

ДИНАМИКА ДЕЛОКАЛИЗОВАННЫХ КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ МОД В ВОЛЬФРАМЕ

А. Ю. Моркина¹, И. И. Тувалев², Е. А. Корзникова³

¹alinamorkina@yandex.ru, ²illumnus102@gmail.com, ³elena.a.korznikova@gmail.com

ФГБОУ ВО «Уфимский университет науки и технологий» (УУНИТ)

Аннотация. Моделирование кристаллических решеток в условиях, далеких от равновесных, в настоящее время является все более актуальным предметом исследований и требует уверенности в справедливости применяемых межатомных потенциалов в широком диапазоне отклонений атома от равновесного состояния. Чтобы выполнить такую оценку для моделирования вольфрама, являющегося материалом-кандидатом для различных ядерных применений, мы проанализировали нелинейное поведение решетки, используя несколько межатомных потенциалов, имеющихся в библиотеке LAMMPS. Были рассчитаны амплитудно-частотные характеристики и теплоёмкость нелинейных делокализованных колебательных мод - точных решений уравнений движения атомов, геометрия которых определяется симметрией решетки.

Ключевые слова: молекулярная динамика, ядерные материалы, делокализованные колебательные моды.

ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время процесс использования материалов все чаще связывают с их переходом в состояния, далекие от равновесных. В этом случае поведение материала начинает сильно отличаться от такового в обычных условиях. Поскольку молекулярная динамика является одним из важнейших инструментов современного материаловедения, реалистичность используемых межатомных потенциалов является важным вопросом в новых условиях. В случае экстремального воздействия нелинейный характер межатомных взаимодействий начинает вносить существенный вклад в динамику решетки. В качестве примера высокоэнергетических воздействий можно привести ударные нагрузки, ионные бомбардировки, краудсионные движения и нелинейные делокализованные моды [1, 2].

Одним из следствий такого воздействия является наличие аномально высокой концентрации точечных дефектов, влияющих на микроструктуру и свойства рассматриваемых материалов. Для моделирования явлений, связанных со значительными атомными сдвигами, необходимы межатомные потенциалы, действующие в широком диапазоне отклонений атома от состояния равновесия.

Другим примером далеко неравновесного состояния материала являются делокализованные нелинейные колебательные моды (ДНКМ). ДНКМ являются симметрично обусловленными точными решениями уравнений движения узлов нелинейной решетки независимо от типа взаимодействия между узлами и при любых амплитудах. При этом атомы во время жизни этих мод колеблются с очень большой амплитудой и частотой [3]. Другой важной особенностью делокализованных мод является их способность к локализации по механизму модуляционной неустойчивости. В этом случае вся энергия системы может быть сосредоточена на нескольких дискретных бризерах (ДБ), способных влиять на макроскопические характеристики кристалла [4]. Ранее делокализованные колебательные моды были обнаружены для ГЦК-кристаллов и двумерных кристаллов, где также исследовалась их модуляционная неустойчивость

[5]. Также было показано, что локализованные осцилляции могут влиять на структуру материалов и содержащиеся в них дефекты. При взаимодействии ДБ, движущейся в плотноупакованном ряду, с такими дефектами, как вакансии и поверхностный атом, снижается потенциальный барьер для миграции вакансий и отрыва атома от поверхности [6].

Как показано в работе [7], с течением времени мода проявляет модуляционную неустойчивость, после чего появляется один или несколько дискретных бризеров, очень слабо излучающих энергию, после чего со временем приходит к тепловому равновесию.

Моды и их модуляционная неустойчивость могут влиять на упругие константы кристалла и макроскопические свойства, в частности, на теплоемкость. Однако не все потенциалы могут хорошо описывать динамику атомов при модуляционной неустойчивости и появлении дискретных бризеров.

Поэтому одна из целей нашего исследования — проверить потенциалы и найти те, которые будут реалистично отражать динамику атомов.

