

МИНОБРНАУКИ РОССИИ

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«САРАТОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИМЕНИ Н.Г.ЧЕРНЫШЕВСКОГО»

Кафедра радиофизики и нелинейной динамики

**Взаимодействие локализованных колебательных нелинейных мод с
дефектами кристаллической решетки**

АВТОРЕФЕРАТ МАГИСТЕРСКОЙ РАБОТЫ

студента 2 курса 2232 группы
направления 03.04.03 Радиофизика
Института физики
Колесникова Ивана Дмитриевича

Научный руководитель

профессор, д.ф.-м.н., профессор _____ Т.Е. Вадивасова

Зав. кафедрой радиофизики

и нелинейной динамики,

д.ф.-м.н., доцент _____ Г.И. Стрелкова

Саратов 2023 г.

Введение

Металлы, состоящие из жестких связанных слоев, заслуживают большого внимания в современном сообществе, поскольку они демонстрируют различные механизмы деформации.

Воздействие начального высокоинтенсивного направленного импульса на атомы материала приводит к локализации энергии в виде нелинейных мод, и представляет собой возмущение, движение которого превышает скорость звука.

Кристаллическая решетка является основой твердых тел, которая определяет их механические, электрические и оптические свойства. Однако, кристаллическая решетка не является идеальной и содержит дефекты, которые могут значительно влиять на свойства материалов.

Дефекты кристаллической решетки могут возникать из-за различных причин, например, в результате механических напряжений, радиационных повреждений или химических реакций. Они могут изменять свойства материала, влиять на его механическую прочность, электропроводность и оптические свойства. Одним из методов изучения свойств твердых тел является исследование их колебательных мод.

Взаимодействие этих мод с дефектами кристаллической решетки при больших амплитудах может приводить к различным эффектам, таким как изменение формы колебаний, частоты колебаний, изменение амплитуды колебаний, генерация новых мод и т.д.

Взаимодействие локализованных колебательных нелинейных мод с дефектами кристаллической решетки является важной проблемой в физике твердого тела.

Тема исследовательской работы была выбрана для того, чтобы дать подробное представление об молекулярном исследовании динамики эффектов, вызванных высокоскоростными нагрузками, распространяющимися в дефектной трехмерной решетке.

Актуальность состоит в том, что изучение процессов позволит получить детальное описание нелинейных эффектов в распределении энергии и массы

внутри материала при высокоинтенсивном воздействии, это даст возможность повысить спектр применимости материалов в разработке современной техники.

Целью данной работы является моделирование и исследование динамики колебательных нелинейных мод, возбужденных высокоскоростными нагрузками в трехмерном в материале.

Для достижения поставленной цели нам необходимо решить следующую задачу, которая состоит в подробном исследовании поведения и анализе механизмов деформации при высокоскоростных нагрузках.

Основное содержание работы

Моделью изучения данной работы является материал со сложной пространственной ОЦК структурой - вольфрам. Для моделирования и исследования используется метод молекулярной динамики с использованием модельного потенциала межатомного взаимодействия W в программном пакете LAMMPS.

С помощью научного программного обеспечения для визуализации и анализа данных атомического моделирования Ovito, можно увидеть ОЦК структуру и проследить образование сверхзвуковых и дозвуковых краудионов и динамику ее движения, а также происходящие в ней изменения. Атомы вольфрама рассматриваются как материальные точки, которые связаны с помощью жесткого потенциала. Исследование производится в декартовой системе координат.

Вольфрам в реакторе всегда эксплуатируется при ненулевых температурах. По этой причине в настоящей работе основное внимание уделяется изучению особенностей краудионов, возбуждаемых в ОЦК решетке вольфрама, нагретой до нескольких конечных температур.

Все исследуемые решетки состоят из 82944 атомов с следующих размеров: решетка вольфрама $391,58 \times 61,53 \times 53,29 \text{ \AA}$ с межатомным расстоянием $a = 2,719 \text{ \AA}$. Граничными условиями являются периодические по трем координатам направления. Следует отметить, что в данной решетке в

отличие от ГЦК-металлов межатомные расстояния в разных кристаллографических направлениях неодинаковы.

