

ЯВЛЕНИЕ НЕЛИНЕЙНОЙ СУПРАТРАНСМИССИИ В КРИСТАЛЛЕ Pt_3Al ПРИ АКТИВНОМ ВНЕШНЕМ ВОЗДЕЙСТВИИ

Захаров П. В.¹, Ерёмин А. М.^{1, а}, Старостенков М. Д.², Чередниченко А. И.¹,
Кудряшова О. Б.³, Вдовин Р. С.¹

¹Алтайский государственный гуманитарно-педагогический университет им. В.М. Шукшина,
г. Бийск,

²Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова,
г. Барнаул,

³Институт проблем химико-энергетических технологий СО РАН, г. Бийск
E-mail: ^аeam77@yandex.ru

Методом молекулярной динамики рассмотрено явление нелинейной супратрансмиссии в кристалле Pt_3Al , заключающийся в передаче энергии на частотах вне фононного спектра кристалла. Модель представляла собой объемный гранецентрированный кубический кристалл, атомы которого взаимодействовали посредством многочастичного потенциала, полученного методом погруженного атома. Рассмотрены разные формы осцилляции области внешнего воздействия. Показана возможность транспорта энергии от поверхности кристалла вглубь посредством возбуждения квази-бризеров вблизи области воздействия и последующего их разрушения в кристалле и рассеяния запасенной на них энергии. Под квази-бризерами понимаются высокоамплитудные нелинейные колебания атомов легкой компоненты сплава на частотах вне фононного спектра кристалла.

1. Введение

Способы модификации приповерхностных слоев материалов очень часто базируются на обработке поверхности высокоинтенсивными внешними воздействиями в виде плазменного разряда, отжига, импульсов тока и т.д. Потоки энергии от поверхности кристаллов оказывают влияние на структурные и энергетические трансформации материалов, обеспечивая таким образом модификацию приповерхностных слоев вещества.

В данной работе нами рассмотрено явление передачи энергии при периодическом воздействии на поверхность кристалла Pt_3Al , имеющего запрещенную зону в фононном спектре кристалла. Воздействие осуществлялось в широком диапазоне частот как, входящих в фононный спектр, так и вне фононного спектра кристалла. Явление передачи энергии на частотах вне фононного спектра кристалла называют нелинейной супратрансмиссией [1]. Интерес к данному явлению не угасает как для относительно простых нелинейных систем [2], так и для более сложных систем и материалов [3-5]. В классическом подходе к супратрансмиссии имеется начальная величина амплитуды, при которой возникает данное явление. Однако в работе [3], на примере деформированного графена, показана возможность транспорта энергии посредством нелинейной супратрансмиссии без ограничений по минимальному значению амплитуды воздействия. Это мотивирует исследование данного явления для различных кристаллов и поиска механизмов передачи энергии в нелинейных системах.

Данный механизм трактуется возбуждением нелинейных локализованных мод большой амплитуды вблизи зоны воздействия – дискретных бризеров. Строго говоря, такие объекты следует называть квази-бризерами [6-12], в силу того, что они имеют конечное время жизни и не строгую периодичность по времени.

В работе рассматривается модель кристалла Pt_3Al . Интерес к данному сплаву вызван перспективой его применения в составе суперсплавов, а также его устойчивостью к высоким температурам. Кроме того, в работе [8] показана возможность возбуждения дискретных бризеров в данном материале потоком частиц и при термодинамическом равновесии [13].

2. Описание модели и методика компьютерного эксперимента

Рассматриваемая нами модель представляет собой объемный ГЦК кристалл стехиометрии A_3B , на примере Pt_3Al , который содержит $32 \cdot 10^3$ частиц (рис. 1), взаимодействующих посредством потенциала, полученного методом погруженного атома (ЕАМ-потенциал) [14].

