

# **ВЛИЯНИЕ БИВАКАНСИИ Pt В КРИСТАЛЛЕ Pt<sub>3</sub>Al НА НЕЛИНЕЙНУЮ ЛОКАЛИЗОВАННУЮ МОДУ БОЛЬШОЙ АМПЛИТУДЫ**

**Захаров П.В., Ерёмин А.М., Старостенков М.Д., Маркидонов А.В.**  
**Алтайская государственная академия образования**  
**им. В.М. Шукшина, г. Бийск**  
**Алтайский государственный технический университет**  
**им. И.И. Ползунова, г. Барнаул**  
**Кузбасский государственный технический университет**  
**им. Т.Ф. Горбачева, г. Новокузнецк**

Методом молекулярной динамики в работе исследуются взаимодействия нелинейной локализованной моды большой амплитуды с бивакансией Pt в кристалле Pt<sub>3</sub>Al. Выявлены зависимости времени жизни нелинейной локализованной моды от начальной температуры модельного кристалла, а также расстояния до внедрённой бивакансии Pt в плоскости (111) кристалла.

**Введение.** В середине прошлого века активно изучались возбуждения, носителями которых являлись точечные дефекты, например, атомы замещения или атомы вблизи вакансий или вакансионных комплексов [1]. В данный момент локализованные колебания активно изучаются многими исследователями, но вектор исследований сместился в направлении возможности локализации колебаний в бездефектных кристаллах. Такие локализованные колебания называются дискретными бризерами (ДБ) [2].

Возможность локализации энергии в бездефектных дискретных упорядоченных структурах, которая впервые предсказана авторами работы [3], получила экспериментальное подтверждение. Дискретные бризеры были обнаружены в различных областях: в нелинейной оптике [4, 5], джозефсоновских сверхпроводящих контактах [6], в аниферромагнетиках [7]. Возможность возбуждения ДБ в трехмерном кристалле со структурой NaCl исследовалась методом молекулярной динамики в работах [8 - 11].

Активно изучается возможность существования ДБ в кристаллах с составом A<sub>3</sub>B [12-16]. В указанных работах подчеркивается важность таких процессов в кристаллах и возможность их влияние на структуру и свойства кристалла.

Также одним из актуальных направлений исследования является изучение солитонных объектов в различных средах, к которым относится дискретный бризер, и процессов связанных с их движением и взаимодействием с другими объектами среды существования солитонов. Такие задачи, рассматриваемые в кристаллических телах имеют прямое отношение к проблемам пластичности и прочности твердых тел. При этом важное значение имеет понятие точечных топологических солитонов, которые представляют собой вакансии, атомы замещения, краудионы и межузельные атомы [17 - 19].

**Описание модели и методика эксперимента.** В данной работе методом

молекулярной динамики изучается взаимодействие нелинейной локализованной моды – дискретного бризера в кристалле  $Pt_3Al$  с внедренной бивакансией Pt.

Рассматриваемая модель представляла собой объемный кристалл стехиометрии  $A_3B$  (рис. 1), атомы которого взаимодействовали посредством парного потенциала Морзе:

$$\varphi(r_{ij}) = D\beta e^{-\alpha r_{ij}} (e^{-\alpha r_{ij}} - 2),$$

где  $D$  – энергетический параметр, соответствующий глубине потенциальной ямы,  $\alpha$  – параметр, определяющий жесткость межатомных связей,  $r_0$  – некоторое усредненное равновесное расстояние по координационным сферам, в которых учитывается взаимодействие между атомами.

