

Движущиеся дискретные бризеры в моноатомном двумерном кристалле

А. А. Кистанов⁺¹⁾, Р. Т. Мурзаев⁺, С. В. Дмитриев^{+*}, В. И. Дубинко[×], В. В. Хижняков[°]

⁺ Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, 450001 Уфа, Россия

^{*} Национальный исследовательский Томский государственный университет, 634050 Томск, Россия

[×] Харьковский физико-технический институт, 61108 Харьков, Украина

[°] Университет Тарту, 50090 Тарту, Эстония

Поступила в редакцию 20 января 2014 г.

После переработки 21 февраля 2014 г.

Предложен анзац для задания начальных условий в методе молекулярной динамики для моделирования движущихся дискретных бризеров в моноатомных плотноупакованных кристаллах. Применимость анзаца продемонстрирована для двумерного кристалла с морзевским взаимодействием.

DOI: 10.7868/S0370274X14060101

Введение. В настоящее время в различных областях физики активно изучаются нелинейные дискретные системы, допускающие существование принципиально новых локализованных колебательных мод – дискретных бризеров (ДБ) [1–4]. Данные колебательные моды существуют в бездефектных решетках, что отличает их от колебательных мод, локализованных на дефектах. Кроме того, ДБ являются существенно нелинейными колебательными модами, в то время как моды, локализованные на дефектах, могут существовать и при малых амплитудах.

В одной из пионерских работ Сиверс и Таке-но показали, что ДБ являются точными решениями нелинейных дискретных уравнений [5]. Существование ДБ обеспечивается ангармонизмом межатомных сил, приводящим к зависимости частоты колебаний атомов от амплитуды. Для мягкого типа нелинейности частота моды уменьшается с ростом амплитуды, а для жесткого – увеличивается. При мягком типе нелинейности частота моды, уменьшаясь с ростом амплитуды, может входить в щель фононного спектра, если таковая имеется. При жестком типе нелинейности она, увеличиваясь, может оказаться выше фононного спектра. И в том и в другом случае колебательная мода (т.е. ДБ) при нулевой температуре перестает излучать энергию в виде малоамплитудных колебаний и теоретически может существовать вечно [5–7]. Следует отметить, что более важным для практики является понятие квазибризера, введенное

Чечиним с соавторами [8]. Квазибризеры не являются точными решениями нелинейных уравнений движения группы взаимодействующих частиц. Вместе с тем они могут иметь весьма большое время жизни, поскольку частоты их главных гармоник лежат вне спектра малоамплитудных колебаний системы.

В работах Манли и др. [9, 10] ДБ были идентифицированы методом неупругого рассеяния нейтронов в кристалле NaI в состоянии теплового равновесия при температуре 555 К. Однако в работе [11] авторы подвергают сомнению возможность наблюдения ДБ методом неупругого рассеяния нейтронов в этих условиях ввиду их малой концентрации. Возможно, наиболее прямое доказательство существования ДБ на сегодняшний день было получено для кристалла $\{[\text{Pt}(\text{en})_2][\text{Pt}(\text{en})_2\text{Cl}_2](\text{ClO}_4)_4\}$, где en = ethylenediamine, путем анализа рамановских спектров [12].

Несмотря на сложность экспериментального обнаружения ДБ в кристаллах, растет число теоретических работ, использующих концепцию ДБ для объяснения ряда физических эффектов. Концепция полярона, представляющего собой электрон-фононный комплекс, была дополнена концепцией солектрона, т.е. электрона, взаимодействующего с нелинейной колебательной модой типа ДБ [13, 14]. Дискретные бризеры локализуют значительную энергию (порядка 1 эВ [15, 16]) и могут инициировать зарождение дефектов в углеродных нанотрубках [17] либо облегчить отрыв дислокаций от стопоров, объясняя эффект электро-пластической деформации металлов

