Письма в ЖЭТФ, том 103, вып. 4, с. 303 – 308 © 2016 г. 25 февраля

Высокосимметричный дискретный бризер в двумерном кристалле Морзе

Е. А. Корзникова[+], С. Ю. Фомин[*], Э. Г. Соболева[×], С. В. Дмитриев[+○1)]

[+]*Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, 450001 Уфа, Россия*

[*]*Уфимский государственный авиационный технический университет, 450077 Уфа, Россия*

[×]*Юргинский технологический институт (филиал) Национального исследовательского Томского политехнического университета, 652050 Юрга, Россия*

[○]*Национальный исследовательский Томский государственный университет, 634050 Томск, Россия*

Поступила в редакцию 25 ноября 2015 г.
После переработки 11 января 2016 г.

Недавно было показано, что в двумерном моноатомном кристалле с морзевским взаимодействием можно возбудить движущийся дискретный бризер (ДБ), локализованный в одном плотноупакованном атомном ряду. В настоящей работе в таком же кристалле возбужден неподвижный ДБ, имеющий ось симметрии третьего порядка. Начальные условия для запуска такого ДБ задаются путем наложения колоколообразной функции на плоскую нелинейную фононную моду с волновым вектором, лежащим на границе зоны Бриллюэна. Кроме того, учитывается смещение центров колебаний атомов от центра ДБ за счет асимметрии потенциала Морзе. Полученные результаты позволяют подойти к поиску высокосимметричных ДБ в трехмерных кристаллах.

DOI: 10.7868/S0370274X16040123

Дискретный бризер (ДБ) – это пространственно-локализованная колебательная мода большой амплитуды в бездефектной нелинейной решетке [1–3]. В последнее десятилетие растет число работ, посвященных изучению ДБ в различных кристаллах, включая экспериментальные [4–11] и теоретические, выполненные с использованием первопринципных подходов [12–14] и метода молекулярной динамики [15–45]. В частности, исследовались ДБ в модельных кристаллах [15, 16], в щелочно-галоидных кристаллах [8, 17–19], в чистых металлах [7, 20–22], в упорядоченных сплавах [23–29], в ковалентных кристаллах германия и кремния [30], в углеродных и углеводородных наноматериалах [12–14, 31–37]. Дальнейший поиск возможных типов ДБ в различных кристаллах представляется актуальной и интересной задачей, решение которой позволит дать ответ на вопрос о роли ДБ в формировании физических и механических свойств кристаллов.

Для того чтобы ДБ не возбуждал малоамплитудных бегущих волн и не терял при этом свою энергию, его частота должна лежать вне фононного спектра колебаний кристалла. Выход частоты ДБ из фононного спектра происходит за счет ангармонизмов межатомных сил при значительных амплитудах колебаний атомов. Дискретные бризеры можно разделить на два больших класса по зависимости их частоты от амплитуды. Если частота ДБ растет с амплитудой, имеем ДБ с жестким типом нелинейности, в противном случае – с мягким. Дискретные бризеры с жестким типом нелинейности могут иметь частоты как выше фононного спектра, так и в его щели, если таковая имеется. Бризеры с мягким типом нелинейности могут иметь частоты только в щели фононного спектра. Следовательно, ее наличие является необходимым условием их существования. В теоретической работе [38] было показано, что одномерная цепочка атомов, взаимодействующих посредством одного из классических потенциалов (Борна–Майера, Леннарда–Джонса или Морзе), не может поддерживать ДБ с жестким типом нелинейности. Авторам удалось возбудить только ДБ с мягким типом нелинейности, рассмотрев биатомную цепочку со щелью в фононном спектре. Позже было показано, что в двумерном и трехмерном кристаллах с морзевским взаимодействием ДБ с жестким типом нелинейности существовать могут [39–46]. Это связано с тем, что в кристаллах размерности выше одного удается до некоторой степени подавить эффект увеличения средних межатомных расстояний в ядре ДБ и тем са-

1) e-mail: dmitriev.sergey.v@gmail.com

мым добиться того, что жесткое ядро межатомного потенциала дает больший вклад в динамику системы, чем мягкий хвост.

