

МИНОБРНАУКИ РОССИИ

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«САРАТОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИМЕНИ Н.Г.ЧЕРНЫШЕВСКОГО»

Кафедра радиофизики и нелинейной динамики

**Исследование нелинейных локализованных мод, возбуждаемых в
трехмерной решетке связанных частиц при высокоинтенсивном
воздействии**

АВТОРЕФЕРАТ БАКАЛАВРСКОЙ РАБОТЫ

студента 4 курса 4032 группы
направления 03.03.03 Радиофизика
Института физики
Колесникова Ивана Дмитриевича

Научный руководитель

доцент, к.ф.-м.н.

И.А. Шепелев

Зав. кафедрой радиофизики

и нелинейной динамики,

д.ф.-м.н., доцент

Г.И. Стрелкова

Саратов 2021 г.

Введение

Однослойные материалы, состоящие из жестких слабосвязанных слоев, заслуживают большого внимания в современном сообществе, поскольку они демонстрируют новый механизм деформации при сжатии по слоям. Для создания таких материалов искусственным путем был проведен ряд исследований.

Воздействие начального высокоинтенсивного направленного импульса на весь край наноленты двумерного материала приводит к локализации энергии в виде ударной волны, представляющей собой возмущение, движение которого превышает локальную скорость звука. Подобно обычной, ударная волна несет энергию и может распространяться через двумерную среду в двух кристаллографических направлениях зигзаг и кресло.

Измерения основываются на том факте, что структура волн и динамика волновых взаимодействий определяются процессами упругопластического деформирования. Волновой характер нагрузки дает достаточно наглядную и однозначную интерпретацию результатов измерений.

Актуальность состоит в том, что изучение процессов позволит получить детальное описание нелинейных эффектов в распределении энергии и массы внутри материала при воздействии ударных волн, это даст возможность повысить спектр применимости материалов в разработке современной техники.

Цель работы состоит в численном моделировании и исследовании динамики и нелинейных свойств ударной волны в двумерном материале со сложной ступенчатой гексагональной структурой.

Для достижения поставленной цели нам необходимо решить следующую задачу, которая состоит в подробном исследовании поведения и анализе механизмов деформации при высокоскоростных нагрузках.

Основное содержание работы

Моделью изучения данной работы является материал со сложной пространственной гексагональной структурой - фосфорен. Для моделирования

и исследования используется метод молекулярной динамики с использованием модельного трехтельного потенциала межатомного взаимодействия Стиллинджера-Вебера в программном пакете LAMMPS. Для моделирования взаимодействия атомов фосфорена параметры потенциала выбираются в соответствии с таблицей 1.

	ϵ (eV)	σ (Å)	a	λ	γ	$\cos\theta_0$	A	B	p	q	tol
P1P1P1	1.0	0.2103	13.3143	9.2660	2.1707	-0.1045	4.3807	3045.2	4.0	0	0
P2P2P2	1.0	0.2103	13.3143	9.2660	2.1707	-0.1045	4.3807	3045.2	4.0	0	0
P1P2P2	1.0	0.1559	17.9602	0	2.9282	0	4.0936	10164.1	4.0	0	0
P2P1P1	1.0	0.1559	17.9602	0	2.9282	0	4.0936	10164.1	4.0	0	0
P1P1P2	1.0	0	0	11.4510	0	-0.2419	0	0	0	0	0
P1P2P1	1.0	0	0	11.4510	0	-0.2419	0	0	0	0	0
P2P1P2	1.0	0	0	11.4510	0	-0.2419	0	0	0	0	0
P2P2P2	1.0	0	0	11.4510	0	-0.2419	0	0	0	0	0

Таблица 1. Значения параметров потенциала Стиллинджера-Вебера для моделирования фосфорена.

Для однослойного фосфорена характерна структура четырехугольной пирамиды, из-за схожести по структуре, где три электрона атома фосфора связываются ковалентно с тремя другими атомами, оставив одну свободную пару. Два атома фосфора находятся в плоскости слоя под углом 99° друг от друга, а третий атом материала находится между слоями под углом 103° , что дает средний угол 102° .