Моделирование осуществлялось посредством пакета LAMMPS [15]. На модель ГЦК кристалла вдоль осей X , Y накладывались периодические граничные условия, вдоль оси Z – свободные. Полученная модель была разделена на 3 блока. Блок I представлял собой 3-4 слоя атомов, которые осуществляли колебания по гармоническому закону в соответствии с диапазонами частот и амплитуд колебаний атомов. Периодическое воздействие применялось ко всем атомам из блока I. Далее находился блок II – поглотитель энергии, по которому происходило оценивание поглощенной энергии кристаллом. В части III расчетной ячейки выделялся блок из 4-5 слоев атомов, жестко зафиксированных, выполняющих роль демпфера. Это обеспечивало отсутствие движения всей модели кристалла Pt_3Al , и делало модель более близкой к реальному кристаллу.

Были рассмотрены два вариант направления внешнего воздействия на кристалл. В первом случае кристалл ориентировался так, что ось Z соответствовала кристаллографическому направлению $\langle 110 \rangle$, во втором случае направлению $\langle 111 \rangle$.

При проведении расчетов шаг интегрирования составлял 1 фс при этом расчетное время каждого запуска составляло 1 пс, начальная температура расчетной ячейки задавалась 0 К. Для всех случаев рассматривался NVE-ансамбль.

На рис. 1, b приведена плотность фононных состояний рассматриваемой модели кристалла.

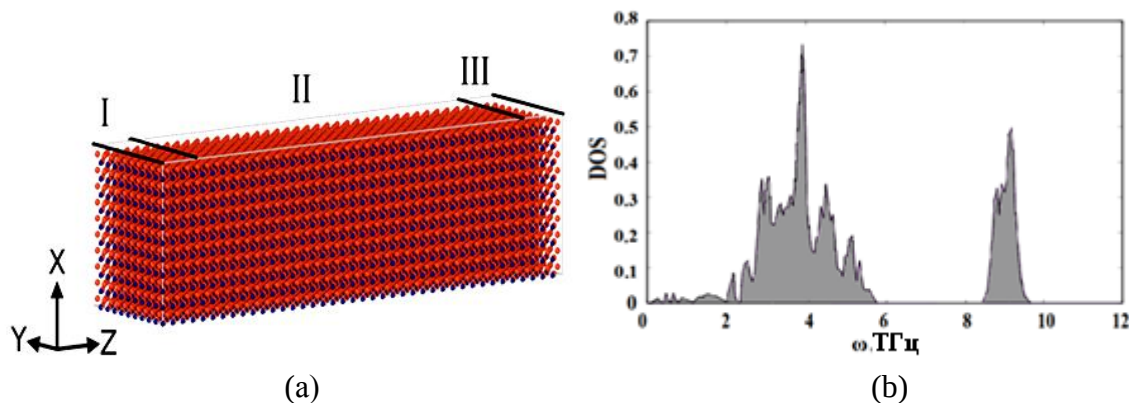


Рис. 1. а) Вид трехмерной модели кристалла Pt_3Al , ось X направлена вдоль кристаллографического направления $\langle -110 \rangle$, Y – $\langle 001 \rangle$, Z – $\langle 110 \rangle$. Цифрой I указана область периодического воздействия, II – область поглощения энергии, III – жестко зафиксированные атомы; б) плотность фононных состояний кристалла Pt_3Al .

Периодическое воздействие осуществлялось по следующим гармоническим законам:

$$Z_1(t) = A \sin(t) \quad (1)$$

$$Z_2(t) = A (\sin(\omega t))^2 \quad (2)$$

$$Z_3(t) = A |\sin(\omega t)|, \quad (3)$$

где для всех случаев A амплитуда внешнего воздействия, ω частота колебаний области I на рис. 1, а. Колебания производились по оси Z с частотами от 0.2 до 15 ТГц, и с различными амплитудами от 0.05 до 0.5 Å, что обеспечивалось за счет запуска скрипта 52 раза для каждого значения амплитуды. Такой диапазон позволяет охватить весь спектр малоамплитудных колебаний атомов для рассматриваемого кристалла.

Поглощенная энергия для атомов зоны II рассчитывалась посредством вычисления кинетической энергии атомов этого блока, затем полученное значение делилось на количество атомов в данном блоке с последующим усреднением. Такие расчеты проводились для каждого значения частоты и для обоих направлений воздействий.

