ЖЭТФ, 2014, том 146, вып. 4 (10), стр. 869–875

СВОЙСТВА ДВИЖУЩИХСЯ ДИСКРЕТНЫХ БРИЗЕРОВ В МОНОАТОМНОМ ДВУМЕРНОМ КРИСТАЛЛЕ

А. А. Кистанов[a*], *А. С. Семенов*[b], *С. В. Дмитриев*[a,c,d]

[a] *Институт проблем сверхпластичности металлов Российской академии наук*
450001, Уфа, Россия

[b] *Мирнинский политехнический институт,*
филиал Северо-Восточного федерального университета им. М. К. Аммосова
678170, Мирный, Россия

[c] *Санкт-Петербургский государственный политехнический университет*
195251, Санкт-Петербург, Россия

[d] *Башкирский государственный университет*
450074, Уфа, Россия

Поступила в редакцию 12 апреля 2014 г.

Методом молекулярной динамики определены области параметров анзаца для задания начальных условий, приводящих к запуску неподвижных и движущихся дискретных бризеров в моноатомном двумерном кристалле с морзевским межатомным взаимодействием. Установлены основные тенденции влияния параметров анзаца на амплитуду и скорость дискретных бризеров.

DOI: 10.7868/S0044451014100228

1. ВВЕДЕНИЕ

Дискретные бризеры (ДБ), представляющие собой нелинейные пространственно-локализованные колебательные моды в бездефектных решетках, в последнее время активно исследуются в контексте физики конденсированного состояния [1–4]. ДБ имеют частоты колебаний вне фононного спектра кристаллов, поэтому они не теряют свою энергию на возбуждение фононов и могут иметь весьма большие времена жизни [5, 6]. ДБ в кристаллах можно разбить на две большие группы по типу нелинейности. При мягком (жестком) типе нелинейности частота ДБ уменьшается (растет) с ростом амплитуды. Необходимым условием существования ДБ с мягким типом нелинейности является наличие щели в фононном спектре и, соответственно, такие ДБ, имеющие частоты в щели фононного спектра, называются щелевыми. ДБ в реальных нелинейных системах более точно именовать квазибризерами, поскольку они не являются строго периодическими во времени и имеют конечные времена жизни [7].

Метод молекулярной динамики широко используется для исследования ДБ в кристаллах [8–23]. Изучались ДБ в трехмерной модельной решетке упорядоченного сплава Pt_3Al [12], в ГЦК-металлах Ni и Nb [13], в углеродных нанотрубках [14], а также в графане [15] и упруго-деформированных графене [16–18] и графеновых нанолентах [19]. Различные аспекты существования щелевых ДБ и способов их возбуждения в биатомных кристаллах изучались в работах [4, 20–23].

Вопрос о движении ДБ по кристаллической решетке является важным для понимания их роли в физических процессах, происходящих в кристаллах. Нередко ДБ привязаны к определенному решеточному узлу, но в ряде случаев они могут быть подвижными [24]. Движущиеся ДБ могут сталкиваться друг с другом, приводя к локализации значительной энергии в точке столкновения, которая может расходоваться на создание дефектов кристаллической структуры или на активизацию фазовых переходов или разрушения. Кроме того, исследовались процессы столкновения движущихся ДБ с несовер-

[*] E-mail: andrei.kistanov.ufa@gmail.com

 ЖЭТФ, том **146**, вып. 4 (10), 2014

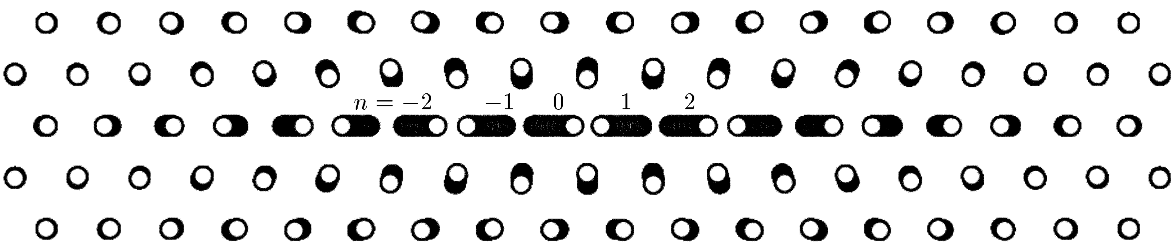

Рис. 1. Стробоскопическая картина движения атомов ДБ в двумерном кристалле с межатомным потенциалом (1) для $\alpha = 5$, полученного при помощи анзаца (2), (3) (атомные перемещения увеличены в 3.7 раза). Показана нумерация цепочки атомов, используемая при задании начальных условий

шенствами кристаллической решетки, например с примесями [25].