Авторы работы [40], следуя логике работы Хааса и др. [20], успешно возбудили движущийся ДБ в двумерном моноатомном морзевском кристалле. Данный ДБ был локализован в одном плотноупакованном атомном ряду и демонстрировал жесткий тип нелинейности. Целью настоящей работы является возбуждение в двумерном моноатомном морзевском кристалле другого ДБ с жестким типом нелинейности. Идея его построения основана на анализе фононной моды с волновым вектором на границе зоны Бриллюэна в нелинейном режиме. Если частота такой моды растет с амплитудой, то можно попытаться наложить на нее колоколообразную функцию, чтобы сформировать пространственно-локализованную нелинейную колебательную моду, т.е. ДБ.

Итак, рассмотрим двумерный кристалл, атомы которого расположены в узлах треугольной решетки, показанной на рис. 1a. Взаимодействие атомов описывается дальнодействующим парным потенциалом Морзе:

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

где r – расстояние между парой атомов, D, α, r_m – параметры потенциала. Функция $V(r)$ имеет минимум при $r = r_m$. Его глубина (энергия разрыва связи) равна D. Параметр α в (1) определяет жесткость межатомной связи. Далее все результаты мы приводим в безразмерных величинах, без потери общности полагая $D = r_m = 1$ и беря массу атома равной 1. Было рассмотрено значение $\alpha = 5$, для которого равновесное межатомное расстояние $a = 0.98813$ при радиусе обрезания потенциала $5.5a$. Отметим, что потенциал Морзе многократно использовался для моделирования различных свойств ДБ в кристаллах [23–29, 40–46].

В данном кристалле можно возбудить фононную моду с волновым вектором на границе зоны Бриллюэна $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$, представленную на рис. 1b. Динамика указанной моды изучалась на ячейке, содержащей 8×8 атомов, с наложенными периодическими граничными условиями. На рис. 2 приведены зависимости частоты данной моды от амплитуды колебания атомов для случаев, когда размер расчетной ячейки фиксирован (сплошная кривая) и когда он изменяется так, чтобы сохранялось нулевое внешнее давление (штриховая линия). Горизонтальной пунктирной линией показана верхняя граница фононного спектра кристалла, $\omega_{\max} = 2.995$. Видно, что данная фононная мода в нелинейном режиме в условиях постоянства объема демонстрирует рост частоты с амплитудой, отщепляясь от верхней границы фононного спектра. Однако при нулевом внешнем давлении частота моды убывает с ростом амплитуды. Следовательно, ДБ может существовать только при том условии, что локальное “тепловое расширение” решетки, которое он вызывает, сдерживается кристаллом в такой степени, что частота ДБ остается выше фононного спектра. Ниже будет показано, что в двумерном морзевском кристалле данное условие выполнено.

