

Стабильность, упругие модули и фононные спектры наноструктурированных материалов на основе титана и алюминия (метод молекулярной динамики).

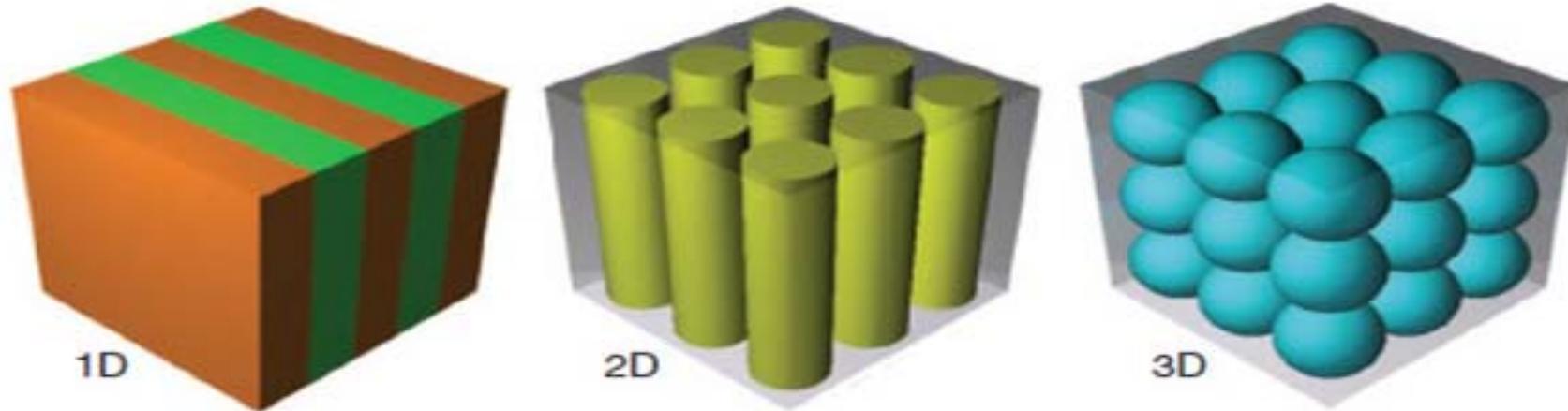
*Е.Б. Долгушева, В.Ю. Трубицын
ФТИ УрО РАН, Ижевск*

БУРЕВЕСТНИК-2015

«Идеи и методы физики конденсированного состояния.

10-20 сентября, г. Сочи

ФОНОННЫЕ КРИСТАЛЛЫ



Фононные кристаллы - периодически расположенные структуры с различными упругими свойствами. Период сравним с длиной волны, распространяющейся в кристалле. Границы раздела между этими структурами должны быть резкими, чтобы волна хорошо отражалась.

$\lambda \sim v T$ - для однородных материалов. $v \cong const.$

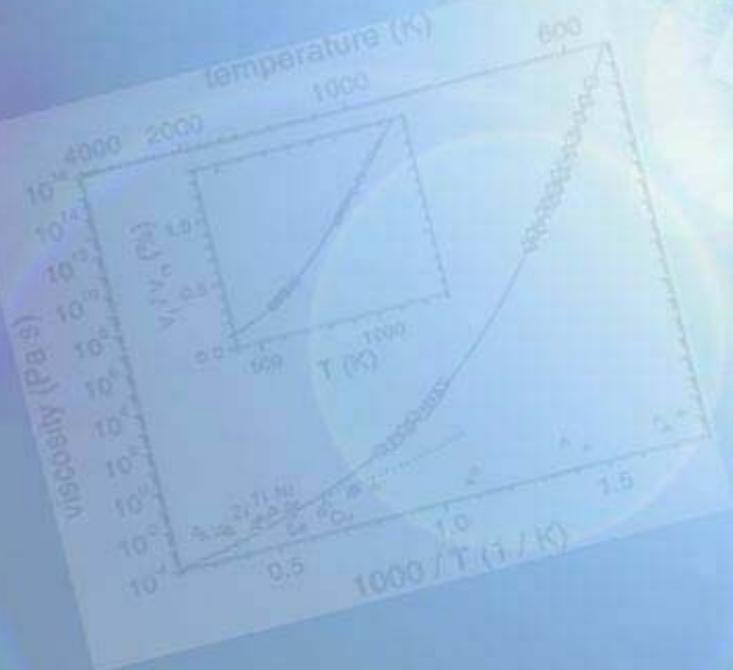
В фононном кристалле $v(\lambda)$.

спектр упругих волн



Цель

Исследование влияния формы и размера периодически расположенных титановых кристаллов в алюминиевой матрице на стабильность, упругие модули и фоновые спектры, полученных материалов.



$$\chi = \int d\{\eta\} d\{\eta^*\} \exp\left(- (2\Gamma_0)^{-1} \sum_a \int dt \bar{\eta}_a(t) \cdot \bar{\eta}_a^*(t)\right) \varphi_a^{(a)}(t) \quad (3)$$
$$\chi = \int d\{\eta\} d\{\eta^*\} \exp\left(- (2\Gamma_0)^{-1} \sum_a \int dt \bar{\eta}_a(t) \cdot \bar{\eta}_a^*(t)\right) \quad (4)$$
$$\chi = \int d\{\eta\} d\{\eta^*\} \exp\left(- (2\Gamma_0)^{-1} \sum_a \int dt \bar{\eta}_a(t) \cdot \bar{\eta}_a^*(t)\right) \quad (5)$$

Методическая часть работы

ЕАМ ПОТЕНЦИАЛ (модель погруженного атома)

PHYSICAL REVIEW B **68**, 024102 (2003)

Interatomic potentials for atomistic simulations of the Ti-Al system

Rajendra R. Zope and Y. Mishin*

School of Computational Sciences, George Mason University, Fairfax, Virginia 22030, USA

(Received 15 November 2002; revised manuscript received 11 March 2003; published 14 July 2003)

Пакет XMD: [J. Rifkin: XMD Molecular Dynamics Program
<<http://xmd.SourceForge.net/>>]

Расчет плотности колебательных состояний

$$\gamma(t) = \langle \sum v_i(t) \cdot v_i(0) \rangle / \langle \sum v_i^2(0) \rangle$$

[J.M. Dickey and A. Paskin, Phys.Rev. 188, 1407(1969)]

Плотность колебательных состояний рассчитывалась как Фурье образ автокорреляционной функции скоростей $\gamma(t)$ релаксация в течение 100ps. Шаг по времени - 1fs.