С помощью научного программного обеспечения для визуализации и анализа данных атомического моделирования Ovito можно увидеть гексагональную структуру и проследить образование ударной волны и динамику ее движения, а также происходящие в ней изменения. Атомы фосфорена рассматриваются как материальные точки, которые связаны с помощью жесткого потенциала. Исследование производится в декартовой системе координат, где ось x соответствует зигзагообразному направлению, а ось y направлению кресло гексагональной решетки.

Рассмотрим кристаллографическое направление кресло. При исследовании волн, распространяющихся в направлении кресла,

рассматриваемая решетка состоит из 800×60 атомов. Рассчитанные ячейки вытянуты по направлению распространения ударной волны и имеют относительно небольшие размеры в поперечном направлении. Это связано с квазиодномерной динамикой ударных волн, движущихся по рассматриваемым высоко симметричным кристаллографическим направлениям.

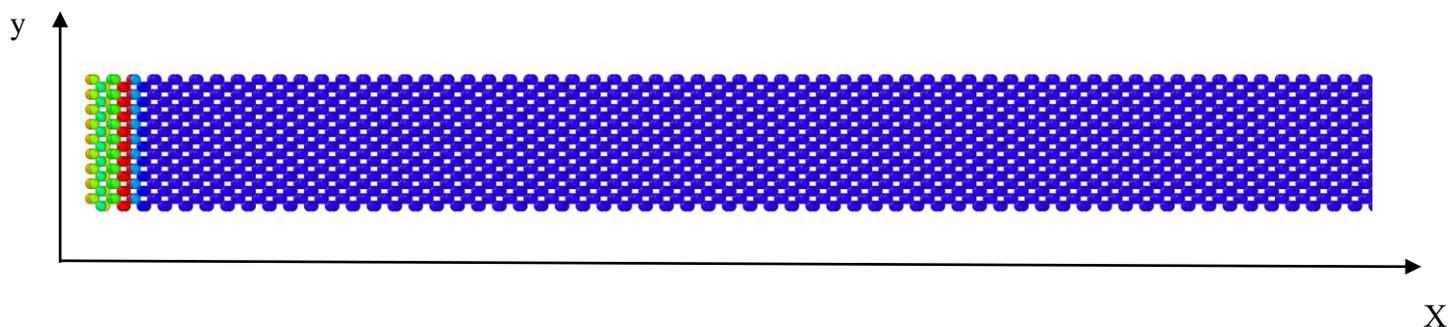


Рисунок 1. Кристаллическая решетка фосфора при направленном высокоинтенсивном начальном воздействии со скоростью $V = 10 \text{ \AA/пс}$. Цветом выделены атомы с повышенной энергией. Время наблюдения $t = 0,02 \text{ пс}$. Начало образования ударной волны.

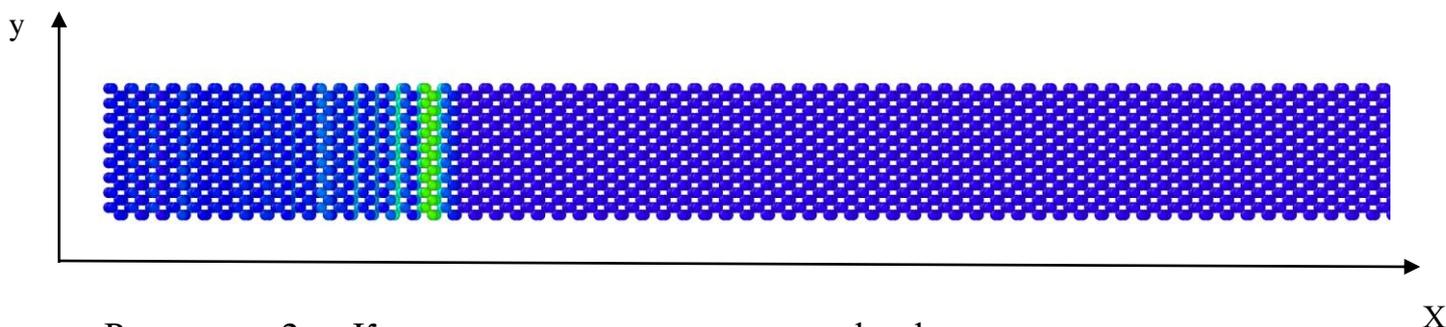


Рисунок 2. Кристаллическая решетка фосфора при направленном высокоинтенсивном начальном воздействии со скоростью $V = 10 \text{ \AA/пс}$. Время наблюдения $t = 0.2 \text{ пс}$. Образование ударной волны.