Роль ДБ в формировании физических свойств кристаллов все еще остается слабо изученной. Тем не менее концепция ДБ все шире привлекается для объяснения различных экспериментально наблюдаемых эффектов. В работах [26, 27] обсуждается возможное влияние ДБ на электропластичность и прочность металлов [28, 29]. Для объяснения механизмов транспорта электронов была предложена концепция солектрона [30, 31].

В работе [32] был предложен анзац для задания начальных условий, описывающих движущиеся ДБ с жестким типом нелинейности в моноатомном кристалле, однако влияние параметров анзаца на характеристики ДБ не было систематически изучено. В данной работе проводится данное исследование.

2. ОПИСАНИЕ МОДЕЛИ

Рассматривается модель двумерного плотноупакованного кристалла. Используется расчетная ячейка, содержащая 160×160 атомов, с периодическими граничными условиями. Каждый атом имеет две степени свободы — компоненты вектора перемещения в плоскости кристалла. В центре расчетной ячейки возбуждался ДБ, а на ее периферии вводилось вязкое трение для поглощения малоамплитудных колебаний, излучаемых ДБ.

Взаимодействие атомов описывается дальнодействующим парным потенциалом Морзе

$$V(r) = D\left\{\exp\left[-2\alpha(r-r_m)\right] - 2\exp\left[-\alpha(r-r_m)\right]\right\}, \quad (1)$$

где r — расстояние между парой атомов, D, α, r_m — параметры потенциала. Функция $V(r)$ имеет минимум при $r = r_m$, глубина минимума (энергия разрыва связи) равна D, а параметр α определяет жесткость межатомной связи. Без потери общности используются безразмерные единицы энергии, длины и времени, такие, что $D = r_m = 1$, и масса атома равна единице. Рассмотрено значение $\alpha = 5$, для которого равновесное межатомное расстояние равнялось $a = 0.98813$ при радиусе обрезки потенциала 5.5 межатомных расстояний.

3. СПОСОБ ВОЗБУЖДЕНИЯ ДИСКРЕТНЫХ БРИЗЕРОВ

Атомы одного из плотноупакованных рядов кристалла нумеровались индексом n, как показано на рис. 1.

Начальные условия для движущегося ДБ задавались для атомов одной плотноупакованной цепочки следующим образом:

$$x_n(t) = \cos\left[\omega t + \varphi_0 + \delta(n - x_0)\right] x_n^0, \quad y_n = 0, \quad \dot{y}_n = 0, \quad (2)$$

где ω — частота ДБ, лежащая выше фононного спектра кристалла, φ_0 — начальная фаза колебаний, δ — параметр, определяющий разность фаз колебаний соседних атомов. Значения x_n^0 определены выражением

$$x_n^0 = (-1)^n T_n^0 + S_n^0, \quad (3)$$

где

$$T_n^0 = \frac{A}{\mathrm{ch}\left[\beta(n-x_0)\right]}, \quad S_n^0 = -\frac{B(n-x_0)}{\mathrm{ch}\left[\gamma(n-x_0)\right]},$$

параметр A определяет амплитуду ДБ, параметр B — амплитуду смещений центров колебаний атомов, параметры β и γ задают степень пространственной локализации ДБ, а x_0 — его начальное положение. При $x_0 = 0$ имеем ДБ, центрированный на атоме, а при $x_0 = 1/2$ — посередине между двумя

