

С.Н. Бедарев, Д.Д. Рудер

Исследование влияния одноосной деформации ГЦК кристалла серебра на характер фононоподобных возбуждений

Введение. Исследование влияния деформации на характер структурной перестройки решетки определяет многие пластические и прочностные свойства металлов. Известно, что характер фононоподобных возбуждений заметно меняется при деформации кристаллической решетки. Поэтому изучение фононоподобных возбуждений дает возможность оценить критическое значение деформации в различных нагруженных состояниях.

В данной работе рассмотрено моделирование одноосной деформации гранецентрированного кубического кристалла (ГЦК) серебра с помощью метода молекулярной динамики. В качестве модели межатомного взаимодействия выбрана разработанная авторами модель, основанная на методе внедренного атома [1].

Метод внедренного атома. В методе внедренного атома функция энергии связи состоит из двух слагаемых, первое слагаемое отвечает за притяжение атомов, а второе – за их отталкивание.

$$E_{ges} = \sum_i F_i(\rho_i) + \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} \phi_{ij}(r_{ij}). \quad (1)$$

В качестве $F_i(r)$ и $\phi_{ij}(r)$ выбраны следующие аналитические функции:

$$F_i(\rho_i) = C \rho_i^n \ln(\rho_i); \quad (2)$$

$$\phi(r_{ij}) = B r_{ij}^2 \exp\left(-\frac{r_{ij}}{R_B}\right). \quad (3)$$

Здесь ρ_i – кристаллическая плотность, являющаяся суммой атомных электронных плотностей:

$$\rho_i = \sum_j \rho_{i,j}. \quad (4)$$

Для аппроксимации атомных плотностей используется выражение следующего вида:

$$\rho_{i,j} = A r_{ij}^2 e^{\frac{r_{ij}}{R_a}}. \quad (5)$$

В выражениях (2), (3) и (5) A, B, C, n, R_a, R_B – параметры модели. Определение параметров

модели проводилось привязкой к экспериментальным характеристикам металла: равновесному объему, энергии связи, модулям упругости. Значения определенных параметров модели для серебра приведены в таблице.

Параметры модели для серебра

	$A, 1/a_B^2$	$B, Ry/a_B^2$	C, Ry	R_a, a_B	R_B, a_B	n
Ag	47,622	244,168	-0,075	0,761	0,407	0,12

Динамическая матрица. Для идеального кристалла, в том числе подверженного однородной деформации, частоты нормальных колебаний атомов кристалла можно определить как собственные значения динамической матрицы [2]:

$$D_{\alpha\beta}(\vec{k}) = \frac{1}{M} \sum_l \Phi_{\alpha\beta}(l) e^{-2\pi i \vec{k} \cdot \vec{r}(l)}, \quad (6)$$

где M – масса атома; коэффициент $\Phi_{\alpha\beta}(l)$ представляет собой силу, действующую в направлении оси α на атом, расположенный в точке $\vec{r}(l)$, в том случае, когда атом, находившийся в точке $\vec{r}(0)$, смещен вдоль оси β на отрезок единичной длины.

Динамический структурный фактор. В процессе деформации при приближении к критическим состояниям, при которых происходит пластическая деформация или разрушение, в кристалле происходят внутренние статические смещения атомов, которые нарушают или изменяют симметрию идеального кристалла.

В этом случае невозможно определить характер колебаний атомов и частоты нормальных колебаний, пользуясь динамической матрицей. Однако можно воспользоваться методом анализа динамического структурного фактора, который имеет пики при частотах, совпадающих с собственными частотами колебаний атомов.

Форм-фактор корреляционной функции поток-поток для соответствующей моды колебаний можно записать в виде [3]

$$S(\vec{k}, \omega) = \int dt e^{i\omega t} \sum_{ij} \left\langle \left(\vec{n} \cdot \vec{v}_i(t) \right) \left(\vec{n} \cdot \vec{v}_j(0) \right) e^{-i\vec{k} \cdot (\vec{r}_i(t) - \vec{r}_j(0))} \right\rangle, \quad (7)$$

где \vec{n} – орт вектора поляризации волны; $\vec{r}_i(t)$ и $\vec{v}_i(t)$ – радиус-вектор и скорость i -го атома в момент времени t .

