

# Щелевые дискретные бризеры в двухкомпонентном двумерном кристалле в состоянии теплового равновесия

© С.В. Дмитриев, Л.З. Хадеева

Институт проблем сверхпластичности металлов РАН,  
Уфа, Россия

E-mail: liya.z.khadeeva@gmail.com

(Поступила в Редакцию 18 октября 2010 г.)

Кристаллы, имеющие запрещенную зону в фоновом спектре, могут поддерживать щелевые дискретные бризеры (ДБ), т.е. нелинейные локализованные колебательные моды, существующие при отсутствии дефектов, частота колебаний которых лежит в запрещенной зоне. Методом молекулярной динамики исследовано время жизни щелевых ДБ в двумерном идеальном кристалле состава  $A_3B$  в состоянии теплового равновесия. Существование ДБ в таком кристалле, как было показано ранее, обеспечивается наличием широкой запрещенной зоны в фоновом спектре при достаточно большом отношении масс компонентов  $m_A/m_B$ . Для сравнения также рассмотрен кристалл с относительно малым отношением  $m_A/m_B$ , когда щель в спектре отсутствует и существование ДБ невозможно при мягком типе нелинейности, реализуемом в нашем случае. Показано, что в кристалле, поддерживающем существование ДБ, в отличие от противоположного случая действительно возникают долгоживущие локализованные колебательные моды большой амплитуды, концентрация и время жизни которых растут с температурой.

Работа поддержана грантом РФФИ № 09-08-00695-а.

## 1. Введение

В последние годы необычайно возрос интерес к дискретным нелинейным системам в различных областях естествознания, включая физику конденсированного состояния [1], нелинейную оптику [2], джозефсоновские сверхпроводящие контакты [3], динамику молекул ДНК [4], бозе-эйнштейновский конденсат [5], материаловедение [6], что нашло отражение в ряде обзоров [7,8]. В нелинейных дискретных системах возможно появление принципиально новых локализованных колебательных мод, получивших название дискретных бризеров (ДБ). В отличие от линейных мод, локализованных на дефектах, ДБ могут существовать в идеальных решетках, но их амплитуда должна быть достаточно большой, чтобы обеспечить выход частоты моды из спектра малоамплитудных колебаний системы за счет влияния ангармонизмов. В системах с жесткой нелинейностью происходит рост частоты колебательной моды с ростом ее амплитуды, что может приводить к формированию ДБ с частотами, лежащими выше фонового спектра. Такая картина типична для системы с кубическим типом нелинейности [9]. Однако в кристаллах с реалистичными межатомными потенциалами нелинейность оказывается мягкого типа [10–16], когда частота колебательной моды уменьшается с ростом ее амплитуды, и существование ДБ в этих условиях возможно лишь при наличии запрещенных зон в фоновом спектре. Такие ДБ получили название щелевых [17–21].

В ряде приложений ДБ не испытывают стохастических возмущений, но в физике конденсированного состояния и в материаловедении наибольший интерес для

практики представляют кристаллы при конечных температурах, когда ДБ, если они существуют, взаимодействуют с тепловыми колебаниями решетки. Существование ДБ в кристалле NaI при нулевой температуре было показано методом молекулярной динамики в работе [10]. Недавно были получены экспериментальные доказательства существования щелевых ДБ в кристалле NaI в состоянии теплового равновесия [1]. В свете этого факта изучение свойств дискретных бризеров в кристаллах в состоянии теплового равновесия становится особенно актуальным и важным.

ДБ в тепловом равновесии рассматривались теоретически в работе [9] для двумерной модельной системы с кубической нелинейностью и с учетом ближайших взаимодействий атомов. Авторы проанализировали спектральную плотность мощности для кристалла в тепловом равновесии при различных температурах и показали, что вклад ДБ возрастает с ростом температуры, когда возрастают амплитуды колебаний атомов и, следовательно, роль ангармонизмов. Частота ДБ в этом случае лежит выше фонового спектра, что, как уже отмечалось, не характерно для реальных кристаллов. Кроме того, спектральная плотность мощности несет в себе информацию о том, какие колебательные частоты возбуждены в кристаллической решетке, но она не позволяет установить такую важную характеристику, как время жизни высокоамплитудных колебаний ДБ.

