

На правах рукописи



Бачурина Ольга Владимировна

**НЕЛИНЕЙНЫЕ ПРОСТРАНСТВЕННО ЛОКАЛИЗОВАННЫЕ
КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ МОДЫ В МЕТАЛЛАХ**

Специальность: 01.04.07 – физика конденсированного состояния

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Уфа – 2019

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Уфимский государственный нефтяной технический университет» (ФГБОУ ВО «УГНТУ»)

Научный руководитель: **Дмитриев Сергей Владимирович**,
доктор физико-математических наук, профессор, ФГБУН Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, заведующий лабораторией «Нелинейная физика и механика материалов»

Официальные оппоненты: **Екомасов Евгений Григорьевич**,
доктор физико-математических наук, профессор кафедры теоретической физики, ФГБОУ ВО «Башкирский государственный университет»

Четвериков Александр Петрович,
доктор физико-математических наук, профессор кафедры радиофизики и нелинейной динамики, ФГБОУ ВО «Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г.Чернышевского»

Ведущая организация: ФГБОУ ВО «Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова»

Защита состоится « 5 » марта 2020 г. в 16.00 часов на заседании диссертационного совета Д 002.080.03 при Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте проблем сверхпластичности металлов Российской академии наук, расположенном по адресу: 450001, Уфа, ул. Ст. Халтурина, 39.

Отзывы на автореферат в 2-х экземплярах, заверенные печатью, просим высылать по адресу: 450001, Республика Башкортостан, г. Уфа, ул. Ст. Халтурина, 39, ученому секретарю диссертационного совета. Факс: +7 (347) 282-37-59. С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на официальном сайте ИПСМ РАН по адресу: <http://www.imsp.ru/>

Автореферат разослан « ____ » _____ 2020 г.

Ученый секретарь диссертационного совета
Доктор физико-математических наук



Имаев Марсель Фанирович

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы исследования. Изучение динамики кристаллической решетки представляет собой одну из важнейших задач физики конденсированного состояния. Малоамплитудные колебания атомов могут быть описаны в рамках линейной теории, однако при интенсивных термомеханических или иных воздействиях на кристаллы, атомы значительно отклоняются от своих равновесных положений, вследствие чего возникает необходимость учета нелинейности межатомных взаимодействий. Нелинейность межатомных связей приводит к обмену энергией между нормальными колебательными модами, к зависимости макроскопических свойств кристаллов от температуры, к возникновению и эволюции дефектов кристаллической структуры. В последние два десятилетия активно изучаются механизмы пространственной локализации колебательной энергии в виде дискретных бризеров. Отметим, что дискретный бризер (ДБ) – это пространственно локализованная колебательная мода большой амплитуды в бездефектном кристалле [1, 2]. Принципиальное отличие ДБ от колебательных мод локализованных на дефектах кристаллической структуры состоит в том, что первые существуют только при наличии нелинейности межатомных взаимодействий, а вторые могут существовать и в кристаллах с гармоническими связями. ДБ могут иметь сравнительно большие времена жизни (сотни и тысячи периодов атомных колебаний, то есть десятки пикосекунд). Это связано с тем, что ДБ совершают колебания на частотах вне спектра малоамплитудных колебаний кристалла и, не резонируя с бегущими малоамплитудными волнами (фононами), они не расходуют свою энергию на их возбуждение. Выход частоты колебания ДБ из спектра обусловлен нелинейной зависимостью частоты колебательной моды от ее амплитуды. Межатомные взаимодействия могут проявлять как мягкий, так и жесткий тип нелинейности, приводя соответственно либо к уменьшению, либо к росту частоты моды с увеличением амплитуды. В кристаллах, не имеющих запрещенной зоны (щели) в фононном спектре, могут существовать лишь ДБ с жестким типом нелинейности, поскольку их частота должна возрастать с амплитудой для того, чтобы оказаться выше верхней границы фононного спектра. В кристаллах со щелью в спектре, кроме того, могут существовать так называемые щелевые ДБ, имеющие частоты в щели спектра. Такие ДБ могут иметь как жесткий, так и мягкий тип нелинейности [3, 4].

