

01:05

Возбуждение двух типов дискретных бризеров в компьютерной 3D-модели Pt₃Al

© Н.Н. Медведев¹, М.Д. Старостенков¹, П.В. Захаров²,
С.В. Дмитриев^{3,4}

¹ Алтайский государственный технический университет, Барнаул

² Алтайская государственная академия образования, Бийск

³ Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа

⁴ Национальный исследовательский Томский государственный университет

E-mail: nnm42@rambler.ru

Поступило в Редакцию 27 февраля 2015 г.

Впервые методом молекулярной динамики показана возможность возбуждения в трехмерной модели кристалла дискретных бризеров (ДБ) как с мягким, так и с жестким типом нелинейности, используя упорядоченный сплав Pt₃Al в качестве примера. Частоты колебаний ДБ первого типа лежат в щели фононного спектра кристалла и убывают с ростом амплитуды, а второго типа — выше фононного спектра и возрастают с ростом амплитуды, т.е. демонстрируют жесткий тип нелинейности. Приведен пример трансформации ДБ с жестким типом нелинейности в щелевой ДБ с мягким типом нелинейности. Рассмотрено влияние различных факторов на продолжительность жизни взаимодействующих ДБ.

Дискретные бризеры (ДБ) — это пространственно локализованные, строго периодические колебательные моды большой амплитуды в нелинейных периодических структурах [1]. Возможность существования таких колебательных мод была доказана математически для целого ряда нелинейных дискретных систем [1,2]. ДБ не излучают энергию в виде малоамплитудных волновых пакетов потому, что их частота лежит вне спектра малоамплитудных колебаний дискретной системы. Однако строгая периодичность колебания ДБ и бесконечное время его жизни чаще всего являются следствием рассмотрения идеализированных моделей с упрощенными межчастичными взаимодействиями. В реалистичных моделях кристаллов ДБ, как правило, не удовлетворяют условию

строгой периодичности во времени и имеют конечное время жизни. Для подобных колебательных мод корректнее употреблять термин „квазibriзер“ [3], однако для краткости далее будет использоваться традиционный термин.

В настоящее время изучение условий возбуждения и свойств ДБ осуществляется главным образом с помощью различных методов компьютерного моделирования. Есть и экспериментальные работы, подтверждающие существование ДБ [4,5], однако экспериментальное изучение ДБ сопряжено с серьезными методическими трудностями [6].

Исследования ДБ в последнее время вышли на качественно новый уровень, что связано с попытками использования данной концепции для объяснения некоторых физических явлений [7–11]. Результаты, полученные в [12–16], свидетельствуют о том, что ДБ могут быть возбуждены практически во всех моноатомных кристаллах.

Дискретные бризеры можно разделить по типу нелинейности на две группы. Если частота ДБ растет (уменьшается) с ростом амплитуды, то имеет место жесткий (мягкий) тип нелинейности. Существование ДБ с мягким типом нелинейности возможно лишь в кристаллах, имеющих запрещенную зону (щель) в фононном спектре, что может быть реализовано только в кристаллах с достаточно сложной структурой, имеющих более одного атома в примитивной трансляционной ячейке. ДБ с жестким типом нелинейности были возбуждены в металлах с ГЦК (Ni) и ОЦК (Nb) решетками, имеющими один атом в примитивной ячейке [14], а также в ГПУ Mg [12] и Co [15], имеющих два атома в примитивной ячейке. Отметим, что в чистых ГПУ металлах щель в фононном спектре отсутствует. Щелевые ДБ с мягким типом нелинейности существуют в некоторых биатомных кристаллах, например: в щелочно-галогенидных со структурой NaCl [17,18], в упорядоченном сплаве Pt₃Al [19], в графене [9,10] или в деформированном графене [20].

В данной работе рассматривается возможность возбуждения в 3D-модельном кристалле Pt₃Al не только щелевых ДБ с мягким типом нелинейности, но и ДБ с жестким типом нелинейности с частотами выше фононного спектра. Изучены некоторые свойства ДБ и их взаимодействие друг с другом.