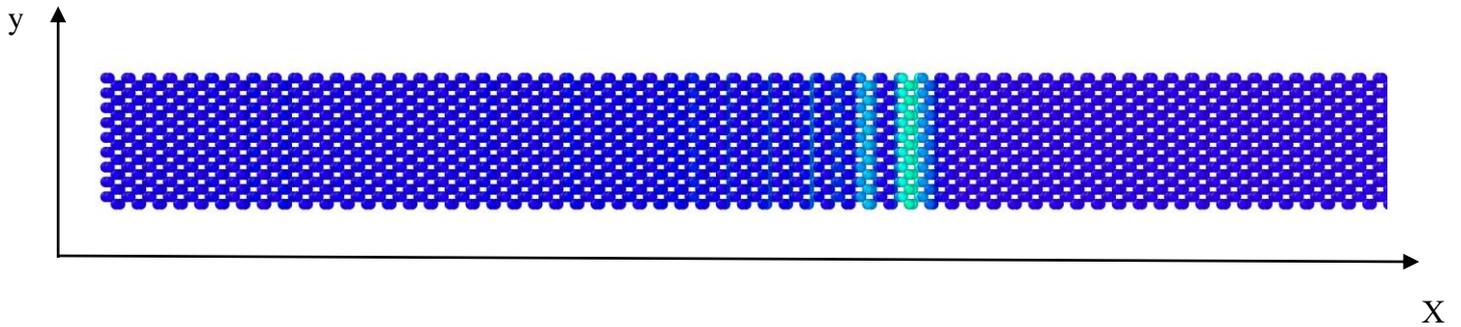


Рисунок 3. Кристаллическая решетка фосфора при направленном высокоинтенсивном начальном воздействии со скоростью $V = 10 \text{ \AA/пс}$. Время наблюдения $t = 0.5 \text{ пс}$. Распространение ударной волны.

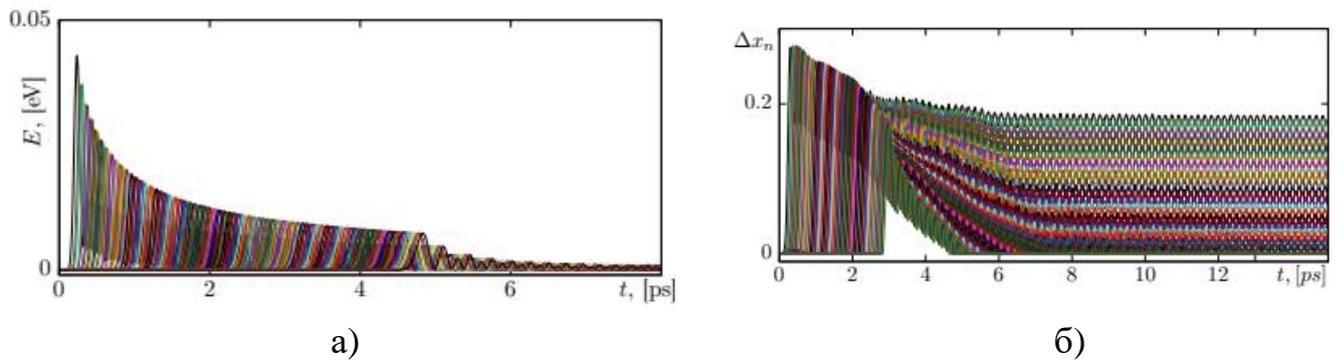


Рисунок 4. Характеристики локализованных мод в направлении кресло. а) зависимость полной энергии ударной волны от времени, б) зависимость относительного смещения атомов от времени.

Рассмотрим тоже направление, увеличив скорость в 2.5 раза.

