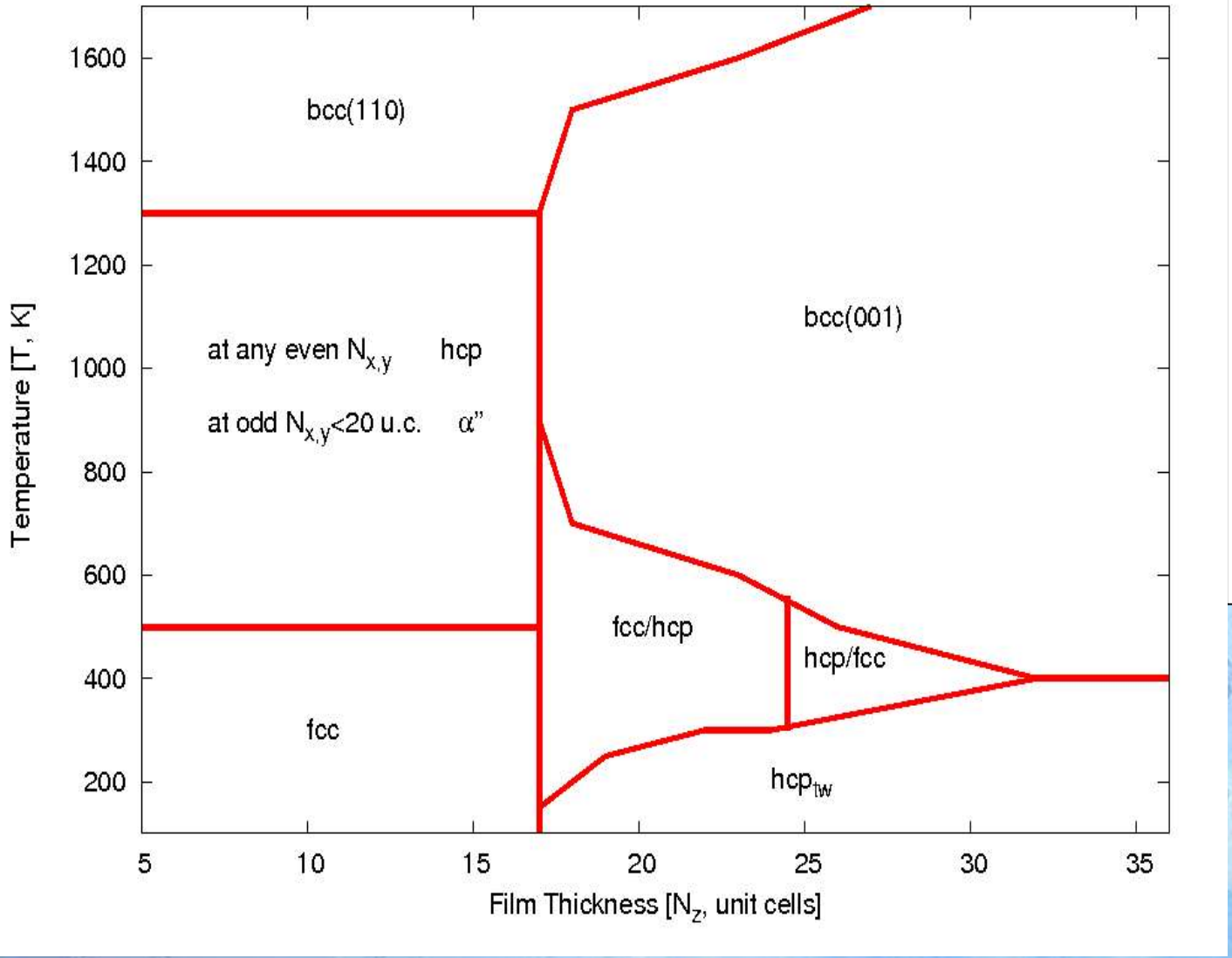
Динамика решетки пленок циркония

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

БУРЕВЕСТНИК-2014
«Проблемы ФТТ»
г.Туапсе

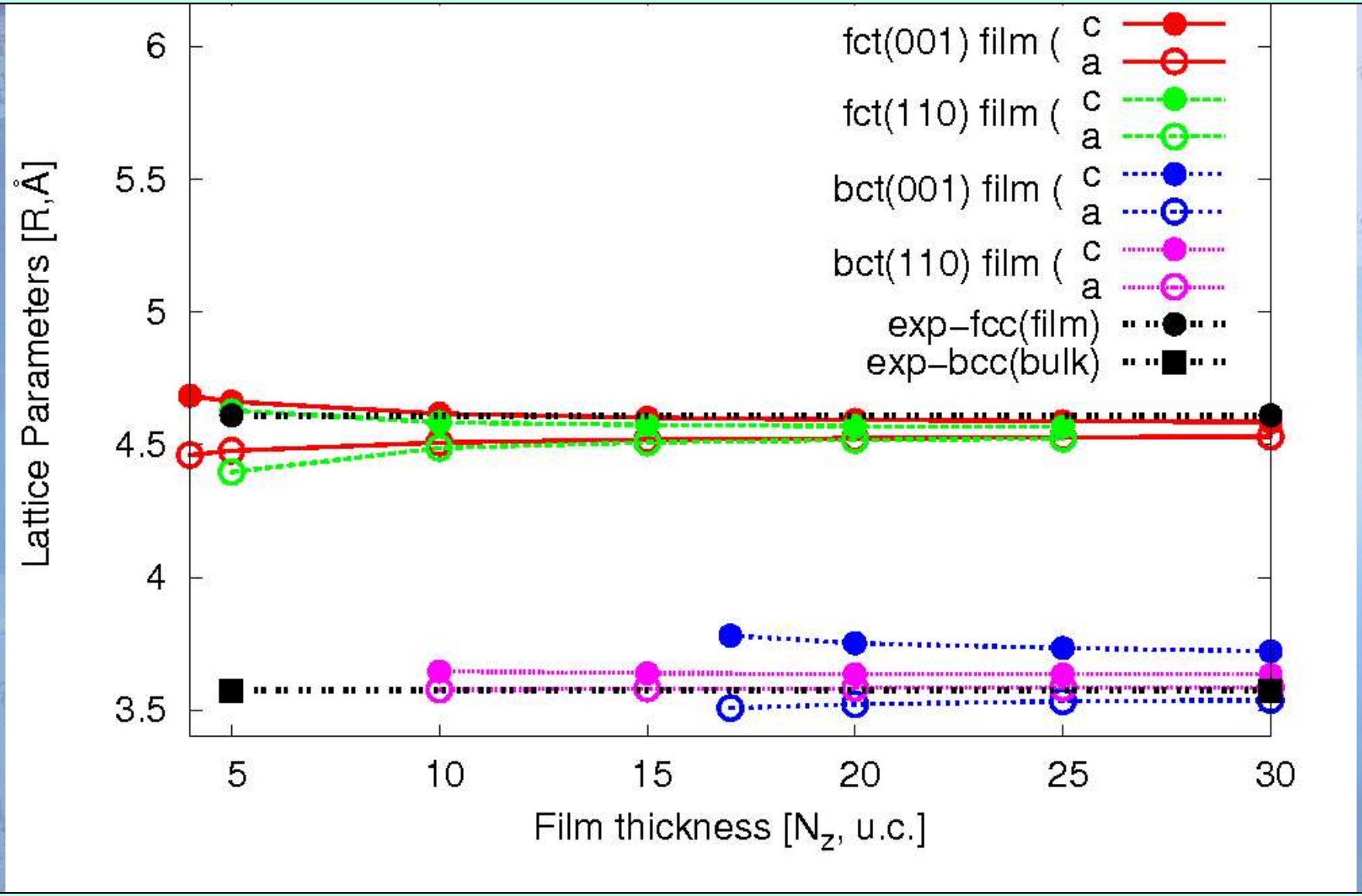
Фазовая диаграмма Температура - Толщина пленок Zr