На первом этапе решетку нагревают с помощью Термостата Носа-Гувера:

$$H(P, R, p_s, s) = \sum_i \frac{p_i^2}{2ms^2} + \frac{1}{2} \sum_{i,j,i \neq j} U(r_i - r_j) + \frac{p_s^2}{2Q} + gkT \ln(s),$$

После этого этапа мы сохраняем состояние структуры металла, а именно координаты, мгновенные скорости, кинетическую и потенциальную энергию всех атомов и интегрируем в эту решетку с помощью NVE (постоянное число атомов (N), объем (V) и энергия (E)) термодинамический ансамбль. Мы возбуждаем в нагретой решетке 2-краудион, пиная направленный локализованный импульс mv_0 (где v_0 — начальная скорость) на 2 соседних атома в одной и той же кристаллографической плоскости вдоль кристаллографического направления $\langle 111 \rangle$ в соответствии со схемой, представленной на рисунке

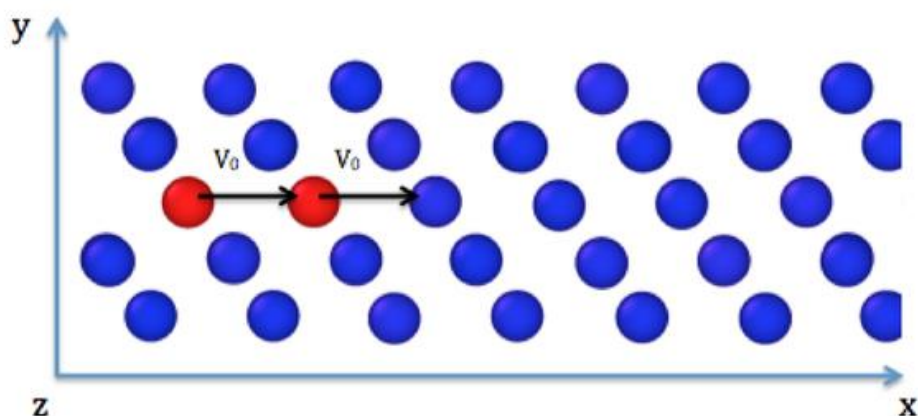


Рисунок 1 Схема начальных условий для индуцирования 2-краудиона в вольфраме путем воздействия с начальными скоростями на пары атомов в одном плотно упакованном ряду. Атомы, находящиеся под воздействием, окрашены в красный цвет, в то время как остальные невозмущенные атомы - в синий. Показана только часть решетки.

Атомы вольфрама в исследуемых решетках постоянно демонстрируют малоамплитудные хаотические тепловые колебания, обусловленные конечной

температурой решетки. Интенсивность теплового движения возрастает при больших температурах.

Этот эффект приводит к передачи энергии от атома к атому при прохождении краудиона. Тепловые колебания слабо влияют на движение дозвукового краудиона, который представляет собой подвижную локализованную моду колебаний, формирующуюся вокруг межузельного атома.

Распространение краудиона можно разделить на две стадии: сверхзвуковую и дозвуковую скорость движения. Следовательно, краудион, проходящий со сверхзвуковой скоростью, мы можем назвать сверхзвуковым краудионом, а второй — дозвуковым краудионом.

На начальном этапе времени происходит распространение сверхзвукового краудиона, который трансформируется в солитон, а вокруг межузельного атома формируется дозвуковой краудион.

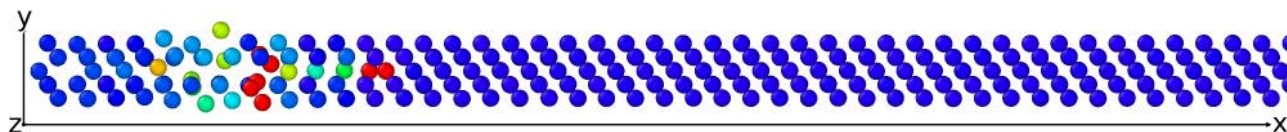


Рисунок 2 Снимок части решетки, где распространяется сверхзвуковой краудион, инициированный импульсом с $v_0 = 10$ км/с., $t = 0,17$ пс, $T = 50$ К