В настоящей работе мы продолжаем исследование щелевых ДБ в двумерном кристалле состава  $A_3B$  с межатомными взаимодействиями, описываемыми потенциалами Морзе, при различных отношениях масс тяжелых ( $A$ ) и легких ( $B$ ) атомов [12–15]. Для различных температур методом молекулярной динамики

рассчитываются времена жизни высокоэнергетических состояний атомов. Рассмотрено два значения отношения масс компонентов  $m_A/m_B$ . В одном случае существование щелевых ДБ возможно, а в другом — нет (из-за отсутствия щели в фоновом спектре).

## 2. Описание компьютерного эксперимента

Нами рассматривается двумерная модель кристалла состава  $A_3B$  на основе гексагональной решетки, которая представляет собой плоскость (111) сверхструктуры  $L1_2$  на основе ГЦК-решетки. Параметры потенциала Морзе [22], использованного в наших расчетах, приводятся в работе [13]. При радиусе обрезки потенциала  $16 \text{ \AA}$  равновесный параметр решетки оказался равным  $2.6 \text{ \AA}$ . Масса атома  $A$  составляет  $m_A = 9.75 \cdot 10^{-26} \text{ kg}$ , а для массы атома  $B$  были рассмотрены два значения, дающие следующие отношения масс:  $m_A/m_B = 2.18$  и  $9.79$ .

Расчетная ячейка с наложенными периодическими граничными условиями содержала  $N = 32 \times 32$  ячеек периодичности кристалла, в каждой из которых, согласно рассмотренной стехиометрии, находилось по три атома  $A$  и по одному атому  $B$ . Уравнения движения атомов, представляющих собой классические уравнения движения Ньютона, интегрировались методом Штормера шестого порядка точности с шагом интегрирования  $0.1 \text{ fs}$ .

При задании начальных условий мы стремились получить кристалл в тепловом равновесии. Для этого нами суммировались все  $N$  фоновых мод дискретного спектра колебаний рассматриваемой ячейки периодичности с амплитудами, обеспечивающими равномерное распределение энергии по всем модам и дающими в сумме желаемую общую энергию. Было учтено тепловое расширение кристалла так, что при любой из рассмотренных нами температур компоненты макроскопических напряжений равнялись нулю. Температуру кристалла удобно характеризовать средней кинетической энергией  $K$ , приходящейся на один атом. Перед анализом тепловых флуктуаций кристалл подвергался термализации в течение  $100 \text{ ps}$ .

В работе [13] было показано, что при отношении масс компонентов  $m_A/m_B = 9.79$  запрещенная зона в фоновом спектре лежит в диапазоне  $52 < \omega < 107 \text{ THz}$ , а частота ДБ, уменьшаясь с ростом его амплитуды, находится в диапазоне  $86 < \omega_{\text{ДБ}} < 106 \text{ THz}$  (рис. 1, *b*). Таким образом, период колебания ДБ составляет около  $\Theta = 0.06 \text{ ps}$ . При отношении масс компонентов  $m_A/m_B = 2.18$  щель в фоновом спектре отсутствует и существование щелевых ДБ невозможно (рис. 1, *a*).

Для термализованного кристалла на временном отрезке длиной  $100 \text{ ps}$  определялись время жизни атомов в высокоэнергетическом состоянии  $t^*$ , средняя кинетическая энергия атома за это время  $K^*$  и концентрация  $C^*$  таких состояний как функция их времени жизни.