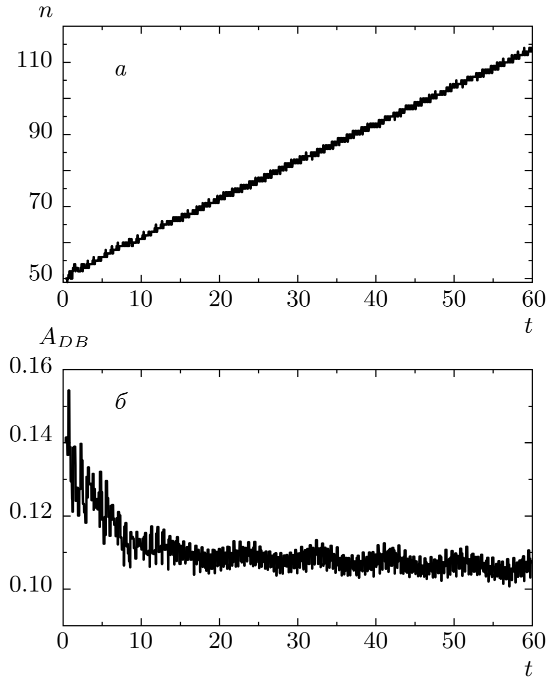

Рис. 2. Решеточное положение центра ДБ (a) и амплитуда ДБ ($б$) как функции времени для параметров анзаца (2), (3) $A = 0.3$, $B = 0$, $\beta = \gamma = 0.33$, $\delta = 0.05$

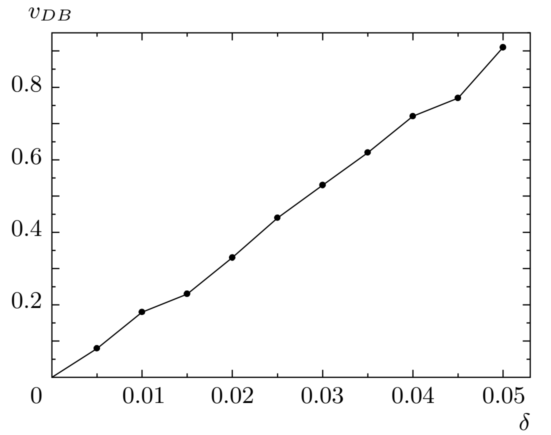

Рис. 3. Зависимость скорости ДБ от параметра δ для $A = 0.3$, $B = 0.012$, $\beta = \gamma = 0.27$

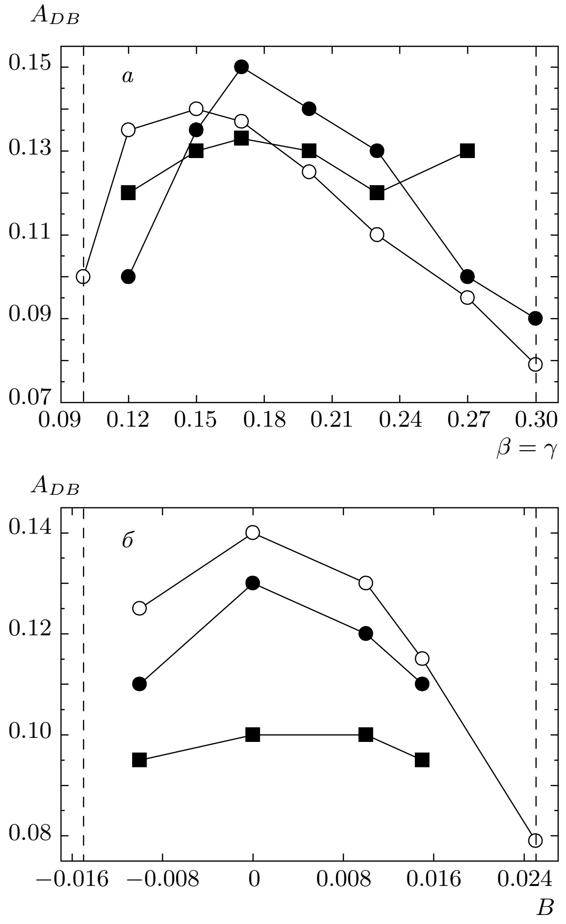

Рис. 4. Зависимости амплитуд неподвижных ДБ от $\beta = \gamma$ (a) для $B = -0.01$ (○), 0 (●), 0.01 (■) и от B ($б$) для $\beta = \gamma = 0.20$ (○), 0.23 (●), 0.27 (■), полученных для $\delta = 0$, $A = 0.14$. Вертикальными штриховыми линиями показаны границы областей параметров $\beta = \gamma$ (a) и B ($б$), где удается возбудить ДБ

соседними атомами. Отметим, что скорость ДБ зависит от δ, и при $\delta = 0$ имеем неподвижный ДБ. Все атомы, не принадлежащие рассматриваемой цепочке, имели нулевые начальные смещения и скорости.

