

Proceedings of the
International meeting



Ordering in Minerals and Alloys

20-th Jubilee International meeting

10-15 of September 2017
Rostov-on-Don - Yuzhny, Russia

issue 20, volume I

Упорядочение в минералах и сплавах
20-й юбилейный международный симпозиум

При поддержке
Российского фонда
фундаментальных исследований

10-15 сентября 2017
г.Ростов-на-Дону - пос.Южный
(п.Южный), Россия

МИКРОСКОПИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА И ОСОБЕННОСТИ ТРЕХЧАСТИЧНЫХ КОРРЕЛЯЦИЙ В НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ СИСТЕМАХ

Б.Н. Галимзянов, А.В. Мокшин

*Институт физики, Казанский (Приволжский) федеральный университет
420008 ул. Кремлевская 18, г. Казань, Россия
e-mail: bulatgnmail@gmail.com*

Выполнена количественная оценка трехчастичных корреляций в жидком и аморфном алюминии через анализ конфигурационных данных, полученных через моделирование методом молекулярной динамики. Предложен оригинальный метод трехчастичного структурного анализа, основанный на определении трехчастичной корреляционной функции. Обнаружено наличие «устойчивых» трехчастичных корреляций как в жидком, так и в аморфном алюминии. Показано, что в случае жидкой системы трехчастичные корреляции охватывают пространственные масштабы, превышающие размер первой координационной сферы. В случае аморфной системы трехчастичные корреляции охватывают пространственные масштабы, превышающие размеры второй и третьей координационных сфер.

MICROSCOPIC STRUCTURE AND FEATURES OF THREE-PARTICLE CORRELATIONS IN DISORDERED SYSTEMS

B.N. Galimzyanov, A.V. Mokshin

*Institute of Physics, Kazan Federal University
18 Kremlyovskaya St. 420008 Kazan, Russia
e-mail: bulatgnmail@gmail.com*

A quantitative evaluation of three-particle correlations in liquid and amorphous aluminum was carried out by analysis of configuration data obtained by molecular dynamics simulation. An original method of three-particle structural analysis based on the determination of the three-particle correlation function is proposed. The presence of "stable" three-particle correlations in liquid and amorphous aluminum was found. In the case of the liquid system it was shown that three-particle correlations cover the spatial scales, which exceed the size of the first coordination sphere. In the case of the amorphous system the three-particle correlations cover the spatial scales, which exceed the size of the second and third coordination spheres.

На протяжении последних десятилетий исследование микроскопической структуры неупорядоченных конденсированных систем является весьма актуальным [1-6]. В таких системах, как жидкости, переохлажденные жидкости и стекла могут формироваться как кристаллические, так и «устойчивые» неупорядоченные структуры, например, обуславливающие проявление эффекта динамической неоднородности, что подтверждается большим количеством как экспериментальных, так и симуляционных исследований [4, 5]. Наличие «устойчивые» неупорядоченных структур достаточно сложно обнаружить с помощью традиционных экспериментальных методов структурного анализа; из-за малых размеров и коротких времен жизни такие структуры могут не проявляться в статическом структурном факторе и в спектрах динамического структурного фактора. Здесь, помимо парных корреляций, возникает необходимость в учете трехчастичных корреляций, что достаточно сложно выполнить на основе экспериментальных измерений [7, 8]. С другой стороны, количественная оценка трехчастичных корреляций может быть осуществлена из анализа конфигурационных данных, получаемых через моделирование методом молекулярной динамики [7, 9]. Поэтому в

настоящей работе мы предлагаем оригинальный подход к оценке трехчастичных корреляций из результатов молекулярно-динамических расчетов.