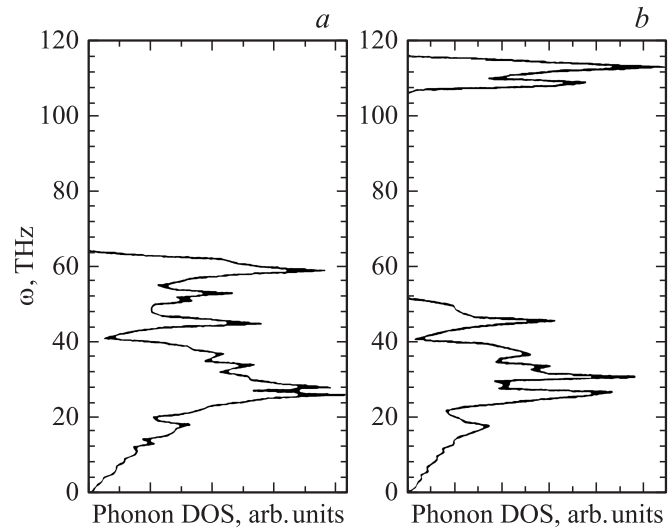


Рис. 1. Плотности фоновых состояний двумерного кристалла при отношениях атомных масс компонентов  $m_A/m_B = 2.18$  (а) и  $9.79$  (б).

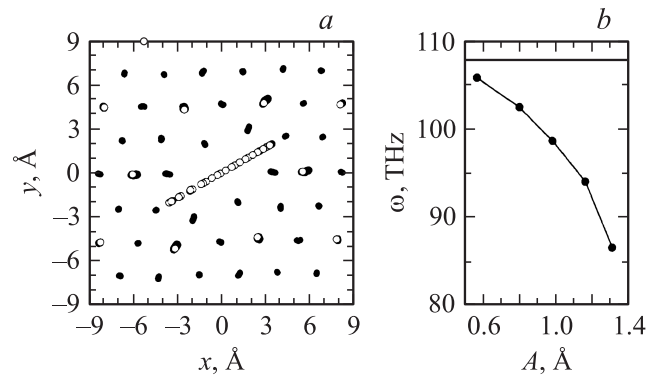
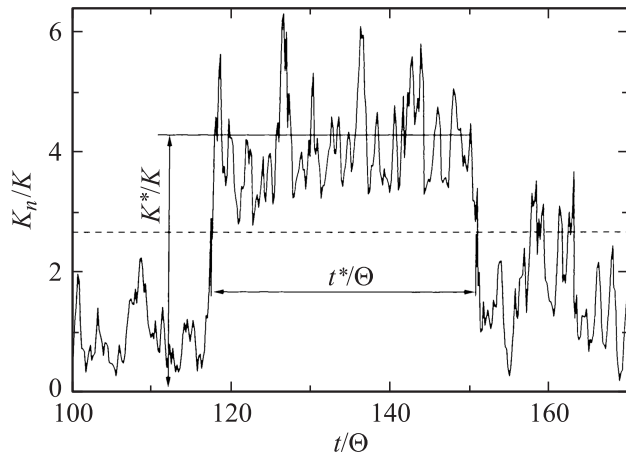


Рис. 2. а) Стробоскопическое представление движения атомов в щелевом ДБ с отношением масс компонентов  $m_A/m_B = 9.79$ . Смещения атомов из положения равновесия увеличены в 4 раза. Светлыми (темными) точками показаны атомы легкого (тяжелого) компонента. б) Зависимость частоты от амплитуды для щелевых ДБ при  $m_A/m_B = 9.79$ . Горизонтальная линия показывает положение верхней границы запрещенной зоны фоновом спектре (см. рис. 1, б).

Высокоэнергетическим считалось состояние, в котором кинетическая энергия атома, усредненная по периоду колебаний ДБ, превышала  $2.66 \text{ K}$ , где  $K$  — средняя по ансамблю кинетическая энергия, приходящаяся на один атом. Данные расчеты проводились для пяти различных значений  $K = 0.025, 0.05, 0.075, 0.1, 0.125 \text{ eV}$ . При средней кинетической энергии на атом  $K > 0.125 \text{ eV}$  начинается образование френкелевских пар, поэтому данные температуры не рассматривались.