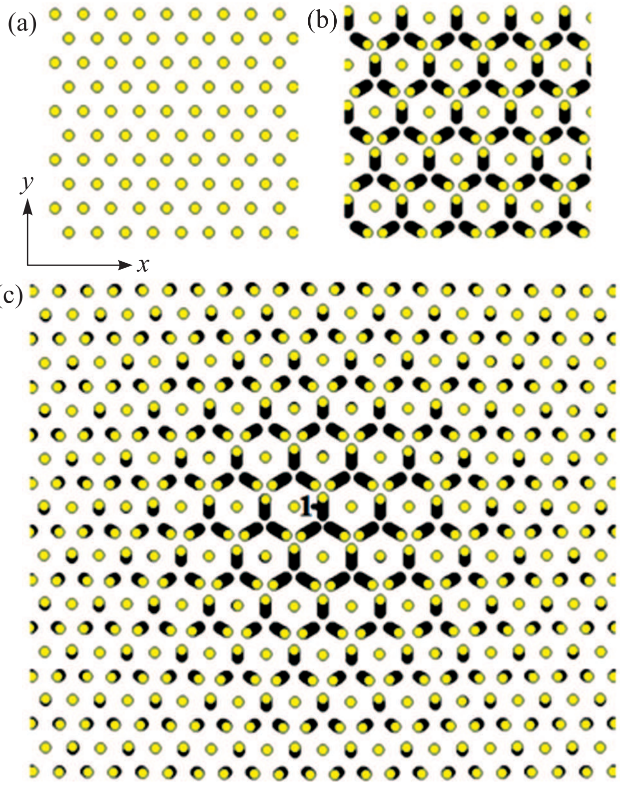

Рис. 1. (Цветной онлайн) (a) – Двумерный кристалл, атомы которого расположены в узлах треугольной решетки. (b) – Стробоскопическая картина движения атомов для фононной моды с волновым вектором на границе зоны Бриллюэна $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$. (c) – Стробоскопическая картина движения атомов в окрестности ДБ, полученного путем наложения колоколообразной функции на коротковолновую фононную моду в нелинейном режиме. Значения параметров, входящих в (2) и (8): $T = 0.04$, $\beta = 0.245$, $P = 0.12$, $\delta = 0.19$. На панелях b и c перемещения атомов для наглядности увеличены в 7 раз

Применим экспоненциально локализованную колоколообразную функцию для вырезания ДБ из плоской фононной моды. Расчет для ДБ проводился на ячейке, содержащей 192×192 атомов, с наложенными периодическими граничными условия-

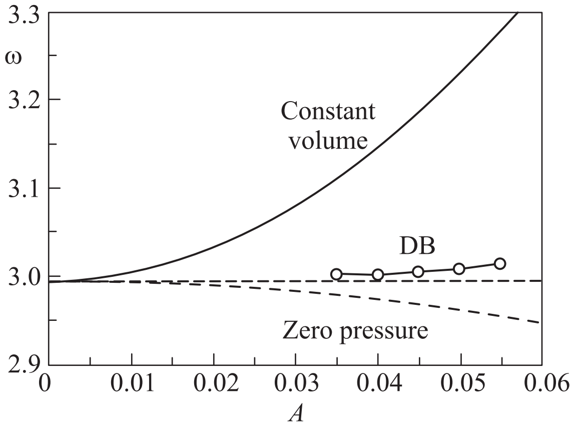

Рис. 2. Зависимости частоты фононной моды, представленной на рис. 1b, от амплитуды в нелинейном режиме: сплошная кривая – при неизменных размерах расчетной ячейки, штриховая – при нулевом давлении. Горизонтальная пунктирная линия показывает верхнюю границу фононного спектра, $\omega_{\max} = 2.995$. Открытые кружки, соединенные линией, представляют рассчитанную зависимость частоты ДБ, показанного на рис. 1c, от амплитуды колебания его центрального атома

ми. На периферии расчетной ячейки вводилась вязкость для поглощения малоамплитудных волн, излучаемых ДБ вследствие неточности начальных условий. Центр колоколообразной функции можно расположить на одном из покоящихся атомов либо в точке, равноудаленной от трех соседних колеблющихся атомов (см. рис. 1a). И в том и в другом случае получается ДБ с осью симметрии третьего порядка. Ввиду относительно слабой степени локализации ДБ, полученных в данной работе, оказалось, что свойства ДБ весьма слабо зависят от точки его центрирования. Далее рассматриваются ДБ, центрированные в точке, равноудаленной от трех соседних колеблющихся атомов. Пусть координаты данной точки (x_0, y_0). Амплитуду колебаний атома с координатами (x, y), удаленного от центра ДБ на расстояние $R = \sqrt{(x-x_0)^2 + (y-y_0)^2}$, примем равной

$$A(R) = \frac{T}{\cosh(\beta R)}, \tag{2}$$

где T – амплитуда колоколообразной функции, а β определяет степень ее локализации.