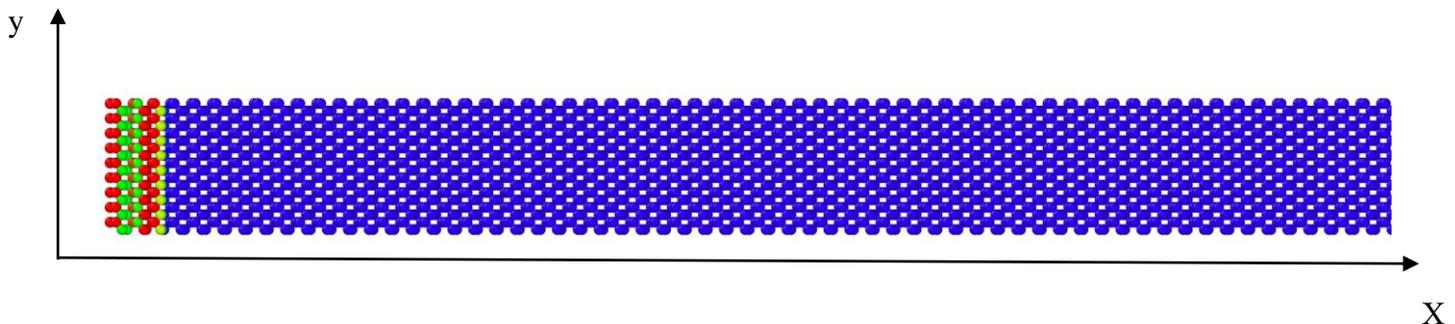


Рисунок 5. Кристаллическая решетка фосфора при направленном высокоинтенсивном воздействии скоростью $V_0 = 25 \text{ \AA/пс}$. Время наблюдения $t = 0.02 \text{ пс}$. Начало образования ударной волны.

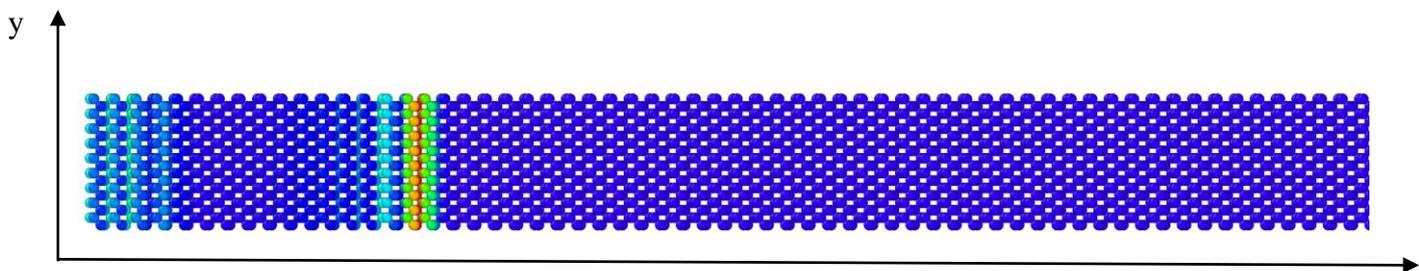
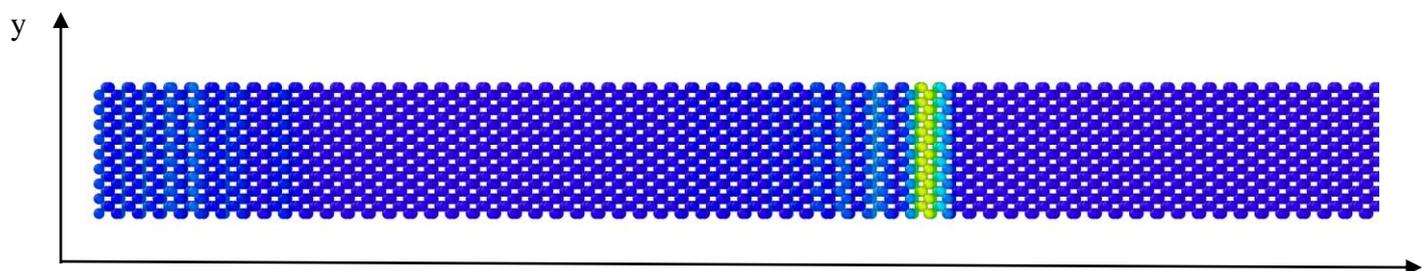
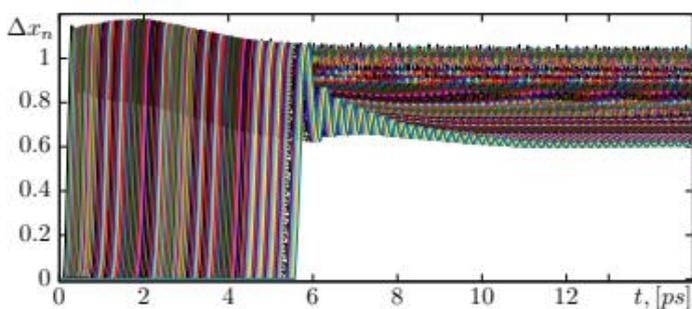