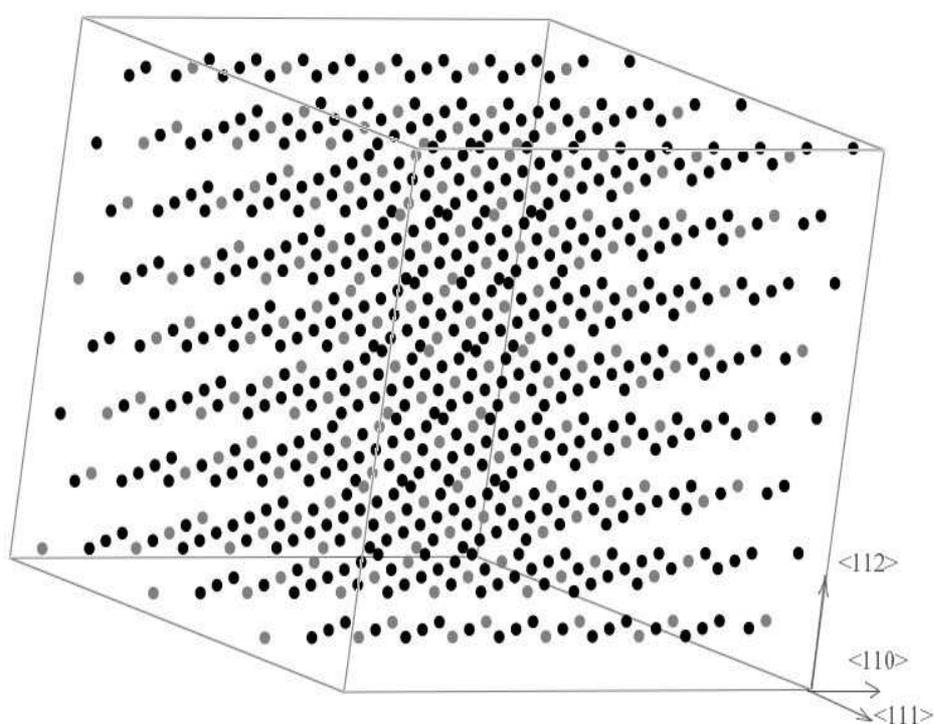


Рис. 1. Трехмерная расчетная ячейка  $Pt_3Al$ , содержащая 7198 атомов. Серым цветом обозначены атомы Al, черным – Pt.

Как показано в работах [14,16] возбуждение ДБ наблюдалось при отклонении атома алюминия вдоль направления  $[100]$ , или под углом не больше, чем 5 градусов к указанному направлению. При начальном отклонении атома на  $0.7 \text{ \AA}$  максимальная кинетическая энергия атома несущего нелинейную локализованную моду имеет значение около 5 эВ, частоты колебаний ДБ в этом случае могут лежать в широком диапазоне в зависимости от параметров потенциала и решетки, в данном случае возбуждались колебания с периодом 0,08 пс

**Результаты и обсуждение.** Для изучения процессов, возникающих при взаимодействии нелинейной локализованной моды с вакансией Pt в  $Pt_3Al$  нами проводились эксперименты при отклонении атома Al вдоль направления  $[100]$

на величину  $0,7 \text{ \AA}$  вблизи внедренной бивакансии Pt в плоскости (111) (рис. 2). Начальная температура эксперимента  $0 \text{ K}$ .

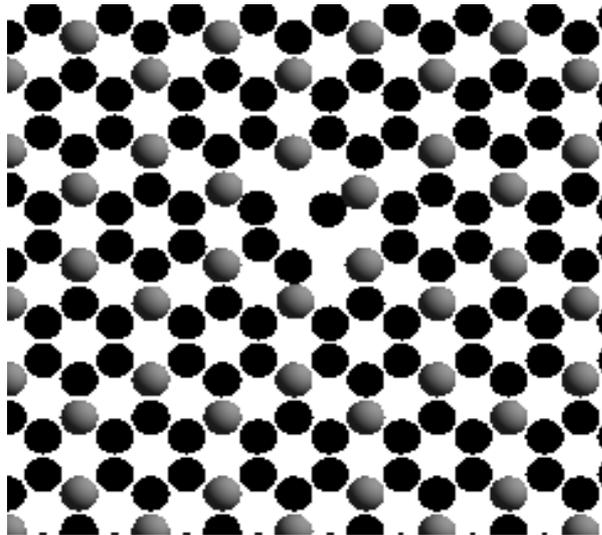


Рис. 2. Начальная конфигурация расположения бивакансии Pt в плоскости (111) модельного кристалла Pt<sub>3</sub>Al (чёрным цветом показаны атомы Pt, серым атомы Al).