При задании начальных условий, соответствующих ДБ, следует также учесть, что центры колебаний атомов смещаются радиально от точки (x_0, y_0) за счет асимметрии потенциала Морзе (эффект, аналогичный тепловому расширению кристаллов). Вдали от центра ДБ радиальные смещения атомов малы и медленно изменяются с расстоянием. Поэтому они должны хорошо описываться линейной теорией упругости. Можно показать, что статическое поле радиальных перемещений атомов, вызванных ДБ, в двумерном кристалле на больших расстояниях убывает как $1/r$, т.е. весьма медленно. Это следует из решения задачи теории упругости для круглой тонкой пластины диаметра b с концентрическим круглым отверстием диаметра a [47]. Пусть данная пластина выполнена из изотропно-упругого материала с модулем Юнга E и коэффициентом Пуассона ν. Радиальное давление p приложено к краям внутреннего выреза. В полярных координатах имеем неизвестное радиальное перемещение $u(r)$, две ненулевые компоненты тензора напряжений σ_r и σ_θ, и три ненулевые компоненты тензора деформаций ε_r, ε_θ и ε_z. Уравнение равновесия, записанное в перемещениях, имеет вид

$$\frac{d^2u}{dr^2} + \frac{1}{r}\frac{du}{dr} - \frac{u}{r^2} = 0. \tag{3}$$

Его общее решение

$$u = C_1 r + \frac{C_2}{r}, \tag{4}$$

где константы интегрирования

$$C_1 = \frac{1-\nu}{E}\frac{a^2 p}{b^2 - a^2}, \tag{5}$$

$$C_2 = \frac{1+\nu}{E}\frac{a^2 b^2 p}{b^2 - a^2}, \tag{6}$$

были определены из граничных условий, состоящих в том, что на внутреннем вырезе $\sigma_r(a) = -p$, а на внешнем крае $\sigma_r(b) = 0$. Для бесконечной пластины с круговым отверстием следует рассмотреть предел $b \to \infty$, что дает $C_1 = 0$, $C_2 = a^2 p(1+\nu)/E$. С учетом этого из (4) для радиального перемещения получаем

$$u = a^2 p \frac{1+\nu}{E}\frac{1}{r}. \tag{7}$$

Данное выражение задает дальнодействующее статическое поле радиальных перемещений атомов в двумерном кристалле вдали от центра ДБ. Множитель $a^2 p$ имеет размерность силы и, следовательно, определяет эффективную сосредоточенную силу, действующую со стороны ДБ на бесконечный двумерный кристалл.

Итак, вдали от центра ДБ радиальные смещения центров колебаний атомов подчиняются выражению (7). Вместе с тем в самом центре ДБ в силу симметрии они должны равняться нулю. Численные эксперименты показали, что зависимость смещений центров колебаний атомов от расстояния до центра ДБ R можно аппроксимировать выражением

$$S(R) = \frac{P \tanh^2(\delta R)}{R}, \tag{8}$$

где P и δ – параметры. Множитель $\tanh^2(\delta R)$ в выражении (8) обеспечивает обращение в нуль $S(R)$ для $R = 0$ и асимптотическое поведение $S(R) \approx P/R$ на больших R.

Дискретный бризер, представленный на рис. 1с, был возбужден при использовании следующих значений параметров, входящих в (2) и (8): $T = 0.04$, $\beta = 0.245$, $P = 0.12$, $\delta = 0.19$. Параметр T, определяющий амплитуду ДБ, был назначен. Для него методом проб и ошибок были подобраны остальные параметры. На рис. 3 для указанных значений параметров сплошными линиями приведены амплитуда колебаний атомов как функция расстояния от центра ДБ, заданная выражением (2) (a), а также смещение центров колебаний атомов как функция расстояния от центра ДБ согласно (8) (b). Значками показаны численно найденные амплитуды колебаний (a) и смещения центров колебаний атомов в момент времени $t = 20$ (b). Закрытые кружки представляют атомы подрешеток 1–3, которые в фононной моде имеют одинаковые амплитуды колебаний, а открытые – атомы подрешетки 4, имеющие нулевые амплитуды колебаний в фононной моде (см. рис. 1b). Отметим близость реальных амплитуд колебаний атомов и смещений их центров колебаний к аппроксимирующим зависимостям (2) и (8) соответственно.