1- размерный эффект
5u.c. и 17u.c.
2- структуры ГЦК и орторомбическая не наблюдаются в объемном цирконии

[Dolgusheva, Trubitsin Comp. Mat. Science **84**, (2014) 23-30]
[Долгушева, Трубицын ФТТ, **54,** № 12, (2012) 1652-1662]

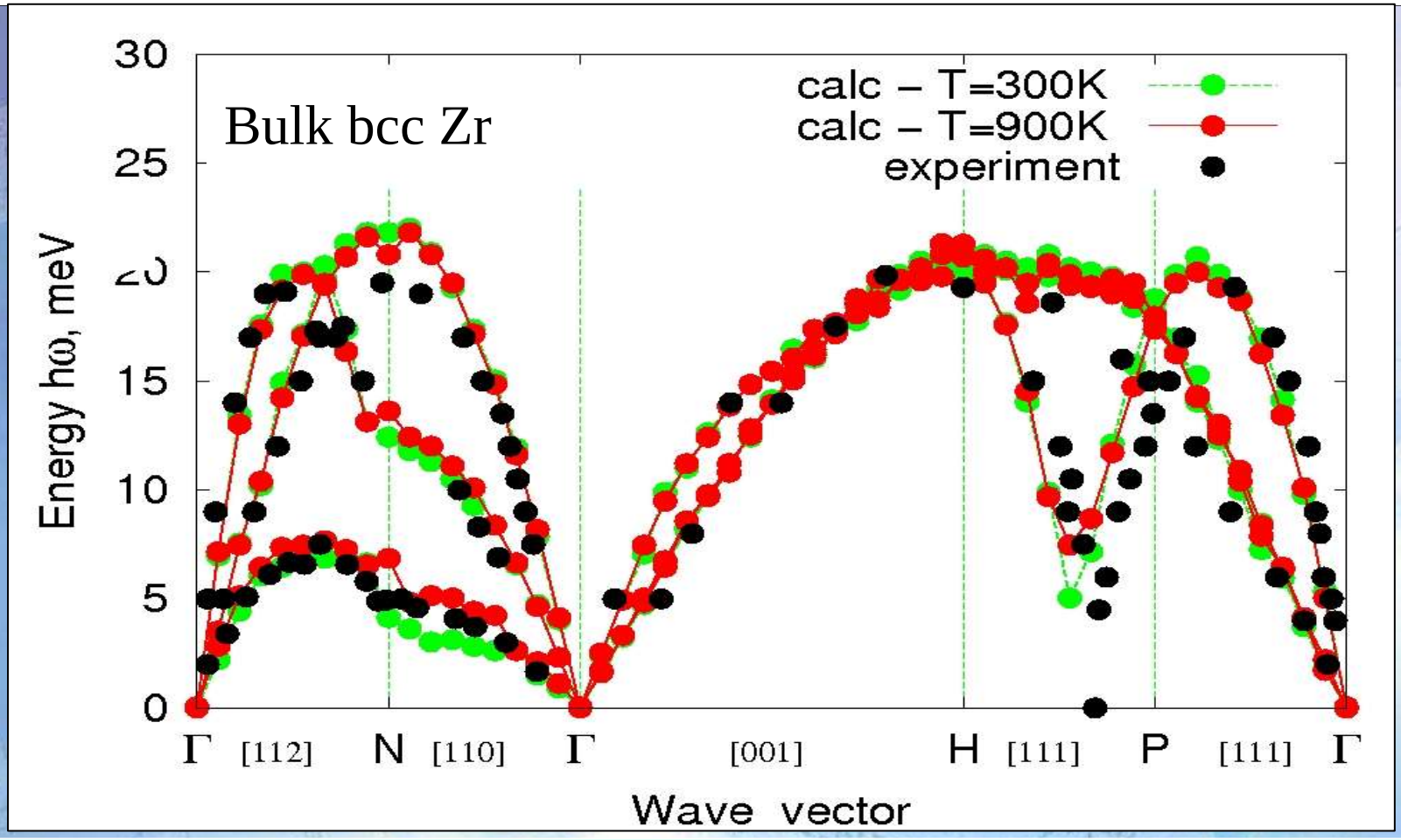
ПАРАМЕТРЫ РЕШЕТОК ПЛЕНОК ГЦК и ОЦК РАЗЛИЧНОЙ ТОЛЩИНЫ



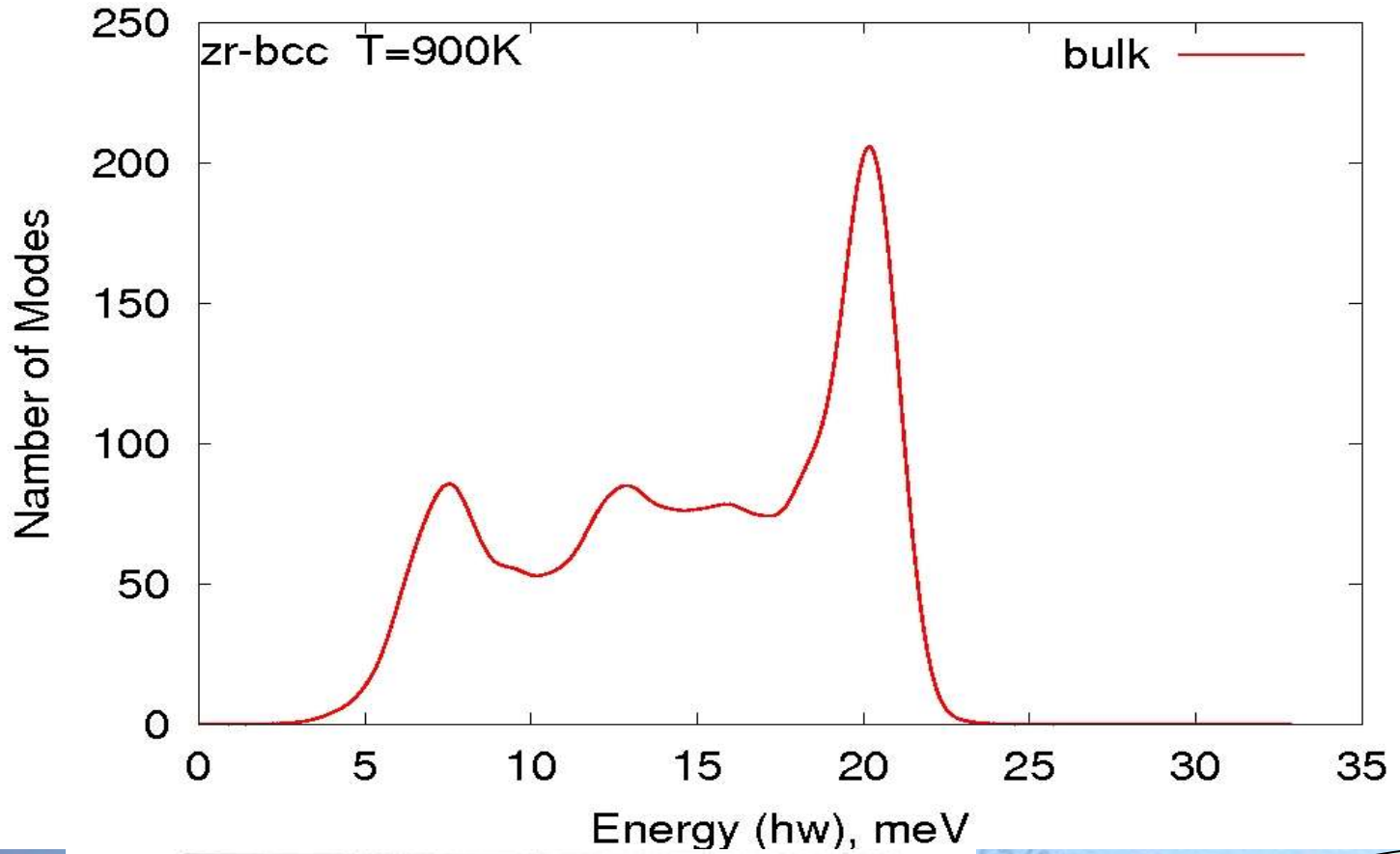
[exp-fcc(film) - Z. Ji at all Phys.Rev.B 68, 075421 (2003)]
[exp-bcc(bulk) - A. Heiming, W. Petry Phys.Rev.B 43, 10948(1991)]

Пакет XMD: [J. Rifkin: XMD Molecular Dynamics Program <http://xmd.SourceForge.net/>]
Потенциал: [M.I. Mendelev and G.J. Ackland. Phil.Mag.Lett. **87**,5, 349 (2007)]
Проведено дополнительное тестирование потенциала по фононным дисперсионным кривым при различной температуре и плотности колебательных состояний ПКС для ОЦК циркония.