Анзац (2), (3) принимает во внимание результаты работы [13] и учитывает тот факт, что ДБ является экспоненциально локализованным в пространстве объектом, что обеспечивается использованием гиперболических функций в выражении (3). Кроме того, частота ДБ должна лежать выше фононного спектра кристалла, что может быть реализовано только для наиболее коротковолновой колебательной моды, когда соседние атомы движутся в противофазе. Данное требование выполняется за счет введения множителя $(-1)^n$ перед амплитудами T_n^0 атомов в формуле (3). Слагаемое S_n^0 в (3) учитывает эффект разрежения в области ДБ за счет ангармонизмов межатомных сил, когда центры колебаний атомов плотноупакованного ряда смещаются в обе стороны от центра ДБ. Наконец, движение ДБ по кристаллу обеспечивается введением в формулу (2) небольшой разности фаз δ в колебания соседних атомов.

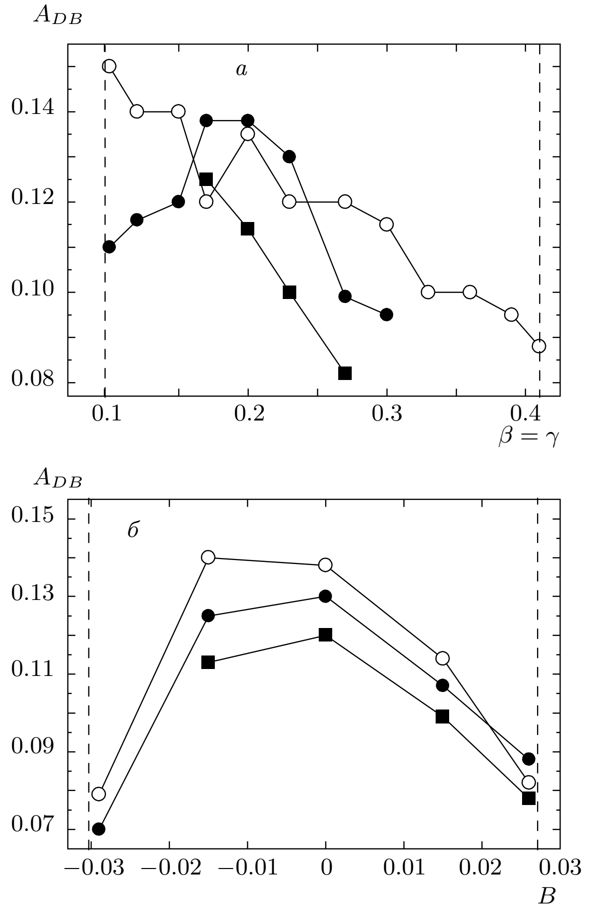

Рис. 5. Зависимости амплитуд неподвижных ДБ от $\beta = \gamma$ (*а*) для $B = -0.015$ (○), 0 (●), 0.015 (■) и от B (*б*) для $\beta = \gamma = 0.20$ (○), 0.23 (●), 0.27 (■), полученных для $\delta = 0$, $A = 0.15$. Вертикальными штриховыми линиями показаны границы областей параметров $\beta = \gamma$ (*а*) и B (*б*), где удается возбудить ДБ

