Письма в ЖЭТФ, том 99, вып. 6, с. 403 – 408 © 2014 г. 25 марта

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 Такено 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 Чечиным 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 K. 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 $\{[Pt(en)_2][Pt(en)_2Cl_2](ClO_4)_4\}$, 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

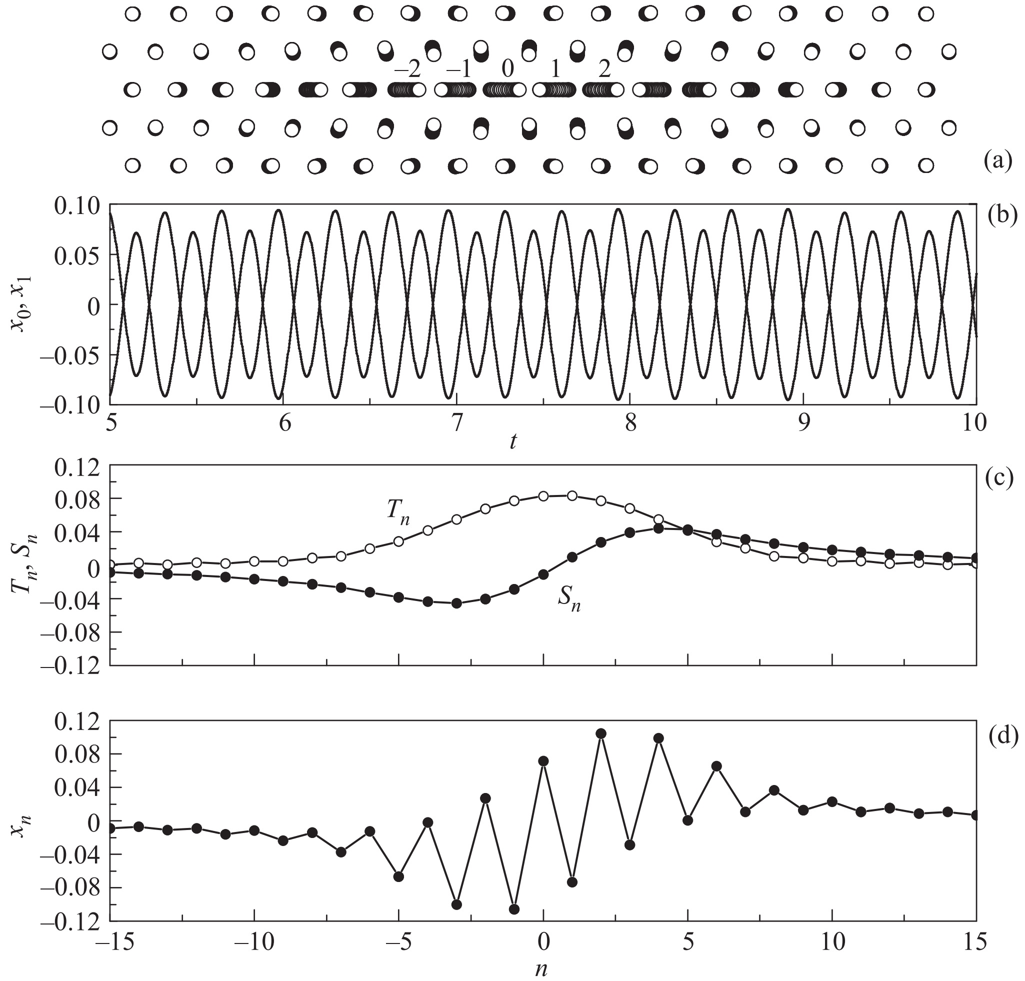

Рис. 1. Пример покоящегося ДБ в двумерном кристалле с межатомным потенциалом (1) для $\alpha = 5$, возбужденного при помощи анзаца (2), (3) (параметры см. в тексте). (a) – Стробоскопическая картина движения атомов (атомные перемещения увеличены в 3.7 раза). Показана нумерация цепочки атомов, используемая при задании начальных условий. (b) – Перемещения двух центральных атомов ДБ как функции времени. (c) – Амплитуды T_n и смещения от решеточных положений S_n для атомов плотноупакованного ряда, где возбужден ДБ. (d) – 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 фононном спектре кристалла. Однако в работе [28] методом молекулярной динамики на примере Ni и Nb была продемонстрирована возможность существования ДБ с жестким типом нелинейности и с частотами выше фононного спектра. Данный результат открывает новые перспективы в изучении ДБ в моноатомных кристаллах со сплошным фононным 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 фононного спектра в двумерном кристалле с морзевским взаимодействием [29, 30].

