

## МЕХАНИЗМ ГЕТЕРОФАЗНОГО ПЛАВЛЕНИЯ ДЛЯ СИСТЕМ С ПОТЕНЦИАЛАМИ МЕЖЧАСТИЧНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЛЕННАРДА-ДЖОНСА И МОРЗЕ

© 2014 А. Н. Шебанов, Е. В. Богатиков, Е. Н. Бормонтов

Воронежский государственный университет, Университетская пл., 1, 394006 Воронеж, Россия  
e-mail: me144@phys.vsu.ru

Поступила в редакцию 13.02.2014 г.

**Аннотация.** Методом молекулярной динамики исследуется согласованное движение тепловых колебаний атомов для систем с потенциалами межчастичного взаимодействия Леннарда-Джонса и Морзе. Установлено, что для данных систем в качестве механизма формирования гетерофазных флуктуаций можно рассматривать перераспределение энергии атомов между потенциальной и кинетической составляющими при согласованном движении атомов.

**Ключевые слова:** динамика кристаллической решетки, молекулярная динамика, гетерофазные флуктуации, коллективные процессы.

### ВВЕДЕНИЕ

Как показано в ряде работ [1—3], для кристаллической решетки при температуре, близкой к температуре плавления, характерно формирование областей локального повышения температуры и образование гетерофазных флуктуаций — областей локального проплавления. Эти процессы протекают в сильно неравновесных условиях, когда в межатомном взаимодействии особую роль играет ангармонизм межатомного взаимодействия. Как показано в работе [4], при этом реализуются условия возникновения особых состояний согласованного движения атомов. Согласованное движение атомов приводит к перераспределению энергии между потенциальной и кинетической составляющими, что и вызывает локальный разогрев кристаллической решетки. В работе [4] численное исследование коллективных процессов в динамике кристаллической решетки проводилось методом молекулярной динамики для двумерной модели аргона с потенциалом взаимодействия Леннарда-Джонса. Преимущество такой модели — возможность оценки геометрических параметров областей согласованного движения атомов (благодаря большой протяженности модели). Тем не менее остается открытым вопрос о применимости полученных результатов к трехмерному случаю, а также к другим видам потенциала взаимодействия. Особый интерес представляют металличе-

ские системы, для которых экспериментально наблюдались закономерности гетерофазного плавления в случае тонких пленок [5].

Целью настоящей работы является обобщение механизма формирования гетерофазных флуктуаций посредством локальной согласованности колебания атомов на случай трехмерных молекулярных кристаллов, а также трехмерных металлических кристаллов.

### МЕТОДИКА

В работе проводилось молекулярно-динамическое моделирование следующих систем:

1) Трехмерный аргон в гранцентрированной решетке размером  $15 \times 15 \times 15$  элементарных ячеек при температуре  $0.9T_{пл}$  (где  $T_{пл}$  — температура плавления). Использовался потенциал взаимодействия Леннарда-Джонса:

$$V(r) = 4\epsilon \left[ \left( \frac{r_0}{r} \right)^{12} - \left( \frac{r_0}{r} \right)^6 \right],$$

где  $\epsilon = 1.04 \cdot 10^{-2}$  эВ,  $r_0 = 3.405$  Å.

2) Трехмерный никель в гранцентрированной кубической решетке размером  $15 \times 15 \times 15$  элементарных ячеек при температуре  $0.9T_{пл}$ . Использовался потенциал взаимодействия Морзе:

$$V(r) = D \left( \exp[-2b(r - r_\epsilon)] - \exp[-b(r - r_\epsilon)] \right)$$

где  $b = 1.4199$  Å<sup>-1</sup>,  $D = -0.4205$  эВ,  $r_\epsilon = 2.866$  Å.

При моделировании использовались периодические граничные условия. Для интегрирования уравнений движения использовался алгоритм Верле в скоростной форме.