## 3. Результаты моделирования

На рис. 2 приведен пример ДБ для  $m_A/m_B = 9.79$  [13]. На части *a* показана стробоскопическая картина дви-



**Рис. 3.** Пример зависимости относительной кинетической энергии  $K_n/K$  одного из легких атомов, усредненной по периоду колебания ДБ, от безразмерного времени  $t/\Theta$  ( $\Theta = 0.06$  ps — период колебания ДБ). Отношение масс компонентов  $m_A/m_B = 9.79$ , средняя кинетическая энергия одного атома в расчетной ячейке  $K = 0.1$  eV.  $t^*/\Theta$  — безразмерное время жизни высокоэнергетического состояния,  $K^*/K$  — средняя за время жизни относительная кинетическая энергия высокоэнергетического атома. Состояние атома является высокоэнергетическим, если  $K_n/K > 2.66$ .

жения атомов, причем светлыми (темными) точками показаны легкие (тяжелые) атомы. Отклонения атомов от решеточных положений умножены на коэффициент 4. Видно, что ДБ представляет собой локализованную колебательную моду с одним легким атомом, имеющим весьма большую амплитуду колебаний. Частота ДБ как функция его амплитуды приведена на рис. 2, *b* [13]. Сопоставляя данные, представленные на рис. 1, *b* и 2, *b*, легко заметить, что частота ДБ лежит в щели спектра близко к ее верхней границе. С уменьшением амплитуды ДБ его частота растет и входит в спектр, что показывает невозможность существования ДБ с амплитудой меньше некоторого значения. Рост частоты моды с уменьшением ее амплитуды свидетельствует о мягком типе нелинейности системы. По этой причине в кристаллах с потенциалом Морзе вряд ли возможны ДБ с частотами, лежащими выше фононного спектра.

На рис. 3 для одного из легких атомов дан пример зависимости его относительной кинетической энергии, усредненной по периоду колебания ДБ  $K_n/K$ , от безразмерного времени  $t/\Theta$ . В данном случае  $m_A/m_B = 9.79$  и  $K = 0.1$  eV. На временном отрезке  $117 \leq t/\Theta \leq 150$  атом находился в высокоэнергетическом состоянии, т.е. его относительная кинетическая энергия превышала установленное значение  $K_n/K > 2.66$ . Обозначим относительное время жизни атома в высокоэнергетическом состоянии, измеренное в периодах колебаний ДБ, через  $t^*/\Theta$ , а через  $K^*/K$  — среднюю относительную кинетическую энергию этого атома за время  $t^*/\Theta$ .

На рис. 4 приводятся численные результаты для высокоэнергетических состояний тяжелых и легких атомов в условиях теплового равновесия при  $m_A/m_B = 2.18$ . На частях *a–e* представлены зависимости  $K^*/K$  от  $t^*/\Theta$  для тяжелых атомов при пяти значениях  $K = 0.025, 0.05, 0.075, 0.1, 0.125$  eV соответственно. На частях *a'–e'* показано то же самое, но для легких атомов. На частях *a''–e''* дана  $C^*$  как функция  $t^*/\Theta$  ( $C^*$  — концентрация высокоэнергетических атомов в расчетном блоке, которая получена следующим образом:  $C^* = N/(N_X/N_{ex})$ , где  $N$  — число случаев появления высокоэнергетических атомов в расчетном блоке за время наблюдения,  $N_X = 32 \times 32 \times 3 = 3072$  ( $N_X = 32 \times 32 = 1024$ ) — число тяжелых (легких) атомов, а  $N_{ex}$  — число наблюдений системы). Система наблюдалась один раз в 0.06 ps, т.е.  $N_{ex} = 1111$  раз за время эксперимента. Отметим, что ось ординат дана в логарифмическом масштабе.

Те же зависимости приведены для случая  $m_A/m_B = 9.79$  на рис. 5.

Наиболее значимым отличием в представленных результатах является рост времени жизни высокоэнергетических состояний легких атомов с ростом температуры, хорошо заметный на рис. 5, в то время как на рис. 4 увеличение температуры приводит к весьма незначительному изменению характеристик высокоэнергетических состояний легких атомов.