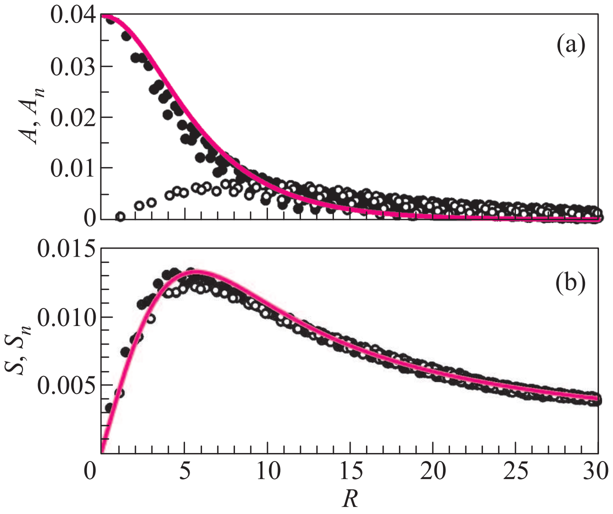

Рис. 3. (Цветной онлайн) (a) – Амплитуда колебаний атомов как функция расстояния от центра ДБ, заданная выражением (2). (b) – Смещение центров колебаний атомов как функция расстояния от центра ДБ, определенная в (8). Открытые и закрытые кружки показывают численный результат в момент времени $t = 20$ для подрешеток 1–3 и 4 соответственно. Значения параметров, входящих в (2) и (8): $T = 0.04$, $\beta = 0.245$, $P = 0.12$, $\delta = 0.19$

На рис. 4 приводится зависимость вертикального перемещения атома 1 от времени для ДБ, показанного на рис. 1с. Данный атом – один из трех атомов, составляющих центр ДБ. Из приведенного графика была определена частота ДБ, равная 3.002. Это значение лежит выше спектра фононных колебаний (см. рис. 2). Аналогичным образом были возбуждены ДБ и для других значений параметра T, который задает амплитуду ДБ. В результате была построена зависимость частоты ДБ от его амплитуды, представленная на рис. 2 открытыми кружками, соединенными кривой. Оказалось, что частота ДБ растет с амплитудой, т.е. ДБ демонстрирует жесткий тип нелинейности. Однако скорость роста частоты ДБ с амплитудой намного меньше, чем у фононной моды, на основе которой ДБ был построен. Это связано с увеличением расстояний между центрами колебаний атомов в ядре ДБ, что приводит к росту вклада мягкого хвоста потенциала Морзе в динамику системы, по сравнению с фононной модой в условиях постоянства объема.

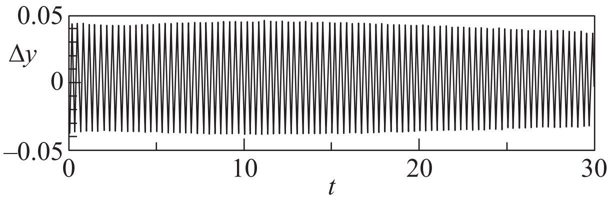

Рис. 4. Зависимость вертикального перемещения атома 1 от времени для ДБ, показанного на рис. 1с

Следует отметить, что полученный ДБ не является точным решением нелинейных уравнений движений атомов. Он должен рассматриваться как квазибризер [48], имеющий достаточно большое время жизни.

Таким образом, в моноатомном двумерном морзевском кристалле найден новый ДБ с жестким типом нелинейности. В отличие от ранее изученного ДБ [40], найденный в данной работе ДБ имеет более высокую симметрию и, по всей видимости, не может перемещаться по кристаллу. Отметим, что у ДБ, описанного в настоящей работе, каждый четвертый атом практически не движется, даже в ядре ДБ. Неподвижные атомы можно заменить более тяжелыми или более легкими атомами. Это практически не повлияет на динамику ДБ. Таким образом, ДБ данного типа может существовать как в моноатомном кристалле, так и в кристалле стехиометрического состава A_3B. Полученные результаты позволяют подойти к поиску высокосимметричных ДБ в трехмерных кристаллах, что планируется сделать в последующих работах.

