

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  $\rho_i$  – 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  $\alpha$  на атом, расположенный в точке  $\vec{r}(l)$ , в том случае, когда атом, находившийся в точке  $\vec{r}(0)$ , смещен вдоль оси  $\beta$  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  $t$ .

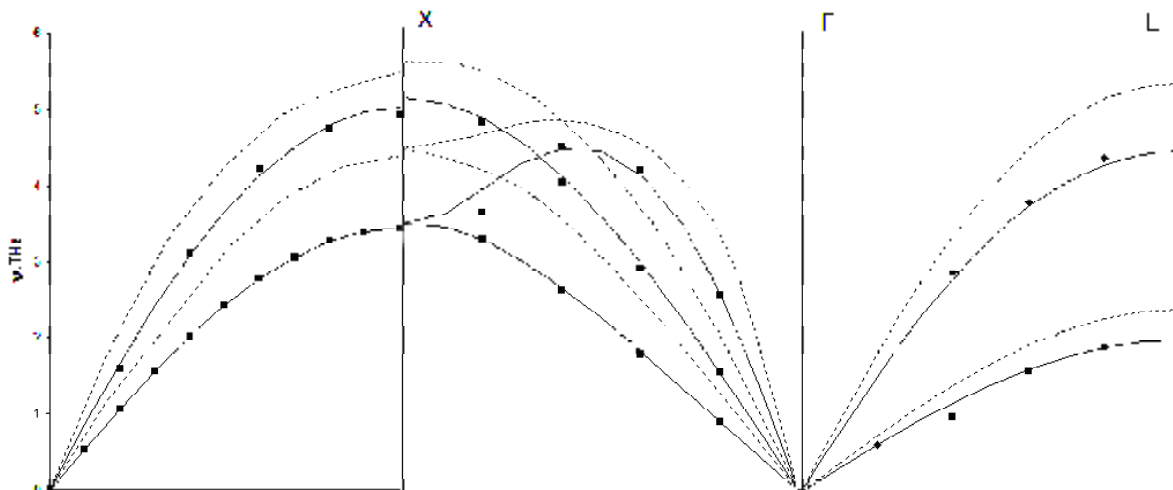


Рис. 1. Дисперсионные зависимости для серебра

**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 фононных 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  $\gamma$  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.

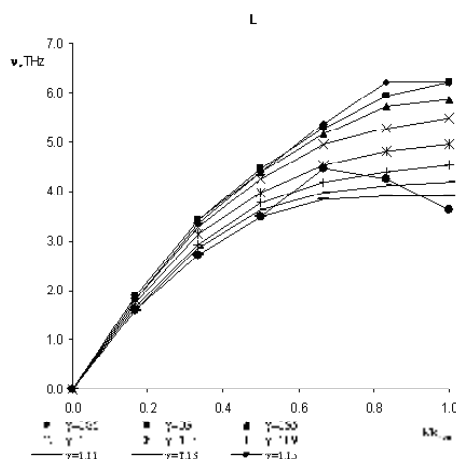


Рис. 2. График зависимости частоты фононоподобных возбуждений от волнового вектора для продольной волны в направлении [001]

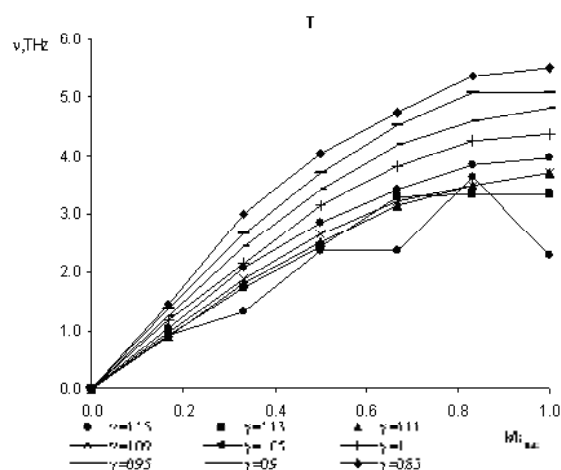


Рис. 3. График зависимости частоты фононоподобных возбуждений от волнового вектора для поперечной волны в направлении [001]

На рисунке 3 представлен график дисперсионной зависимости в направлении [001] при различных степенях деформации  $\gamma$  для поперечной волны. Из рисунка 2 видно, что при растяжении  $\gamma > 1$  частота фононоподобных возбуждений уменьшается. Относительное измене-

ние частоты при значении  $\gamma = 1,13$  составляет около 30%. При сжатии  $\gamma < 1$  частота увеличивается. Относительное изменение частоты при значении  $\gamma = 0,85$  составляет порядка 43%. При значении  $\gamma = 1,15$ , кроме акустической ветви, в спектре присутствует и оптическая ветвь (рис. 3). Присутствие оптической ветви свидетельствует о том, что в моделируемой ячейке при  $\gamma = 1,15$  атомы расположены не в узлах идеальной кристаллической решетки. Другими словами, произошли структурные изменения, которые являются следствием приближения деформации к критическому значению.

**Заключение.** 1. В работе проведено компьютерное моделирование одноосной деформации вдоль направления [001] ГЦК кристалла серебра и рассчитаны частоты собственных колебаний атомов решетки с помощью динамической матрицы и динамического структурного фактора.

2. Показано, что с ростом деформации частоты колебаний значительно меняются. Относительное изменение частоты для продольной волны и поперечных волн составляет порядка 36 и 30% соответственно для степени деформации  $\gamma = 1,13$ .

## Литература

1. Daw M.S., Baskes M.I. Phys. Rev. – 1984. – V. B29.
2. Марадудин А. Динамическая теория кристаллической решетки в гармоническом приближении : пер. с англ. / А. Марадудин, Э. Монтролл, Дж. Вейсс. – М., 1965.
3. Бетгер Х. Принципы динамической теории решетки. – М., 1986.
4. Allen M.P. Computer simulation of Liquids / M.P. Allen, D.J. Tildesley. – Oxford, 1989.
5. Kamitakahara W.A., Brockhouse B.N. Phys. Lett. – 1969. – V. A29.