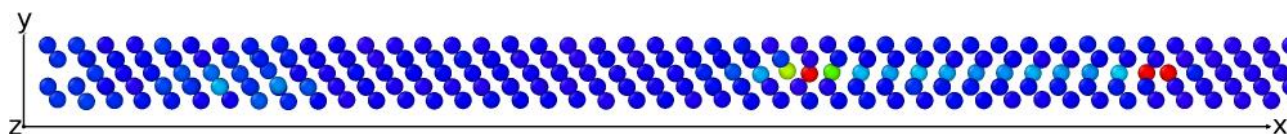


Рисунок 3 Снимок части решетки, где распространяется сверхзвуковой краудион, инициированный импульсом с $v_0 = 10$ км/с., $t = 0,83$ пс, $T = 50$ К

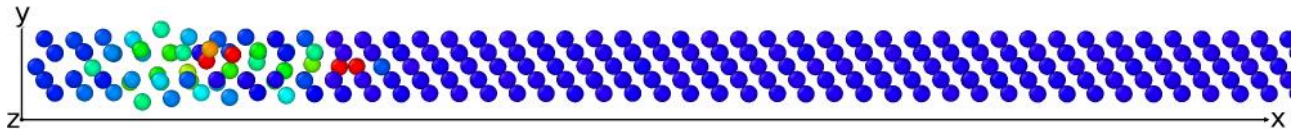


Рисунок 4 Снимок части решетки, где распространяется сверхзвуковой краудион, инициированный импульсом с $v_0 = 10$ км/с., $t = 0,17$ пс, $T = 200$ К

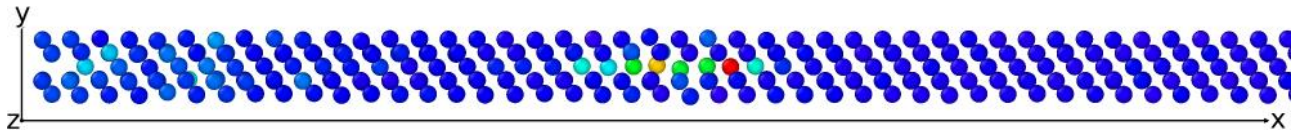


Рисунок 5 Снимок части решетки, где распространяется дозвуковой краудион, инициированный импульсом с $v_0 = 10$ км/с., $t = 0,83$ пс., $T = 200$ К

Из изображенных рисунков можно проследить, что краудион движется быстрее в более холодной решетке и замедляется в более нагретой. Снимки решетки при моменте времени $t=0.83$ пс демонстрируют, когда дозвуковые краудионы формируются во всех трех решетках, а сверхзвуковые краудионы уже исчезли. Мгновенные положения дозвуковых краудионов заметно различаются.

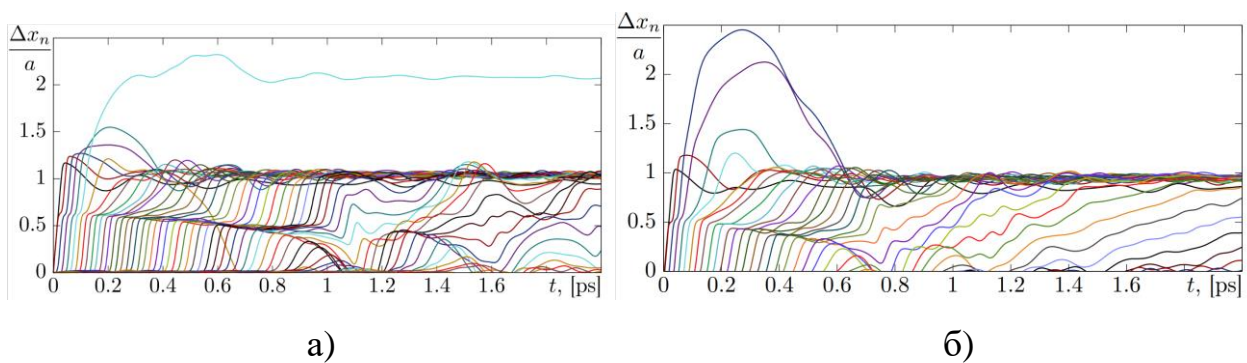


Рисунок 6. Относительные смещения атомов при распространении краудиона вдоль плотно упакованного ряда ОЦК решетки вольфрама, возбужденного импульсом $v_0 = 10$ км/пс на каждый атом ряда а) $T = 50$ К б) $T = 200$ К