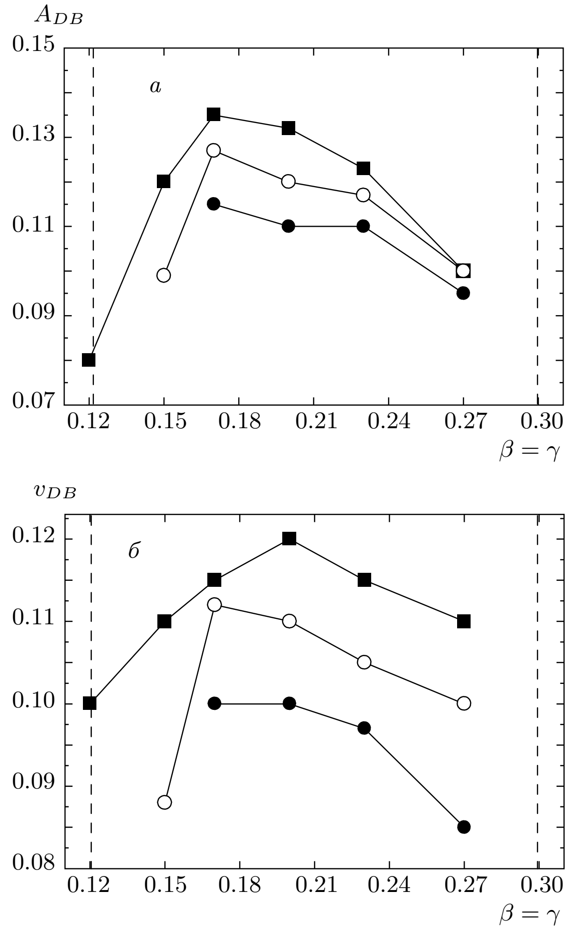

Рис. 6. Амплитуды (*а*) и скорости (*б*) ДБ, полученных для $\delta = 0.05$, $A = 0.14$ и $B = 0.009$ (■) 0.012 (○), 0.015 (●), как функции $\beta = \gamma$. Вертикальными штриховыми линиями показаны граничные значения параметров $\beta = \gamma$, где удается возбудить ДБ

В продолжение работы [32] здесь анализируется влияние всех параметров анзаца (2), (3) на возможность запуска ДБ и параметры получаемых ДБ.

На рис. 2 в качестве примера представлены решеточное положение центра ДБ и амплитуда ДБ как функции времени. Из-за неточности задания начальных условий ДБ излучает часть энергии в виде малоамплитудных волн и для $t > 20$ приобретает практически постоянную скорость движения v_{DB} и амплитуду A_{DB}, слабо осциллирующую около определенного значения. Скорость ДБ рассчитывалась по наклону прямой на рис. 2*а* с учетом того, что координата ДБ вычисляется как $x = an$. Амплитуда ДБ определялась как среднее значение на участке стационарного движения. В данном примере $v_{DB} = 1$ и $A_{DB} = 0.115$.

4. РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Для анзаца (2), (3) проводилось исследование влияния параметров δ, A, B, $\beta = \gamma$ на характеристики получаемых ДБ.

На рис. 3 показана зависимость скорости ДБ от параметра δ для $A = 0.3$, $B = 0.012$, $\beta = \gamma = 0.27$. Отметим, что зависимость $v(\delta)$ линейная и обрывается при $\delta = 0.05$. Для $\delta > 0.05$ варьированием параметров A, B, $\beta = \gamma$ движущийся ДБ получить не удалось.

В дальнейшем рассматриваются неподвижный ДБ, $\delta = 0$, и движущийся ДБ, получаемый при фиксированном значении $\delta = 0.05$.

Для параметра А, определяющего амплитуду ДБ в (3), были выбраны два значения, $A = 0.14$, 0.15. Для параметров B и $\beta = \gamma$ были рассмотрены