Единственным объяснением этого различия является существование двух типов колебательных мод, фононов и ДБ в случае  $m_A/m_B = 9.79$ , в то время как при  $m_A/m_B = 2.18$  возможны лишь фононные колебания решетки. В пользу этого утверждения свидетельствуют следующие факты.

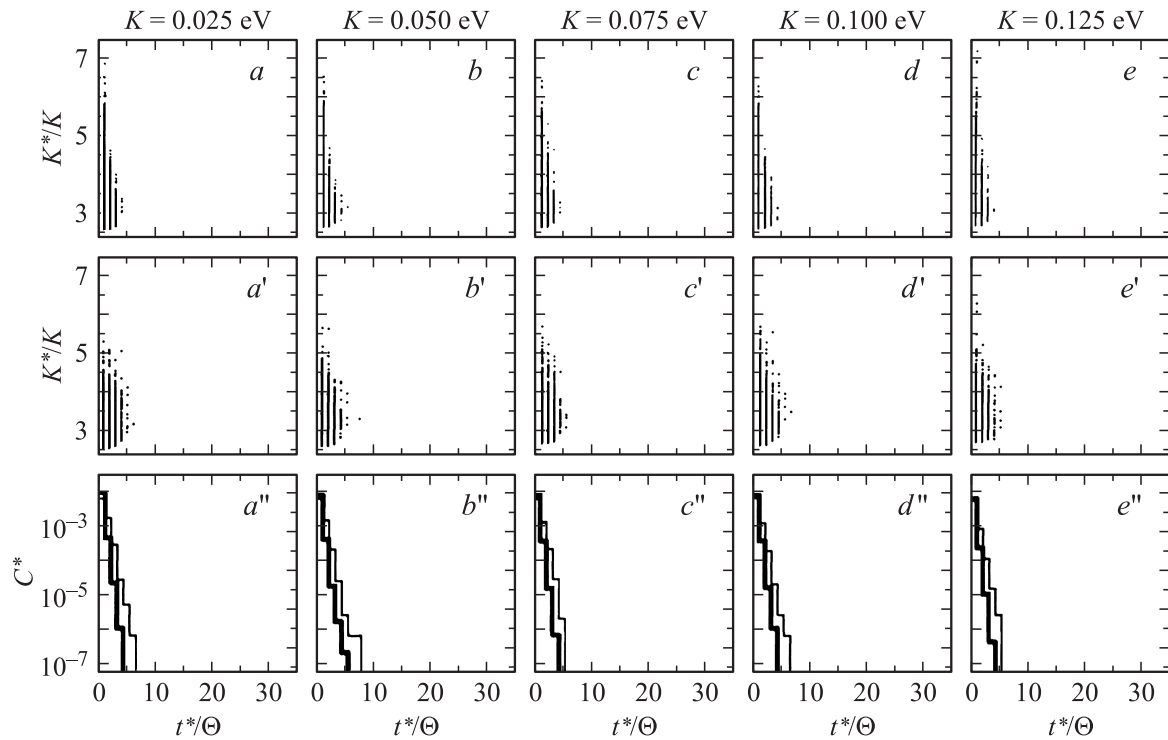
1) Аномалия роста времени жизни высокоэнергетических состояний легких атомов возникает именно для отношения масс компонентов  $m_A/m_B = 9.79$ , когда фононный спектр имеет широкую запрещенную зону и кристалл поддерживает щелевые ДБ.

2) С уменьшением температуры различие во времени жизни высокоэнергетических легких атомов уменьшается, как видно из сравнения рис. 4 и 5. Это согласуется с уменьшением вклада ДБ в колебательный спектр кристалла при понижении температуры, поскольку они являются существенно нелинейными колебательными модами и, как отмечалось выше, не могут иметь амплитуду колебаний меньше некоторого критического значения.