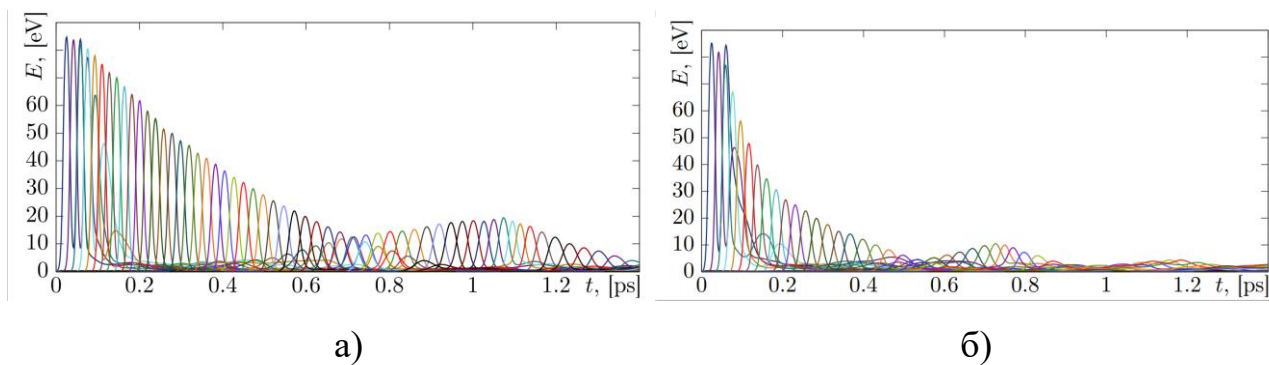


Рисунок 7 Эволюция полной энергии атомов во времени при распространении краудиона вдоль плотно упакованного ряда ОЦК решетки вольфрама, возбужденного импульсом $v_0 = 10$ км/пс на каждый атом ряда а) $T = 50\text{K}$ б) $T = 200\text{K}$

Молекулярно-динамические исследования возбуждения и распространения краудиона на ОЦК-решетке вольфрама, нагретой до конечной температуры, показывают, что рост температуры решетки значительно уменьшает расстояние сверхзвукового распространения краудиона. При этом динамика краудиона не претерпевает заметных качественных изменений.

Массоперенос сопровождается смещением на одно межатомное расстояние каждого атома вдоль кристаллографического направления, вдоль которого движется краудион.

Энергия рассеивается с примерно одинаковой интенсивностью в достаточно холодной решетке ($T = 50\text{ K}$), тогда как для более горячих решеток ее можно разделить на две стадии дозвуковая и сверхзвуковая. В процессе образования краудиона происходит интенсивное рассеяние энергии, после чего диссипация становится заметно слабее. Поскольку время жизни сверхзвуковых краудионов сильно зависит от температуры решетки то, чем горячее решетка, тем раньше образуются дозвуковые.

Атомы вольфрама при экстремальных температурах обладают достаточно большой кинетической энергией и демонстрируют довольно сильные хаотические тепловые колебания большой амплитуды.

Очевидно, что эти условия не оптимальны для индуцирования движения краудионов кристаллической решетке. Однако наше исследование показывает,

что в определенном диапазоне начальных скоростей v_0 возможно индуцировать как солитон, так и краудион.

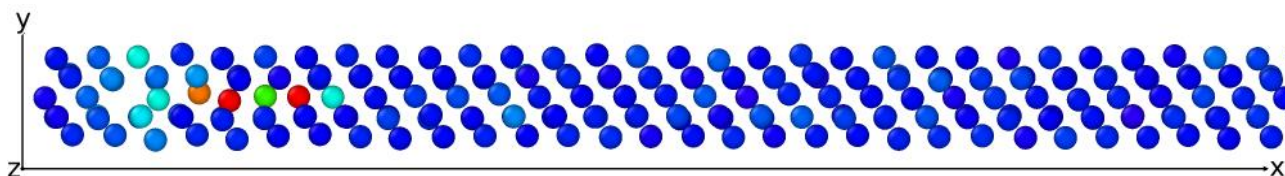


Рисунок 8 Снимок части решетки, где распространяется сверхзвуковой краудион, инициированный импульсом с $v_0 = 3.5$ км/с., $t = 0,12$ пс., $T = 1000$ К