Моделирование делокализованных нелинейных мод в различных решетках с различным межатомным потенциалом позволяет оценить справедливость эмпирического описания межатомного взаимодействия в широком диапазоне отклонений атома от положения равновесия. Между тем молекулярно-динамические исследования радиационных явлений в вольфраме и ванадии представляют особый интерес в связи с тем, что W был выбран в качестве диверторного материала в термоядерном реакторе ИТЭР. Вольфрам имеет ОЦК решетку. Пятнадцать делокализованных колебательных мод для последних кристаллов были обнаружены Чечиным с соавторами [8].

Целью данной работы было оценить амплитудно-частотные зависимости нескольких делокализованных мод в вольфраме, чтобы определить набор межатомных потенциалов, пригодных для моделирования далеких от равновесных состояний в материале.

ДЕТАЛИ МОДЕЛИРОВАНИЯ

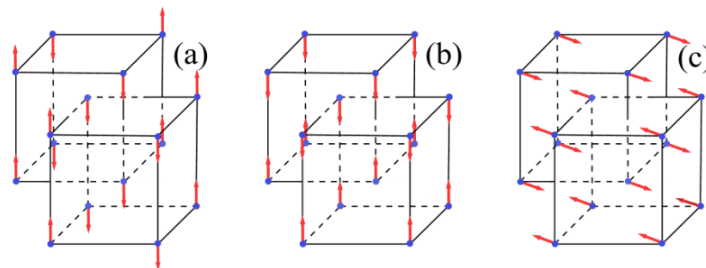


Рис. 1. Начальные смещения атомов, используемые для возбуждения однокомпонентных делокализованных мод в ОЦК-решетке вольфрама: мода 1 (а), мода 13 (б), мода 15 (в). Все атомы имеют нулевые начальные скорости. Все векторы смещения имеют одинаковую длину. Все ненулевые компоненты смещения имеют одинаковую величину.

Стрелки в данном случае показывают смещения атомов из положений равновесия, которые использовались для задания начальных условий, порождающих ту или иную моду колебаний. Все векторы смещения имеют одинаковую длину, равную нулю. Начальные скорости всех атомов равны нулю.

Важно отметить, что для этих режимов характерно вовлечение в колебательный процесс всех атомов. Это, как правило, приводит к тому, что амплитудно-частотная характеристика этой моды будет иметь жесткий тип нелинейности. Помимо доли атомов, участвующих в движении, можно отметить также различный вклад мод в анизотропию кристалла. Так, некоторые моды (1, 13) характеризуются направленным движением атомов в определенных плоскостях и, как правило, могут приводить к анизотропии кристаллической решетки в течение жизни моды. Такие режимы, как правило, проявляют пониженную склонность к локализации.

ОЦК-решетка W с параметром решетки $a = 3,160 \text{ \AA}$ и межатомным расстоянием $1,414 \text{ \AA}$. Общее количество атомов 2000. Используются периодические граничные условия. Атомная

масса вольфрама составляет 183,84 а.е.м. Моделирование проводилось с помощью пакета программ LAMMPS и анализировались следующие потенциалы: *eam.fs*, *eam2.fs.*, *eam3.fs*, *eam4.fs*, *team.fs*, *Olsson* и *Zhou*.

РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

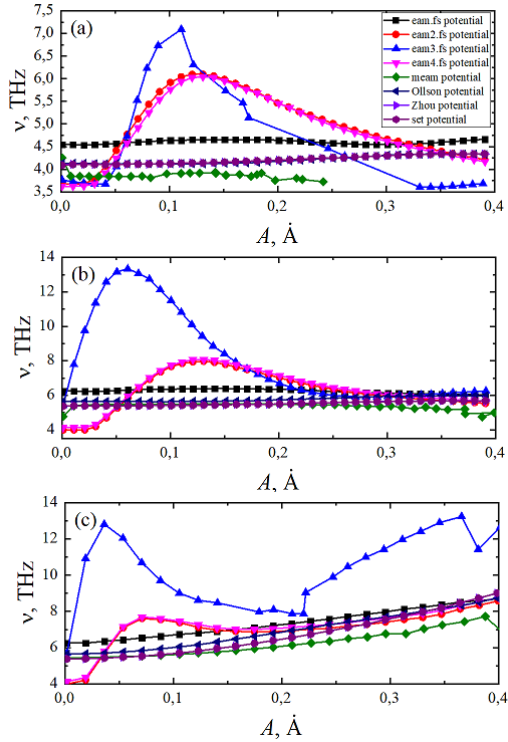


Рис. 2. Амплитудно-частотные характеристики для мод 1 (а), 13 (б), 15 (с) для потенциалов *eam.fs* (черный квадрат), *eam2.fs* (красный круг), *eam3.fs* (синий треугольник), *eam4.fs*, *set* (розовый треугольник), *team* (зеленый ромб), *Olsson* (сиреневый треугольник) и *Zhou* (фиолетовый круг).

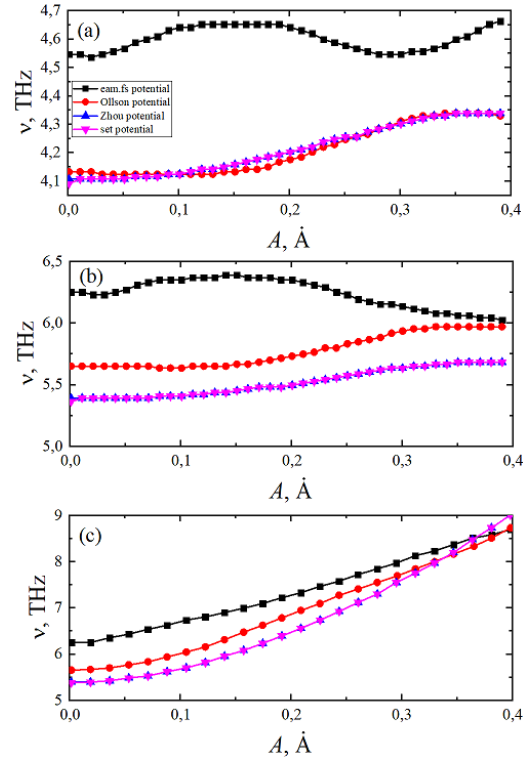


Рис. 3. Амплитудно-частотные характеристики для мод 1 (а), 13 (б), 15 (с) для потенциалов *eam.fs* (черный квадрат), *set* (розовый треугольник), *Olsson* (сиреневый треугольник) и *Zhou* (фиолетовый круг).

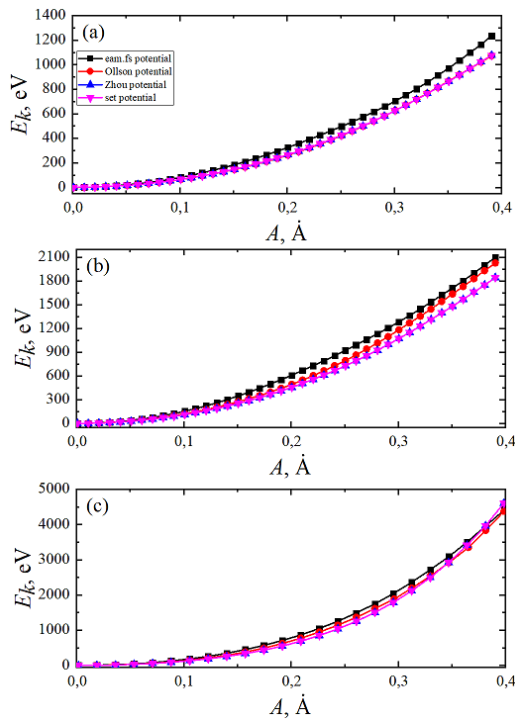


Рис. 4. Зависимости кинетической энергии от амплитуды для мод 1 (а), 13 (б), 15 (в) для потенциалов *eam.fs* (черный квадрат), *set* (розовый треугольник), *Ollson* (сиреневый треугольник) и *Zhou* (фиолетовый круг).