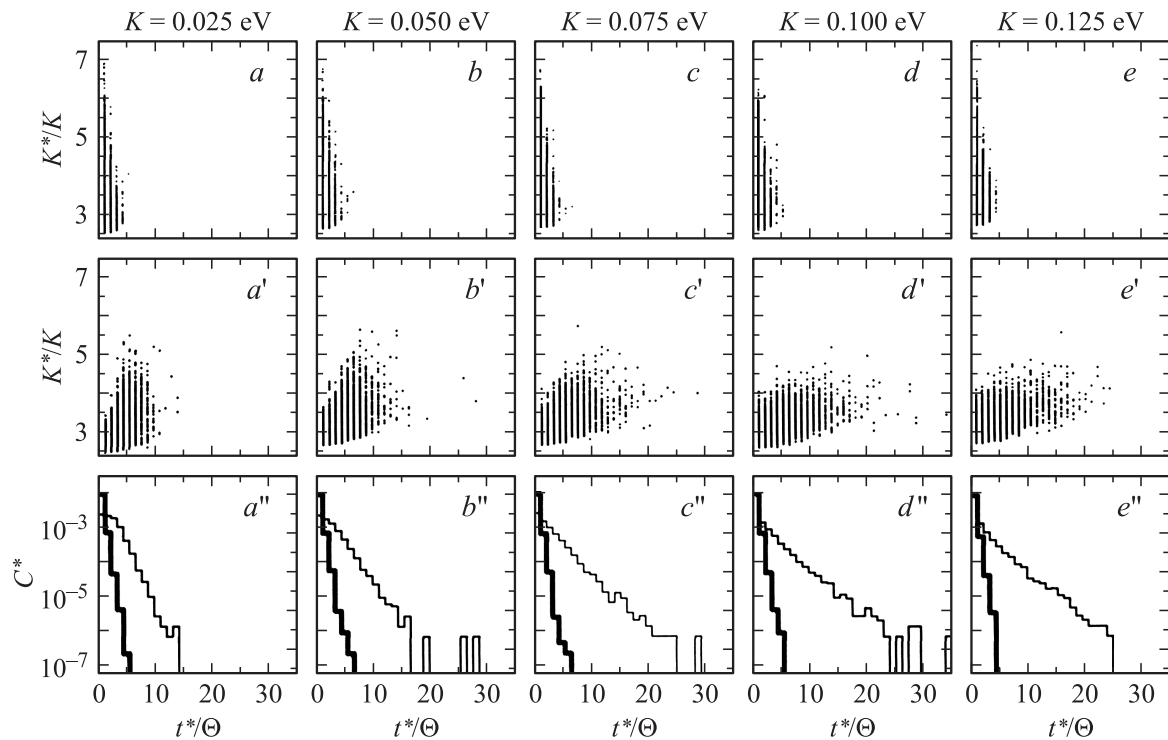
3) Именно легкие атомы показывают аномалию роста времени жизни высокоэнергетических состояний. Это согласуется с тем, что только легкие атомы имеют большую амплитуду колебаний в ДБ (рис. 2, *a*).

Определим зависимость концентрации высокоэнергетических атомов  $C^*$  от  $K$ .

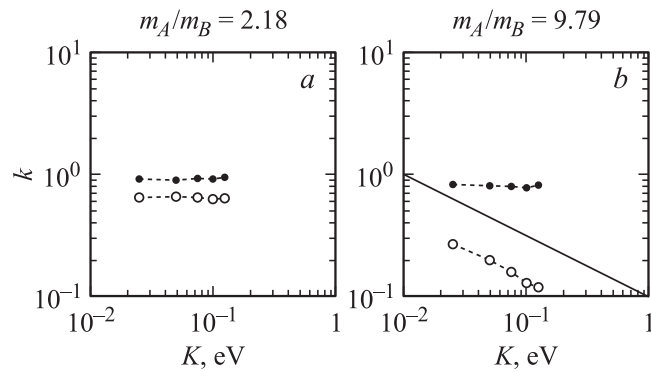
Обратимся к частям *a''–e''* на рис. 4 и 5. Учитывая, что с использованием логарифмической шкалы для оси ординат численные данные хорошо аппроксимируются