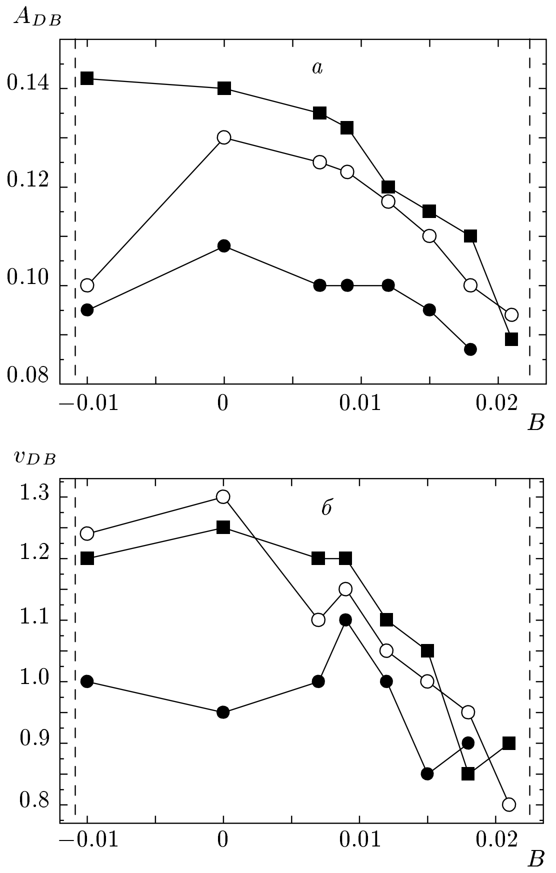

Рис. 7. Амплитуды (a) и скорости ($б$) ДБ, полученных для $\delta = 0.05$, $A = 0.14$ и $\beta = \gamma = 0.20$ (■), 0.23 (○), 0.27 (●), как функции B. Вертикальными штриховыми линиями показаны граничные значения параметра B, где удается возбудить ДБ

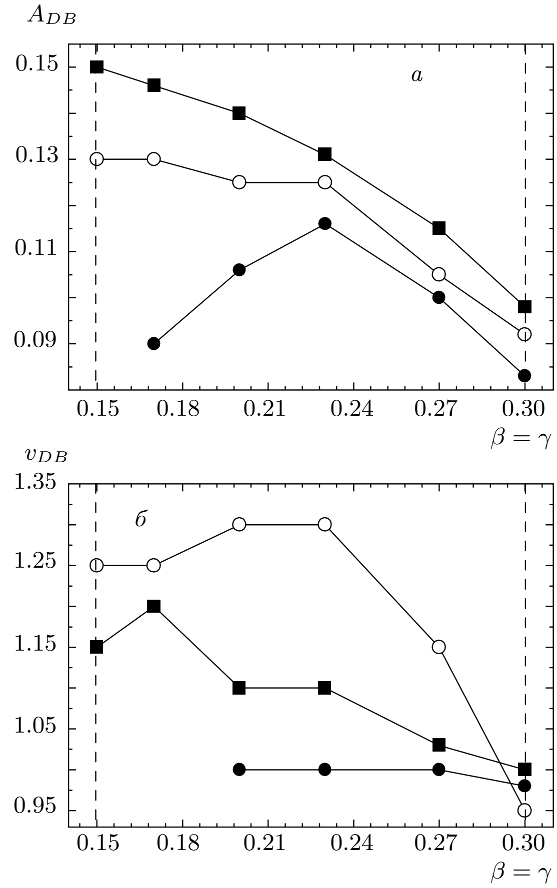

Рис. 8. То же, что и на рис. 6, но для $A = 0.15$ и $B = 0.012$ (■) 0.015 (○), 0.018 (●)

значения $B = -0.029$, -0.010, 0, 0.015, 0.025 и $\beta = \gamma = 0.10$, 0.12, 0.15, 0.17, 0.20, 0.23, 0.27, 0.30, 0.33, 0.36, 0.39, 0.41.

На рис. 4a для значений параметров $\delta = 0$, $A = 0.14$ и $B = -0.01$, 0, 0.01 показаны амплитуды A_{DB} полученных неподвижных ДБ как функции $\beta = \gamma$. Вертикальными штриховыми линиями показаны левая ($\beta = \gamma = 0.1$) и правая ($\beta = \gamma = 0.3$) границы области данных параметров, где удается возбудить ДБ. На рис. 4$б$ для значений параметров $A = 0.14$, $\delta = 0$ и $\beta = \gamma = 0.20$, 0.23, 0.27 показаны амплитуды A_{DB} неподвижных ДБ как функции B. Вертикальными штриховыми линиями показаны границы области параметра $-0.015 < B < 0.026$, где удается возбудить ДБ.

На рис. 5a для фиксированных значений задаваемых параметров A, δ и B показаны амплитуды A_{DB} полученных неподвижных ДБ как функции от $\beta = \gamma$; вертикальными штриховыми линиями показаны граничные значения параметров $\beta = \gamma$ (минимальное $\beta = \gamma = 0.1$ и максимальное $\beta = \gamma = 0.41$). На рис. 5$б$ для фиксированных значений задаваемых параметров A, δ и $\beta = \gamma$ показаны амплитуды A_{DB} полученных неподвижных ДБ как функции от B (минимальное значение $B = -0.029$, максимальное значение $B = 0.026$).