Детали моделирования. Моделируемая система состоит из $N = 864$ атомов алюминия, расположенных в кубической симуляционной ячейке с периодическими граничными условиями во всех направлениях. Сила межатомных взаимодействий определяется потенциалом EAM [10]. Интегрирование уравнений движения осуществляется скоростным алгоритмом Верле с временным шагом 1 фс. Сперва готовятся жидкие образцы при температурах $T = 1000, 1500$ и 2000 К и при давлении 1 атм, которые приводятся в состояние термодинамического равновесия в течение 100 пс времени (см. рис. 1а). Далее, жидкие образцы охлаждаются со скоростью 10^{12} K/c до температур $T = 50, 100$ и 150 К (при давлении 1 атм), что соответствует аморфному состоянию. Конфигурационные данные получают через моделирование атомарной динамики с помощью пакета LAMMPS. Наличие жидкой и аморфной структур подтверждается через расчет известной парной корреляционной функции $g(r)$ [7]. В качестве примера, на рисунке 1б показаны кривые $g(r)$ для жидкого и аморфного алюминия при температурах $T = 1000 \text{ K}$ и $T = 150 \text{ K}$, соответственно. Температура плавления алюминия при нормальных условиях составляет $T_m \approx 934 \text{ K}$.

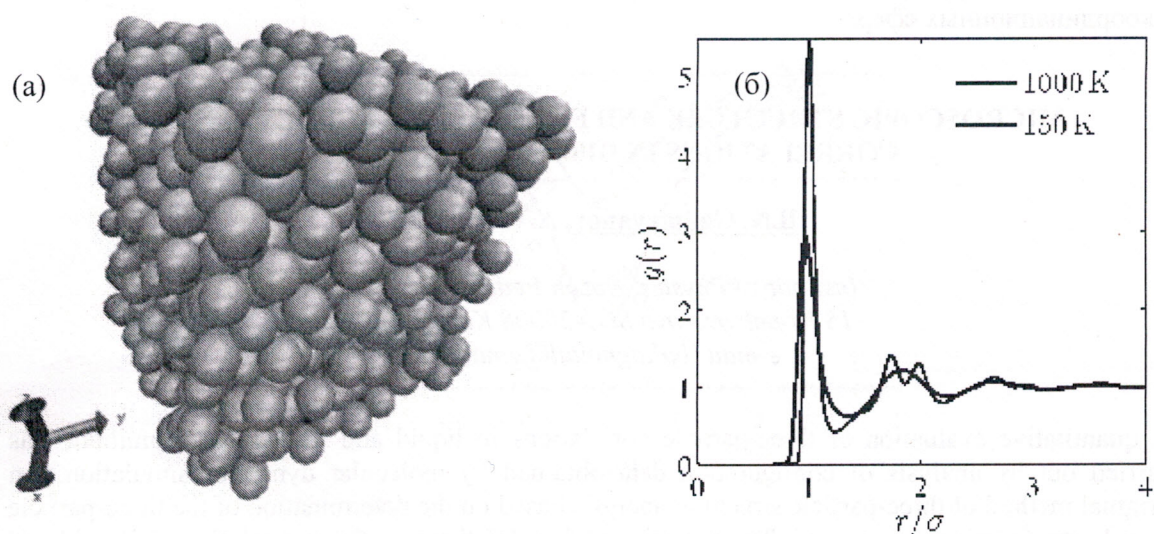


Рис. 1- (а) – вид жидкой системы, (б) – парная корреляционная функция, полученная при различных температурах (здесь $\sigma = 2.86 \text{ \AA}$).

Результаты. Для количественной оценки трехчастичных корреляций нами предложен оригинальный подход, основанный на рассмотрении взаимного расположения трех произвольных атомов [9]. А именно, с геометрической точки зрения любые три атома системы образуют в пространстве фигуру в виде треугольника; атомы располагаются на его вершинах. Благодаря известным координатам каждого атома площадь l -го треугольника S_l достаточно точно определяется с помощью известной формулы Герона:

$$S_l = \sqrt{p(p - r_{ij})(p - r_{jk})(p - r_{ik})}, \quad (1)$$

где $p = (r_{ij} + r_{jk} + r_{ik})/2$ - есть полупериметр, r_{ij}, r_{jk}, r_{ik} - есть координаты атомов с индексами i, j и k . Распределение треугольников по площадям определяется следующим образом [9]:

$$g(S) = \frac{1}{N_T} \sum_{i=1}^{N_T} \delta(S - S_i), \quad (1)$$

где N_T - количество треугольников в системе, $\delta(\dots)$ - дельта функция Дирака.