3. Основные результаты и обсуждения

Фиксировалась поглощенная энергия в зависимости от частоты воздействия и амплитуды. В качестве примера на рис. 2. (а) и (б) представлены результаты для воздействия по закону (1). Исходя из данного графика можно отметить, что для амплитуд менее 0.2 Å эффект передачи энергии кристаллу отсутствовал в запрещенной зоне фононного спектра (рис. 1,б). Для амплитуд 0.2 ангстрем и более происходит передача энергии кристаллу, в том числе на частотах в запрещенной зоне фононного спектра. С увеличением амплитуды пик поглощения смещается глубже в запрещенные частоты фононного спектра кристалла, что свидетельствует об увеличении доли нелинейных мод в процессе передачи энергии. Активное возбуждение бризеров происходит в непосредственной близости с областью воздействия, аналогичные результаты нами были получены ранее для двумерных моделей данного сплава [16]. Отметим, что имеется пороговое значение амплитуды воздействия, с которого начинает проявляться данное явление, что характерно при классической трактовке эффекта супратрансмиссии.

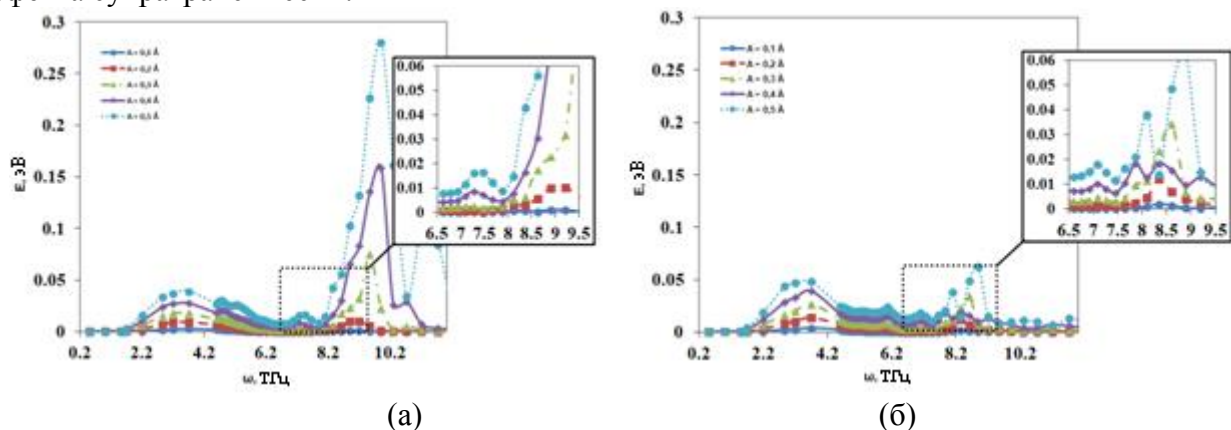


Рис. 2. Зависимость поглощенной энергии расчетной ячейкой на один атом за одну пикосекунду от частоты внешнего воздействия (1) и амплитуды. Для (а) воздействие осуществлялось вдоль кристаллографического направления $\langle 110 \rangle$, для (б), воздействие осуществлялось вдоль кристаллографического направления $\langle 111 \rangle$.

Полученные результаты для уравнений (1) – (3) имеют отличия. Далее проанализировано поведение первого слоя атомов вблизи области воздействия. Для этого выбиралось по одному атому Pt и Al в этом слое и отслеживалась их динамика с течением времени для всего диапазона частот. Для частот близких к оптической ветви фононного спектра по гармоническому закону (1) более активно возбуждаются колебания на атоме Al, что свидетельствует о возбуждении дискретных бризеров, в то время как для выражений (2) и (3), такой активности не наблюдается. При этом для уравнения (1) происходит локальное расширение вблизи области воздействия, что свидетельствует о возбуждении дискретных бризеров.

4. Заключение

Методом молекулярной динамики для кристалла Pt_3Al рассмотрен механизм явления нелинейной супратрансмиссии для различных форм и направлений внешнего воздействия. Было показано, что транспорт энергии посредством данного механизма возможен вдоль направлений соответствующих кристаллографическим направлениям существования квазибризера в кристалле и при воздействии по синусоидальному закону, в противном случае эффект сводился к минимуму. Полученные данные свидетельствуют, что вклад квазибризеров в передачу энергии по кристаллу возрастает при увеличении амплитуды воздействия. Результаты проведенного исследования могут быть полезны при лазерной обработке материалов и обработке поверхности низкоэнергетической плазмой, а также в радиационном материаловедении.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ и Алтайского края в рамках научного проекта № 18-42-220002.