На рис. 3 показана зависимость времени жизни нелинейной локализованной моды от расстояния до внедрённой бивакансии Pt.

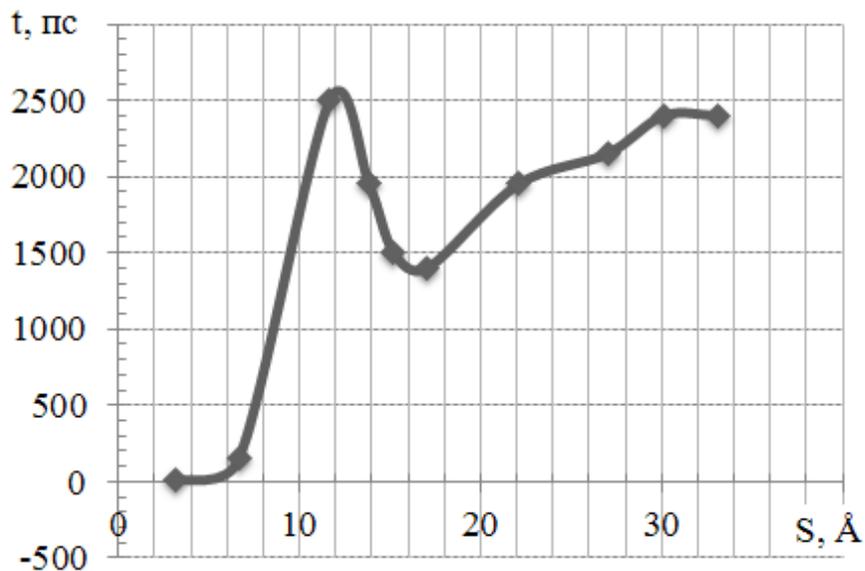


Рис. 3. Зависимость времени жизни нелинейной локализованной моды от расстояния до внедрённой бивакансии Pt (ось абсцисс – расстояние  $S$  в  $\text{ \AA}$  от бивакансии Pt до атома Al, где осуществлялось возбуждение ДБ; ось ординат – время жизни  $t$  нелинейной локализованной моды в пикосекундах).

Как видно из рис. 3 бивакансия Pt существенно влияет на время жизни ДБ. Время жизни ДБ уменьшается при приближении к бивакансии. Но на некотором расстоянии от бивакансии Pt наблюдается резкое увеличение времени жизни ДБ (см. рис. 4).