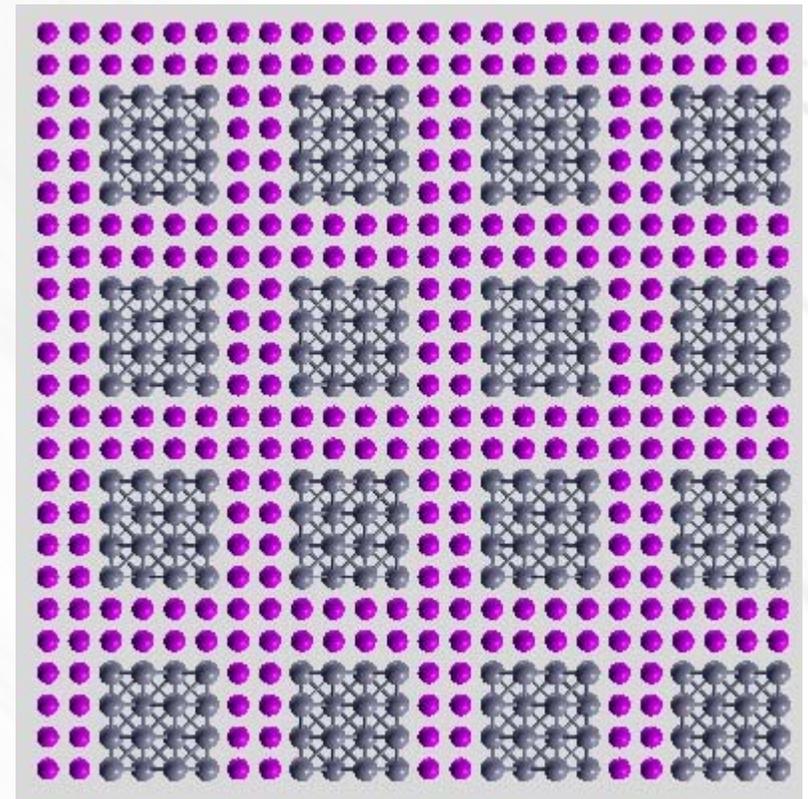
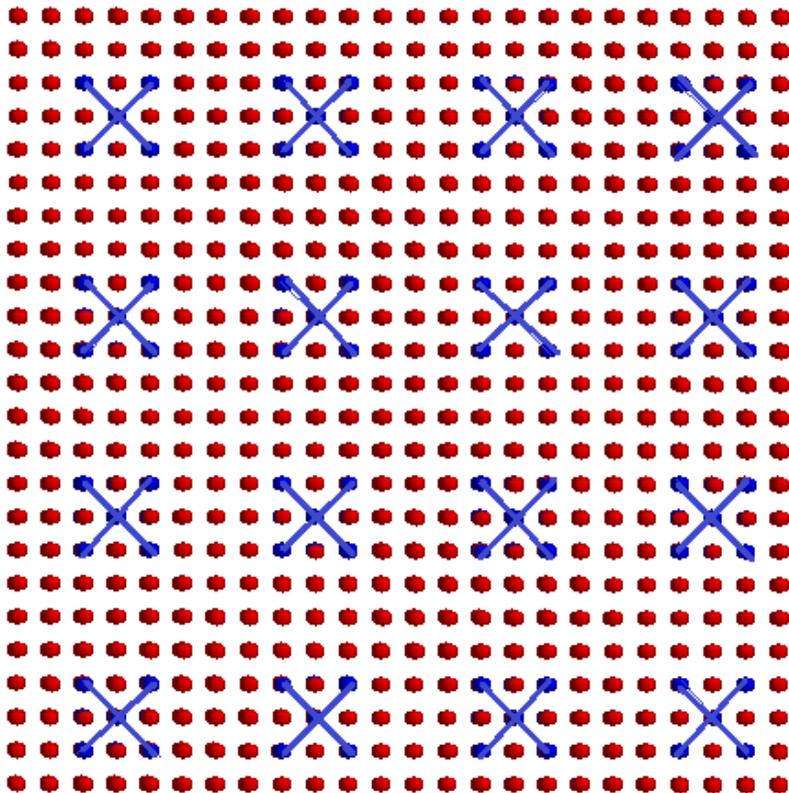
Граничные условия: X, Y, Z – циклические.

Ансамбль: NPT. P=0.

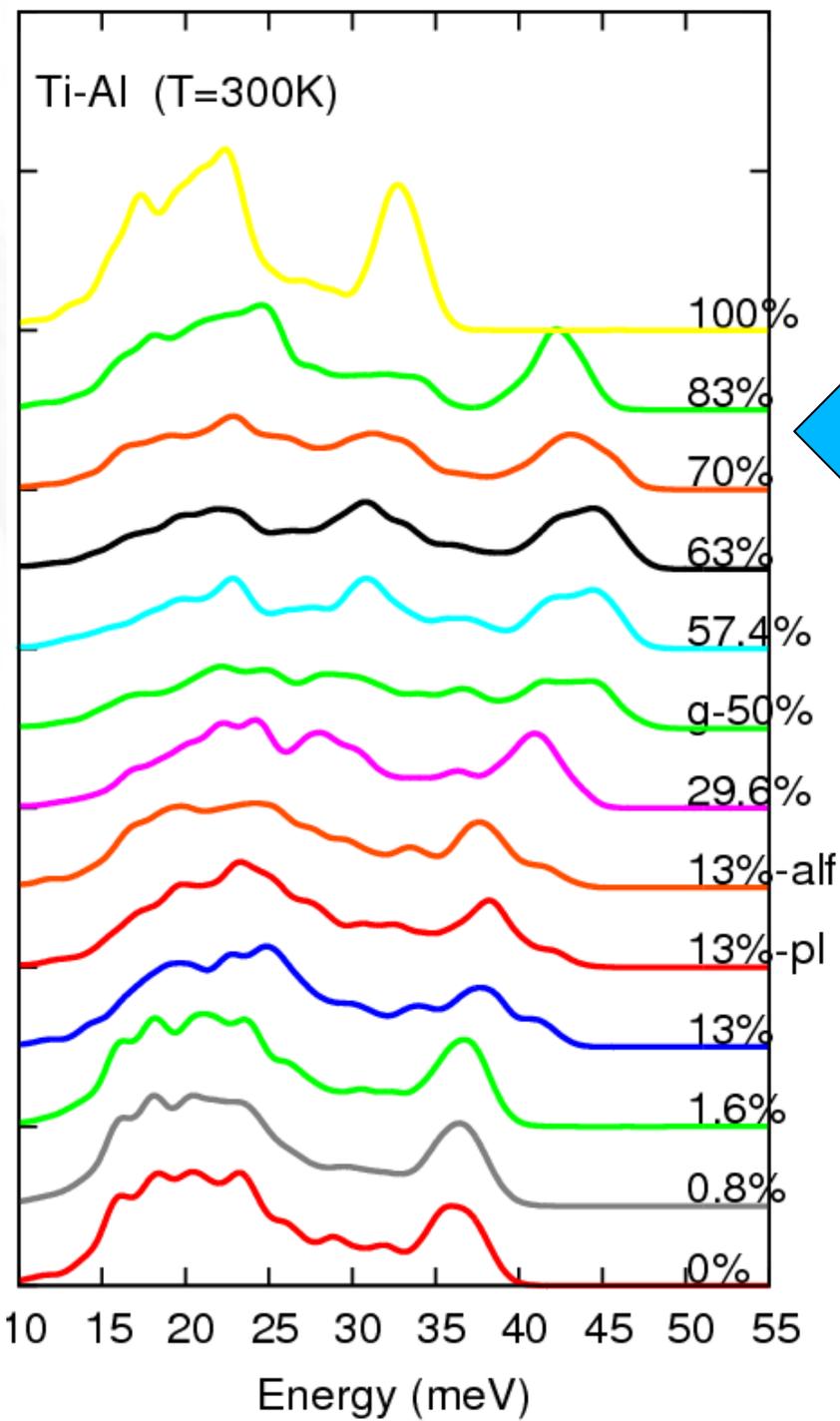
Размеры базовых кристаллитов: от 6912 до 55296 атомов.