Трехмерный кристалл Pt₃Al, представляющий собой сверхструктуру L1₂ на основе ГЦК-решетки, моделировался методом молекулярной динамики. Взаимодействие между атомами задавалось посредством парного потенциала Морзе

$$\varphi_{PQ}(r_{ij}) = D_{PQ}\beta_{PQ} \exp(\alpha_{PQ}r_{ij})(\beta_{PQ} \exp(-\alpha_{PQ}r_{ij}) - 2). \quad (1)$$

Его параметры $\alpha_{PtPt} = 1.638 \text{ \AA}^{-1}$, $\beta_{PtPt} = 118.83$, $D_{PtPt} = 0.685 \text{ eV}$, $\alpha_{AlAl} = 1.287 \text{ \AA}^{-1}$, $\beta_{AlAl} = 57.932$, $D_{AlAl} = 0.247 \text{ eV}$, $\alpha_{PtAl} = 1.138 \text{ \AA}^{-1}$, $\beta_{PtAl} = 39.085$, $D_{PtAl} = 0.481 \text{ eV}$ вычислялись по стандартной методике [19,20] (с учетом 10 координационных сфер) из условий

$$\frac{1}{2} \sum_{i=1}^z \eta_i U_{V=V_0} = E_s, \quad \frac{1}{2} \sum_{i=1}^z \eta_i \left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_{V=V_0} = 0, \quad -V_0 \left(\frac{\partial P_s}{\partial V} \right) = K_0. \quad (2)$$

Здесь E_s — энергия сублимации атомов кристалла при нуле Кельвин, K_0 — объемный модуль упругости, V_0 — равновесный объем расчетной ячейки. Платина и алюминий имеют: массы атомов $m_{Pt} = 195.23$, $m_{Al} = 26.97 \text{ amu}$; энергии сублимации $E_s = 5.492$, $E_s = 2.3842 \text{ eV/atom}$; объемные модули упругости $K_0 = 1.734$, $K_0 = 0.4656 \text{ eV/\AA}^3$ соответственно. Постоянная кристаллической решетки сплава $a_0 = 4 \text{ \AA}$. Расчетная ячейка содержала $22 \times 12 \times 15$ ГЦК ячеек, в каждой из которых находилось три атома Pt и один атом Al. С помощью периодических граничных условий обеспечивалась „бесконечность“ модельного кристалла. Тепловые колебания не вводились при задании начальных условий. В силу значительной разницы масс компонентов рассматриваемого кристалла в спектре его фонных колебаний имеется достаточно широкая щель.

В описанной выше модели кристалла удалось возбудить четыре вида ДБ. Первый из них — это хорошо известный щелевой ДБ с мягким типом нелинейности [19]. Данный ДБ сильно локализован, так что колебания с большой амплитудой совершает лишь один атом Al. В данной работе такой ДБ запускался простым отклонением одного атома Al из положения равновесия в направлении $\langle 111 \rangle$, при этом начальные смещения и начальные скорости всех остальных атомов были нулевыми. Три других ДБ, схематически представленные на рис. 1, имели жесткий тип нелинейности. Во всех трех случаях с большой амплитудой колеблются атомы Al в одном плотноупакованном ряду в направлении $\langle 110 \rangle$.

На рис. 1, *a* ДБ локализован примерно на шести атомах Al, совершающих колебания в противофазе. Для задания начальных условий при запуске ДБ, изображенных на *a* и *b*, использовался подход, описанный в работе [16]. На *b* имеем то же самое, но атомы Al колеблются в фазе. На *c* имеем „бесконечный“ ДБ со всеми атомами Al, движущимися в одном плотноупакованном ряду в фазе и с одинаковыми амплитудами. Данный

