

Прискорення атомів при фазових переходах на поверхні кристалу

В.В. Михайловський, І.Ю. Голіней, В.Й. Сугаков

Інститут ядерних досліджень НАН України

Наявність частинок великої енергії дозволяє пришвидшувати протікання процесів, змінювати їхнє протікання, а головне, стимулювати процеси, виникнення яких вимагає порогових енергій. В серії робіт був запропонований механізм прискорення атомів в нерівноважній системі в процесі переходу атомів до рівноважного стану. Цей механізм реалізується в кристалах, в яких існує два можливих положення для атомів вздовж якогось ряду, і в початковий момент атоми знаходяться в положеннях з більшою потенціальною енергією. В роботах показано, що за таких умов можливий процес релаксації, при якому атоми переходять у вигідніші положення послідовно, один за одним, а потенціальна енергія, що вивільнюється при переході великої кількості атомів, накопичується як кінетична енергія одного атома. Таким чином при великій кількості зміщених атомів енергія одного атома наприкінці процесу може виявитися великою. Стан кристала з ланцюжком послідовних зіткнень, при якому один атом прискорюється, було названо акселероном.

Однією з систем, де можуть виникнути акселерони, є кристал, в якому відбувається фазовий перехід, а інверсна заселеність і прискорення можуть виникнути на межі розділу фаз. Проблемою утворення акселеронів в тривимірних кристалах при фазових переходах є той факт, що нові фази в більшості випадків мають форму близьку до сферичної, і тоді не існує переходів атомів вздовж ряду, що є принципово важливим для запропонованого механізму прискорення. Тому було проведено математичне моделювання прискорення атомів на поверхні кристала. Проаналізована стійкість системи при різних параметрах потенціалу взаємодії атомів на поверхні між собою та з підкладкою, показана можливість існування акселерона. Методом молекулярної динаміки проведено моделювання процесу прискорення, отримані результати підтверджують якісну картину процесу, сформульовану раніше. Показано, що внаслідок таких процесів атоми можуть накопичувати енергію до сотень еВ. Проаналізовано процеси, що обмежують прискорення атомів, зокрема процес розфокусування каскаду зіткнень.