Задание начальных условий и выбор шага интегрирования производились в соответствии с методикой, изложенной в работе [6]. Для оценки степени согласованности между колебаниями атомов использовалась методика, изложенная в работе [4]. Методика основана на подходе, который включает следующие шаги:

1) Введение семейства фаз при помощи вейвлетного преобразования [7]:

$$W(a, b) = |a|^{-1/2} \int X(t) \psi^* \left( \frac{t-b}{a} \right) dt,$$

$$\phi_a(b) = \arg W(a, b),$$

где  $X(t)$  — траектория движения атома,  $\psi$  — базисный вейвлет,  $\phi_a$  — фаза колебания, определенная для временного масштаба  $a$ .

2) Выделение на усредненном вейвлетном спектре мощности (спектр строится для траекторий колебания всех атомов) локальных максимумов, которые отвечают временным масштабам, на которых происходит формирование областей локальной согласованности колебаний, а также временным масштабам фонных колебаний решетки.

3) Идентификация согласованности колебаний производится отдельно для каждого выделенного временного масштаба при помощи коэффициента согласованности:

$$\Phi = \sqrt{(\sin \Delta\phi)^2 + (\cos \Delta\phi)^2},$$

где  $\Delta\phi$  — разность фаз, знак  $\bar{\phantom{x}}$  означает усреднение по времени. Рост коэффициента  $\Phi$  от 0 до 1 свидетельствует о повышении степени согласованности колебаний.

4) Построение зависимости потенциальной и кинетической энергии атома от степени согласованности его движения с соседними атомами. Идентификация временных масштабов, соответствующих формированию локальной согласованности колебаний, и масштабов, соответствующих фонным колебаниям решетки.

## РЕЗУЛЬТАТЫ

При моделировании кристаллического аргона были получены следующие результаты. По вейвлетному спектру мощности были определены характерные периоды колебаний атомов в системе. Временные масштабы менее 1 пс — это собствен-

ный период колебаний атомов. Временные масштабы 10 пс и более соответствуют фонным колебаниям. Промежуточный диапазон соответствует локальным согласованным состояниям. На рис. 1 приведена зависимость кинетической ( $E$ ) и потенциальной ( $U$ ) энергии атомов от степени согласованности их движения с соседними атомами (для временного масштаба 5 пс). Зависимости имеют монотонно убывающий характер. Это означает, что энергия перераспределяется от атомов, участвующих в согласованном движении, к атомам, в таком движении не участвующим. Осцилляции энергии для атомов с коэффициентом согласованности  $\Phi$  от 0 до 0.3 вызваны тем, что количество таких атомов мало и недостаточно для надежной стати-