Рисунок 6. Кристаллическая решетка фосфора при направленном высокоинтенсивном начальном воздействии со скоростью $V = 10 \text{ \AA/пс.}$

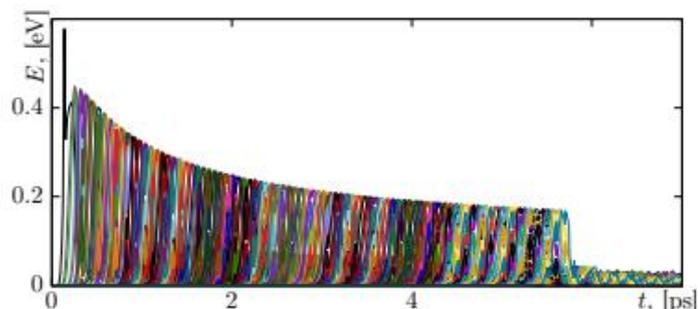


Кристаллическая решетка фосфора при направленном высокоинтенсивном воздействии скоростью $V = 25 \text{ \AA/пс.}$ Время наблюдения $t = 0.2 \text{ пс.}$ Образование ударной волны.

Рисунок 7. Кристаллическая решетка фосфора при направленном высокоинтенсивном воздействии с начальной скоростью $V_0 = 25 \text{ \AA/пс.}$ Время наблюдения $t = 0.5 \text{ пс.}$ Распространение ударной волны.



а)



б)

Рисунок 8. Нелинейные характеристики локализованных мод в направлении кресло. а) зависимость полной энергии с течением времени б) зависимость среднего смещения с течением времени.

Из графиков видно, что с увеличением скорости полная энергия возмущения при $V=10 \text{ \AA/пс}$ приблизительно в 24 раза меньше, чем в случае $V=25 \text{ \AA/пс}$. Спад энергии происходит плавно и заканчивается в обоих случаях примерно при $t = 8 \text{ пс}$. Следовательно, чем больше скорость, тем волна большее расстояние преодолает за то же временем. График смещения показывает, что уровень сжатия стремительно приближается к 0, при $V_0=10 \text{ \AA/пс}$ $t = 13 \text{ пс}$, но при этом же времени и скорости $V_0=25 \text{ \AA/пс}$ уровень сжатия плавно уменьшается и после уровня $0.65a$ почти не изменяется с течением времени.

Рассмотрим кристаллографическое направление фосфорена зигзаг. При исследовании ударных волн, распространяющихся в направлении кресла, рассматриваемая решетка состоит из 60×800 атомов.

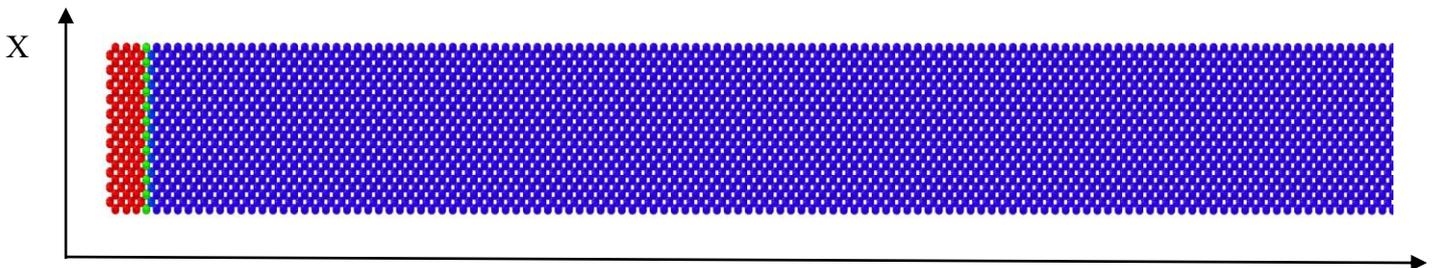


Рисунок 9. Кристаллическая решетка фосфорена при направленном высокоинтенсивном воздействии с начальной скоростью $V_0 = 15 \text{ \AA/пс}$. Время наблюдения $t = 0.02 \text{ пс}$. Начало движения ударной волны.