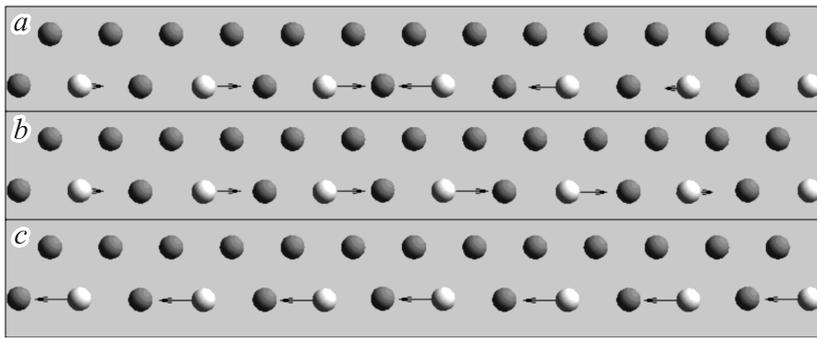


Рис. 1. Варианты начальных смещений атомов, использованных при возбуждении ДБ с жестким типом нелинейности. Темные атомы — Pt, светлые — Al. *a* — локализованный ДБ с атомами Al, колеблющимися в одном плотноупакованном ряду в противофазе, *b* — то же, что и на *a*, но атомы Al движутся в фазе. *c* — бесконечный ДБ со всеми атомами Al, движущимися в одном плотноупакованном ряду в фазе и с одинаковыми амплитудами.

ДБ запускался смещением всех атомов Al в одном плотноупакованном ряду на одну и ту же величину в направлении „110“. Начальные смещения и начальные скорости всех прочих атомов равнялись нулю. Максимальное смещение атомов при запуске ДБ варьировалось в пределах от 0.8 до 1.1 Å.

На рис. 2, *a* показаны зависимости частот колебаний атомов, несущих нелинейную локализованную моду, от величины максимального начального смещения. Кривая 1 получена для „бесконечного“ ДБ, схематически представленного на рис. 1, *c*. Кривая 2 отвечает локализованным ДБ с жестким типом нелинейности, показанным на рис. 1, *a* и *b*, которые имеют весьма близкие частоты колебаний. Кривая 3 относится к щелевому ДБ с мягким типом нелинейности. У „бесконечного“ ДБ зависимость частоты колебаний от амплитуды (кривая 1) возрастает быстрее, чем у локализованных ДБ с жестким типом нелинейности (кривая 2).

Очевидно, что у ДБ с жестким типом нелинейности энергия выше, чем у щелевого бризера при одинаковых амплитудах колебания. Благодаря этому обстоятельству ДБ с жестким типом нелинейности неустойчивы. Например, „бесконечный“ ДБ, в силу модуляционной