К.Е.А. благодарит за поддержку грант Президента для молодых ученых РФ МК-5283.2015.2,С.В.Д.благодарит за финансовую поддержку РНФ (грант # 14-13-00982).

1. A. S. Dolgov, Sov. Phys. Sol. State **28**, 907 (1986).
2. A. J. Sievers and S. Takeno, Phys. Rev. Lett. **61**, 970 (1988).
3. S. Flach and A. V. Gorbach, Phys. Rep. **467**, 1 (2008).
4. N. K. Voulgarakis, G. Kalosakas, A. R. Bishop, and G. P. Tsironis, Phys. Rev. B **64**, 020301 (2001).
5. G. Kalosakas, A. R. Bishop, and A. P. Shreve, Phys. Rev. B **66**, 094303 (2002).
6. D. K. Campbell, S. Flach, and Y. S. Kivshar, Phys. Today. **57**, 43 (2004).
7. M. E. Manley, A. Alatas, F. Trouw, B. M. Leu, J. W. Lynn, Y. Chen, and W. L. Hults, Phys. Rev. B **77**, 214305 (2008).
8. 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).
9. M. Kempa, P. Ondrejkovic, P. Bourges, J. Ollivier, S. Rols, J. Kulda, S. Margueron, and J. Hlinka, J. Phys.: Cond. Mat. **25**, 055403 (2013).
10. A. J. Sievers, M. Sato, J. B. Page, and T. Rössler, Phys. Rev. B **88**, 104305 (2013).
11. J. F. R. Archilla, S. M. M. Coelho, F. D. Auret, V. I. Dubinko, and V. Hizhnyakov, Physica D **297**, 56 (2015).
12. G. M. Chechin and I. P. Lobzenko, Lett. Mat. **4**, 226 (2014).
13. G. M. Chechin, S. V. Dmitriev, I. P. Lobzenko, and D. S. Ryabov, Phys. Rev. B **90**, 045432 (2014).
14. И. П. Лобзенко, Г. М. Чечин, Г. С. Безуглова, Ю. А. Баимова, Е. А. Корзникова, С. В. Дмитриев, ФТТ **58**(3), 616 (2016).
15. S. V. Dmitriev, N. N. Medvedev, R. R. Mulyukov, O. V. Pozhidaeva, A. I. Potekaev, and M. D. Starostenkov, Rus. Phys. J. **51**, 858 (2008).
16. L. Z. Khadeeva and S. V. Dmitriev, Phys. Rev. B **84**, 144304 (2011).
17. S. A. Kiselev and A. J. Sievers, Phys. Rev. B **55**, 5755 (1997).
18. L. Z. Khadeeva and S. V. Dmitriev, Phys. Rev. B **81**, 214306 (2010).
19. Ю. А. Баимова, С. В. Дмитриев, А. А. Кистанов, А. И. Потекаев, Изв. вузов. Физика **56**(2), 60 (2013).
20. M. Haas, V. Hizhnyakov, A. Shelkan, M. Klopov, and A. J. Sievers, Phys. Rev. B **84**, 144303 (2011).
21. R. T. Murzaev, A. A. Kistanov, V. I. Dubinko, D. A. Terentyev, and S. V. Dmitriev, Comp. Mat. Sci. **98**, 88 (2015).
22. D. A. Terentyev, A. V. Dubinko, V. I. Dubinko, S. V. Dmitriev, E. E. Zhurkin, and M. V. Sorokin, Model. Simul. Mater. Sci. Eng. **23**, 085007 (2015).
23. N. N. Medvedev, M. D. Starostenkov, and M. E. Manley, J. Appl. Phys. **114**, 213506 (2013).
24. М. Д. Старостенков, А. И. Потекаев, С. В. Дмитриев, П. В. Захаров, А. М. Еремин, В. В. Кулагина, Изв. вузов. Физика **58**(9), 136 (2015).