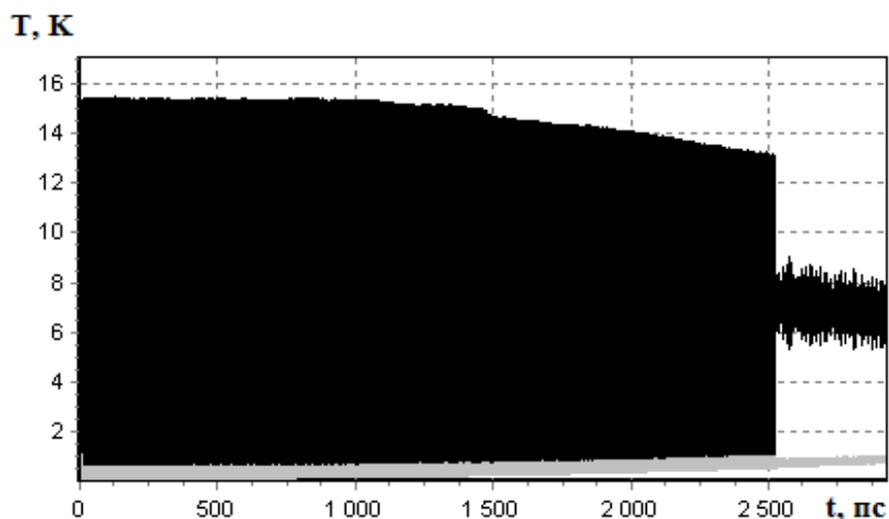


Рис. 4. Температурные кривые подрешеток Al (черным цветом графика) и Pt (серый цвет графика).

Предполагается, что существует некоторая область, окружающая бивакансию Pt в которой время жизни ДБ максимально. Возможной причиной увеличения времени жизни высокоамплитудной локализованной моды может быть локальное уширение запрещенной зоны в фоновом спектре модельного кристалла. Об этом свидетельствует пик на графике рис. 3. Также к возможным причинам полученной аномалии можно отнести тот факт, что в данной области ДБ имеет более широкий профиль, т.е. большее количество атомов вовлечено в процесс согласованных колебаний.

График зависимости времени жизни ДБ в модельном кристалле  $Pt_3Al$  с бивакансией Pt от начальной температуры кристалла приведен на рис. 5. В данном случае температура эксперимента варьировалась от 0 К до 170 К. Характерным является то, что при нулевой начальной температуре время жизни ДБ составляет 2500 пс, а при повышении до 3 К – 540 пс.

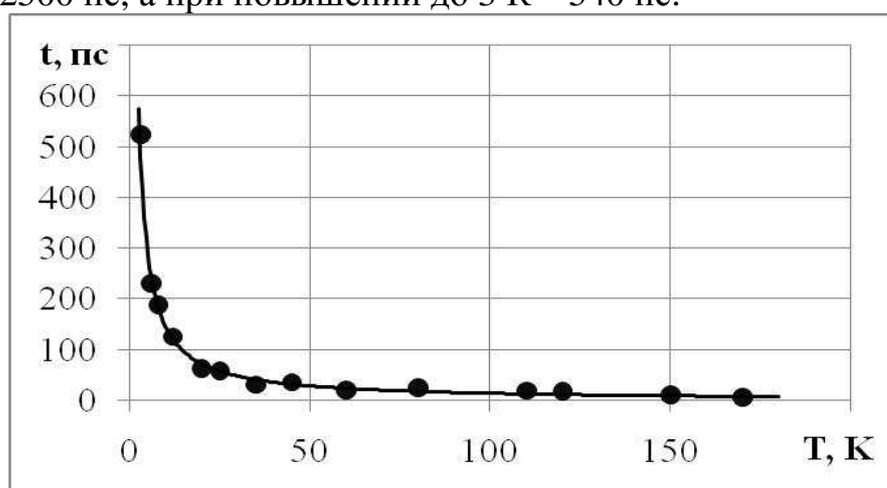


Рис. 5. Зависимость времени жизни дискретного брызера в модельном кристалле  $Pt_3Al$  с бивакансией Pt от начальной температуры кристалла.

Из рис. 5 видно, что незначительное повышение температуры модельной ячейки сплава  $Pt_3Al$  с бивакансией Pt приводит к существенному уменьшению

времени жизни ДБ. Решающим фактором, обуславливающим это, является то, что атомы, окружающие основной атом, на котором происходит локализация колебаний, не совершают согласованных с ним колебаний. Чем выше начальная температура ячейки, тем меньшее количество атомов входят в состав ДБ, делая его профиль более узким и соответственно менее устойчивым к воздействиям со стороны других атомов кристалла. Таким образом проявляется роль способности системы к самоорганизации на начальных этапах формирования ДБ, в виде вовлечения атомов в согласованные колебания с частотой, входящей в запрещенную зону фононного спектра модельного кристалла.