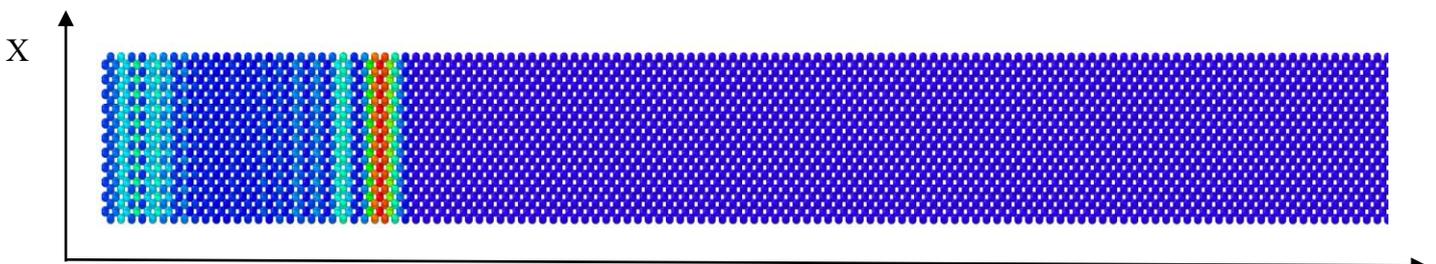


Рисунок 10. Кристаллическая решетка фосфорена при направленном высокоинтенсивном воздействии с начальной скоростью $V_0 = 15 \text{ \AA/пс}$. Время наблюдения $t = 0.2 \text{ пс}$. Распространение ударной волны.

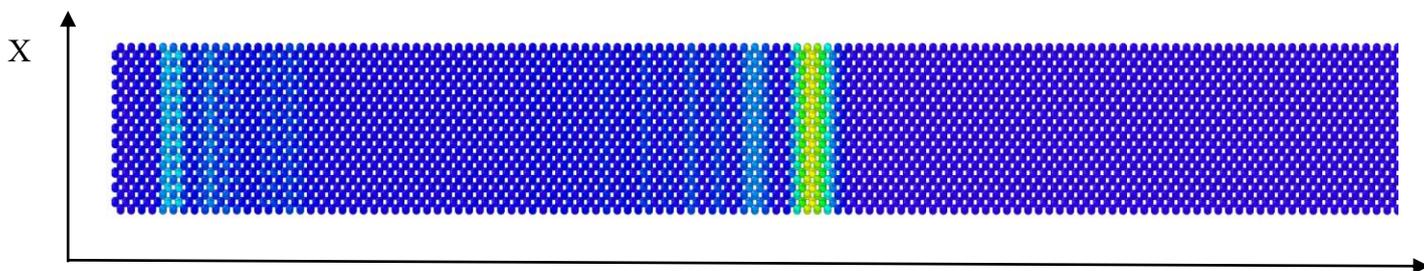
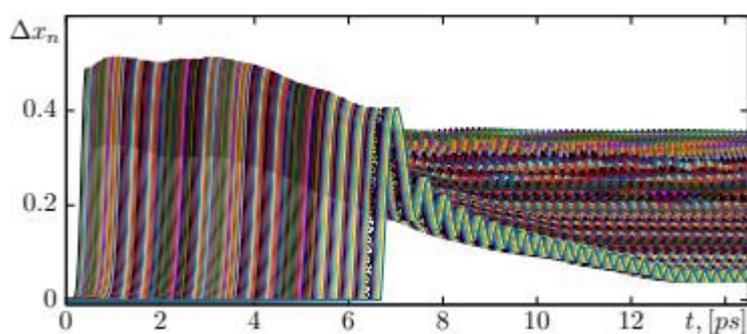
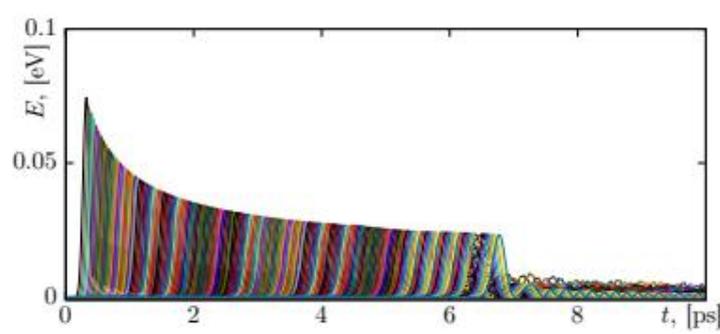