КОНФИГУРАЦИИ

В алюминиевой матрице с ГЦК структурой путем замещения атомов Al на атомы Ti формировались конфигурации с различной периодичностью структурных элементов.



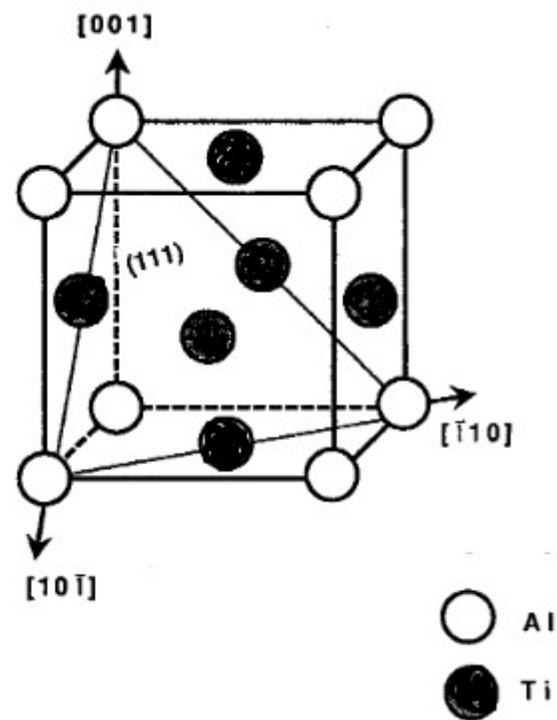
ΠΚΣ



EE

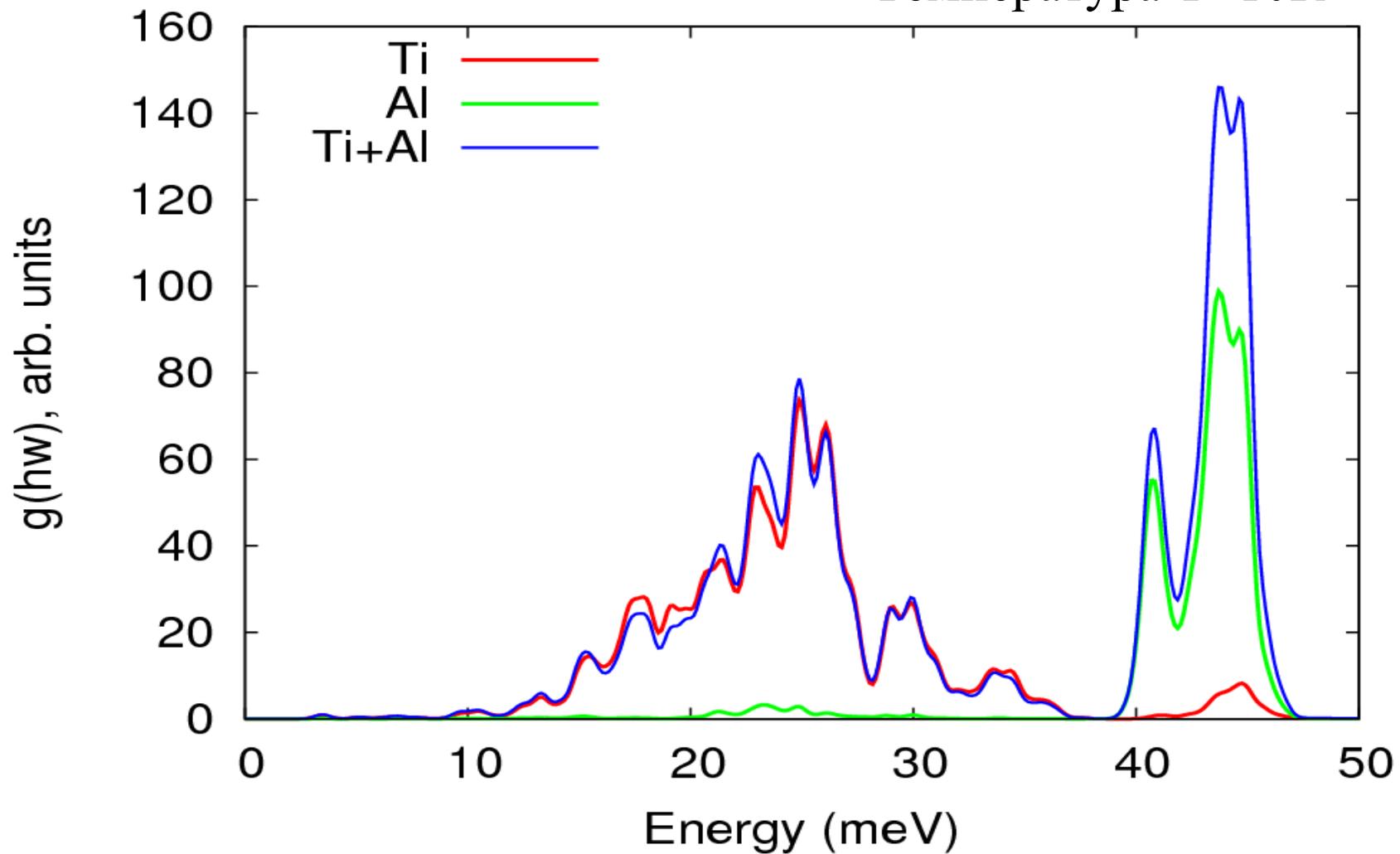
СТРУКТУРА Ti_3Al
(L1₂)