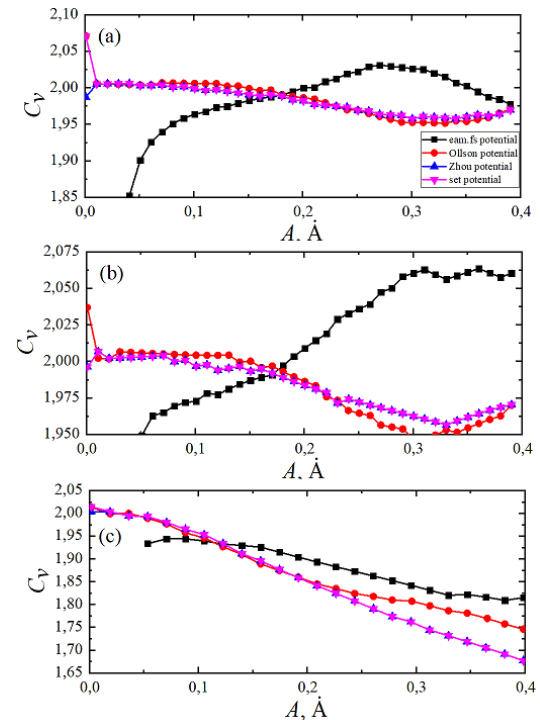


Рис. 5. Зависимости теплоемкости от амплитуды для мод 1 (а), 13 (б), 15 (в) для потенциалов *eam.fs* (черный квадрат), *set* (розовый треугольник), *Ollson* (сиреневый треугольник) и *Zhou* (фиолетовый круг).

В данной работе мы проанализировали амплитудно-частотные характеристики этих мод для ОЦК-кристалла вольфрама для нескольких межатомных потенциалов. На рис. 2 представлены амплитудно-частотные характеристики для мод 1, 13, 15 как наиболее показательные для решетки вольфрама с использованием всех рассмотренных потенциалов. Из всех рассмотренных потенциалов были отобраны 4 потенциала, для которых установлена удовлетворительная степень совпадения, представленные на рис. 3. Именно эти потенциалы в дальнейшем использовались для анализа амплитудно-частотных характеристик мод и влияния делокализованных нелинейных колебаний на макроскопические свойства кристаллов - теплоемкость, давление (как характеристика внутренних напряжений). Моде 15 демонстрирует наиболее сильную нелинейность.

На рис. 4 показаны зависимости кинетической энергии от амплитуды для режимов 1 (а), 13 (б), 15 (в) для потенциалов *eam.fs* (черный квадрат), *set* (розовый треугольник), *Ollson* (фиолетовый треугольник) и *Zhou* (фиолетовый круг). В этом случае мода 15 также показывает наиболее интенсивный рост значения кинетической энергии при увеличении начальных перемещений, что, вероятно, связано с вовлечением в движение этой моды большего числа атомов. Этот мод можно рассматривать как один из перспективных способов реализации локализованных состояний на его основе.