Рисунок 11. Кристаллическая решетка фосфора при направленном высокоинтенсивном воздействии с начальной скоростью $V_0 = 15 \text{ \AA/пс}$. Время наблюдения $t = 0.5 \text{ пс}$. Распространение ударной волны



а



б

Рисунок 13. Характеристики локализованных мод в направлении зигзаг. а) зависимость полной энергии ударной волны от времени б) зависимость относительного смещения атомов от времени.

Рассмотрим направление зигзаг увеличив скорость в 1.8 раза.

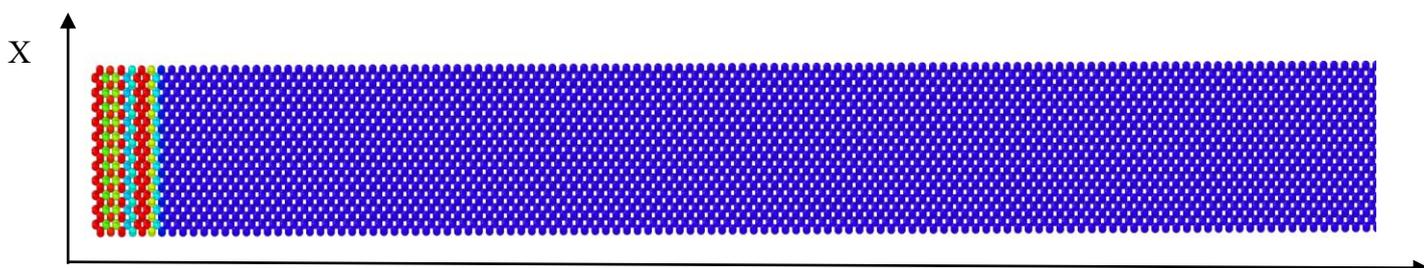


Рисунок 14. Кристаллическая решетка фосфора при направленном высокоинтенсивном воздействии с начальной скоростью $V_0 = 27 \text{ \AA/пс}$. Время наблюдения $t = 0.02 \text{ пс}$. Начало образования ударной волны.

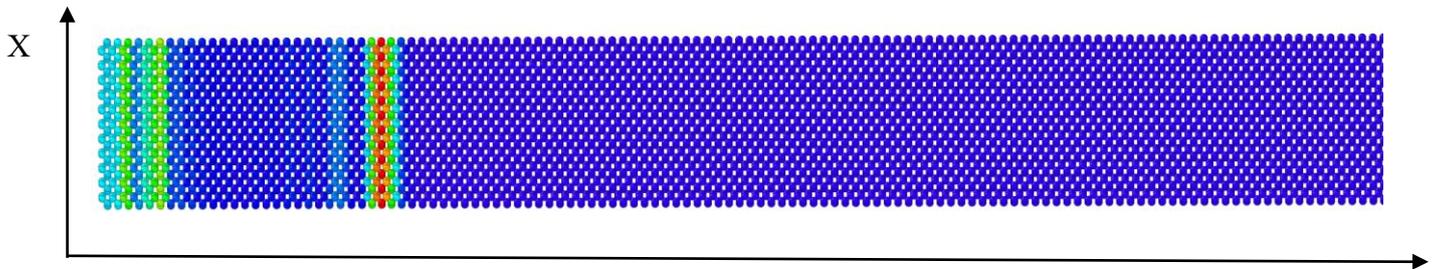


Рисунок 15. Кристаллическая решетка фосфора при направленном высокointенсивном воздействии с начальной скоростью $V_0 = 27 \text{ \AA/пс}$. Время наблюдения $t = 0.2 \text{ пс}$. Образование ударной волны.