Ti – 75%

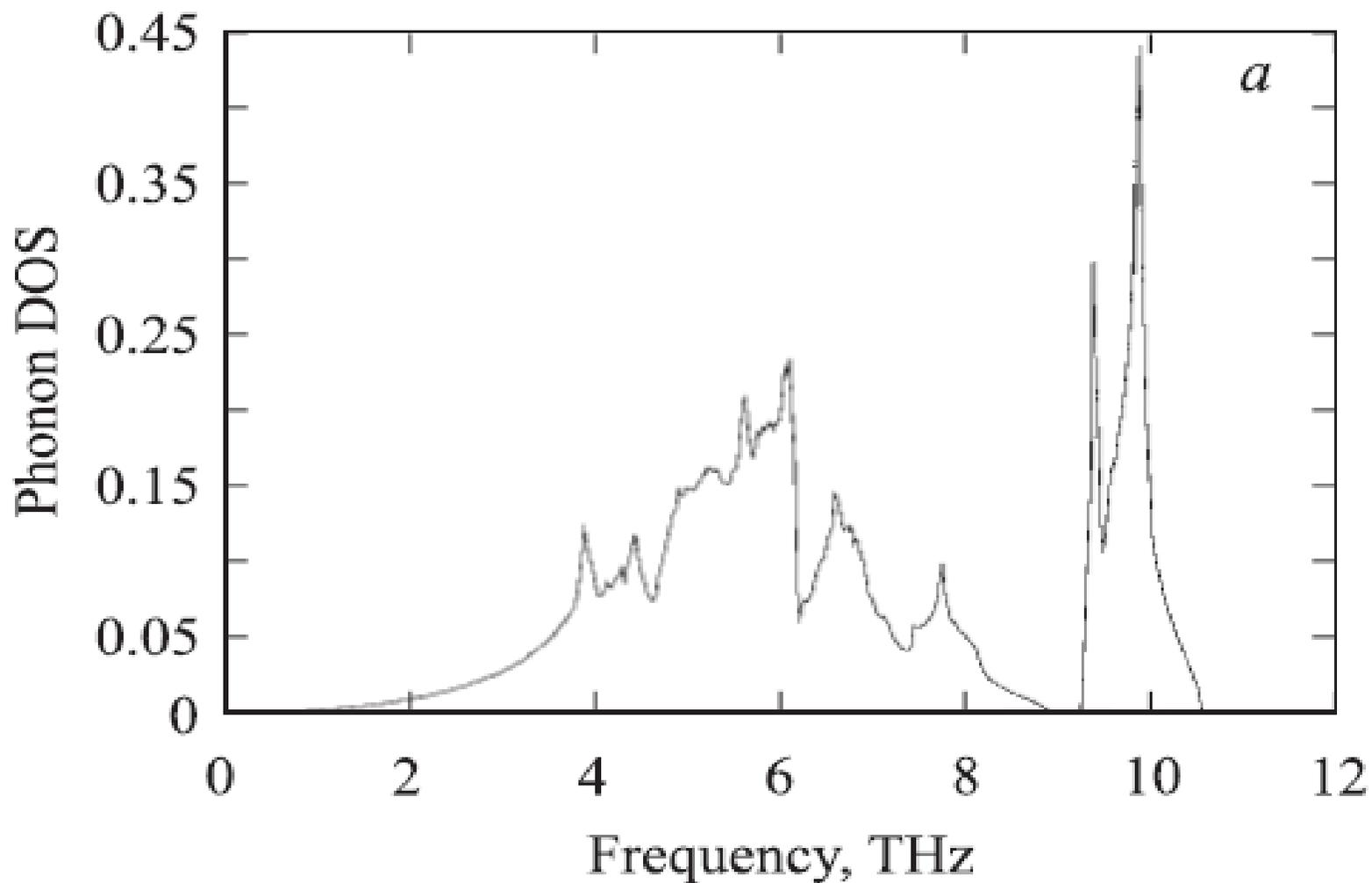


ФОНОННЫЙ СПЕКТР СИСТЕМЫ Ti3Al (L1₂)

Температура T=10К



ПКС Ni₃Al (L12)

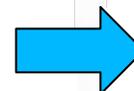
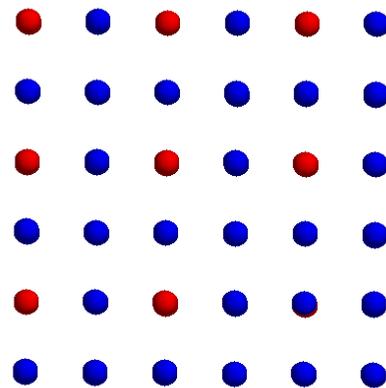
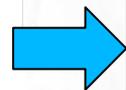
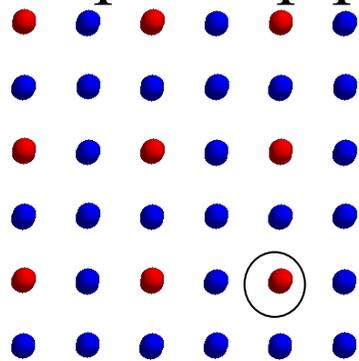


40 meV ~ 9.7 ТГц

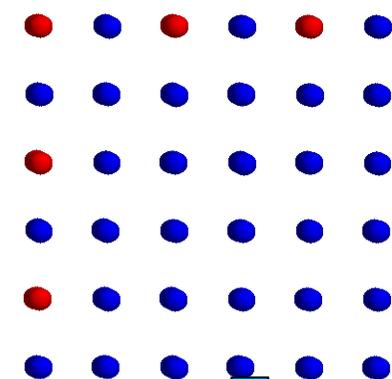
[Исаев Э. И., Лихтенштейн А.И. ФТТ, 2004, 46, 6, 1156.]

Кристалл титана в системе Ti_3Al (L12)

a – параметр решетки

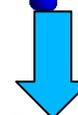


ПЕРИОД $A = 3a$

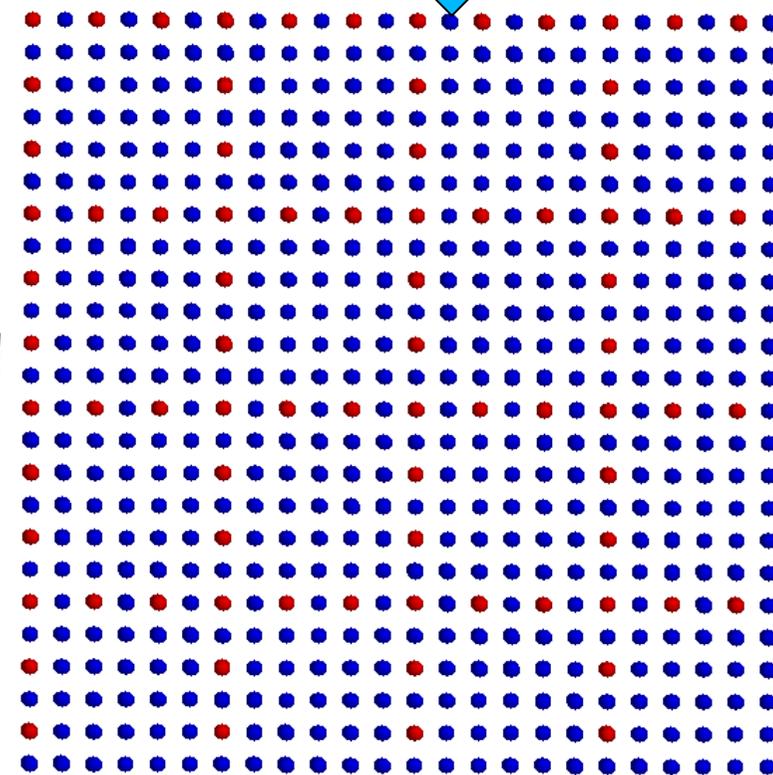
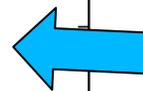
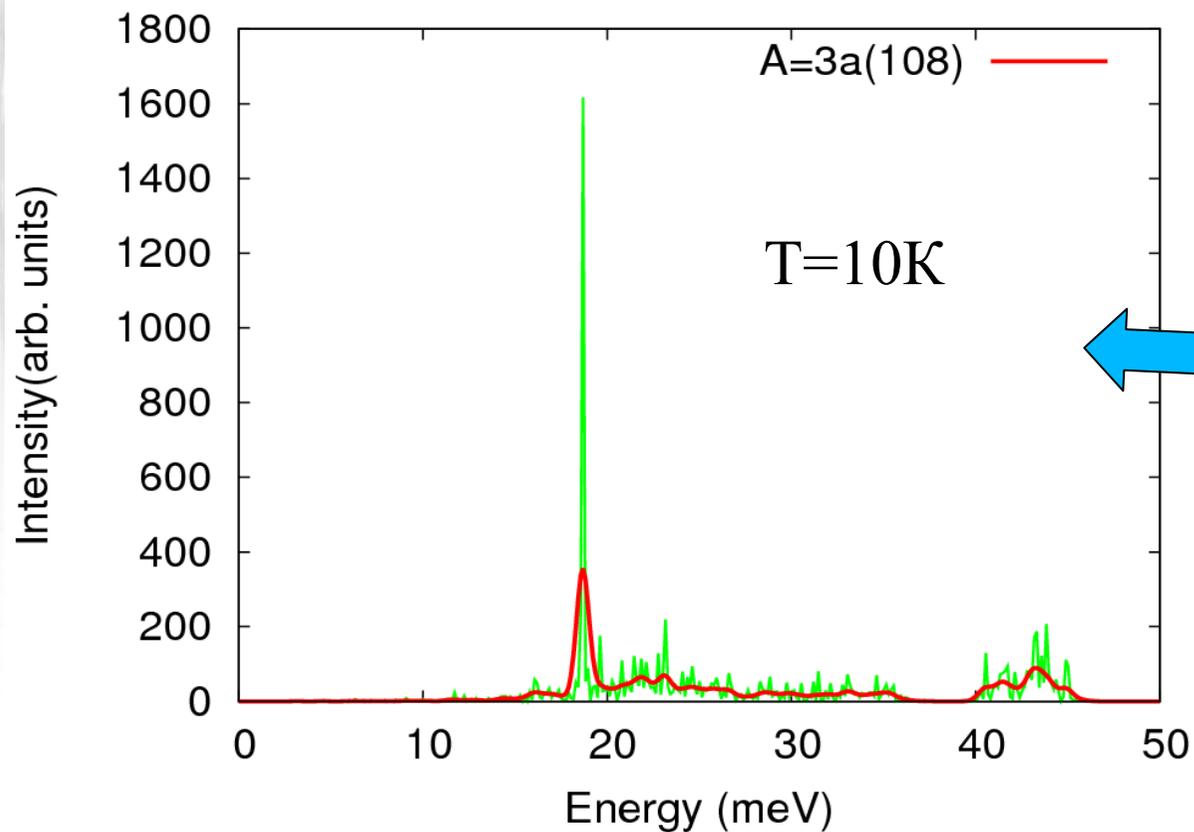