После публикации работы [5] в 1993 г. долгое время считалось, что кристаллы не могут поддерживать ДБ с частотами выше фононного спектра, поскольку межатомные потенциалы проявляют мягкий тип нелинейности. На основе проведенных расчетов, авторы этой работы сделали вывод, что ДБ могут существовать лишь в кристаллах со щелью в фононном спектре, и первые исследования, как теоретические [6], так и экспериментальные [7], были посвящены щелочно-галогидному кристаллу NaI, который отвечает данному требованию. Активно исследовались щелевые ДБ в упорядоченных сплавах с большой разницей масс компонент, которая обеспечивает наличие достаточно широкой щели в фононном спектре [8-11]. Первая работа, где методом молекулярной динамики была показана возможность существования ДБ в чистых металлах с бесщелевым спектром, датируется 2011 годом [12]. Авторы, однако, не подвергли сомнению выводы работы [5] и объяснили полученные результаты эффектом экранирования зарядов в металлах. И лишь в работах [13, 14] было показано, что запрет на существование ДБ в кристаллах справедлив лишь для одномерных кристаллов (именно они рассматривались в [5]), а в двумерных и трехмерных кристаллах ДБ могут существовать даже в отсутствие экранирования электрических зарядов. Причина состоит в том, что межатомные связи проявляют мягкий тип нелинейности на больших расстояниях, где основной вклад дает взаимодействие их электронных оболочек, но на меньших расстояниях существенный вклад дает межъядерное взаимодействие с жестким типом нелинейности. Для того чтобы частота ДБ росла с амплитудой, необходимо обеспечить больший вклад в динамику от жесткого ядра потенциала, что невозможно для одномерной нелинейной цепочки без локального потенциала, но оказывается возможным для кристаллов более высокой размерности.

Возможно ли существование ДБ различного типа в одном и том же кристалле?

Положительный ответ на этот вопрос был дан для графена [15] и для двумерного кристалла Морзе [13, 16]. Интересно, что в этих работах для возбуждения ДБ в молекулярно-динамических расчетах применялся достаточно общий подход, основанный на наложении локализуемых функций на различные делокализованные нелинейные колебательные моды (ДНКМ), полученные в работах Чечина с соавторами на основе теоретико-групповых методов [17, 18]. ДНКМ (иными словами, буши нормальных нелинейных мод [17, 18]) – это делокализованные колебательные моды большой амплитуды, являющиеся точными решениями нелинейных динамических уравнений, обусловленные точечной симметрией кристаллической решетки. В настоящей работе, для решения поставленных задач, также будут широко использоваться ДНКМ.

При изучении нелинейных колебаний в кристаллических решетках большое значение имеет их пространственная размерность. Существуют как одномерные кристаллы (полимерные цепочки, карбин и др.), так и двумерные (графен, силицен, фосфорен, нитрид бора, дисульфид молибдена и др.), однако подавляющее большинство кристаллов, используемых на практике, трехмерны. В одномерных кристаллах, экспоненциально локализованные в пространстве ДБ являются нульмерными объектами. В двумерных кристаллах возможны как нульмерные ДБ, то есть пространственно локализованные вдоль обоих координатных направлений, так и одномерные ДБ, локализованные вдоль одного направления и делокализованные вдоль другого. По-видимому, впервые одномерные ДБ в двумерном кристалле графена исследовались в работе [19]. По аналогии, в трехмерных кристаллах можно говорить о нульмерных, одномерных и двумерных ДБ. В последнем случае предполагается возбуждение атомов вдоль некоторой плоскости, причем, с удалением от данной плоскости, амплитуда их колебаний должна экспоненциально уменьшаться. Следует заметить, что о возможности существования и свойствах одномерных и двумерных ДБ в трехмерных кристаллах до настоящего времени ничего не было известно и работы в данном направлении не велись. Описание новых долгоживущих пространственно локализованных нелинейных колебательных мод в трехмерных кристаллах представляет несомненный интерес для широкого круга исследователей и является **актуальной** задачей физики твердого тела.

В настоящей диссертационной работе в качестве *объекта исследования* выбраны чистые металлы с различной кристаллической решеткой, а *предметом исследования* являются ДБ в этих металлах. Следует отметить, что нульмерные ДБ в чистых металлах активно изучаются [20-27] после пионерской работы [12]. Имеются и экспериментальные работы, свидетельствующие о существовании ДБ в кристаллической решетке урана [28, 29]. Представляется интересным и важным описание новых, ранее не исследованных типов ДБ, имеющих различную пространственную размерность.

Целью диссертационной работы является изучение свойств нелинейных локализованных колебательных мод различной пространственной размерности в ГПУ и ГЦК металлах при помощи молекулярно-динамического моделирования.