На рис. 6 для значений параметров $\delta = 0.05$, $A = 0.14$ и $B = 0.009, 0.012, 0.015$ показаны амплитуды и скорости полученных ДБ как функции $\beta = \gamma$.

На рис. 7 показаны амплитуды и скорости ДБ, полученных для $\delta = 0.05$, $A = 0.14$ и $\beta = \gamma = 0.20$, 0.23, 0.27, как функции B.

Из рис. 6 и 7 видно, что для исследованного интервала параметров $\beta = \gamma$ и B при $A = 0.14$ наибольшая амплитуда и наибольшая скорость ДБ наблюдаются при $\beta = \gamma = 0.20, 0.23$ и $B = 0.009, 0.012$.

На рис. 8 показано то же, что и на рис. 6, но для $A = 0.15$ и $B = 0.012$, 0.015, 0.018. На рис. 9 пока-

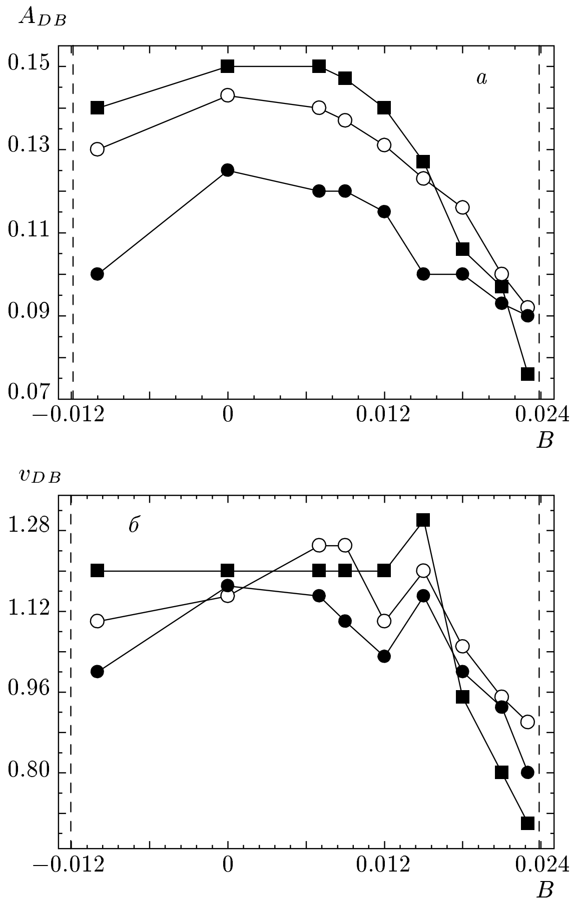

Рис. 9. То же, что и на рис. 7, но для $A = 0.15$

зано то же, что и на рис. 7, но для $A = 0.15$. Из рис. 8 и 9 видно, что для исследованного интервала параметров $\beta = \gamma$ и B при $\delta = 0.05$ и $A = 0.15$ наибольшая амплитуда и наибольшая скорость ДБ наблюдаются при $\beta = \gamma = 0.20$, 0.23 и $B = 0.012$, 0.015.

5. ВЫВОДЫ

В двумерном моноатомном кристалле с морзевским потенциалом взаимодействия проведено исследование влияния параметров δ, A, B, $\beta = \gamma$ анзаца (2), (3), предложенного в работе [32], на характеристики неподвижных и движущихся ДБ. Определены области значений параметров B, $\beta = \gamma$, где удается возбудить неподвижный ДБ ($\delta = 0$) и движущийся ДБ ($\delta = 0.05$). Установлено, что амплитуда неподвижных ДБ максимальна при $B = -0.015$ и $\beta = \gamma = 0.2$. Амплитуда и скорость движущихся ДБ при $\delta = 0.05$ и $A = 0.14$ максимальны при $\beta = \gamma = 0.20$, 0.23 и $B = 0.009$, 0.012. Если положить $A = 0.15$, то максимальные амплитуды и скорости наблюдаются при $\beta = \gamma = 0.20$, 0.23 и $B = 0.012$, 0.015.

Полученные в данной работе результаты предполагается использовать для изучения результатов взаимодействия ДБ друг с другом и с дефектами кристаллической решетки, такими как вакансии, свободные границы и др.

Работа одного из авторов (А. А. К.) поддержана Российским научным фондом (грант № 14-13-00982). Другой автор (С. В. Д.) благодарит Программу правительства РФ (5-100-2020) за финансовую поддержку.