● Al

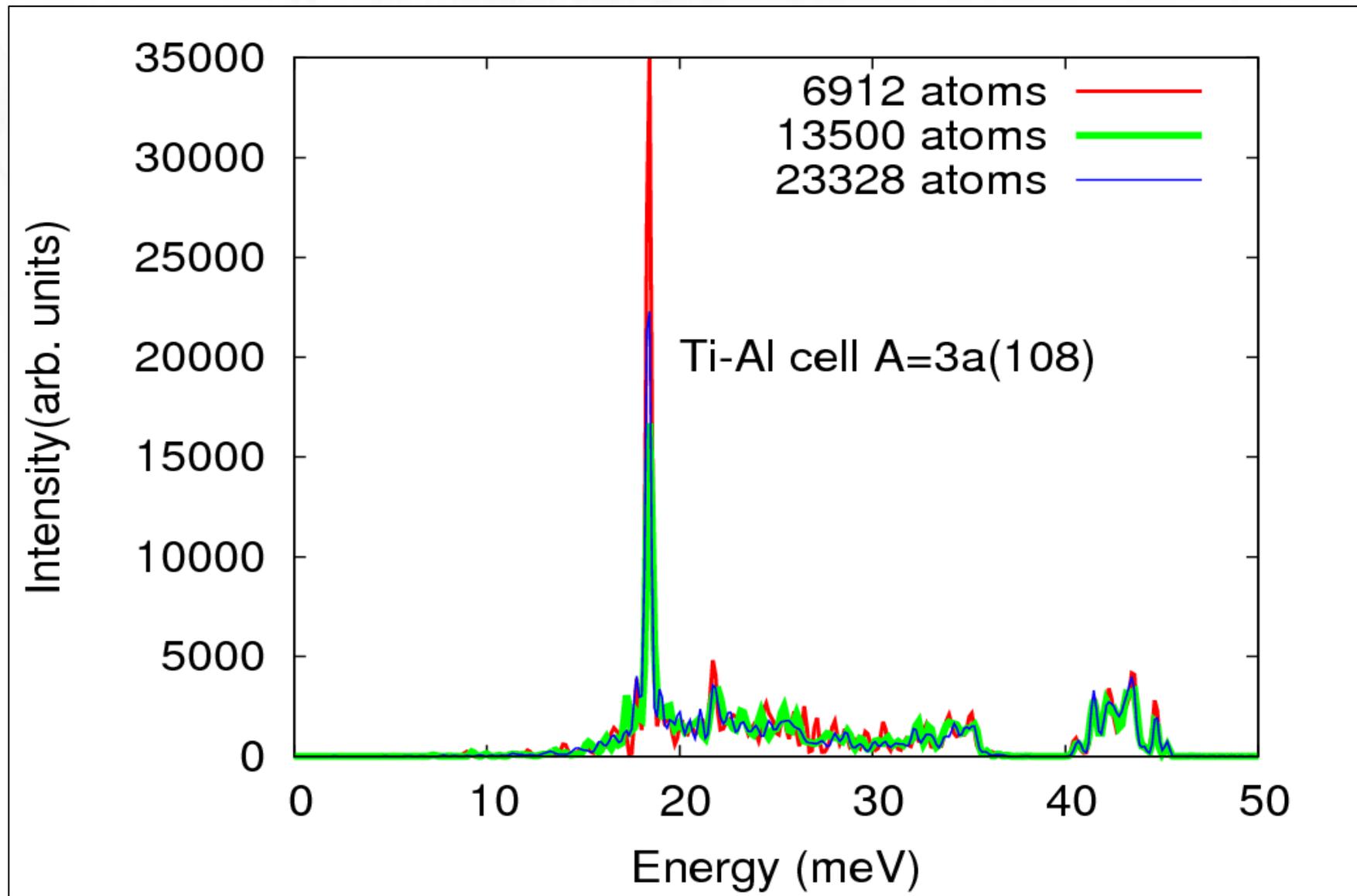
● Ti



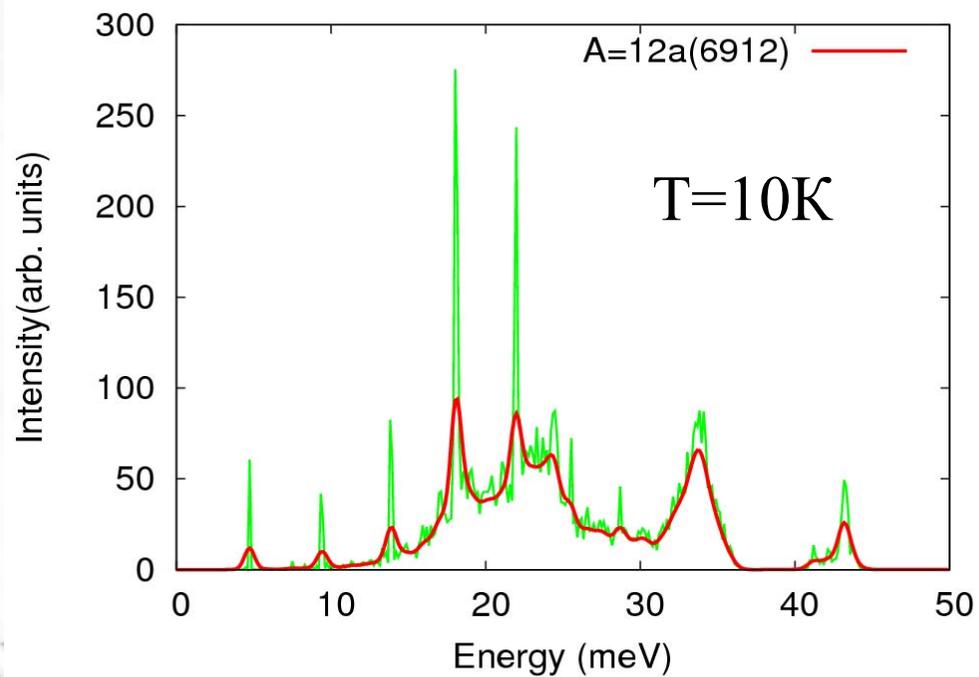
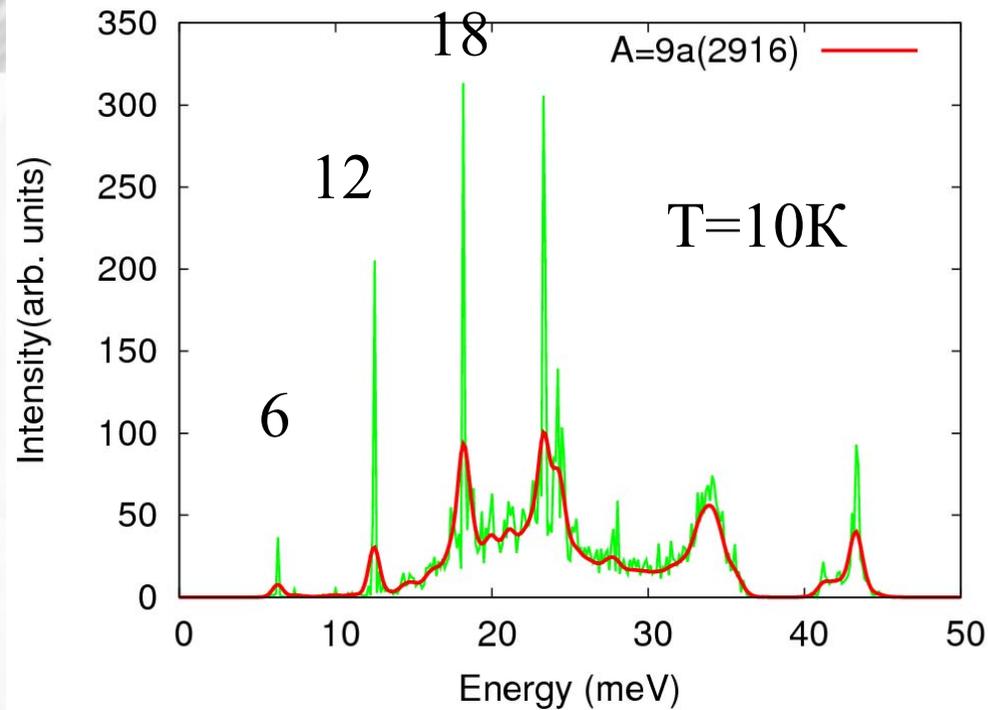