¹⁾ e-mail: andrei.kistanov.ufa@gmail.com

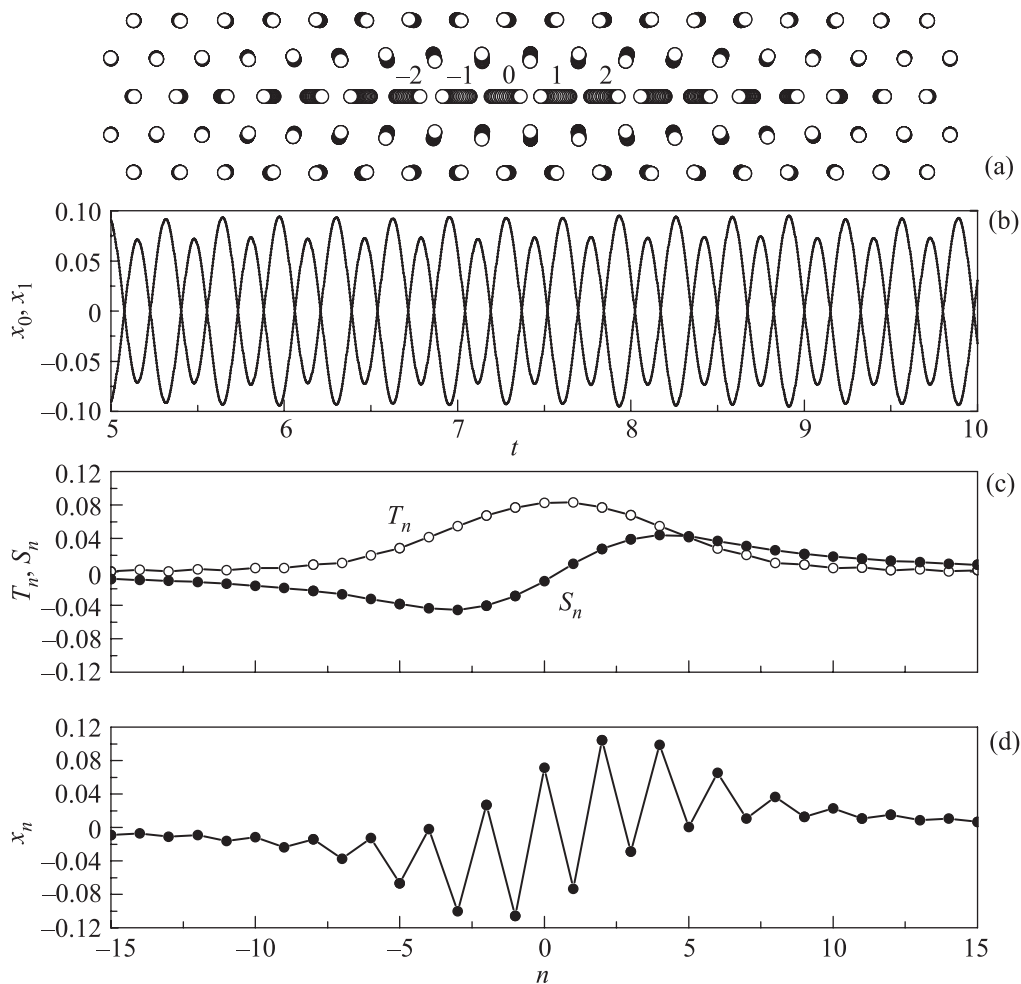


Рис. 1. Пример покоящегося ДБ в двумерном кристалле с межатомным потенциалом (1) для $\alpha = 5$, возбужденного при помощи анзаца (2), (3) (параметры см. в тексте). (а) – Стробоскопическая картина движения атомов (атомные перемещения увеличены в 3.7 раза). Показана нумерация цепочки атомов, используемая при задании начальных условий. (б) – Перемещения двух центральных атомов ДБ как функции времени. (с) – Амплитуды T_n и смещения от решеточных положений S_n для атомов плотноупакованного ряда, где возбужден ДБ. (д) – Смещения $x_n = (-1)^n T_n + S_n$ для них же

[18–21]. В общем случае возникновение ДБ приводит к перенормировке энергий активации различных химических реакций, что может вызывать отклонение скоростей реакций от классического закона Аррениуса [22].

Первые молекулярно-динамические исследования ДБ были проведены для кристалла NaI [23], Ge и Si [24]. Они были продолжены для кристаллов со структурой NaCl, углеродных нанотрубок [17] и графена [25–27].

До недавнего времени многие исследователи полагали [11], что в реальных кристаллах межатомные взаимодействия, как правило, проявляют мягкий тип нелинейности и ДБ могут существовать только при наличии щели в фоннном спектре кристалла. Од-

нако в работе [28] методом молекулярной динамики на примере Ni и Nb была продемонстрирована возможность существования ДБ с жестким типом нелинейности и с частотами выше фоннного спектра. Данный результат открывает новые перспективы в изучении ДБ в моноатомных кристаллах со сплошным фоннным спектром. Вместе с тем способ возбуждения ДБ, использовавшийся авторами, не позволил им получить ДБ без модуляции амплитуды.