**Рис. 4.** Характеристики высокоэнергетических состояний атомов в кристалле с отношением масс компонентов  $m_A/m_B = 2.18$ .  $a-e$  — зависимости  $K^*/K$  от  $t^*/\Theta$  для тяжелых атомов (см. обозначения, введенные на рис. 3) для различных значений  $K$ ;  $a'-e'$  — те же результаты для легких атомов;  $a''-e''$  — зависимость  $C^*$  от  $t^*/\Theta$  ( $C^*$  — концентрация высокоэнергетических атомов в расчетном блоке с данным временем жизни). Результаты для легких (тяжелых) атомов представлены тонкой (жирной) линией.



**Рис. 5.** То же, что на рис. 4, для отношения атомных масс компонентов  $m_A/m_B = 9.79$ .



**Рис. 6.** Зависимость коэффициента  $k$  от осредненной по ансамблю кинетической энергии одного атома  $K$  в логарифмических координатах для (а)  $m_A/m_B = 2.18$  и для (б)  $m_A/m_B = 9.79$ . Светлыми (темными) точками показаны результаты для атомов легкой (тяжелой) компоненты. Черной сплошной линией на (б) показан наклон, равный  $-1/2$ , который хорошо аппроксимирует численные результаты для легких атомов.

линейной зависимостью, имеем  $C^* = D \exp[-k(t^*/\Theta)]$ , где  $D$  и  $k$  — некоторые положительные параметры. На рис. 6 представлена зависимость коэффициента  $k$  от усредненной по ансамблю кинетической энергии одного атома  $K$  в логарифмических координатах для  $m_A/m_B = 2.18$  и  $9.78$ . Светлыми (темными) точками даны результаты для легких (тяжелых) атомов. Сплошной линией на частях б показан наклон, равный  $-1/2$ , который хорошо аппроксимирует результаты для легких атомов в этом случае. В остальных случаях  $k$  не зависит от  $K$ .

Можно сделать вывод, что при наличии ДБ концентрация  $C^*$  и время жизни  $t^*/\Theta$  долгоживущих высокоэнергетических состояний легких атомов связаны соотношением  $C^* = D \exp[-t^*/(\Theta\sqrt{K})]$ . Видно, что с ростом  $K$  экспонента поднимается вверх, т.к. растут концентрация  $C^*$  и время жизни  $t^*/\Theta$  легких атомов в высокоэнергетическом состоянии. В отсутствие ДБ  $C^*$  для легких атомов мало и не зависит от температуры. Для тяжелых атомов  $C^*$  не зависит от температуры даже в случае, когда ДБ существуют, что объясняется тем, что в ДБ только легкие атомы имеют большую амплитуду колебаний.

#### 4. Заключение

Методом молекулярной динамики исследованы частоты и времена жизни высокоэнергетических состояний легких и тяжелых атомов в двумерном двухкомпонентном кристалле в состоянии теплового равновесия.

Проведено сравнение результатов для двух отношений атомных масс компонентов  $m_A/m_B$ . Для  $m_A/m_B = 9.79$ , когда кристалл поддерживает существование щелевых ДБ, концентрация  $C^*$  и время жизни

ни  $t^*/\Theta$  долгоживущих высокоэнергетических состояний легких атомов изменяются с ростом  $K$  по закону  $C^* = D \exp[-t^*/(\Theta\sqrt{K})]$ , где  $K$  — усредненная по ансамблю кинетическая энергия одного атома. Для тяжелых атомов рост концентрации и времени жизни высокоэнергетических состояний не наблюдается. Для  $m_A/m_B = 2.18$ , когда ДБ в кристалле существовать не могут, концентрация и время жизни высокоэнергетических состояний атомов малы и не зависят от температуры.