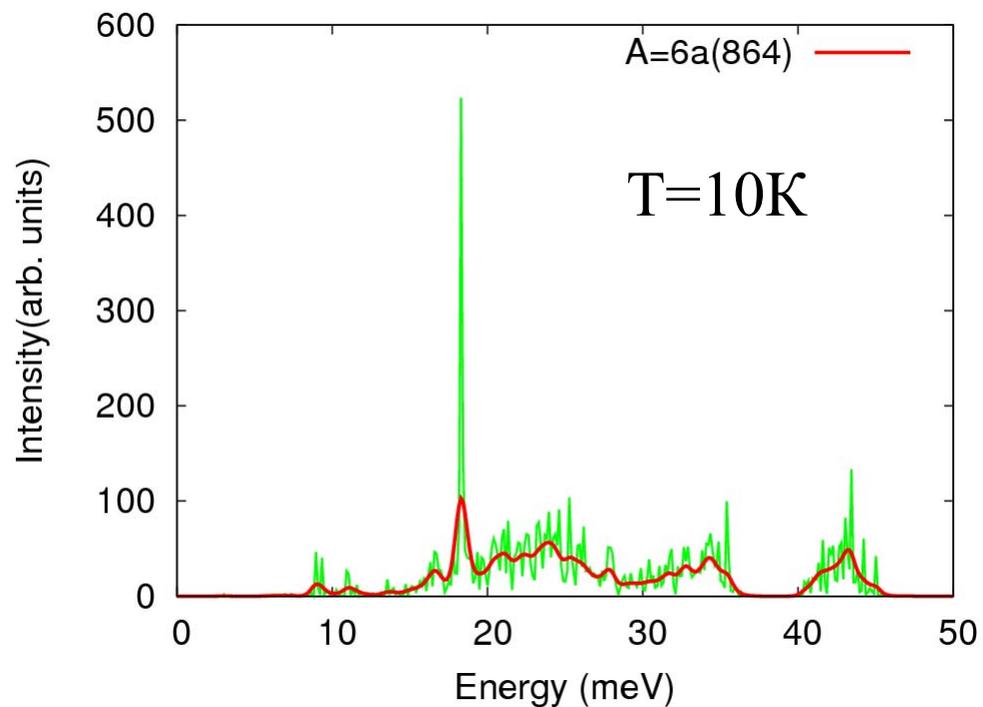
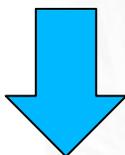
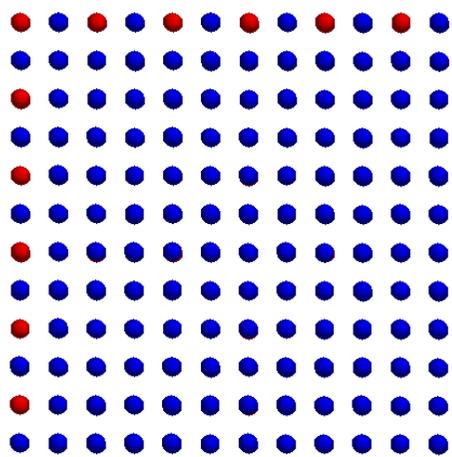
Элементарная ячейка - 108 атомов