В настоящей работе предлагается анзац для задания начальных условий в методе молекулярной динамики с целью возбуждения ДБ с частотами выше фоннного спектра в двумерном кристалле с морзевским взаимодействием [29, 30].

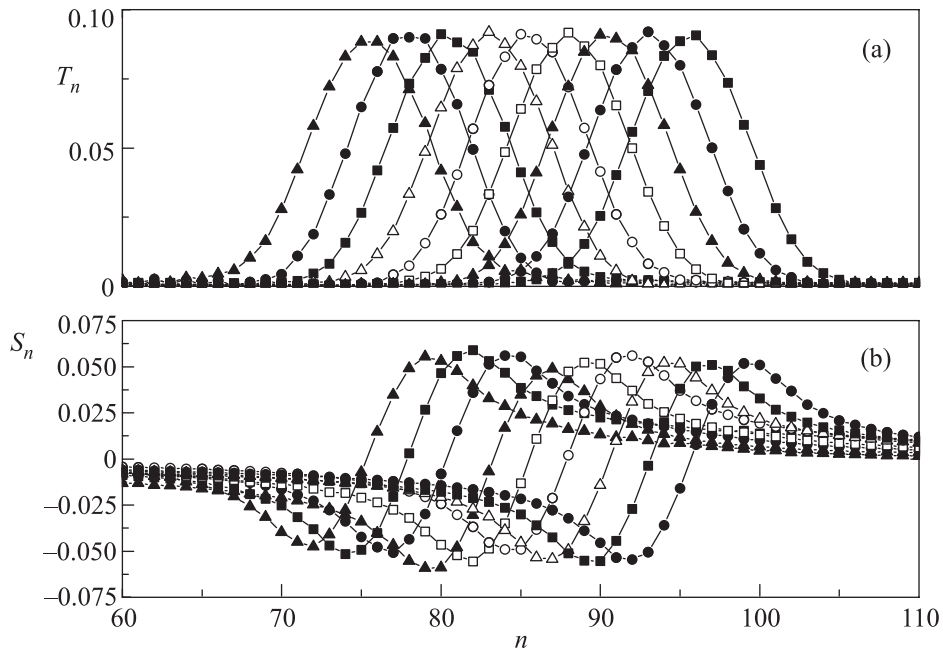


Рис. 2. Пример движущегося ДБ, возбужденного в двумерном кристалле ($\alpha = 5$) при помощи анзаца (4) с параметрами $A = 0.108$, $B = 0.013$, $\beta = \gamma = 0.27$, $\omega = 20$, $x_0 = 1/2$, $\delta = 0.04\pi$. Функции T_n (a) и S_n (b) приведены с интервалом $\Delta t = 5.07$

Описание модели. Нами рассматривается модель двумерного плотноупакованного кристалла с межатомным расстоянием a . Без потери общности масса атомов считается единичной. Взаимодействие атомов описывается парным потенциалом Морзе:

$$U(r) = D(e^{-2\alpha(r-r_m)} - 2e^{-\alpha(r-r_m)}), \quad (1)$$

где r – расстояние между парой атомов, D , α , r_m – параметры потенциала. Функция $U(r)$ имеет минимум при $r = r_m$. Глубина минимума (энергия разрыва связи) равна D . Параметр α определяет жесткость межатомной связи. Без потери общности можно положить $D = 1$ и $r_m = 1$, выбрав соответствующие единицы измерения расстояния и энергии. Остается один существенный параметр потенциала, α , влияющий на жесткость кристалла. Были рассмотрены значения $\alpha = \{5, 10, 20\}$, для которых равновесное межатомное расстояние равнялось $a = \{0.98813, 0.99987, 1.0\}$ соответственно.

Расчетная ячейка с периодическими граничными условиями содержала 160×160 атомов, имеющих две степени свободы – компоненты вектора перемещения в плоскости кристалла. Дискретный бризер возбуждался в центре расчетной ячейки. На ее периферии вводилось вязкое трение для поглощения малоамплитудных колебаний, излучаемых ДБ.