Начиная с температуры 170 К нелинейная локализованная мода в кристалле  $Pt_3Al$  с бивакансией Pt становится сравнительно неустойчивой и быстро разрушается (см. рис. 6).

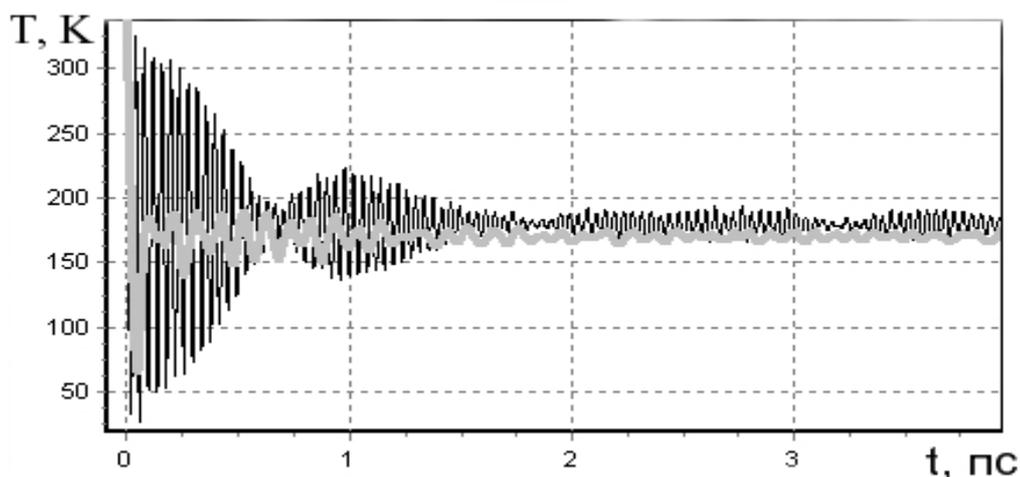


Рис. 6. Температурные кривые подрешеток Al (чёрным цветом графика) и Pt (серый цвет графика) при температуре 170 К.

Таким образом, методом молекулярной динамики установлено, что бивакансия Pt в сплаве  $Pt_3Al$  оказывают существенное влияние на нелинейные локализованные моды в случае близкого к ним расположения. Воздействие проявляется в разрушение высокоамплитудных локализованных колебаний с последующим рассеиванием энергии по кристаллу. Однако стоит отметить, что в процессе деградации колебаний большой амплитуды, рассеивание преимущественно происходит в подрешетку Al, где энергии остается локализованной за счет наличия запрещенной зоны в фононном спектре кристалла  $Pt_3Al$  в течение продолжительного времени.

#### Список литературы

1. Марадудин, А. Динамическая теория кристаллической решетки в гармоническом приближении / А. Марадудин, Э. Монтролл, Дж. Вейсс: М., Мир. - 1965. - 384 с.
2. Flach, S. Discrete breathers advancer in theory and application / S. Flach, A.V. Gorbach // Phys. Rep. - 2008. - 467. - P. 1 - 116.
3. Sievers, A.J. Intrinsic Localized Modes in Anharmonic Crystals / A.J. Sievers, S. Takeno // Phys. Rev. Lett. - 1988. - v. 61. - № 8. - P. 970 - 973.