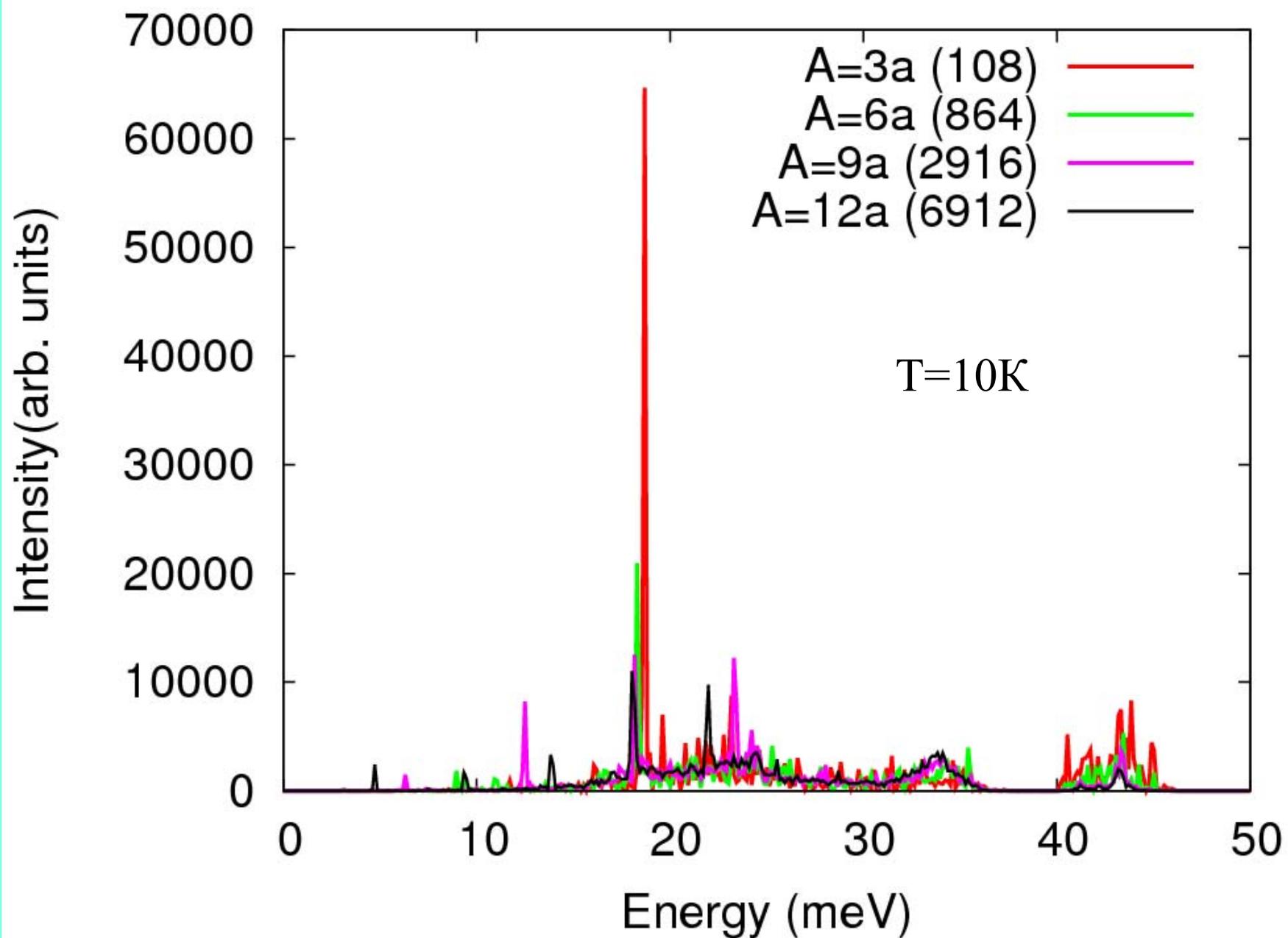
Влияние размера базового кристаллита на результат расчета фононного спектра