Возбуждение ДБ. Атомы одного из плотноупакованных рядов двумерного или трехмерного кри-

сталла нумеровались индексом n , как это показано на рис. 1а. Начальные условия для неподвижного ДБ задавались следующим образом:

$$x_n^0 = (-1)^n T_n + S_n, \quad \dot{x}_n^0 = 0, \quad y_n^0 = 0, \quad \dot{y}_n^0 = 0, \quad (2)$$

где x_n^0, y_n^0 и \dot{x}_n^0, \dot{y}_n^0 – компоненты векторов начальных перемещений и начальных скоростей атомов выбранной цепочки. Все остальные атомы кристалла имели нулевые начальные перемещения и начальные скорости. Функции T_n и S_n в (2) описывают амплитуды и смещения центров колебания атомов соответственно: $T_n = (x_{n,\max} - x_{n,\min})/2$, $S_n = (x_{n,\max} + x_{n,\min})/2$, где $x_{n,\max}$ и $x_{n,\min}$ – максимальное и минимальное значения (квази)периодической функции $x_n(t)$, описывающей колебательное движение n -го атома. Функции T_n и S_n имели вид

$$T_n = \frac{A}{\cosh[\beta(n - x_0)]}, \quad S_n = \frac{-B(n - x_0)}{\cosh[\gamma(n - x_0)]}, \quad (3)$$

где параметр A определяет амплитуду ДБ, B – амплитуду смещений центров колебаний атомов, параметры β, 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 соседними атомами.

Для задания движущегося ДБ использовался анзац

$$x_n(t) = \cos[\omega t + \varphi_0 + \delta(n - x_0)]x_n^0, \quad (4)$$

где ω – частота ДБ, лежащая выше фононного спектра кристалла, φ_0 – начальная фаза колебаний, δ – параметр, задающий разность фаз колебаний соседних атомов, а значения x_n^0 определены выражениями (2), (3). Отметим, что скорость ДБ зависит от δ . При $\delta = 0$ имеем неподвижный ДБ.

Предложенный анзац опирается на данные работы [28] и учитывает тот факт, что ДБ является экспоненциально локализованным в пространстве объектом, что обеспечивается использованием гиперболических функций в (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 перед амплитудами атомов T_n в выражении (2) множителя $(-1)^n$. Слагаемое S_n в (2) учитывает эффект разряжения 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 небольшой разности фаз δ в колебания соседних атомов в (4).

Выбор параметров предложенного анзаца представляет собой отдельную проблему. В данной работе использовался метод проб и ошибок. Заметим, что частота ДБ должна быть выше фононного спектра кристалла. Поскольку рост частоты ДБ обеспечивается за счет ангармонизмов межатомных сил, амплитуда ДБ должна быть достаточно большой. В качестве ориентира следует иметь в виду, что амплитуда колебаний атомов в металлах при предплавильных температурах составляет порядка 10% от межатомного расстояния. Поэтому в настоящей работе использовались значения $A \sim 0.1$ при межатомном расстоянии, близком к 1. Можно сформулировать некоторые тенденции в изменении параметров ДБ. Допустим, что каким-либо способом удалось возбудить ДБ с амплитудой A и частотой ω . Тогда ввиду жесткого типа нелинейности ДБ повышение его амплитуды приведет к повышению частоты и к увеличению степени локализации ДБ, т.е. к увеличению параметров β и γ .

Результаты моделирования. На рис. 1 приведен пример покоящегося ДБ в двумерном кристалле с межатомным потенциалом (1) для $\alpha = 5$, возбужденного при помощи анзаца (2), (3) с параметрами

$A = 0.0945$, $B = 0.011$, $\beta = \gamma = 0.22$, $x_0 = 1/2$. На панели а представлена стробоскопическая картина движения атомов (атомные перемещения увеличены в 3.7 раза). На панели б показаны перемещения $x_0(t)$ и $x_1(t)$ двух центральных атомов ДБ как функции времени. На панели с изображены амплитуды T_n и смещения от решеточных положений S_n для атомов плотноупакованного ряда, где возбужден ДБ. На панели д показаны смещения атомов $x_n = (-1)^n T_n + S_n$. Из приведенных результатов видно, что центральные атомы ДБ колеблются с постоянной амплитудой $A = 0.083$. Эта величина незначительно меньше амплитуды, отвечающей начальным условиям. Таким образом, анзац (2), (3) дает хорошее приближение начальных условий для ДБ.