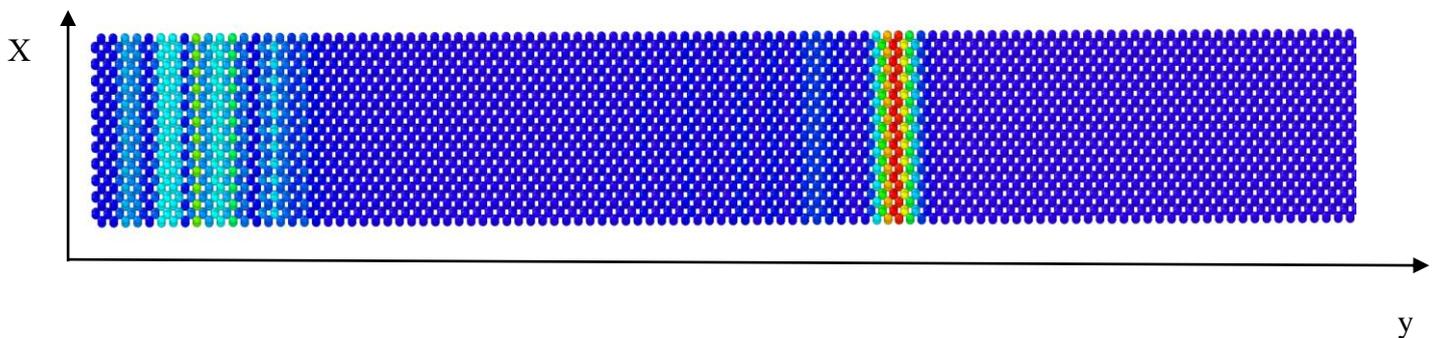
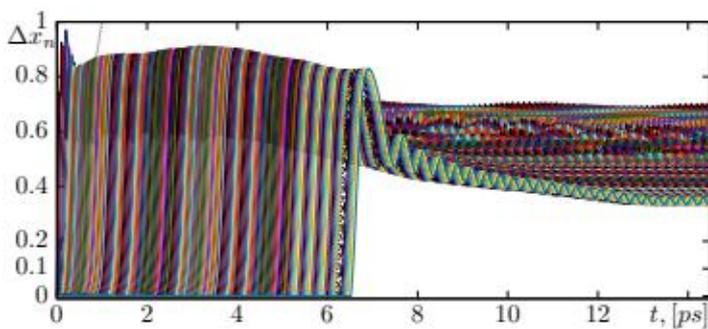
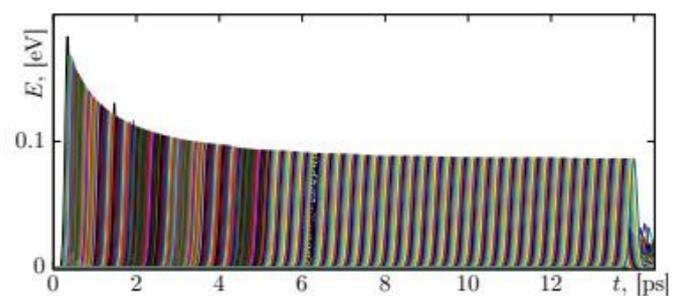


Рисунок 16. Кристаллическая решетка фосфора при направленном высокointенсивном воздействии с начальной скоростью $V_0 = 27 \text{ \AA/пс}$. Время наблюдения $t = 0.5 \text{ пс}$. Распространение ударной волны.



а)



б)

Рисунок 17. Характеристики локализованных мод в направлении зигзаг. а) зависимость полной энергии ударной волны от времени б) зависимость среднего смещения от времени.

На Рисунках 13 а) и 17 а), как и в случае зигзага при $V = 15 \text{ \AA/пс}$ среднее смещение быстро приближается к 0, когда при $V = 27 \text{ \AA/пс}$ уменьшение происходит более плавно. Максимум полной энергии полученной в результате высокоскоростного воздействия в 2.6 раза больше на рисунке 17(б) нежели на изображении 13 б).

Заключение

В ходе данной работы методами численного моделирования было проведено исследование количественных структурных параметров и каналов рассеяния энергии в гексагональной решетке фосфорена, подвергнутой высокоскоростному нагружению. Показано, что ударные волны могут быть образованы путем подачи начального импульса в один атомный ряд в направлении кресло или зигзаг. Установлено, что волна появляется после переходного периода, который составляет около 0.2- 0.3 пс. Во всех случаях ударные волны распространяются быстрее скорости звука в исследуемом материале. Исследованы механизмы распространения ударной волны. Построены графики зависимостей среднего смещения от времени и зависимость полной энергии от времени.