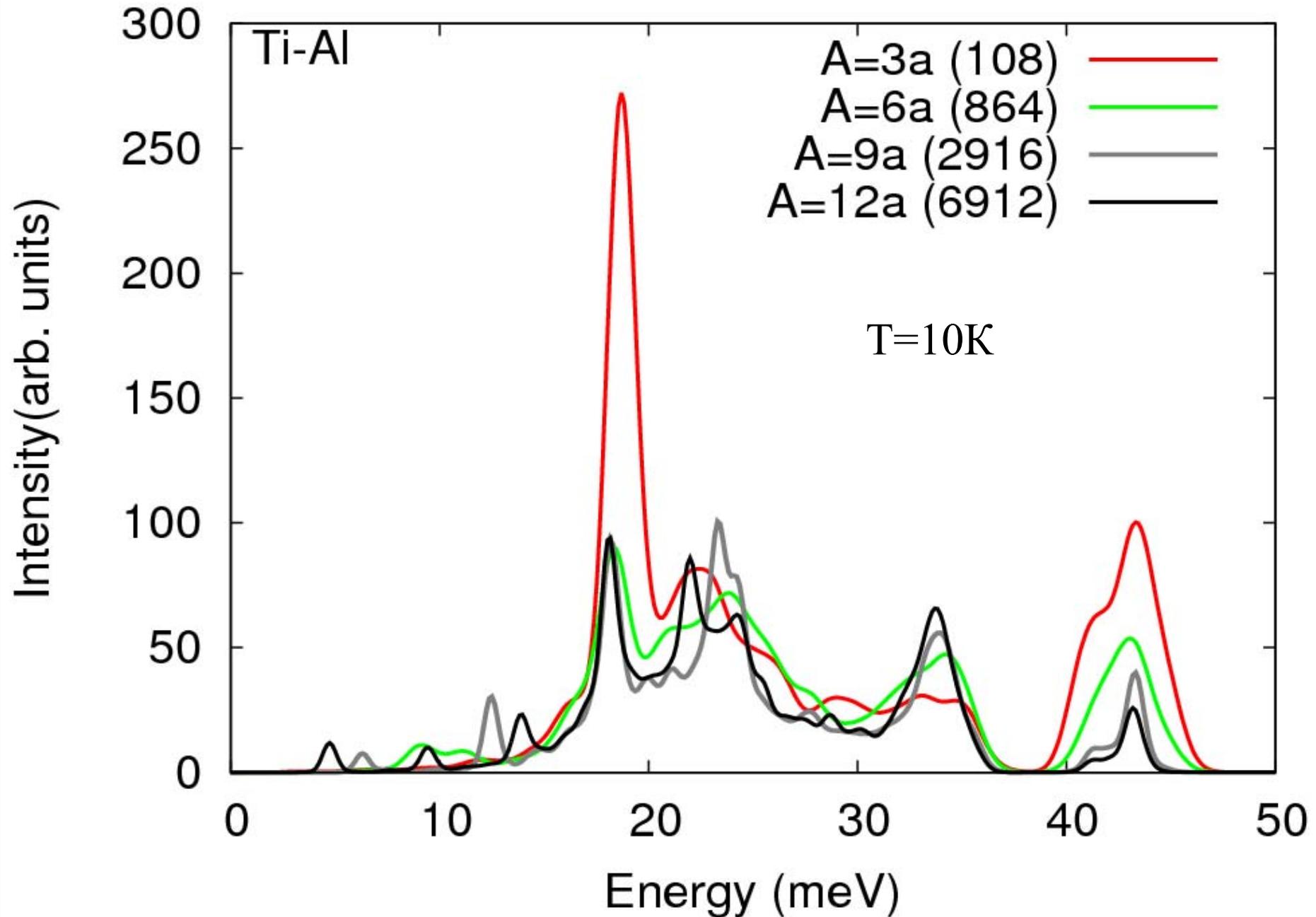
ПЕРИОД $A=6a$



НЕ СГЛАЖЕННЫЕ СПЕКТРЫ КОЛЕБАНИЙ



ПЛОТНОСТИ КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ СОСТОЯНИЙ

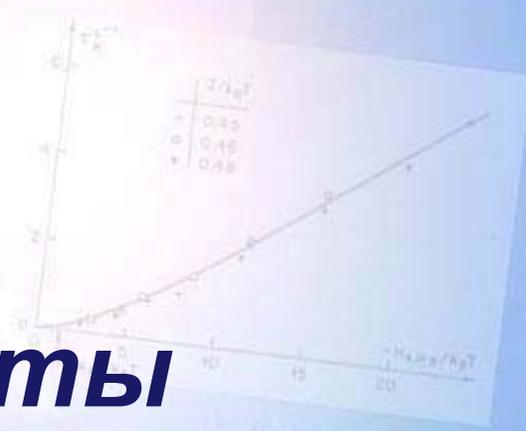
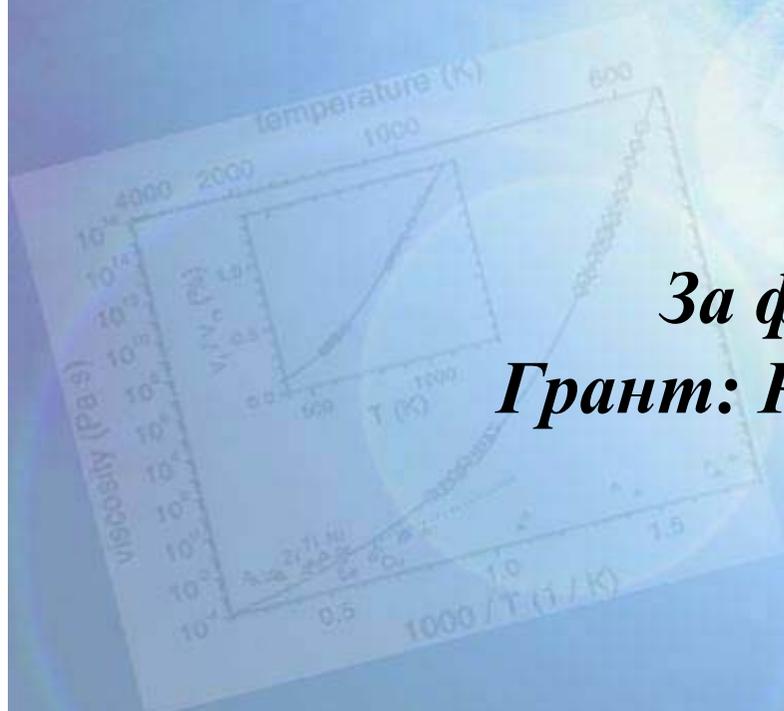


ВМЕСТО ЗАКЛЮЧЕНИЯ

- 1 - определить длину волны и направление ее распространения
- 2 - нагреть систему с малым шагом по температуре и посмотреть при какой температуре происходит размытие пика
- 3 – рассчитать низкотемпературную теплоемкость для ЭТИХ систем
- 4 – проверить ансамбль NVT

БЛАГОДАРИМ
Саламатова Е.И.
и Чулкина Е.П.
за обсуждение работы
и ценные замечания !

За финансовую поддержку
Грант: РФФИ 13-02-96034-р-урал-а,

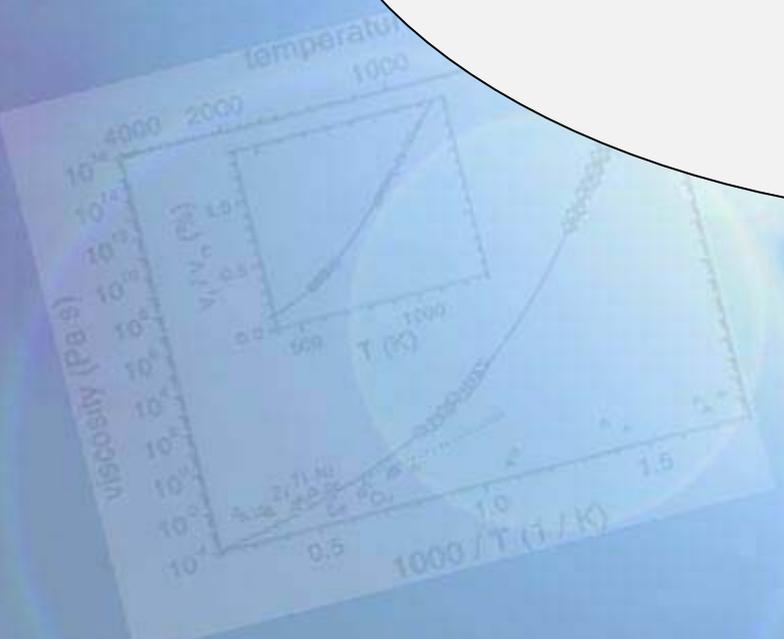
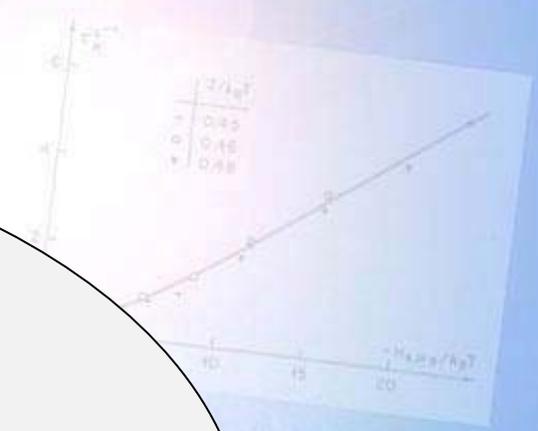


with $\frac{d\eta}{dt} = 0$

$$\eta(t) = X^{-1} \int d(\eta) d(\eta^*)$$
$$\times \exp\left(- (2\Gamma_0)^{-1} \sum_j \int dt \tilde{\eta}_a(t) \cdot \tilde{\eta}_a^*(t)\right) \varphi_X^{(a)}(t)$$
$$X = \int d(\eta) d(\eta^*) \exp\left(- (2\Gamma_0)^{-1} \sum_j \int dt \tilde{\eta}_a(t) \cdot \tilde{\eta}_a^*(t)\right)$$

СПАСИБО ЗА
ВНИМАНИЕ !

$$\frac{d\sigma_{ij}}{dt} = -\left(\frac{\sigma_{ij}}{t}\right) \frac{dH}{d\sigma_{ij}} + \sigma_{ij}$$
$$\frac{1}{\sigma_{ij} t} \frac{dH}{d\sigma_{ij}} = \left(\frac{1}{\sigma_{ij}} - \frac{d\sigma_{ij}}{d\sigma_{ij}}\right) \frac{dH}{d\sigma_{ij}} + \frac{1}{\sigma_{ij}}$$



$$\frac{d\sigma_{ij}}{dt} = \sigma_{ij} \left(\frac{1}{t} - \frac{d\sigma_{ij}}{d\sigma_{ij}} \right) \frac{dH}{d\sigma_{ij}} + \frac{1}{\sigma_{ij}}$$

(4)

$$\frac{1}{\sigma_{ij} t} \frac{dH}{d\sigma_{ij}} = \left(\frac{1}{\sigma_{ij}} - \frac{d\sigma_{ij}}{d\sigma_{ij}} \right) \frac{dH}{d\sigma_{ij}} + \frac{1}{\sigma_{ij}}$$

(5)