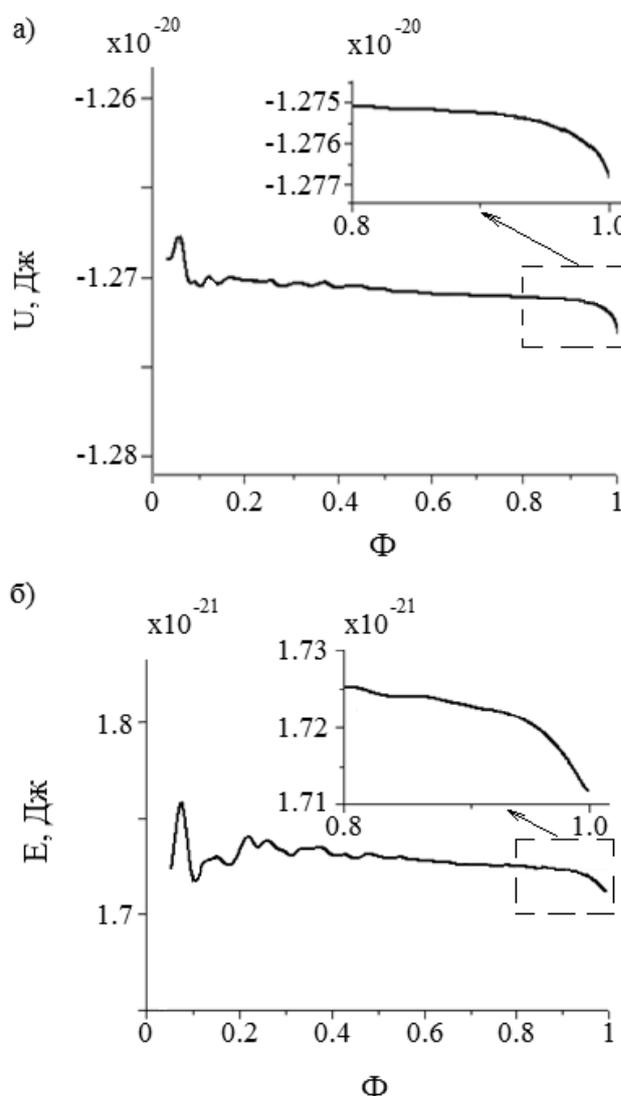


Рис. 1. Перераспределение энергии при изменении степени согласованности движения атомов в молекулярно-динамической модели кристалла аргона

стики. Уменьшение потенциальной энергии объясняется уменьшением среднего межатомного расстояния для областей согласованного движения атомов (рис. 2).

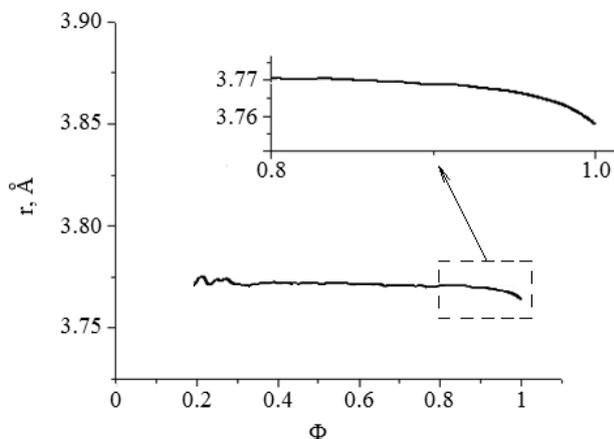


Рис. 2. Уменьшение межатомного расстояния для атомов аргона, участвующих в согласованном движении

При моделировании кристаллического никеля были получены следующие результаты. Для данной системы локальные согласованные состояния идентифицируются на временных масштабах 50—100 фс (при временных масштабах собственных колебаний менее 10 фс). Подобно аргону потенциальная энергия атомов, участвующих в согласованном движении, уменьшается (рис. 3а). При этом кинетическая энергия таких атомов возрастает (рис. 3б). Это означает, что за время существования согласованного состояния энергия не успевает передаваться соседним атомам. Таким образом, в отличие от аргона, повышается температура тех областей кристалла, которые участвуют в согласованном движении.

Таким образом, можно представить следующий механизм формирования гетерофазных флуктуаций. С ростом температуры колебания атомов приобретают сильно ангармонический характер. Время жизни фононов становится конечным, и появляется новый тип коллективных движений атомов: происходит формирование кластеров небольших размеров (~2—10 атомов), в пределах которых атомы движутся с большой степенью согласованности конечное время (обычно порядка  $10^1$ – $10^2$  средних периодов колебаний атома). Межатомное расстояние в таких кластерах меньше среднего по системе. Это приводит к уменьшению потенциаль-