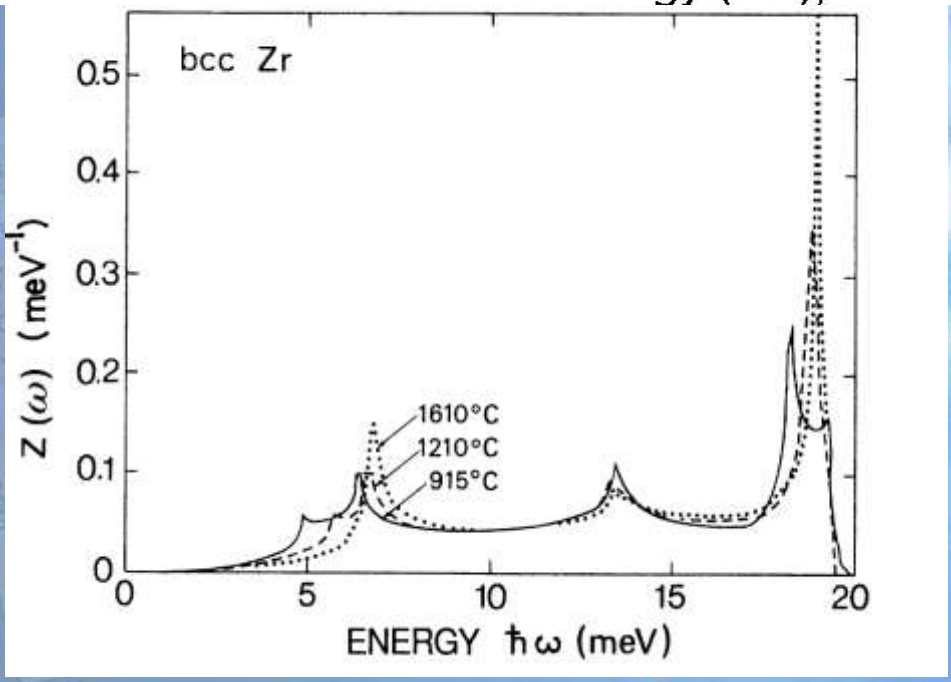
ФОНОННЫЕ ДИСПЕРСИОННЫЕ КРИВЫЕ ОЦК-Zr



Расчет спектра проводился с помощью Фурье преобразования усредненной на интервале 40 ps функции временной эволюции смещений атомов. Вектора поляризации вычислялись в гармоническом приближении путем определения собственных значений динамической матрицы



Плотность колебательных состояний (ПКС) для ОЦК кристаллита с циклическими граничными условиями



Экспериментальная плотность колебаний ОЦК-Zr
[A. Heiming, W. Petry Phys.Rev.B 43, 10948(1991)]

Расчет и анализ распределения плотности колебательных состояний и их температурных зависимостей с целью определения степени влияния объемных и поверхностных колебаний на структурную стабильность ОЦК и ГЦК пленок циркония с кристаллографической ориентацией (001) и (110).

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

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

Плотность колебательных состояний рассчитывалась как Фурье образ автокорреляционной функции скоростей γ(t).

Усреднение скоростей - на интервале 10ps после релаксации в течение 100ps. Шаг по времени - 1fs.

Размеры кристаллитов: Nz=20u.c. Nx,y=24u.c. (23040, 46080 ат.)

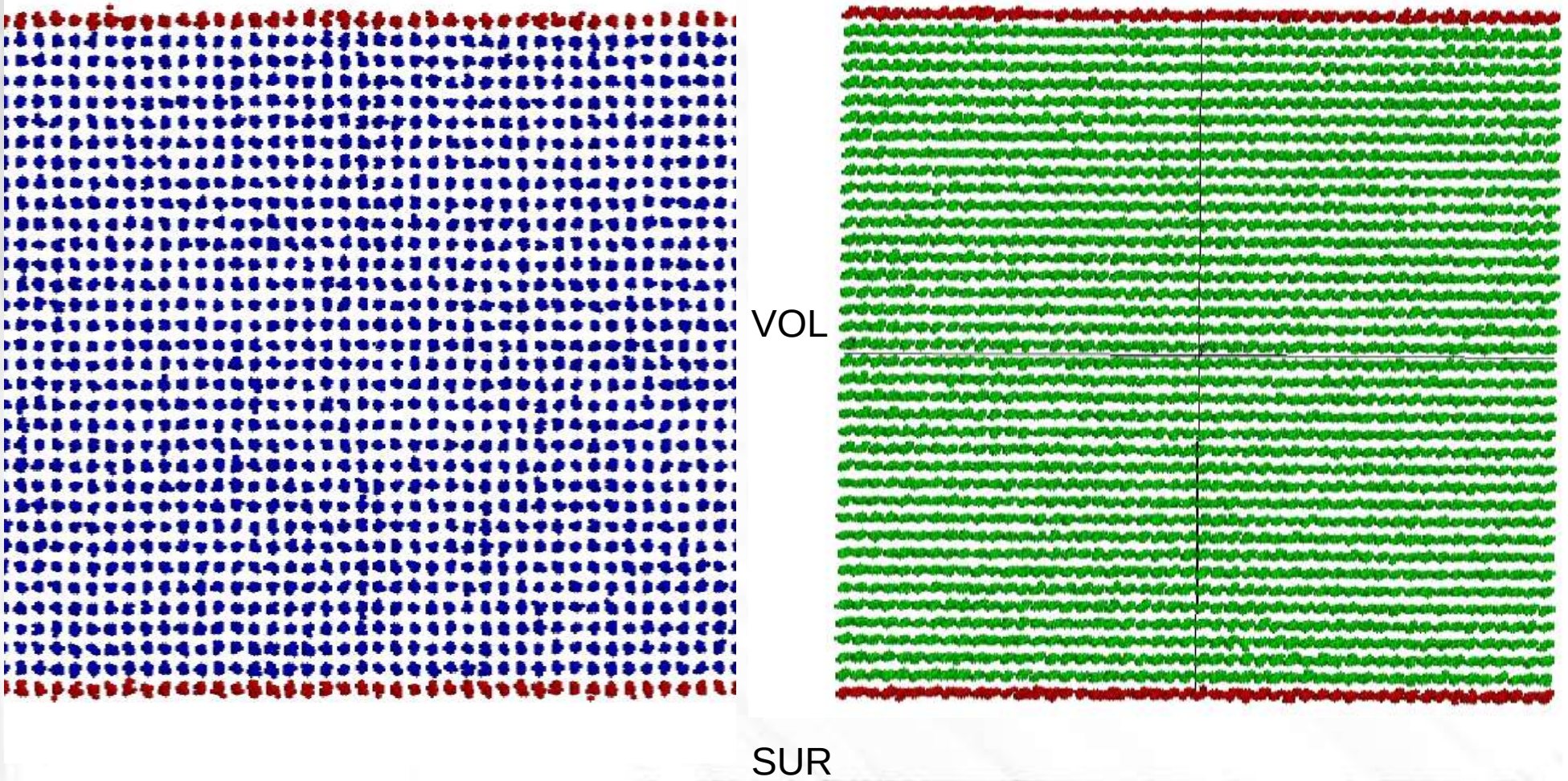
Граничные условия: по оси Z – свободные, по X и Y – циклические.