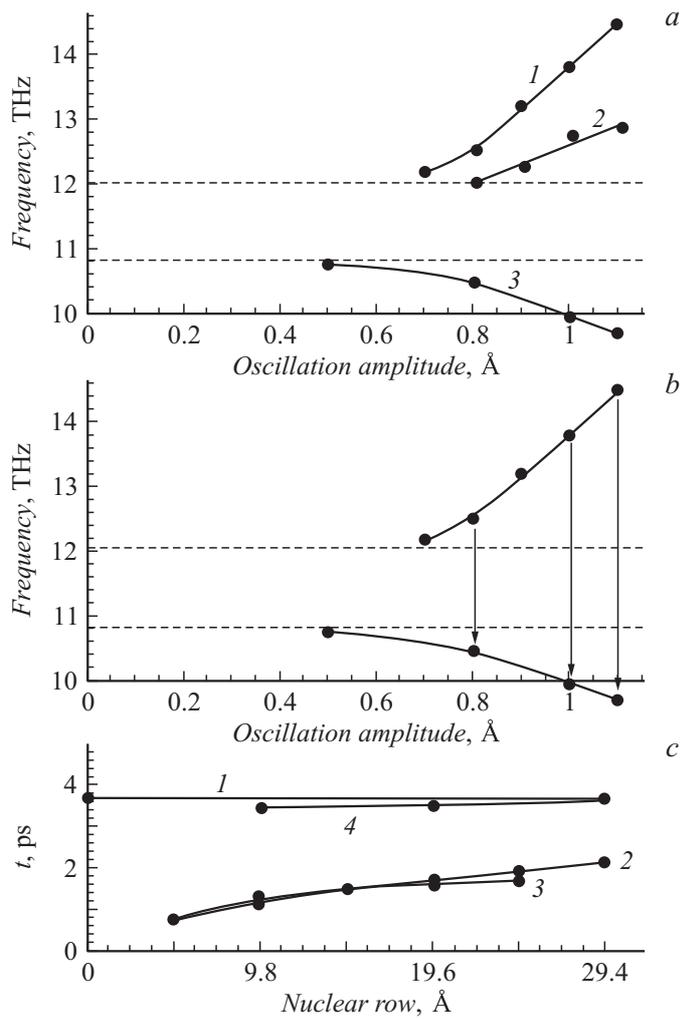


Рис. 2. *a* — зависимость частот колебаний атомов от их амплитуды колебаний. *b* — переходы атомов Al, несущих нелинейные локализованные моды с одного типа нелинейности на другой. *c* — продолжительность жизни квазибризеров с жестким типом нелинейности в зависимости от расстояния до источников возмущений.

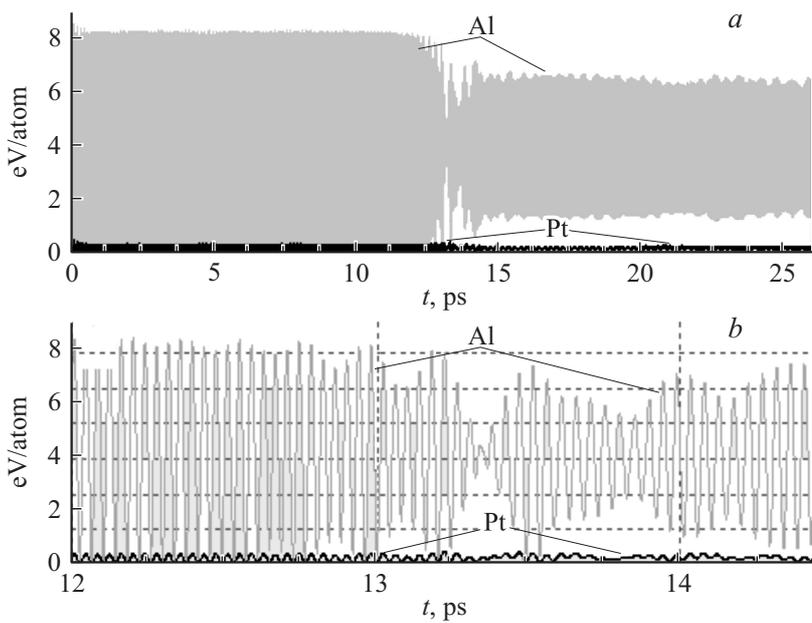


Рис. 3. *a* — спонтанный переход атомов Al из одного состояния в другое; из состояния, при котором все атомы Al одного плотноупакованного ряда, несущие локализованную моду с жесткой нелинейностью, превращаются в щелевые. *b* — то же, что и на *a*, иллюстрация изменения частоты колебаний атомов Al. Начальное отклонение атомов 0.8 Å.

неустойчивости, по истечении некоторого времени, достаточного для развития данной неустойчивости, трансформируется в группу щелевых ДБ. Такие переходы представлены стрелками на рис. 2, *b*. На рис. 3 показано, как меняются перемещения атомов как функции времени при переходе „бесконечного“ ДБ с жестким типом нелинейности в щелевые ДБ. При этом меняется поляризация колебаний атомов алюминия с $\langle 110 \rangle$ на $\langle 100 \rangle$. На рис. 3, *b* показано то же, что и на *a*, но для отрезка времени вблизи перехода, чтобы отчетливо показать скачок частоты колебаний атомов алюминия.

