

УДК 538.911

ДАЛЬНОДЕЙСТВИЕ ОСЦИЛЛИРУЮЩИХ ПОТЕНЦИАЛОВ МЕЖАТОМНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ И СТАБИЛЬНЫЕ СТРУКТУРЫ

О. В. Вольф, Г. М. Калибаева, В. С. Степанюк, А. А. Кацнельсон

(кафедра физики твердого тела)

Проведено молекулярно-динамическое моделирование системы из 256 атомов Al, взаимодействие между которыми описывалось потенциалом Хейне—Абаренкова—Анималу. В одном случае потенциал был обрезан с учетом только одного минимума, а в другом — учитывались три первых минимума. Результаты анализа многогранников Вороного показали, что усиление дальнего действия осциллирующего потенциала в молекулярно-динамическом эксперименте способствует большей аморфизации системы.

Принято считать, что дальнедействующие потенциалы межатомного взаимодействия способствуют стабилизации кристаллических структур. В то же время энергия кристаллических структур должна быть тем ниже, чем больше минимумов потенциалов межатомного взаимодействия $V(r)$ будет совпадать с положениями атомов в такой структуре. В простых металлах

$$V(r) \sim (\cos 2kr)/r^3 \quad (1)$$

и совершенно очевидно, что лишь в редких случаях одновременно многие минимумы потенциала типа (1) будет соответствовать радиусам координационных сфер.

С этой точки зрения стабильность кристаллических структур при увеличении дальнего действия осциллирующих потенциалов должна понижаться, что должно проявляться в понижении доли конфигураций атомных группировок, аналогичных наблюдающимся в кристаллах.

Для проверки этого предположения в настоящей работе методом молекулярной динамики (используется NVE-ансамбль) была смоделирована система из 256 атомов Al, взаимодействие между которыми описывалось потенциалом Хейне—Абаренкова—Анималу с экранированием Вашиста—Сингви [1, 2]. В одной системе этот потенциал был обрезан таким образом, чтобы учитывался лишь один его минимум (назовем ее моделью 1), а в другой системе — чтобы учитывались первые три минимума потенциала (модель 2).

Обе модели сначала «нагревались» до температуры намного выше температуры плавления ($T=2000$ К), далее проводилось быстрое охлаждение из расплава до 300 К в течение 1700 временных шагов (один временной шаг равен 10^{-15} с). После этого проводилась термостабилизация модели в течение 20 000 временных шагов.

При температурах 2000 К и 300 К (в начале и в конце термостабилизации) проводился анализ многогранников Вороного [1]. Результаты анализа приведены в таблице и на рисунке.

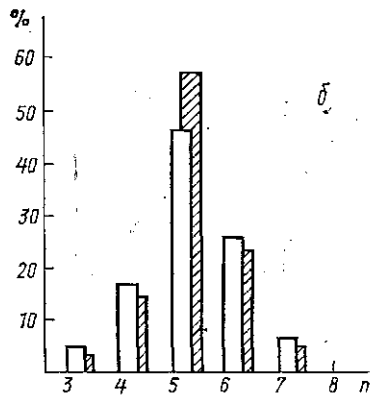
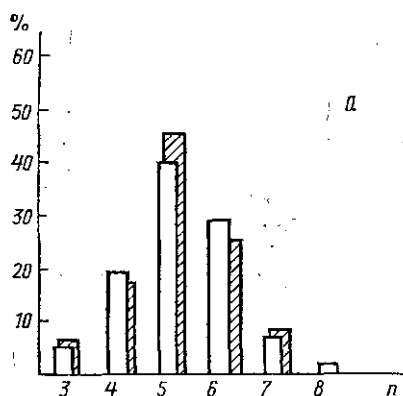
Температура	Икосаэдроподобные	Призмы	Структуры типа ГЦК	Структуры типа ОЦК
2000 К	3	11	16	1
	2	4	14	0,5
300 К (начало)	4	12	14	—
	9	10	12	1
300 К (конец)	10	17	13	0,5
	26	17	8	—

Примечание. Верхняя цифра — модель 1, нижняя — модель 2.

На рисунке представлено количество многоугольников N , имеющих n сторон ($n=3, 4, \dots, 8$) и составляющих грани многогранников Вороного, описанных вокруг атомов Al, для обеих моделей. Светлые области соответствуют модели 1, заштрихованные — модели 2. Рисунки а и б соответствуют началу и концу термостабилизации.

На обеих диаграммах наблюдается максимум при $n=5$, причем для модели 2 количество пятиугольников значительно больше, чем для модели 1; в конце термостабилизации эта разница увеличивается.

В таблице представлены характерные типы многогранников Вороного для обеих моделей (в процентах от общего числа многогранников) при температурах 2000 К и 300 К (в начале и в конце термостабилизации).



Изменение количества граней многогранников Вороного, имеющих n сторон, с течением времени

Из таблицы видно, что модели 2 соответствует большее количество некристаллографических икосаэдрических микроструктур и значительно меньшее количество кристаллографических структур (типа ГЦК), причем в процессе термостабилизации в обеих системах наблюдается рост количества икосаэдрических структур.

По результатам проведенного анализа многогранников Вороного можно сделать вывод, что использование дальнего действующего осциллирующего потенциала в молекулярно-динамическом эксперименте способствует большей аморфизации системы. Этот результат вполне соответствует приведенным выше соображениям и показывает, что в общем случае усиление дальнего действия осциллирующих потенциалов понижает устойчивость кристаллических структур и способствует аморфизации конденсированных сред.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Полухин В. А., Ватолин Н. А. Моделирование аморфных металлов. М., 1985. [2] Vashista P., Singwi Y. S. // Phys. Rev. 1972. В6. P. 875.

Поступила в редакцию
29.07.92