На рис. 2 показаны распределения трехчастичной корреляционной функции $g(S)$, полученные для жидкого алюминия при различных температурах. На этом рисунке распределения $g(S)$ имеют два ярка выраженных максимума, которые указывают на наличие «устойчивых» трехчастичных корреляций. Треугольники с площадями $S \approx 0.42\sigma^2$ участвуют в формировании первого максимума в распределениях $g(S)$, в то время как треугольники с площадями $S \approx 0.81\sigma^2$ дают вклад во второй максимум. Схематические рисунки этих треугольников показаны во вставках на рис. 2. С увеличением температуры высота максимумов уменьшается вследствие ослабления трехчастичных корреляций; с увеличением температуры положение максимумов смещается в область малых значений площади S , что обусловлено уменьшением «времени жизни» треугольников с большими площадями.

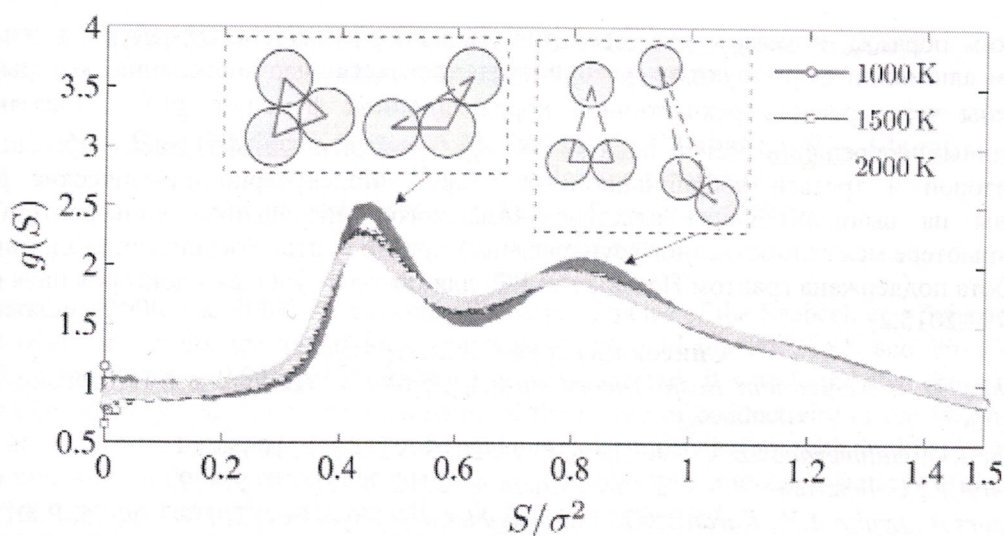


Рис. 2- Трехчастичная корреляционная функция для жидкого алюминия, полученная при различных температурах.

На рис. 3 изображены распределения $g(S)$, полученные для аморфного алюминия при различных температурах. В отличие от жидкой системы, распределение $g(S)$ для аморфного алюминия содержит 5 ярко выраженных максимумов. Наличие максимумов, положение которых соответствует площадям $S \approx 0.02\sigma^2$ и $S \approx 0.26\sigma^2$, обусловлено зарождением кристаллической фазы. При формировании остальных максимумов участвуют треугольники с площадями $S \approx 0.46\sigma^2$, $S \approx 0.82\sigma^2$ и $S \approx 1.2\sigma^2$, которые указывают на наличие достаточно устойчивых трехчастичных корреляций. Примечательно, что в случае аморфной системы положение максимумов слабо зависит от температуры, в то время как наблюдается незначительное уменьшение высоты максимумов с увеличением температуры. Во вставках на рис. 3 показаны схематические изображения треугольников, дающие вклад в основные максимумы функции $g(S)$ для аморфного алюминия.