4. Eisenberg, H.S. *Discrete Spatial Solitons in Waveguide Arrays* / H.S. Eisenberg, Y. Silberberg, R. Morandotti, R. Boyd, J.S. Aitchison // *Phys. Rev. Lett.* - 1998. - V. 81. - P. 3383.
5. Kivshar, Yu.S. *Optical solitons* / Yu.S. Kivshar, G.P. Agrawal // Academic Press. Amsterdam. - 2003. - 540 p.
6. Miroshnichenko, A.E. / A.E. Miroshnichenko, S. Flach, M.V. Fistul, Y. Zolotaryuk, J.B. Page // *Phys. Rev.* - 2001. – E. 64. - P. 600 - 601.
7. Schwarz, U.T. *Experimental Generation and Observation of Intrinsic Localized Spin Wave Modes in an Antiferromagnet* / U.T. Schwarz, L.Q. English, A.J. Sievers // *Phys. Rev. Lett.* - 1999. - V. 83. - P. 223.
8. Kiselev, S.A. / S.A. Kiselev, A.J. Sievers // *Phys. Rev.* - 1997, B. 55, 5755.
9. Дмитриев, С.В., Хадеева Л.З. Характеристики целевых дискретных бризеров в кристаллах со структурой NaCl / С.В. Дмитриев, Л.З. Хадеева // *Известия вузов. Прикладная нелинейная динамика.* - 2010. - т. 18. - № 6. - С. 85 - 92.
10. Khadeeva, L.Z. *Discrete breathers in crystals with NaCl* / L.Z. Khadeeva, S.V. Dmitriev // *Phys. Rev.* - 2010. – B. 81. - 214306.
11. Дмитриев, С.В. Целевые дискретные бризеры в двухкомпонентном двумерном кристалле в состоянии теплового равновесия / С.В. Дмитриев, Л.З. Хадеева // *ФТТ.* - 2011. - т. 53. - №7. – С. 1353 - 1358.
12. Захаров, П.В. О влиянии температуры на устойчивость колебаний атома, несущего локализованную моду в трехмерном упорядоченном сплаве / П.В. Захаров // *Образование, наука, инновации – вклад молодых исследователей: материалы III (XXXV) Международной научно-практической конференции.* – Кемерово: ООО «ИНТ», 2008, вып. 9, Т. 1, С. 455 - 456.
13. Медведев, Н.Н. Локализованные колебательные моды в двумерной модели упорядоченного сплава Pt<sub>3</sub>Al / Н.Н. Медведев, М.Д. Старостенков, П.В. Захаров, О.В. Пожидеева // *ПЖТФ.* - 2011. - т. 37. - вып. 3. - С.7 - 15.
14. Медведев, Н.Н. О локализации энергии нелинейных и линейных колебаний атомов в модельной кристаллической решетке состава A<sub>3</sub>B / Н.Н. Медведев, М.Д. Старостенков, П.В. Захаров, А.В. Маркидонов // *Письма о материалах.* – т. 3. – вып. 1. - 2013. - С. 34 - 37.
15. Medvedev, N.N. *Discrete breathers on the 3D model of Pt<sub>3</sub>Al with L12 order* / N.N. Medvedev, M.D. Starostenkov // *Изв. Вузов. Физика.* – 2012. – Т.55. (11-3). - С. 113 - 116.
16. Medvedev, N.N. *Energy Localization on the sublattice of Pt<sub>3</sub>Al with L<sub>12</sub> order* / N.N. Medvedev, M.D. Starostenkov, M.E. Manley // *Journal of Applied Physics.* - 2013. - V.114. - P. 213506(4).
17. Полетаев, Г.М. Атомные механизмы структурно-энергетических превращений в объеме кристаллов и вблизи границ зерен наклона в ГЦК металлах / Г.М. Полетаев // *Дисс. на соискание уч. степ. д. ф.-м. н. Барнаул.* - 2008. - 412 с.
18. Тетельбаум, Д.И. Эффект дальнего действия при малоинтенсивном облучении твердых тел / Д.И. Тетельбаум, Е.В. Курильчик, Ю.А. Менделева // *Поверхность. Рентгеновские синхротронные и нейтронные исследования.* –

2009. - № 3. – С. 94 - 103.

19. Захаров, П.В. Кооперативные явления при взаимодействии динамических и топологических солитонов с дефектами в различных модельных кристаллических решетках на основе ГЦК структуры / П.В. Захаров // Дисс. на соискание уч. степ. к. ф.-м.н. Барнаул. - 2012. - 165 с.

«Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта 14-08-90416 Укр\_а».