Литература

1. Geniet F., Leon J. Energy Transmission in the Forbidden Band Gap of a Nonlinear Chain // Phys. Rev. Lett. – 2002. – Vol. 89. – P. 134102.
2. Khomeriki R., Lepri S., Ruffo S. Nonlinear supratransmission and bistability in the Fermi-Pasta-Ulam model // Phys Rev E Stat Nonlin Soft Matter Phys. – 2004. – Vol. 70. – P. 066626.
3. Evazzade I., Lobzenko I. P., Korznikova E. A., Ovid'ko I. A. et al. Energy transfer in strained graphene assisted by discrete breathers excited by external ac driving // Physical Review B. – 2017. – Vol. 95, No. 3. – P. 035423.
4. Yousefzadeh B. and Phani A. S. Supratransmission in a disordered nonlinear periodic structure // Journal of Sound and Vibration. – 2016. – Vol. 380. – P. 242-266.
5. Leon J. Nonlinear supratransmission as a fundamental instability // Physics Letters A. – 2003. – Vol. 319. – P. 130–136.
6. Chechin G. M., Dzhelauhova G. S., Mehonoshina E. A. Quasibreathers as a generalization of the concept of discrete breathers // Physical Review E. – 2006. – Vol. 74. – P. 036608.
7. Старостенков М.Д., Захаров П.В., Медведев Н.Н. Изучение посредством двумерной модели возможности существования нелинейных локализованных колебаний на границе биметалла Pt-Al // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2011. – Т. 8, № 8. – С. 40–44.
8. Захаров П. В., Старостенков М. Д., Ерёмин А. М., Корзникова Е. А., Дмитриев С. В. Возбуждение щелевых дискретных бризеров в кристалле состава A3B потоком частиц // Физика твердого тела. – 2017. – Т. 59, № 2. – С. 217–222.
9. Захаров П. В., Дмитриев С. В., Старостенков М. Д., Ерёмин А. М., Корзникова Е. А. Стационарные квазibriзеры в монокристаллических металлах с ГЦК-структурой // ЖЭТФ. – 2017. – Т. 152, Вып. 5, № 11. – С. 1073–1080.
10. Захаров П. В., Старостенков М. Д., Ерёмин А. М., Чередниченко А. И. Дискретные бризеры в кристалле CuAu // Письма о материалах. – 2016. – Т. 6, № 4(24). – С. 294-299.
11. Zakharov P. V., Medvedev N. N., Starostenkov M. D., Eremin A. M. Prospects for the use of dynamic discrete breathers in nanofibers crystals stoichiometry A3B with the structure of L12 // 2015 International Siberian Conference on Control and Communications (SIBCON). Proceedings. – Omsk: Omsk State Technical University. Russia, Omsk, May 21–23, 2015. IEEE Catalog Number: CFP15794-CDR.
12. Medvedev N. N., Starostenkov M. D., Zakharov P. V., Dmitriev S. V. Exciting discrete breathers of two types in a computer 3D model of Pt₃Al crystal // Technical physics letters. – 2015. – Т. 41, No 10. – P. 994–997.
13. Старостенков М. Д., Потекаев А. И., Дмитриев С. В. и др. Динамика дискретных бризеров в кристалле Pt₃Al // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2015. – Т. 58, № 9. – С. 136–140.
14. Zhou X. W., Johnson R. A. and Wadley H. N. G. Misfit-energy-increasing dislocations in vapor-deposited CoFe/NiFe multilayers // Physical Review B. – 2004. – Vol. 69. – P. 144113.
15. LAMMPS Molecular Dynamics Simulator [Electronic resource]: <http://lammps.sandia.gov/>.
16. Медведев Н. Н., Старостенков М. Д., Захаров П. В., Пожидаева О. В. Локализованные колебательные моды в двумерной модели упорядоченного сплава Pt₃Al // Письма в Журнал технической физики. – 2011. – Т. 37, № 3. – С. 7–15.