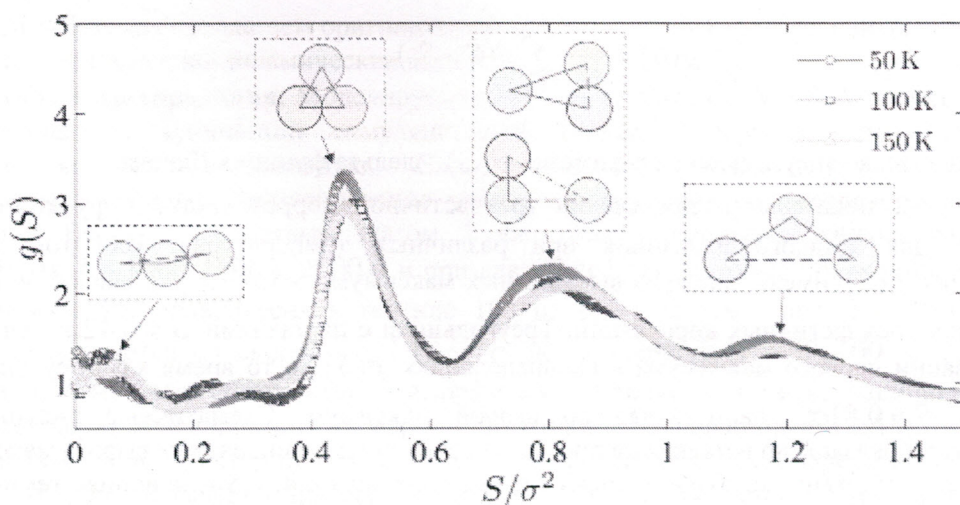


Рис. 3- Трехчастичная корреляционная функция для аморфного алюминия, полученная при различных температурах.

Таким образом, показано, что, несмотря на неупорядоченную структуру, в жидком и аморфном алюминии формируются «устойчивые» трехчастичные корреляции, которые были обнаружены через расчет трехчастичной корреляционной функции $g(S)$. Показано, что трехчастичные корреляции могут охватывать пространственные масштабы, превышающие размер второй и третьей координационных сфер. Молекулярно-динамические расчеты выполнены на вычислительном кластере Казанского федерального университета и на суперкомпьютере межведомственного суперкомпьютерного центра Российской академии наук.

Работа поддержана грантом Президента РФ для молодых ученых - докторов наук (проект № МД-5792.2016.2)

Список цитируемой литературы

1. Kashchiev D. // *Nucleation: Basic Theory with Applications* (Butterworth-Heinemann, Frenkel Oxford, 2000).
2. Mokshin A.V., Galimzyanov B.N. // *J. Chem. Phys.* 2015. V. 142. P. 104502.
3. Mokshin A.V., Galimzyanov B.N. // *J. Phys. Chem. B.* 2012. V. 116. P. 11959.
4. Vorselaars B., Lyulin A.V., Karatasos K., Michels M.A.J. // *Phys. Rev. E.* 2007. V. 75. P. 011504.
5. Zahn K., Maret G., Ruß C., von Grunberg H.H. // *Phys. Rev. Lett.* 2003. V. 91. P. 115502.
6. Mokshin A.V. // *Theoret. Math. Phys.* 2015. V. 183. P. 449.
7. March N.H., Tosi M.P. // *Atomic Dynamics in Liquids* (Dover, New York, 1991).
8. Egelstaff P.A., Page D.I., Heard C.R.T. // *Phys. Lett. A.* 1969. V. 30. P. 376.
9. Galimzyanov B.N., Mokshin A.V. // *Physica A.* 2017. V. 478. P. 103.
10. Winey J.M., Kubota A., Gupta Y.M. // *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* 2009. V. 17. P. 055004.