Пример движущегося в двумерном кристалле с параметром потенциала $\alpha = 5$ ДБ приведен на рис. 2. Функции T_n (а) и S_n (б) даны с интервалом $\Delta t = 5.07$. Бризер движется слева направо. Параметры выражения (4), использовавшегося для задания начальных условий, брались следующими: $A = 0.108$, $B = 0.013$, $\beta = \gamma = 0.27$, $\omega = 20$, $x_0 = 1/2$, $\delta = 0.04\pi$. Дискретный бризер движется, сохраняя свой профиль и амплитуду. При этом профили функций T_n и S_n сохраняются близкими к заданным в момент $t = 0$ выражениями (3). Одно межатомное расстояние ДБ проходит за 6.4 периода колебаний. Можно оценить порядок величины скорости движения ДБ в железе, приняв, что частота Дебая составляет $6 \cdot 10^{13} \text{ с}^{-1}$, а межатомное расстояние равно $3 \cdot 10^{-10} \text{ м}$. Данная оценка дает $2.8 \cdot 10^3 \text{ м/с}$, что близко к половине скорости звука в железе.

На рис. 3 а–с представлены зависимости от A круговой частоты ДБ в двумерном кристалле с морзевским взаимодействием для $\alpha = \{5, 10, 20\}$ соответственно. Верхние границы фононных спектров показаны горизонтальными линиями. Видно, что во всех случаях частоты ДБ находятся выше фононного спектра кристалла и растут с ростом амплитуды ДБ. Таким образом, для рассматриваемых нелинейных колебательных мод реализуется жесткий тип нелинейности.

Расчеты показали, что ширина ДБ, определяемая параметрами β и γ , очень слабо зависит от величины параметра потенциала $\alpha = \{5, 10, 20\}$.

Заключение. Итак, нами предложен анзац с небольшим числом параметров, позволяющий с хорошей точностью задавать начальные условия для движущегося ДБ в моноатомном кристалле со сплошным фононным спектром. Анзац учитывает амплитуду колебаний и смещение центров колебаний атомов, составляющих ДБ. Предложенный

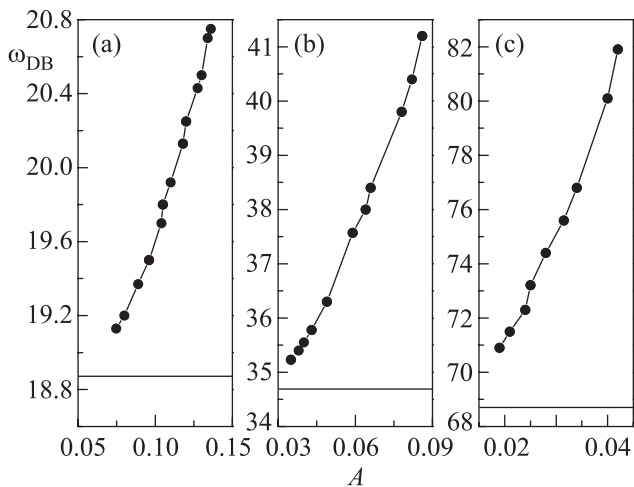


Рис. 3. (a–c) – Зависимости частоты ДБ от амплитуды для значений параметра потенциала Морзе $\alpha = \{5, 10, 20\}$ соответственно. Горизонтальные линии отмечают верхние границы фоновых спектров кристаллов для соответствующих параметров потенциала

анзац успешно апробирован для случая двумерного кристалла с морзевским межатомным потенциалом.

Установлено, что вне зависимости от параметра α , определяющего жесткость межатомного потенциала, степень локализации ДБ невысока. Поэтому значительные амплитуды колебаний имеет около десятка атомов одного плотноупакованного ряда. Щелевые ДБ, изучавшиеся в двумерных и трехмерных двухкомпонентных кристаллах при значительной разнице атомных масс компонент, локализованы значительно сильнее, так что большую амплитуду колебаний имеет всего один легкий атом [15, 23, 25]. Дискретные бризеры в углеродных нанотрубках [17], в деформированном графене [16, 25–27], а также в германии и кремнии [24] локализованы на двух атомах. По-видимому, низкая степень локализации ДБ в моноатомных кристаллах и послужила причиной задержки их открытия в чистых металлах [28], поскольку их возбуждение оказывается нетривиальной задачей.

Отметим, что анзац (4) был успешно применен нами и для возбуждения движущихся ДБ в ряде трехмерных металлических кристаллов с межатомными потенциалами, построенными по методу погруженного атома. Соответствующие результаты будут представлены в последующих публикациях. Эта задача важна для понимания механизма образования подвижных ДБ в кристаллах при их облучении быстрыми частицами, передающими атомам энергию и импульс. Радиационно-индуцированное образование ДБ имеет большое практическое значение, поскольку

оно качественно изменяет кинетику фазовых превращений [31].