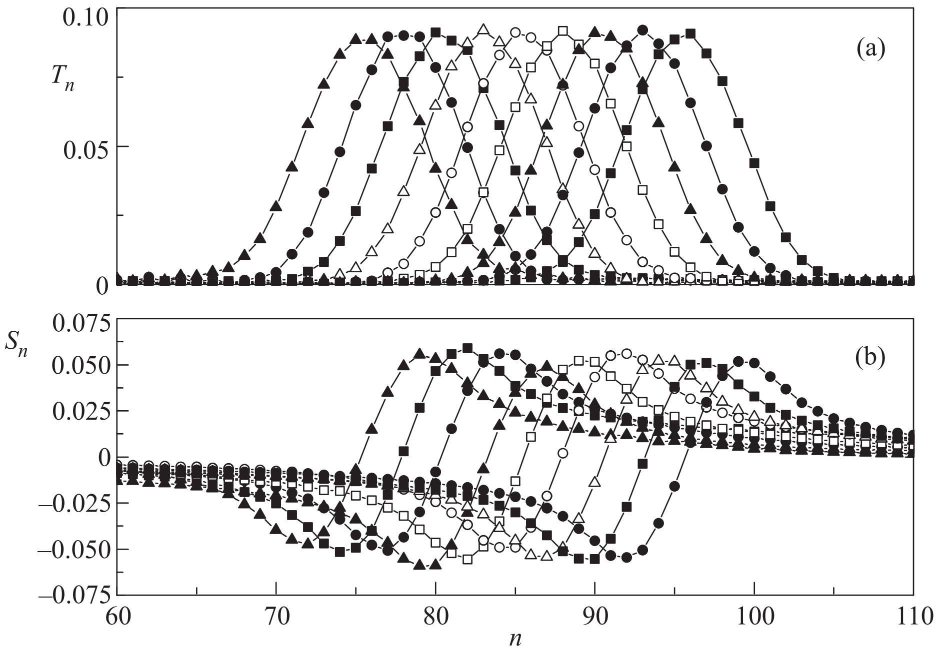

Рис. 2. Пример движущегося ДБ, возбужденного в двумерном кристалле ($\alpha = 5$) при помощи анзаца (4) с параметрами $A = 0.108$, $B = 0.013$, $\beta = \gamma = 0.27$, $\omega = 20$, $x_0 = 1/2$, $\delta = 0.04\pi$. Функции T_n (a) и S_n (b) приведены с интервалом $\Delta t = 5.07$

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:

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

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 $160{\times}160$ 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 кристалла нумеровались индексом n, как это показано на рис. 1a. Начальные условия для *неподвижного* ДБ задавались следующим образом:

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

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

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

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 a представлена стробоскопическая картина движения атомов (атомные перемещения увеличены в 3.7 раза). На панели b показаны перемещения $x_0(t)$ и $x_1(t)$ двух центральных атомов ДБ как функции времени. На панели c изображены амплитуды T_n и смещения от решеточных положений S_n для атомов плотноупакованного ряда, где возбужден ДБ. На панели d 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 (a) и S_n (b) 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 свои 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 $3 \cdot 10^{-10}$ м. Данная оценка дает $2.8 \cdot 10^3$ м/с, что близко к половине скорости звука в железе.

На рис. 3 a–c 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

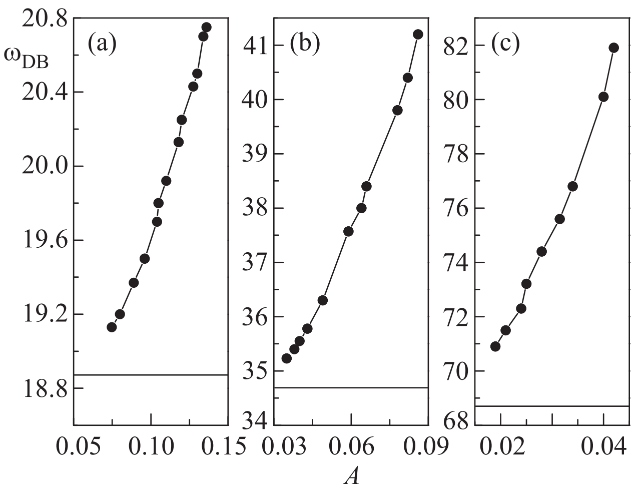

Рис. 3. (a–c) – Зависимости частоты ДБ от амплитуды для значений параметра потенциала Морзе $\alpha = \{5, 10, 20\}$ соответственно. Горизонтальные линии отмечают верхние границы фононных спектров кристаллов для соответствующих параметров потенциала

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.Ł. Abernathy, N. I. Agladze, and A. J. Sievers, Sci. Rep. **1**, 4 (2011).
11. A. J. Sievers, M. Sato, J. B. Page, and T. Rossler, 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.