Ансамбль: NPT. P=0.

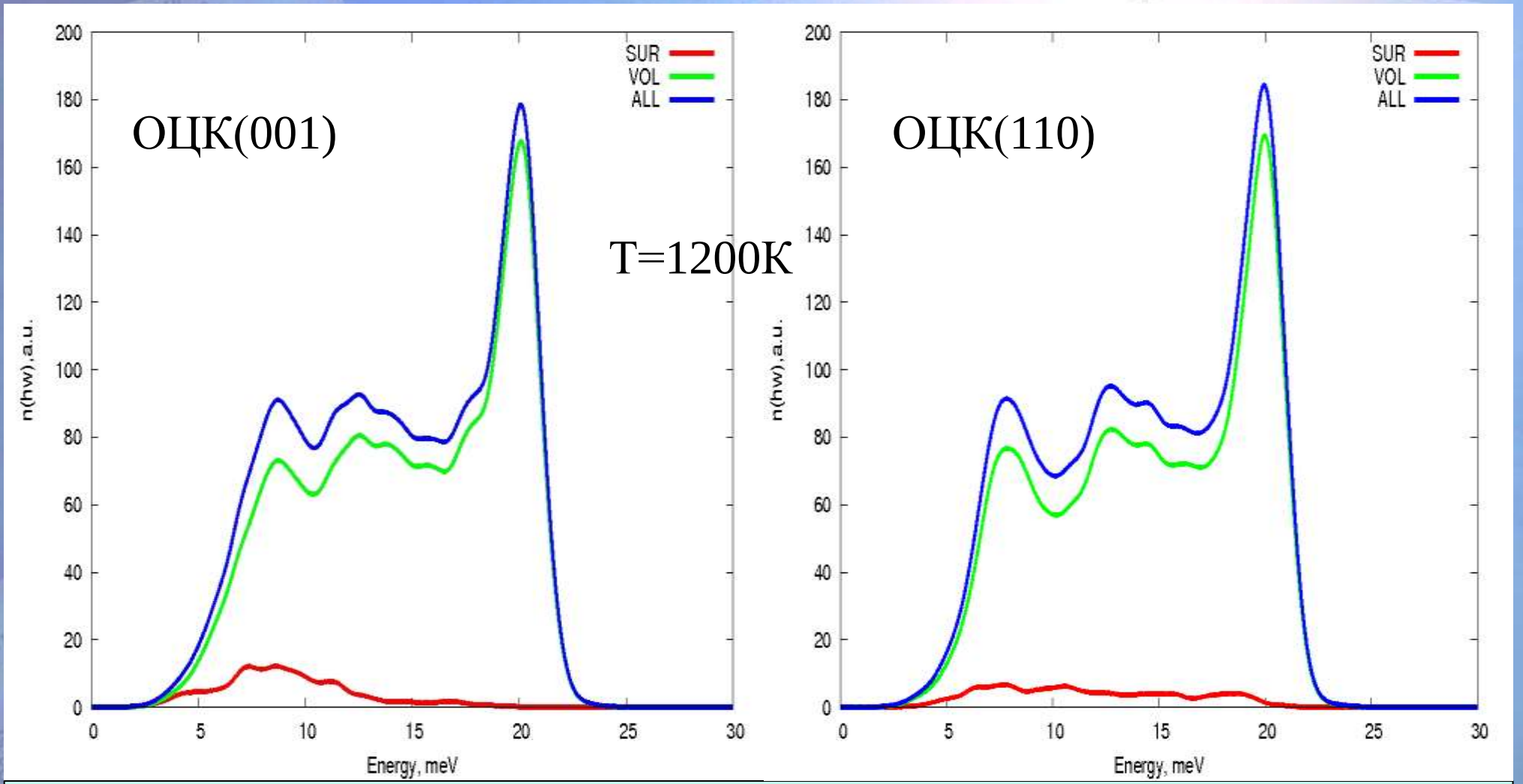
Чем отличаются ПКС пленок ОЦК(001) и ОЦК(110)?

ОЦК(001)

ОЦК(110)



ПКС для пленок ОЦК-Zr с поверхностью (001) и (110)



SUR - ПКС для поверхностных атомов,

VOL - ПКС для внутренних атомов,

ALL - ПКС для всего кристаллита

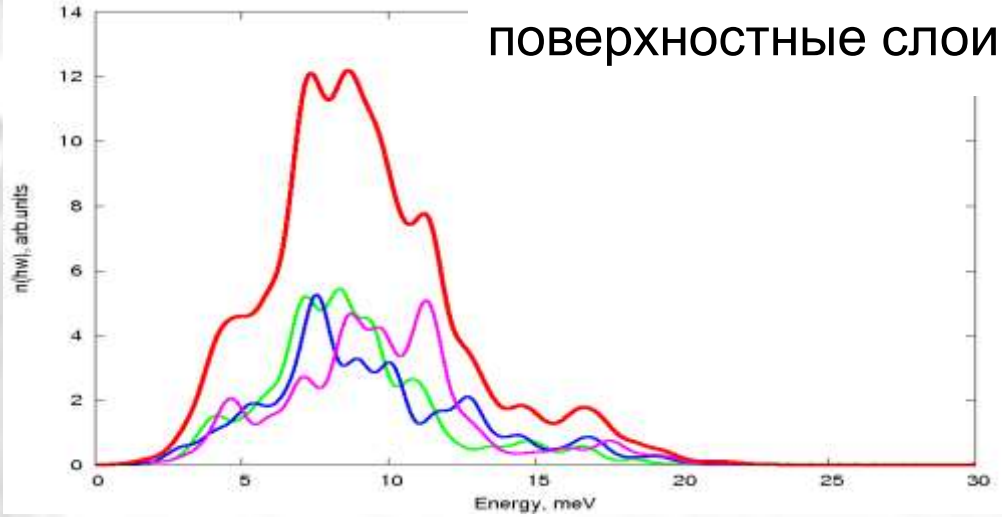
17u.c. - !