ЛИТЕРАТУРА

1. S. Flach and A. V. Gorbach. Phys. Rep. **467**, 1 (2008).
2. M. E. Manley, Acta Mater. **58**, 2926 (2010).
3. С. В. Дмитриев, Письма о материалах **1**(2), 78 (2011).
4. Н. Н. Медведев, М. Д. Старостенков, П. В. Захаров, О. В. Пожидаева, Письма в ЖТФ **37**, 7 (2011).
5. A. J. Sievers and S. Takeno, Phys. Rev. Lett. **61**, 970 (1988).
6. G. S. Bezuglova, G. M. Chechin, and P. P. Goncharov, Phys. Rev. E **84**, 036606 (2011).
7. G. M. Chechin, G. S. Dzhelauhova, and E. A. Mehonoshina, Phys. Rev. E **74**, 036608 (2006).
8. S. A. Kiselev and A. J. Sievers, Phys. Rev. **55**, 5755 (1997).
9. А. А. Кистанов, С. В. Дмитриев, Письма в ЖТФ **39**(13), 78 (2013).
10. А. А. Кистанов, Ю. А. Баимова, С. В. Дмитриев, Письма в ЖТФ **38**(14), 72 (2012).
11. А. А. Кистанов, Фундаментальные проблемы современного материаловедения **11**, 9 (2014).
12. Н. Н. Медведев, М. Д. Старостенков, П. В. Захаров, А. В. Маркидонов, Письма о материалах **3**(1), 34 (2013).
13. M. Haas, V. Hizhnyakov, A. Shelkan et al., Phys. Rev. B **84**, 144303 (2011).
14. T. Shimada, D. Shirasaki, and T. Kitamura, Phys. Rev. B **81**, 035401 (2010).

15. B. Liu, J. A. Baimova, S. V. Dmitriev et al., J. Phys. D **46**, 305302 (2013).

16. Л. З. Хадеева, С. В. Дмитриев, Ю. С. Кившарь, Письма в ЖЭТФ **94**, 580 (2011).

17. J. A. Baimova, S. V. Dmitriev, and K. Zhou, Europhys. Lett. **100**, 36005 (2012).

18. Y. Yamayose, Y. Kinoshita, Y. Doi et al., Europhys. Lett. **80**, 40008 (2007).

19. E. A. Korznikova, J. A. Baimova, and S. V. Dmitriev, Europhys. Lett. **102**, 60004 (2013).

20. С. В. Дмитриев, Л. З. Хадеева, А. И. Пшеничнюк, Н. Н. Медведев, ФТТ **52**, 1398 (2010).

21. О. В. Пожидаева, С. В. Дмитриев, Н. Н. Медведев и др., Фундаментальные проблемы современного материаловедения **4**, 102 (2007).

22. Н. Н. Медведев, С. В. Дмитриев, М. Д. Старостенков, Фундаментальные проблемы современного материаловедения **4**, 100 (2007).

23. S. V. Dmitriev, A. I. Pshenichnyuk, L. Z. Khadeeva et al., Phys. Rev. B **80**, 094302 (2009).

24. D. Chen, S. Aubry, and G. P. Tsironis, Phys. Rev. Lett. **77**, 4776 (1996).

25. J. Cuevas, F. Palmero, J. F. R. Archilla, and F. R. Romero, J. Phys. A **35**, 10519 (2002).

26. В. И. Дубинко, А. В. Дубинко, С. В. Дмитриев, Письма о материалах **3**, 239 (2013).

27. В. И. Дубинко, Е. Е. Журкин, П. Ю. Григорьев и др., Письма о материалах **3**, 230 (2013).

28. В. В. Столяров, Письма о материалах **1**, 75 (2011).

29. В. В. Столяров, Письма о материалах **3**, 137 (2013).

30. M. G. Velarde, J. Comput. Appl. Math. **233**, 1432 (2010).

31. M. G. Velarde, W. Ebeling, and A. P. Chetverikov, Int. J. Bifurcat. Chaos **21**, 1595 (2011).

32. А. А. Кистанов, Р. Т. Мурзаев, С. В. Дмитриев и др., Письма в ЖЭТФ **99**, 403 (2014).