По результатам, представленным в настоящей работе, можно сформулировать следующие основные выводы. В кристалле, в котором существование ДБ невозможно, доля атомов, имеющих большую относительную энергию, не изменяется с температурой вплоть до достаточно высоких температур, при которых начинается образование пар Френкеля. С другой стороны, в двухкомпонентном кристалле, поддерживающем щелевые ДБ, концентрация и время жизни относительно высокоэнергетических состояний легких атомов растут с температурой и оказываются значительно выше, чем в случае, когда ДБ отсутствуют. В рассмотренном нами кристалле с отношением масс компонентов  $m_A/m_B = 9.79$  при температурах, приближающихся к температуре образования френкелевских пар, за время наблюдения 100 ps в расчетном блоке, содержащем  $32 \times 32 \times 4$  атомов, наблюдались единичные случаи появления ДБ со временем жизни, превышающим 30 периодов колебаний ДБ, и средней за время жизни энергией, превосходящей среднюю по ансамблю кинетическую энергию атома примерно в 5 раз.

#### Список литературы

- [1] M.E. Manley, A.J. Sievers, J.W. Lynn, S.A. Kiselev, N.I. Agladze, Y. Chen, A. Llobet, A. Alatas. Phys. Rev. B **79**, 134 304 (2009).
- [2] Yu.S. Kivshar, G.P. Agrawal. Optical solitons. Academic Press, Amsterdam (2003). 540 p.
- [3] A.E. Miroshnichenko, S. Flach, M.V. Fistul, Y. Zolotaryuk, J.B. Page. Phys. Rev. E **64**, 066 601 (2001).
- [4] T. Dauxois, M. Peyrard, A.R. Bishop. Phys. Rev. E **47**, 684 (1993).
- [5] F.Kh. Abdullaev, B.B. Baizakov, S.A. Darmanyan, V.V. Konotop, M. Salerno. Phys. Rev. A **64**, 043 606 (2001).
- [6] M.E. Manley. Acta Mater. **58**, 2926 (2010).
- [7] S. Flach, C.R. Willis. Phys. Rep. **295**, 181 (1998).
- [8] S. Flach, A.V. Gorbach. Phys. Rep. **467**, 1 (2008).
- [9] M. Eleftheriou, S. Flach. Physica D **202**, 142 (2005).
- [10] S.A. Kiselev, A.J. Sievers. Phys. Rev. B **55**, 5755 (1997).
- [11] L.Z. Khadeeva, S.V. Dmitriev. Phys. Rev. B **81**, 214 306 (2010).
- [12] S.V. Dmitriev, A.A. Sukhorukov, A.I. Pshenichnyuk, L.Z. Khadeeva, A.M. Iskandarov, Yu.S. Kivshar. Phys. Rev. B **80**, 094 302 (2009).

- [13] С.В. Дмитриев, Л.З. Хадеева, А.И. Пшеничнюк, Н.Н. Медведев. ФТТ **52**, 1398 (2010).
- [14] С.В. Дмитриев, А.А. Назаров, А.И. Потекаев, А.И. Пшеничнюк, Л.З. Хадеева. Изв. вузов. Физика **52**, 2, 21 (2009).
- [15] С.В. Дмитриев, Н.Н. Медведев, Р.Р. Мулюков, О.В. Пожидаева, А.И. Потекаев, М.Д. Старостенков. Изв. вузов. Физика **51**, 8, 73 (2008).
- [16] Л.З. Хадеева, С.В. Дмитриев, А.А. Назаров, А.И. Пшеничнюк. Перспективные материалы **7**, 327 (2009).
- [17] A.V. Gorbach, M. Johansson. Phys. Rev. E **67**, 066 608 (2003).
- [18] G. James, M. Kastner. Nonlinearity **20**, 631 (2007).
- [19] А.В. Горбач, А.С. Ковалев, О.В. Усатенко. ФТТ **43**, 2081 (2001).
- [20] I.A. Butt, J.A.D. Wattis. J. Phys. A: Math. Theor. **40**, 1239 (2007).
- [21] Y. Doi, A. Nakatani, K. Yoshimura. Phys. Rev. E **79**, 026 603 (2009).
- [22] А.И. Царегородцев, Н.В. Горлов, Б.Ф. Демьянов, М.Д. Старостенков. ФММ **58**, 2, 336 (1984).