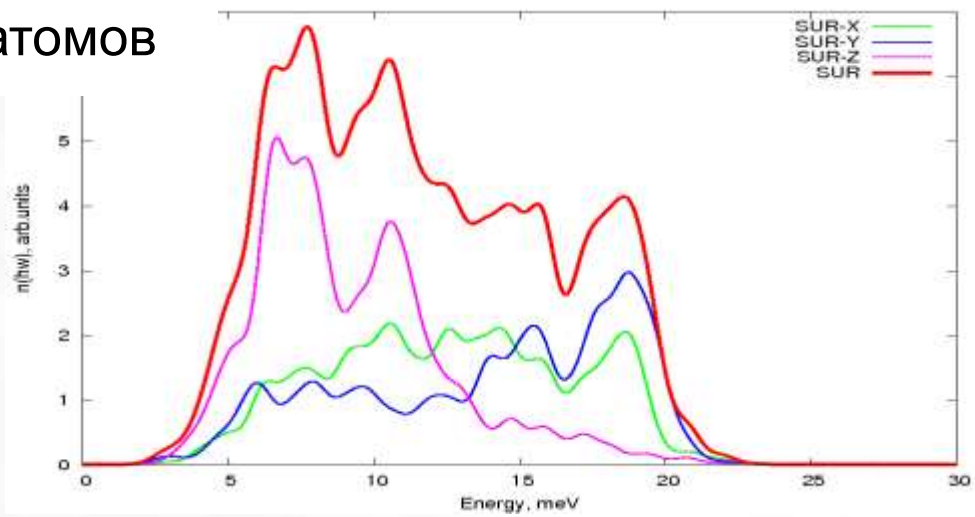
при T=0K

Локальные плотности колебательных состояний

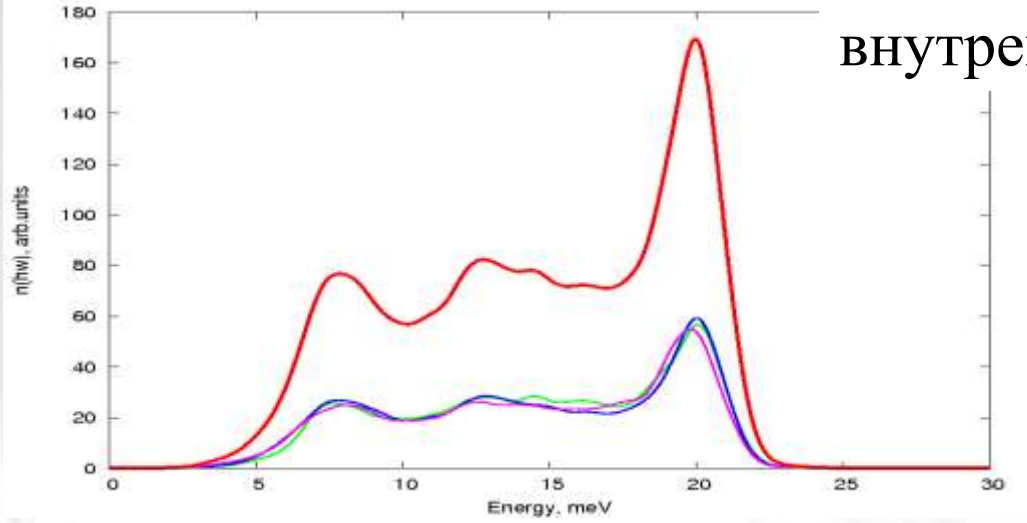
ОЦК(001) T=1200K ОЦК(110)