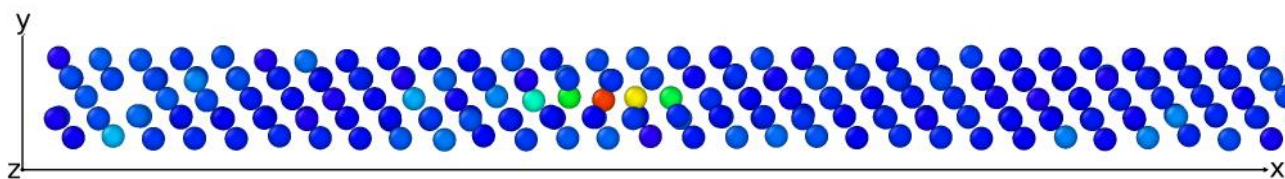


Рисунок 9 Снимок части решетки, где распространяется сверхзвуковой краудион, инициированный импульсом с $v_0 = 4.2$ км/с., $t = 1$ пс., $T = 1000$ К

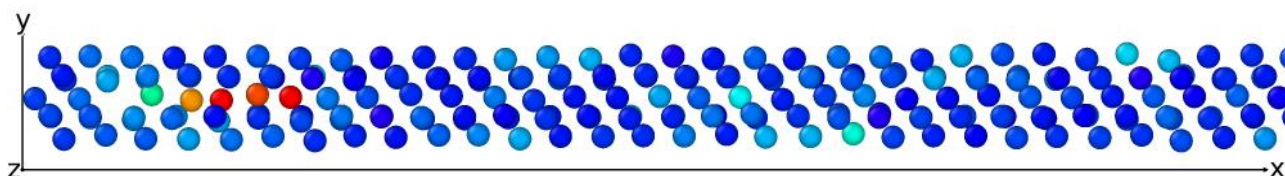


Рисунок 10 Снимок части решетки, где распространяется сверхзвуковой краудион, инициированный импульсом с $v_0 = 3.5$ км/с., $t = 1$ пс., $T = 1500$ К

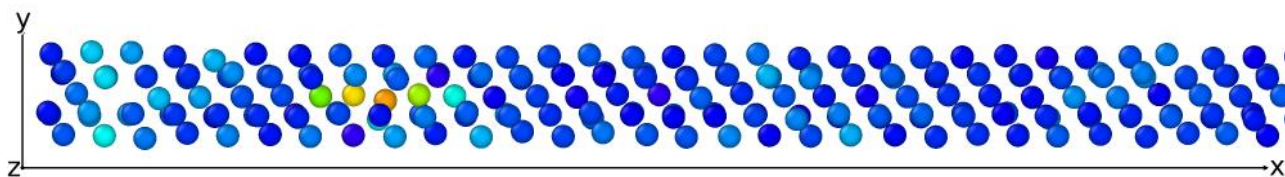


Рисунок 11 Снимок части решетки, где распространяется сверхзвуковой краудион, инициированный импульсом с $v_0 = 4.2$ км/с., $t = 1$ пс., $T = 1500$ К

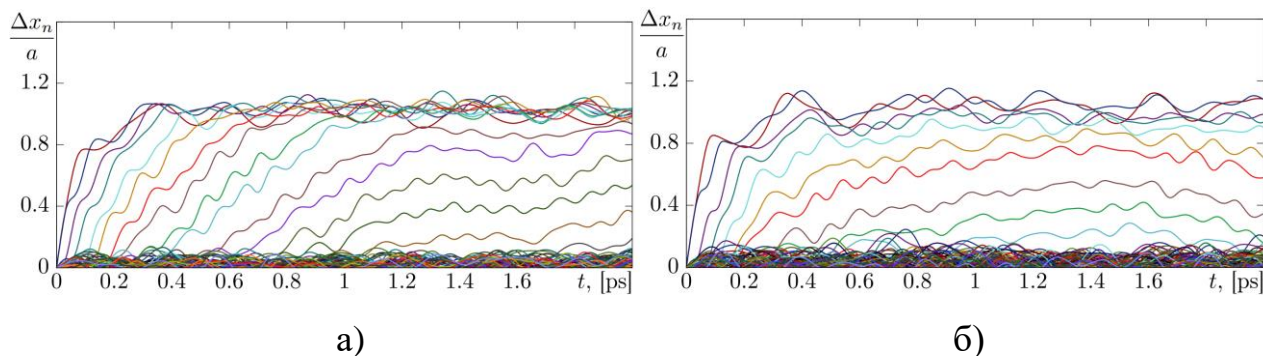


Рисунок 12 Нормированные смещения атомов при распространении краудиона вдоль плотноупакованного ряда ОЦК решетки вольфрама $v_0 = 3.5$ км/с. Т = 1000 К б) Т = 1500 К