Рассмотрим вопрос о взаимодействии ДБ различного типа. Воздействие друг на друга двух ДБ, естественно, зависит от расстояния между ними. Изучалась зависимость времени жизни ДБ с жестким

типом нелинейности при возбуждении по соседству другого ДБ, такого же типа или щелевого (начальное отклонение атома, несущего ДБ с мягким типом нелинейности, бралось равным 0.69 \AA). На рис. 2, с показана зависимость времени жизни квазибризера с жестким типом нелинейности от расстояния до возбуждаемого рядом щелевого или ДБ с жестким типом нелинейности. Естественно, что при их значительном удалении друг от друга продолжительность их жизни стремится к предельной. Отметим, что продолжительность жизни ДБ увеличивается до предельного значения, если его разместить строго в середине между двумя другими бризерами и осуществить их одновременное возбуждение (кривая 4 на рис. 2, с). Это объясняется тем, что одной из основных причин затухания взаимодействующих бризеров является воздействие волны, возникающей в начальный момент времени, пришедшей от соседа. Если волны приходят в противофазе, то они не оказывают влияния на колебания атомов, несущих нелинейные локализованные моды.

Методом молекулярной динамики с использованием потенциала Морзе в модельном 3D-кристалле Pt_3Al получены квазибризеры как с мягким, так и с жестким типом нелинейности. Показана модуляционная неустойчивость „бесконечного“ ДБ с жестким типом нелинейности и его трансформация в цепочку щелевых ДБ. Изучено взаимодействие ДБ различного типа и оценено время их жизни в присутствии соседних ДБ. Полученные результаты свидетельствуют о многообразии возможных нелинейных колебательных мод в кристаллах и ставят перед исследователями задачу их поиска и описания их свойств.

В статье использованы результаты, полученные в ходе выполнения проекта, в рамках программы „Научный фонд им. Д.И. Менделеева Томского государственного университета“ в 2015 г.

Список литературы

- [1] *Sievers A.J., Takeno S.* // Phys. Rev. Lett. 1988. V. 61. N 8. P. 970.
- [2] *Flach S., Gorbach A.V.* // Phys. Rep. 2008. V. 467. P. 1.
- [3] *Chechin G.M., Dzhelauhova G.S.* et al. // Phys. Rev. E. 2006. V. 74. P. 036 608.
- [4] *Manley M.E.* // Acta Mater. 2010. V. 58. P. 2926.
- [5] *Kempa M., Ondrejko P.* et al. // J. Phys.: Condens. Matter. 2013. V. 25. P. 055 403.
- [6] *Sievers A.J., Sato M., Page J.B., Rössler T.* // Phys. Rev. B. 2013. V. 88. P. 104 305.

- [7] *Dubinko V.I., Selyshev P.A., Archilla J.F.R.* // Phys. Rev. E. 2011. V. 83. P. 041 124.
- [8] *Velarde M.G., Chetverikov A.P.* et al. // Europhys. Lett. 2014. V. 106. P. 27 004.
- [9] *Chechin G.M., Dmitriev S.V.* et al. // Phys. Rev. B. 2014. V. 90. P. 045432.
- [10] *Liu B., Baimova J.A.* et al. // J. Phys. D: Appl. Phys. 2013. V. 46. P. 305 302.
- [11] *Sales M.O., Moura F.A.B.F.* // J. Phys.: Condes. Matter. 2014. V. 26. P. 415 401.
- [12] *Кистанов А.А., Семенов А.С.* и др. // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2014. Т. 11 (4/2). С. 572.
- [13] *Volgrakis N.K., Hadjisavvas G.* et al. // Phys. Rev. B. 2004. V. 69. P. 113 201.
- [14] *Haas M., Hizhnyakov V., Shelkan A.* et al. // Phys. Rev. B. 2011. V. 84. P. 144 303.
- [15] *Кистанов А.А., Семенов А.С.* и др. // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2014. Т. 11 (3). С. 322.
- [16] *Кистанов А.А., Дмитриев С.В.* и др. // Письма в ЖЭТФ. 2014. Т. 99 (6). С. 403.
- [17] *Khadeeva L.Z., Dmitriev S.V.* // Phys. Rev. B. 2010. V. 81. P. 214306.
- [18] *Кистанов А.А., Дмитриев С.В.* // Письма о материалах. 2012. Т. 2 (3). С. 143.
- [19] *Медведев Н.Н., Старостенков М.Д.* и др. // Изв. вузов. Физика. 2014. Т. 57 (3). С. 92.
- [20] *Хадеева Л.З., Дмитриев С.В.* и др. // Письма в ЖЭТФ. 2011. Т. 94. С. 580.