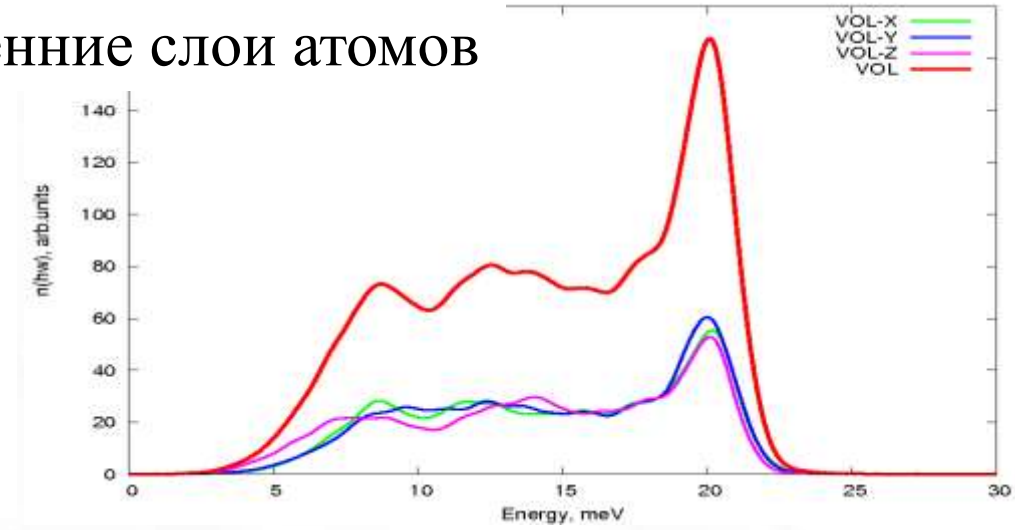
поверхностные слои атомов





внутренние слои атомов

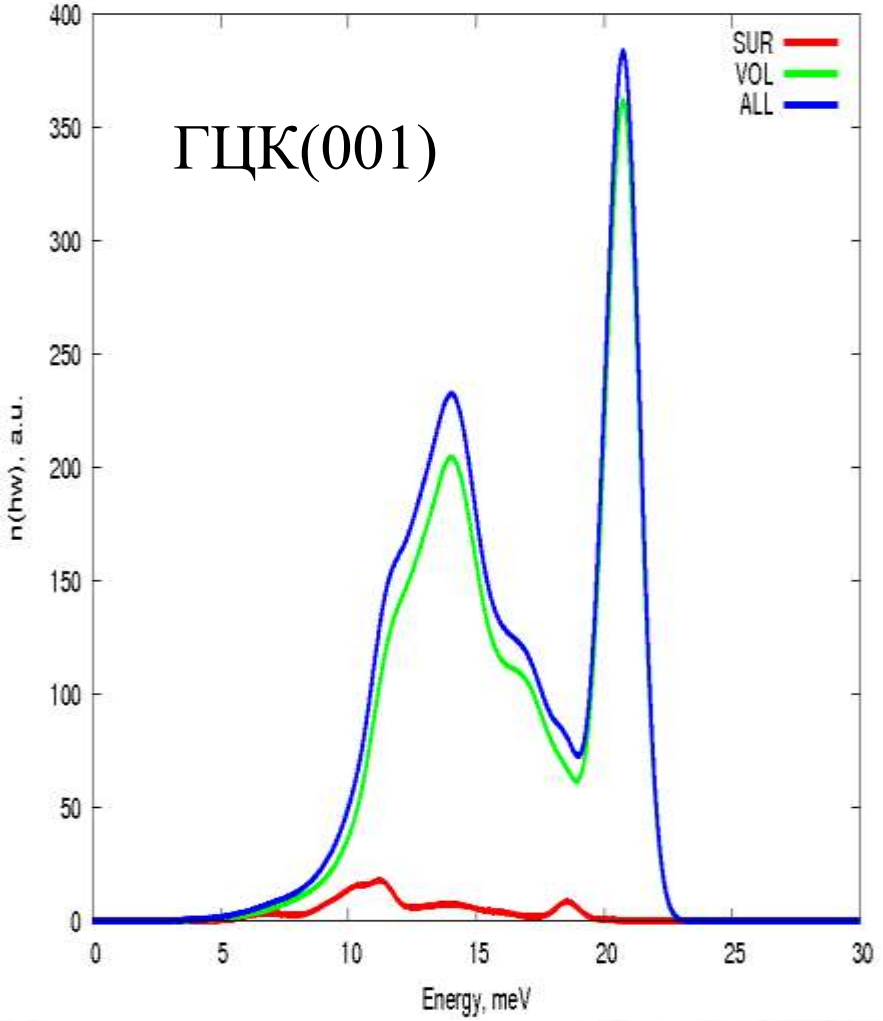




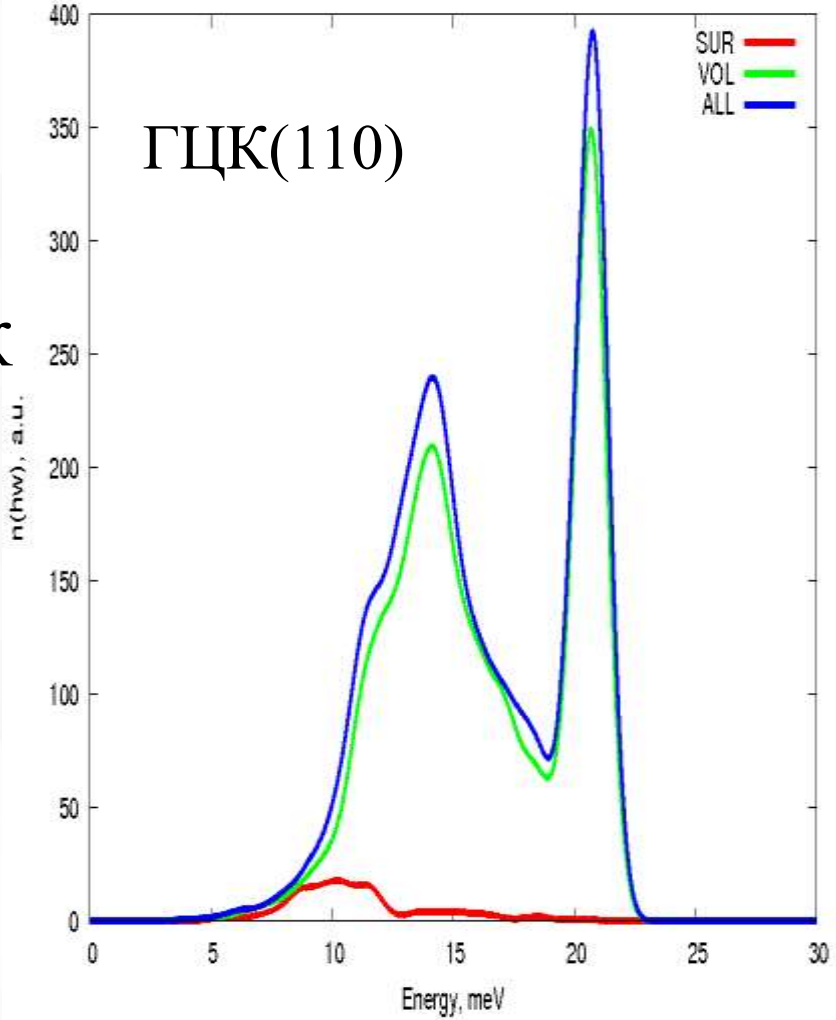
z- смещения атомов нормально к поверхности пленки

x и y - смещения атомов в плоскости пленки

ПЛЕНКИ ГЦК



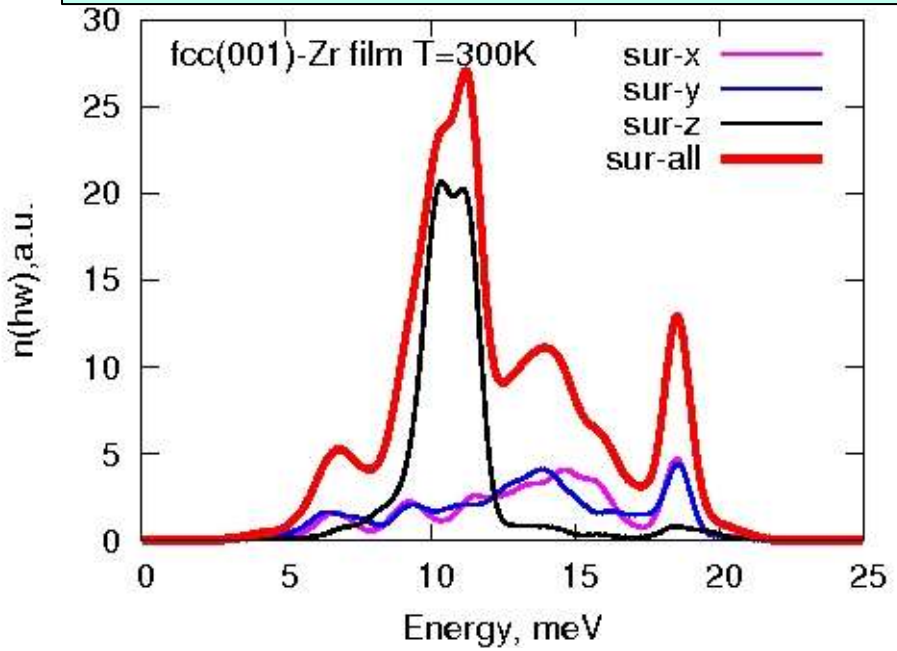
Т=300К

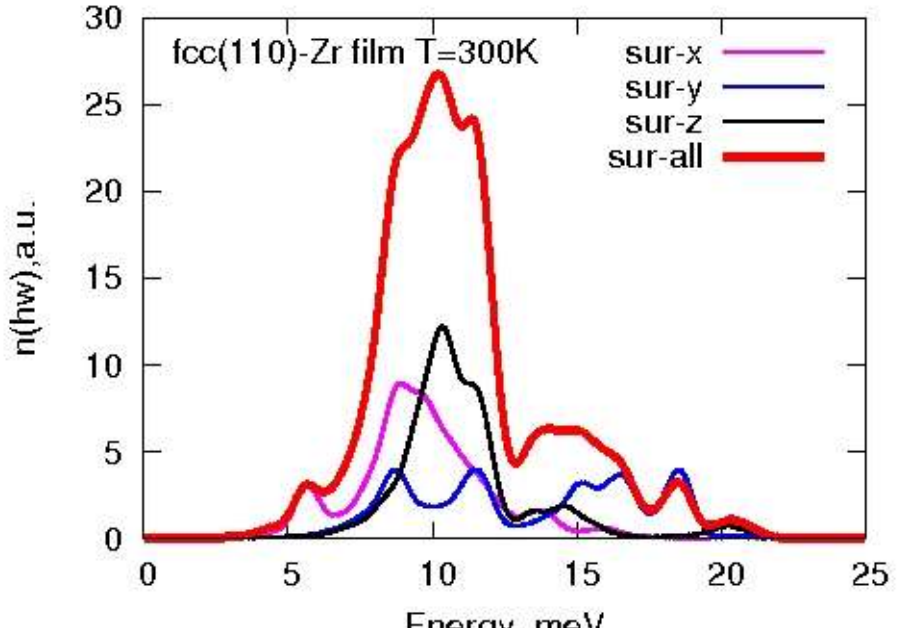


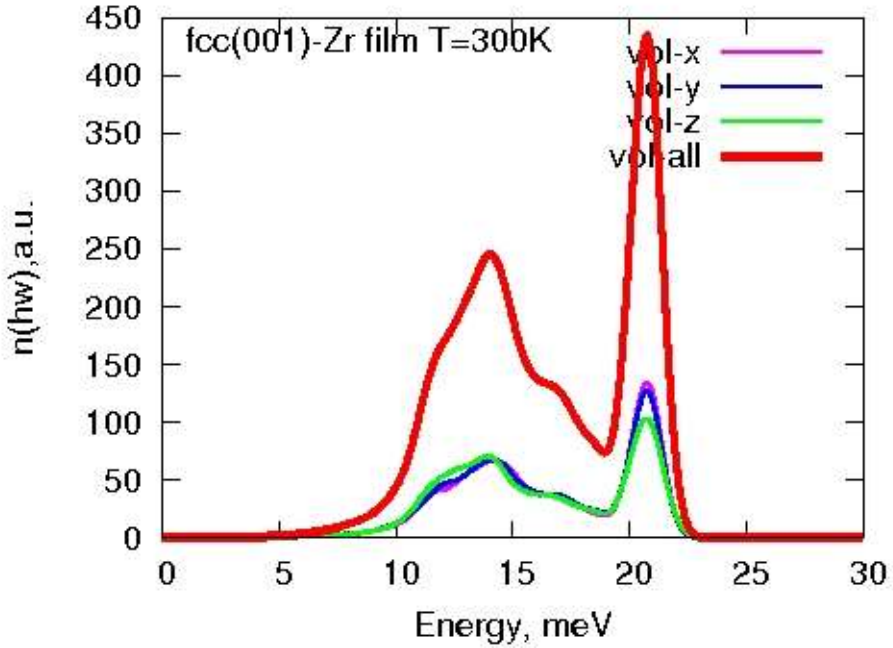
Тк = 1050К
ГЦК(001) → ОЦК(110)