25. Н. Н. Медведев, М. Д. Старостенков, П. В. Захаров, О. В. Пожидаева, Письма в ЖТФ **379**(3), 7 (2011).
26. N. N. Medvedev, M. D. Starostenkov, A. I. Potekaev, P. V. Zakharov, A. V. Markidonov, and A. M. Eremin, Energy, Russ. Phys. J. **57**(3), 387 (2014).
27. П. В. Захаров, М. Д. Старостенков, А. М. Еремин, А. В. Маркидонов, Фундаментальные проблемы современного материаловедения **11**(2), 260 (2014).
28. П. В. Захаров, М. Д. Старостенков, С. В. Дмитриев, Н. Н. Медведев, А. М. Еремин, ЖЭТФ **148**(2), 252 (2015).
29. П. В. Захаров, М. Д. Старостенков, Н. Н. Медведев, А. М. Еремин, А. В. Маркидонов, Фундаментальные проблемы современного материаловедения **11**(3), 388 (2014).
30. N. K. Voulgarakis, G. Hadjisavvas, P. C. Kelires, and G. P. Tsironis, Phys. Rev. B **69**, 113201 (2004).
31. Y. Yamayose, Y. Kinoshita, Y. Doi, A. Nakatani, and T. Kitamura, Europhys. Lett. **80**, 40008 (2007).
32. Y. Doi and A. Nakatani, J. Sol. Mach. Mat. Eng. **6**, 71 (2012).
33. Л. З. Хадеева, С. В. Дмитриев, Ю. С. Кившарь, Письма в ЖЭТФ **97**(7), 580 (2011).
34. E. A. Korznikova, J. A. Baimova, and S. V. Dmitriev, Europhys. Lett. **102**, 60004 (2013).
35. J. A. Baimova, S. V. Dmitriev, and K. Zhou, Europhys. Lett. **100**, 36005 (2012).
36. J. A. Baimova, E. A. Korznikova, I. P. Lobzenko, and S. V. Dmitriev, Rev. Adv. Mater. Sci. **42**, 68 (2015).
37. B. Liu, J. A. Baimova, S. V. Dmitriev, X. Wang, H. Zhu, and K. Zhou, J. Phys. D: Appl. Phys. **46**, 305302 (2013).
38. S. A. Kiselev, S. R. Bickham, and A. J. Sievers, Phys. Rev. B **48**, 13508 (1993).
39. S. V. Dmitriev, A. A. Kistanov, and V. I. Dubinko, Springer Ser. Mat. Sci. **221**, 205 (2015).
40. А. А. Кистанов, Р. Т. Мурзаев, С. В. Дмитриев, В. И. Дубинко, В. В. Хижняков, Письма в ЖЭТФ **99**, 403 (2014).
41. A. A. Kistanov, E. A. Korznikova, S. Yu. Fomin, K. Zhou, and S. V. Dmitriev, Lett. Mat. **4**(4), 315 (2014).
42. A. A. Kistanov, S. V. Dmitriev, A. P. Chetverikov, and M. G. Velarde, Eur. Phys. J. B **87**(9), 211 (2014).
43. А. С. Семенов, Е. А. Корзникова, С. В. Дмитриев, Письма о материалах **5**(1), 11 (2015).

44. А. А. Кистанов, К. Жоу, Е. А. Корзникова, С. Ю. Фомин, С. В. Дмитриев, Фундаментальные проблемы современного материаловедения **12**(1), 103 (2015).
45. А. А. Кистанов, А. С. Семенов, С. В. Дмитриев, ЖЭТФ **146**(4),869 (2014).
46. А. А. Кистанов, С. В. Дмитриев, А. С. Семенов, В. И. Дубинко, Д. А. Терентьев, Письма в ЖТФ **40**(15), 58 (2014).
47. С. П. Тимошенко, Дж. Гудьер, *Теория упругости*, Наука, М. (1975), 576 с.
48. G. M. Chechin, G. S. Dzhelauhova, and E. A. Mehonoshina, Phys. Rev. E **74**, 036608 (2006).