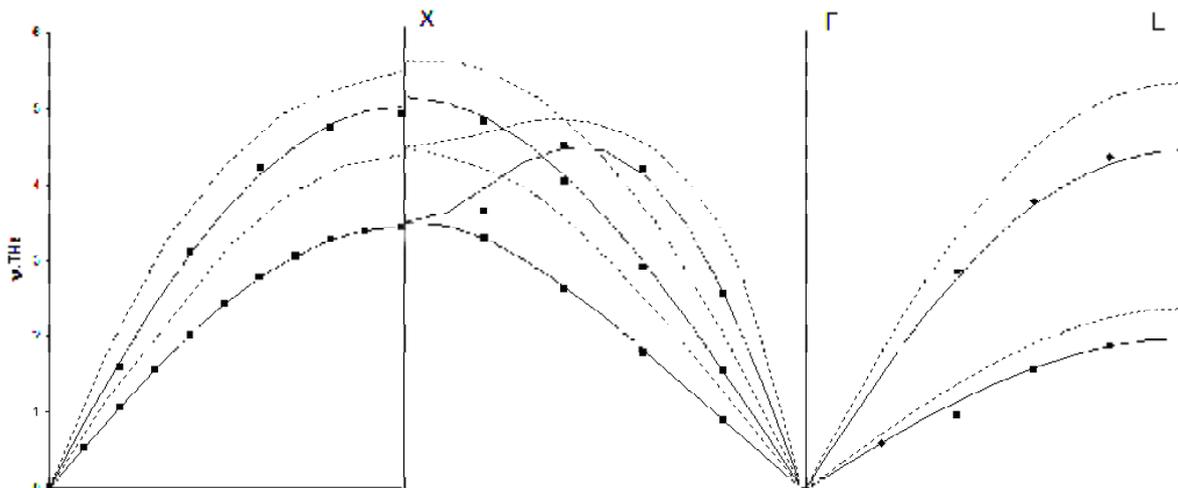


Рис. 1. Дисперсионные зависимости для серебра

Метод молекулярной динамики. Для моделирования движения атомов в кристалле использован метод молекулярной динамики [4]. В исходном состоянии МД-ячейка представляет собой прямоугольный параллелепипед, стороны которого параллельны декартовым осям координат – X, Y, Z. Атомы располагаются в узлах ГЦК решетки. Кристаллографические направления [100] параллельны оси OX, [010] параллельны оси OY, а направления [001] – оси OZ. Моделирование одноосной деформации производилось смещением слоев [001] вдоль оси OZ, при этом параметр деформации $\gamma = a/a_0$, где a – параметр ГЦК решетки в деформированном состоянии; a_0 – параметр ГЦК решетки в недеформированном состоянии. При решении уравнений движения атомов использовались периодические граничные условия. Температура в системе поддерживалась равной $T=10$ К, временной шаг равен $h=5$ фс, число атомов в системе $N=864$. Общее число шагов моделирования составляло 1300. На первых 300 шагах производилась нормализация системы. В процессе выполнения программы вычислялся динамический структурный фактор $S(\vec{k}, \omega)$.

На рисунке 1 представлен график зависимости частоты фононоподобных возбуждений для ГЦК кристалла серебра в направлениях [100], [110], [111]. Сплошной линией обозначены результаты, полученные с помощью расчета динамической матрицы, пунктирной – результаты, полученные на основании расчета динамического структурного фактора, точками обозначены экспериментальные данные [5, р. 639]. Из рисунка 1 видно, что наблюдается хорошее

соответствие фоннных спектров, рассчитанных с помощью динамической матрицы, экспериментальным результатам. Частоты фононоподобных возбуждений, полученные с помощью динамического структурного фактора, лежат несколько выше экспериментальных точек.

На рисунке 2 представлен график дисперсионной зависимости в направлении [001] при различных степенях деформации γ для продольной волны. Из рисунка 1 видно, что при растяжении $\gamma > 1$ частота фононоподобных возбуждений уменьшается. Относительное изменение частоты при значении $\gamma = 1,13$ составляет около 36%. При сжатии $\gamma < 1$ частота увеличивается. Относительное изменение частоты при значении $\gamma = 0,85$ составляет примерно 13%. При значении $\gamma = 1,15$ продольная ветвь имеет сложный вид, что, вероятно, свидетельствует о структурных изменениях, происходящих в МД-ячейке.

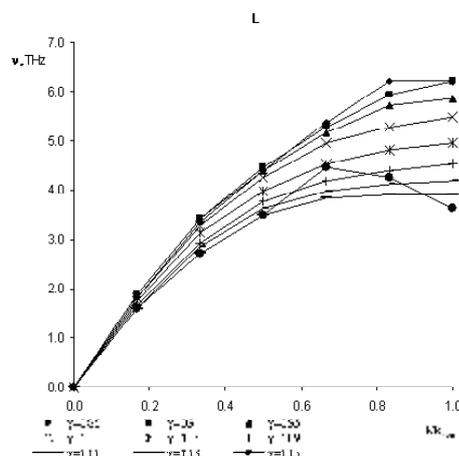


Рис. 2. График зависимости частоты фононоподобных возбуждений от волнового вектора для продольной волны в направлении [001]