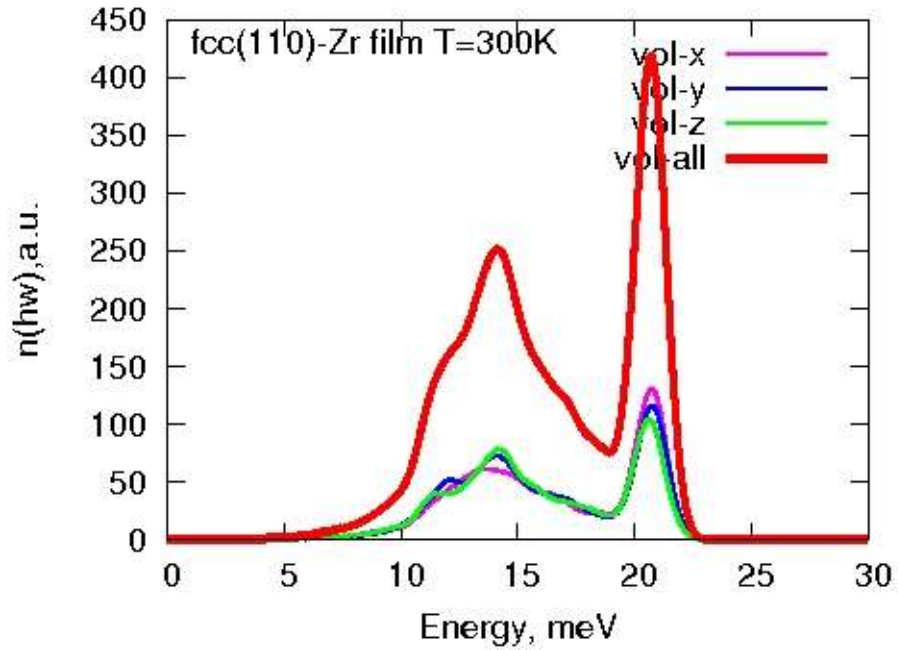
Тк = 900К
ГЦК(110) → ГПУ

Локальные плотности колебаний в пленках ГЦК(001) и (110)