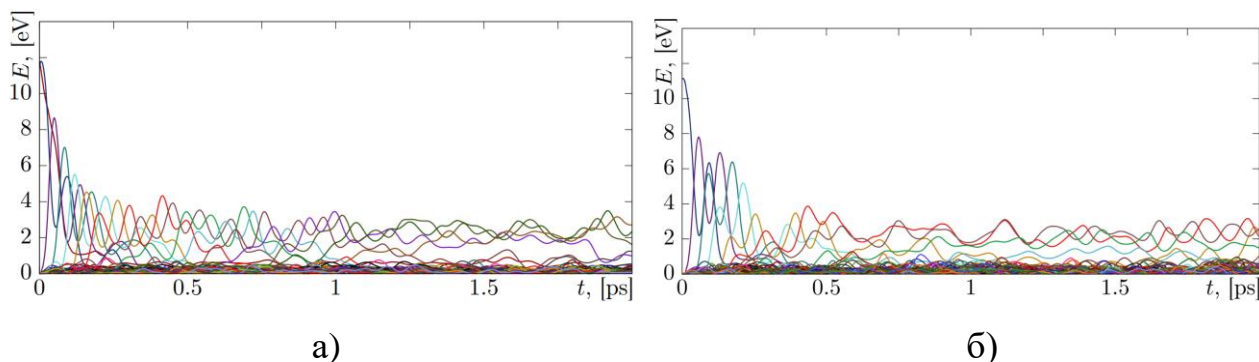


Рисунок 13 Эволюция полной энергии атомов во времени при распространении краудиона вдоль плотно упакованного ряда ОЦК решетки вольфрама, возбужденного импульсом $v_0 = 3.5$ км/пс на каждый атом ряда а) Т = 1000К б) Т = 1500К

Энергетический уровень атомов после сверхзвуковой стадии краудиона распространения заметно выше в случае температуры Т = 1000 К. Это связано с тем, что для данного случая имеет место возникновение и движение дозвукового подвижного краудиона, а при Т = 1500 К дозвуковой краудион остается неподвижным. Поэтому уровень остаточной энергии для этой температуры определяется выражением энергии фоновых колебаний, что достаточно велико для столь высокой температуры решетки.

Результаты представлены для всех изучаемых случаев показывает, что энергия краудиона очень быстро убывает на начальной стадии его образования. до $t < 0,08$ пс. Это связано с тем, что начальные условия не соответствуют

точному решению краудиона. Следовательно, краудион формируется в начальный период времени. Этот процесс сопровождается излучением высокой энергии. Кроме того, когда краудион движется со сверхзвуковой скоростью, он также интенсивно излучает свою энергию через фононы.

Заключение

В ходе данной работы методами численного моделирования было проведено исследование количественных структурных параметров и каналов рассеяния энергии в ОЦК решетке вольфрама при различных температурах, подвергнутой высокоскоростному нагружению. Показано, что краудионы могут быть образованы путем подачи начального импульса на два атома.

Установлено, что краудионы появляются после переходного периода, который составляет около 0.2 - 0.3 пс. Сверхзвуковая стадия движения краудиона в горячей решетке достаточно короткая и краудион проходит менее десятка межатомных расстояний в пределах этой стадии. Это связано с невыполнением условия самофокусировки краудиона в горячей решетке за счет высокоамплитудных тепловых колебаний атомов.

Был исследован один из основных механизмов массопереноса в сильно горячих решетках, который осуществляется спомощью дозвукового краудиона. Он представляет собой подвижную локализованную колебательную моду, которая возникает вокруг межузельного атома после окончания сверхзвукового распространения краудиона.

Построены графики зависимостей среднего смещения от времени и зависимость полной энергии от времени. Установлен диапазон скоростей для вольфрама, где потенциал W не теряет смысл.

Полученные результаты способствуют фундаментальному пониманию процессов массо- и энергопереноса в кристалле решетки нагретой до очень высокой температуры.