1. S. Flach and A. V. Gorbach, *Phys. Rep.* **467**, 1 (2008).
2. D. K. Campbell, S. Flach, and Yu. S. Kivshar, *Phys. Today* **57**, 43 (2004).
3. M. E. Manley, *Acta Mater.* **58**, 2926 (2010).
4. С. В. Дмитриев, *Письма о материалах* **1**(2), 78 (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. S. Bezuglova, G. M. Chechin, and P. P. Goncharov, *Phys. Rev. E* **84**, 036606 (2011).
8. G. M. Chechin, G. S. Dzhelauhova, and E. A. Mehonoshina, *Phys. Rev. E* **74**, 036608 (2006).
9. M. E. Manley, A. J. Sievers, J. W. Lynn, S. A. Kiselev, N. I. Agladze, Y. Chen, A. Llobet, and A. Alatas, *Phys. Rev. B* **79**, 134304 (2009).
10. M. E. Manley, D. L. Abernathy, N. I. Agladze, and A. J. Sievers, *Sci. Rep.* **1**, 4 (2011).
11. A. J. Sievers, M. Sato, J. B. Page, and T. Rössler, *Phys. Rev. B* **88**, 104305 (2013).
12. G. Kalosakas, A. R. Bishop, and A. P. Shreve, *Phys. Rev. B* **66**, 094303 (2002).
13. M. G. Velarde, *J. Comput. Appl. Math.* **233**, 1432 (2010).
14. M. G. Velarde, W. Ebeling, and A. P. Chetverikov, *Int. J. Bifurcat. Chaos* **21**(6), 1595 (2011).
15. L. Z. Khadeeva and S. V. Dmitriev, *Phys. Rev. B* **81**, 214306 (2010).
16. E. A. Korznikova, J. A. Baimova, and S. V. Dmitriev, *Europhys. Lett.* **102**, 60004 (2013).
17. T. Shimada, D. Shirasaki, and T. Kitamura, *Phys. Rev. B* **81**, 035401 (2010).
18. В. В. Столяров, *Письма о материалах* **1**(2), 75 (2011).
19. В. В. Столяров, *Письма о материалах* **3**(2), 137 (2013).
20. V. I. Dubinko, P. A. Selyshchev, and J. F. R. Archilla, *Phys. Rev. E* **83**, 041124 (2011).
21. В. И. Дубинко, А. В. Дубинко, С. В. Дмитриев, *Письма о материалах* **3**(3), 239 (2013).
22. V. I. Dubinko and A. V. Dubinko, *Nuclear Inst. and Methods in Physics Research B* **303**, 133 (2013).
23. S. A. Kiselev and A. J. Sievers, *Phys. Rev. B* **55**, 5755 (1997).
24. N. K. Voulgarakis, G. Hadjisavvas, P. C. Kelires, and G. P. Tsironis, *Phys. Rev. B* **69**, 113201 (2004).
25. Л. З. Хадеева, С. В. Дмитриев, Ю. С. Кившарь, *Письма в ЖЭТФ* **94**(7), 580 (2011).

26. J. A. Baimova, S. V. Dmitriev, and K. Zhou, *Europhys. Lett.* **100**, 36005 (2012).
27. Y. Yamayose, Y. Kinoshita, Y. Doi, A. Nakatani, and T. Kitamura, *Europhys. Lett.* **80**, 40008 (2007).
28. M. Haas, V. Hizhnyakov, A. Shelkan, M. Klopov, and A. J. Sievers, *Phys. Rev. B* **84**, 144303 (2011).
29. Н. Н. Медведев, М. Д. Старостенков, П. В. Захаров, О. В. Пожидаева, *Письма в ЖТФ* **37**(3), 7 (2011).
30. L. Z. Khadeeva and S. V. Dmitriev, *Phys. Rev. B* **82**, 144304 (2011).
31. V. Dubinko and R. Shapovalov, *Theory of a quodon gas*. With application to precipitation kinetics in solids under irradiation; *Localized Excitations in Nonlinear Complex Systems, Nonlinear Systems and Complexity*, ed. by R. Carretero-Gonzalez, Springer International Publishing Switzerland (2014), p. 7.