, L. Huang, T. Zhang. *J. Alloys Comp.* **504S**, S198 (2010).
- [10] A.V. Granato. *Phys. Rev. Lett.* **68**, 974 (1992).

- [11] A.V. Granato. *Eur. J. Phys.* **87**, 18 (2014).
- [12] A.V. Granato, D.M. Joncich, V.A. Khonik. *Appl. Phys. Lett.* **97**, 171 911 (2010).
- [13] K. Nordlund, Y. Ashkenazy, R.S. Averback, A.V. Granato. *Eur. Lett.* **71**, 625 (2005).
- [14] A.V. Granato, V.A. Khonik. *Phys. Rev. Lett.* **93**, 155 502 (2004).
- [15] А.С. Новик, Б.С. Берри. *Релаксационные явления в кристаллах*. Атомиздат, М. (1975). 472 с.
- [16] N.P. Kobelev, V.A. Khonik, A.S. Makarov, G.V. Afonin, Yu.P. Mitrofanov. *J. Appl. Phys.* **115**, 033 513 (2014).
- [17] V.A. Khonik, N.P. Kobelev. *J. Appl. Phys.* **115**, 093 510 (2014).
- [18] Р.А. Кончаков, В.А. Хоник, Н.П. Кобелев. *ФТТ* **57**, 844 (2015).
- [19] A.V. Granato. *J. Non-Cryst. Solids* **352**, 4821 (2006).
- [20] P.H. Dederichs, C. Lehmann, H.R. Schober, A. Scholz, R. Zeller. *J. Nucl. Mater.* **69–70**, 176 (1978).
- [21] J. Plimpton. *J. Comp. Phys.* **117**, 1 (1995).
- [22] H.W. Sheng, M.J. Kramer, A. Cadien, T. Fujita, M.W. Chen. *Phys. Rev. B* **83**, 134 118 (2011).
- [23] Р.А. Кончаков, В.А. Хоник. *ФТТ* **56**, 1316 (2014).
- [24] M.E. Tuckerman, J. Alejandre, R. Lopez-Rendon, A.L. Jochim, G.J. Martyna. *Phys. A* **39**, 5629 (2006).
- [25] S. Nose. *J. Chem. Phys.* **81**, 511 (1984).
- [26] W.G. Hoover. *Phys. Rev. A* **31**, 1695 (1985).
- [27] H.J.C. Berendsen, J.P.M. Postma, W.F. van Gunsteren, A. DiNola, J.R. Haak. *J. Chem. Phys.* **81**, 3684 (1984).
- [28] A.V. Granato. *Met. Mater. Trans. A* **29A**, 1837 (1998).
- [29] P. J. Steinhardt. *Phys. Rev. B* **28**, 784 (1983).
- [30] Z.W. Wu, M.Z. Li, W.H. Wang, K.X. Liu. *Nature Commun.* **6**, 1 (2015).