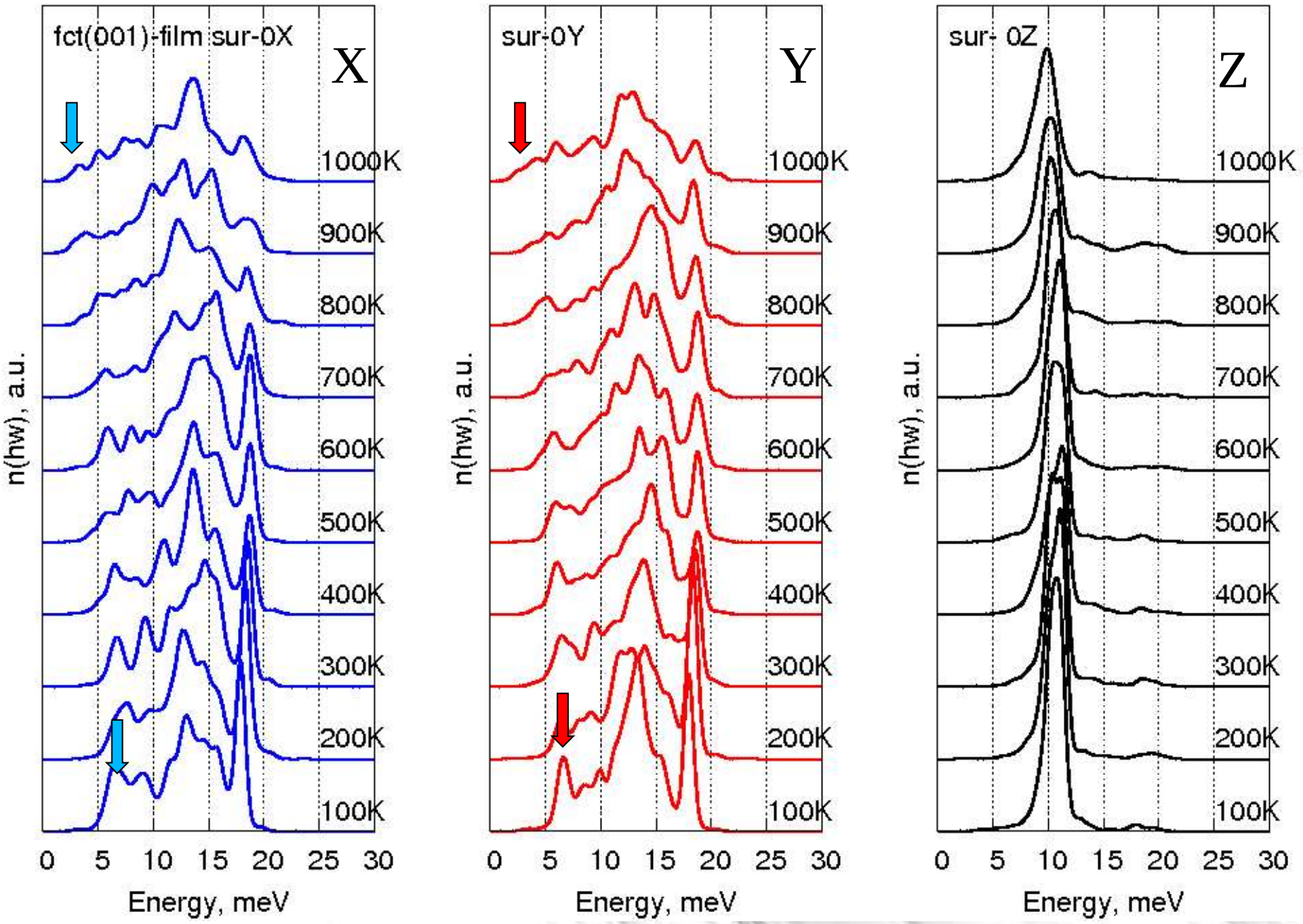




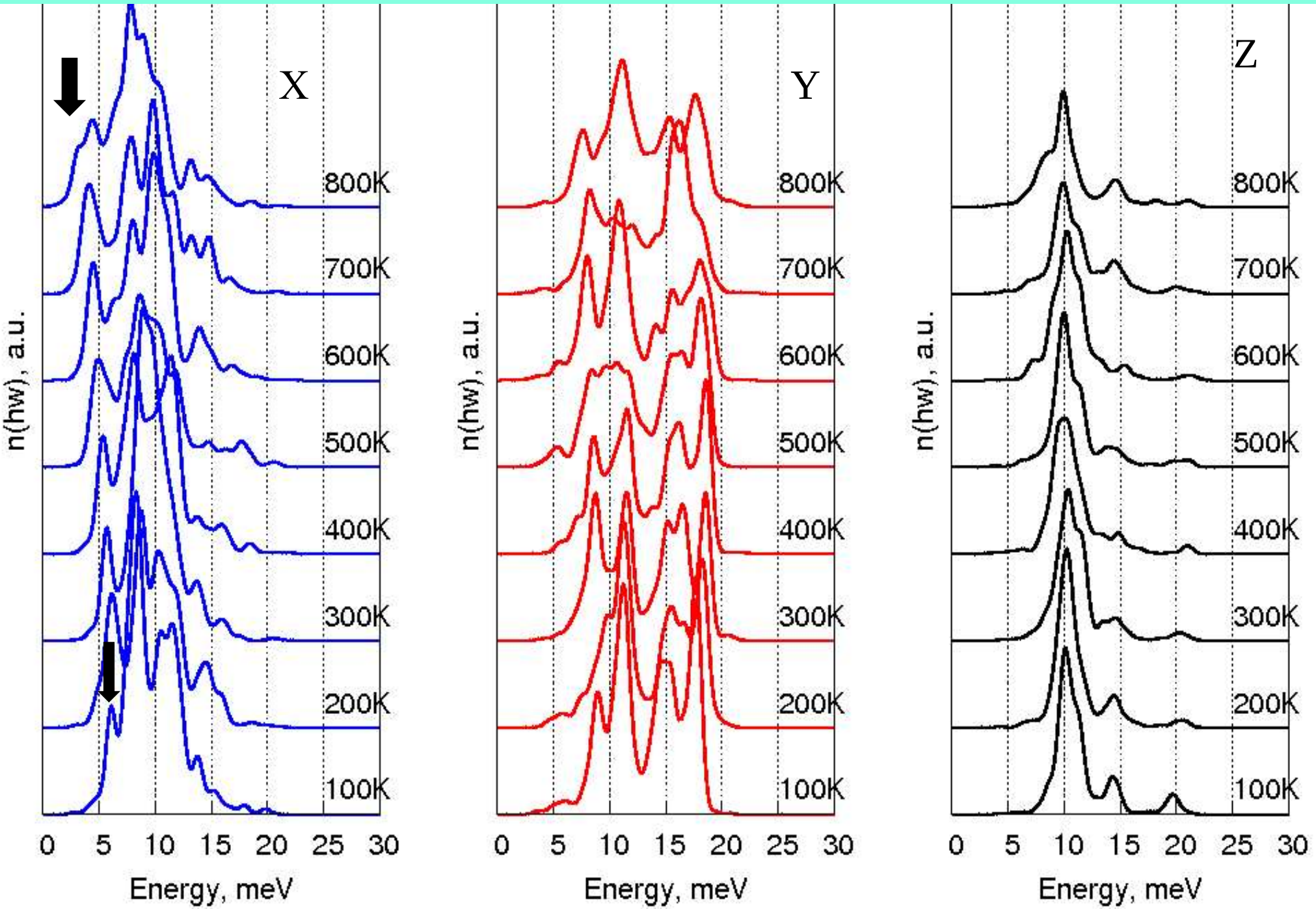




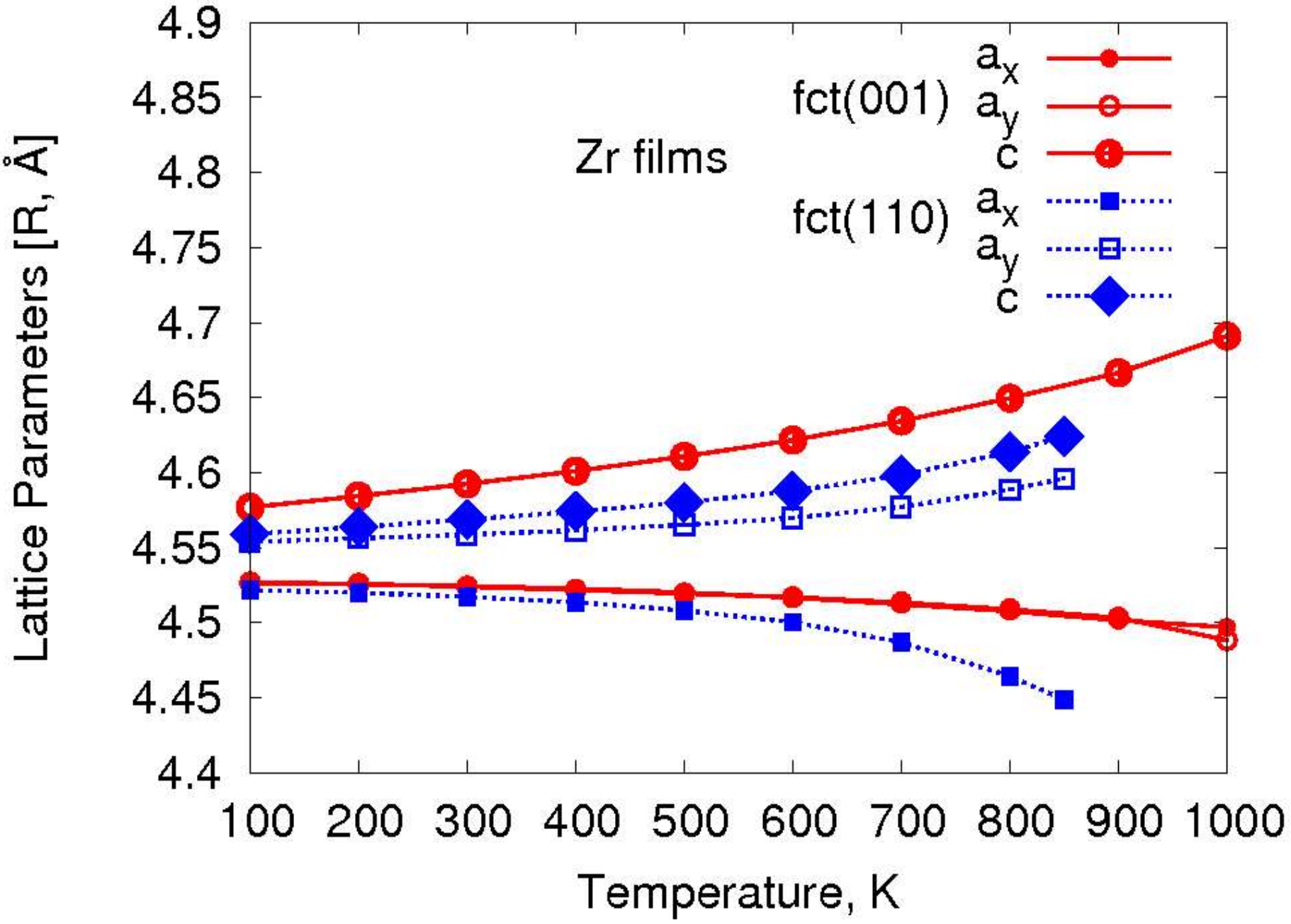
ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ЛОКАЛЬНЫХ ПКС ПОВЕРХНОСТНЫХ СЛОЕВ АТОМОВ ДЛЯ ГЦК(001) ПЛЕНОК



ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ПКС ПОВЕРХНОСТНЫХ СЛОЕВ АТОМОВ ДЛЯ ПЛЕНКИ ГЦК(110)



ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ПАРАМЕТРОВ РЕШЕТКИ ПЛЕНОК С ГЦК СТРУКТУРОЙ



J.S.O. Evans et al Science (1996) **272** no 5258 pp.90-92
« Negative Thermal Expansion from 0.3 to 1050 Kelvin in ZrW_2O_8»
характеристики материала:
1 – метастабильный
2 – сильно ангармоничный
3 – смягчение ПКС

В сильно анизотропных, слоистых кристаллах
(например: диселенит ниобия 2H- NiSe2)
«Мембранный» эффект
И.М. Лифшиц ЖЭТФ **22**, 475(1952)

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1) Неустойчивость пленок циркония связана со смягчением поверхностных колебательных мод.

2) В метастабильных ГЦК пленках циркония наблюдаемое уменьшение частот поверхностных колебаний при увеличении температуры проявляется в аномальном поведении параметров решетки, что приводит к отрицательным значениям линейных коэффициентов теплового расширения в плоскости пленки.

3) Факторы?

БЛАГОДАРЮ

ЗА ВНИМАНИЕ!

И финансовую поддержку
Гранты: РФФИ 10-02-96034-р-урал-а,
Президиума РАН 12-П-12-2010
и УрО РАН 12-У-2-1023

СПАСИБО ЗА ВОПРОСЫ