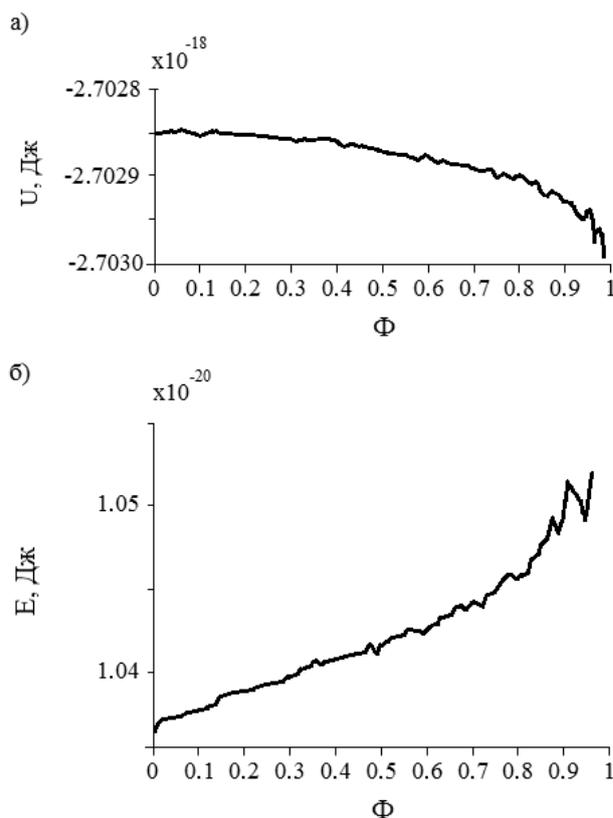


Рис. 3. Перераспределение энергии при изменении степени согласованности движения атомов в молекулярно-динамической модели кристалла никеля

ной энергии атомов, которая перераспределяется в кинетическую энергию атомов, то есть приводит к образованию областей локального повышения температуры кристалла. Данный механизм сохраняется для систем с различным видом межчастичного потенциала.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Khait Y. L.* // Phys. Stat. Sol (b). 1985. V. 131. P. 17—22.
2. *Кацнельсон М. И., Трефилов А. В.* // ФММ. 1987. Т. 64. № 4. С. 629—642.
3. *Bityutskaya L. A., Mashkina E. S.* // Phase Transitions. 2000. V. 71. P. 317—330.
4. *Шебанов А. Н., Богатиков Е. В., Битюцкая Л. А. и др.* // Нелинейный мир. 2010. № 11. С. 703—708.
5. *Громов Д. Г., Гаврилов С. А.* // ФТТ. 2009. Т. 51. № 10. С. 2012—2021.
6. *Шебанов А. Н., Богатиков Е. В.* // Конденсированные среды и межфазные границы. 2011. Т. 13. № 4. С. 510—514.
7. *Короновский А. А., Храмов А. Е.* // Письма в ЖЭТФ. 2004. Т. 79. № 7. С. 391—395.

*Шебанов Александр Николаевич* — ассистент кафедры физики полупроводников и микроэлектроники, Воронежский государственный университет; тел.: (473) 2208481, email: me144@phys.vsu.ru

*Богатиков Евгений Васильевич* — к. ф.-м. н., доцент кафедры физики полупроводников и микроэлектроники, Воронежский государственный университет; тел.: (473) 2208481, e-mail: me144@phys.vsu.ru

*Бормонтов Евгений Николаевич* — д. ф.-м. н., профессор, заведующий кафедрой физики полупроводников и микроэлектроники; Воронежский государственный университет; тел.: (473) 2208481, e-mail: me144@phys.vsu.ru

*Shebanov Alexander N.* — Assistant of the Physic of Semiconductor and Microelectronics Chair, Voronezh State University; tel.: (473) 2208481, email: me144@phys.vsu.ru

*Bogatikov Eugenie V.* — Cand. Sci. (Phys.-Math.), Associate Professor of the Physic of Semiconductor and Microelectronics Chair, Voronezh State University; tel.: (473) 2208481, e-mail: me144@phys.vsu.ru

*Bormontov Eugenie N.* — Dr. Sci. (Phys.-Math.), Professor, Head of the Physic of Semiconductor and Microelectronics Chair, Voronezh State University; tel.: (473) 2208481, e-mail: me144@phys.vsu.ru