На рис. 5 представлены зависимости теплоемкости от амплитуды для режимов 1, 13, 15. Для режима 15 теплоемкость уменьшается с ростом начальной амплитуды, что связано с ее жесткой нелинейностью и ростом кинетической энергии при увеличении амплитуды колебаний. Для остальных мод характер изменения теплоемкости немонотонный и коррелирует с амплитудно-частотными характеристиками моды.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Исследование ДНКМ в вольфраме с разными потенциалами проведено методом молекулярной динамики. Мы выяснили, что наиболее реалистичными являются потенциалы *eam.fs*, *set*, *Olsson*, *Zhou*. С помощью этих потенциалов оценивали амплитудно-частотные характеристики ДНКМ, изменения кинетической энергии и теплоемкости. Можно предположить, что мода 15 вследствие модуляционной неустойчивости приведет к локализации энергии на отдельных атомах. Полученные результаты позволяют оценить применимость различных межатомных потенциалов для моделирования высокоэнергетических ударов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Marinica, M.-C., Ventelon, L., Gilbert, M., Proville, L., Dudarev, S., Marian, J., Bencteux, G., and Willaime, F., "Interatomic potentials for modelling radiation defects and dislocations in tungsten" // *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2013, 25(39), 395502.
3. Babicheva, R., Evazzade, I., Korznikova, E., Shepelev, I., Zhou, K., and Dmitriev, S., "Low-energy channel for mass transfer in pt crystal initiated by molecule impact" // *Computational Materials Science*, 2019, 163, 248–255.
3. Sand, A. E., Nordlund, K., and Dudarev, S., "Radiation damage production in massive cascades initiated by fusion neutrons in tungsten" // *Journal of Nuclear Materials*, 2014, 455(1-3), 207–211.
4. Bjorkas, C., Nordlund, K., and Dudarev, S., "Modelling radiation effects using the ab-initio based tungsten and vanadium potentials" // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 2009, 267(18), 3204–3208.
5. Chetverikov, A., Shepelev, I., Korznikova, E., Kistanov, A., Dmitriev, S., and Velarde, M., "Breathing subsonic crowdion in morse lattices" // *Computational Condensed Matter*, 2017, 13, 59–64.
6. Shepelev, I., Bayazitov, A., and Korznikova, E., "Modeling of supersonic crowdion clusters in fcc lattice: Effect of the interatomic potential" // *Journal of Micromechanics and Molecular Physics*, 2021, 6(1).
7. Shepelev, I., Dmitriev, S., Kudreyko, A., Velarde, M., and Korznikova, E., "Supersonic voidions in 2d morse lattice" // *Chaos, Solitons and Fractals*, 2020, 140.
8. Shepelev, I., Bachurin, D., Korznikova, E., Bayazitov, A., and Dmitriev, S., "Mechanism of remote vacancy emergence by a supersonic crowdion cluster in a 2d morse lattice" // *Chinese Journal of Physics*, 2021, 70, 355–362.

ОБ АВТОРАХ

МОРКИНА Алина Юрьевна, магистрант 1-го курса ИАТМ.

ТУВАЛЕВ Ильяс Ильгизович, студент 4-го курса БГУ.

КОРЗНИКОВА Елена Александровна, зав. лабораторией «Металлы и сплавы при экстремальных воздействиях» УГАТУ.

METADATA

Title: Dynamics of delocalized vibrational modes in tungsten

Affiliation: Ufa University of Science and Technology (UUST), Russia.

Email: ¹alinamorkina@yandex.ru, ²illumnus102@gmail.com, ²elena.a.korznikova@gmail.com

Language: Russian.

Source: *Molodezhnyj Vestnik UGATU* (scientific journal of Ufa University of Science and Technology), no. 1(27), pp. 75-79, 2023. ISSN 2225-9309 (Print).

Abstract: Modeling of crystal lattices under conditions far from equilibrium is currently an increasingly important subject of research and requires confidence in the validity of the applied interatomic potentials in a wide range of atom deviations from the equilibrium state. To perform such an evaluation for modeling tungsten, a candidate material for various nuclear applications, we analyzed the nonlinear behavior of the lattice using several interatomic potentials available in the LAMMPS library. The amplitude-frequency characteristics and heat capacity of non-linear delocalized vibrational modes were calculated - the exact solutions of the equations of motion of atoms, the geometry of which is determined by the symmetry of the lattice.

Key words: molecular dynamics, nuclear materials, delocalized vibrational modes

About authors:

MORKINA, Alina Yurievna, postgraduate student 1 year, Ufa state aviation technical University.

TUVALEV, Ilyas Ilgizovich, student 4 year of Bashkir State University.

KORZNIKOVA, Elena Aleksandrovna, Head of the Laboratory "Metals and alloys under extreme impacts" USATU.