Поставленная цель была достигнута в результате решения следующих **задач**:

1. Построение молекулярно-динамических моделей для исследования нелинейных колебательных мод в металлах с ГПУ и ГЦК решеткой.
2. Исследование неподвижных и движущихся нульмерных стречневых дискретных бризеров в ГПУ бериллии.
3. Изучение свойств одномерных дискретных бризеров в кристаллах с ГЦК решеткой (алюминий, медь, никель).
4. Изучение свойств двумерных (плоских) дискретных бризеров в кристаллах с ГПУ (титан) и ГЦК решеткой (алюминий, медь, никель).
5. Изучение свойств нульмерных дискообразных дискретных бризеров в кристаллах с ГЦК решеткой (алюминий, медь, никель).

Методы исследования. Поставленные задачи решались методами классической молекулярной динамики с использованием апробированных многочастичных межатомных потенциалов взаимодействия.

Научная новизна.

1. Показано, что в трехмерных кристаллах могут существовать дискретные бризеры различной размерности $k < 3$.
2. Установлено, что один и тот же металл допускает существование дискретных бризеров, различающихся как размерностью, так и структурой атомных колебаний.
3. В чистых металлах (алюминий, медь, никель) впервые возбуждены дискретные бризеры новых типов: нульмерные, одномерные и двумерные.
4. Рассчитаны характеристики этих дискретных бризеров: зависимость частоты от амплитуды, степень пространственной локализации, время жизни, диапазон возможных энергий.
5. Установлено какие из восьми делокализованных нелинейных колебательных мод двумерной треугольной решетки порождают двумерные дискретные бризеры в ГЦК металлах (алюминий, медь, никель) и ГПУ титане.

Научная и практическая значимость работы заключается в том, что в работе впервые показана возможность существования дискретных бризеров различной пространственной размерности с жестким типом нелинейности в трехмерных кристаллах с ГЦК и ГПУ решеткой, что расширяет наши представления о возможных типах пространственно локализованных нелинейных колебательных модах в кристаллах. Следовательно, в диссертации наглядно продемонстрировано нетривиальное значение пространственной размерности кристаллов в вопросах существования и изучения свойств дискретных бризеров. Настоящая работа стимулирует постановку экспериментальных исследований по обнаружению дискретных бризеров с жестким типом нелинейности в кристаллах с простой структурой, не имеющих щели в фононном спектре, в частности, в чистых металлах, а также исследования влияния дискретных бризеров на различные свойства материалов.

Достоверность результатов диссертации гарантируется использованием стандартных, хорошо апробированных алгоритмов метода молекулярной динамики и межатомных потенциалов для решения задач нелинейной динамики кристаллических решеток различного типа и размерности. Полученные результаты всесторонне тестировались на сходимость при изменении размеров расчетной ячейки и уменьшении шага численного интегрирования уравнений движения атомов. Проводилось сопоставление результатов, полученных с использованием схем численного интегрирования различной точности. Контроль точности вычислений осуществлялся, в том числе, по точности сохранения полной энергии системы в задачах для NVE ансамблей. Полученные численные результаты не противоречат базовым физическим законам и ранее опубликованным результатам по изучению нелинейной динамики модельных и реальных кристаллов.

Положения выносимые на защиту:

1. Результаты исследования свойств неподвижных и движущихся нульмерных стречневых дискретных бризеров в ГПУ металле бериллии.
2. Результаты исследования одномерных дискретных бризеров в металлах с ГЦК решеткой (алюминий, медь, никель).
3. Результаты исследования двумерных (плоских) дискретных бризеров в трехмерном ГПУ кристалле титана и в металлах с ГЦК решеткой (алюминий, медь, никель).
4. Результаты исследования двумерных и нульмерных дискообразных дискретных бризеров в металлах с ГЦК решеткой (алюминий, медь, никель).

Апробация работы. Результаты диссертационной работы были доложены на следующих конференциях и семинарах: 14-я международная Школа-симпозиум «Фундаментальные основы атомистического многомасштабного моделирования» (Новый Афон, 2016), LX Международная конференция «Актуальные проблемы прочности» (Витебск, Беларусь, 2018), XII Всероссийская научная конференция молодых ученых «Наноэлектроника, нанофотоника и нелинейная физика» (Саратов, 2018), XV Международная школа-семинар «Эволюция дефектных структур в конденсированных средах» (Барнаул, 2018), открытая школа-конференция стран СНГ «Ультрамелкозернистые и наноструктурные материалы – 2018» (Уфа, 2018), The 12th CHAOS

International Conference on Non Linear Analysis and Modeling: Theory and Applications (Greece, Crete, Chania 2019).

Личный вклад автора заключался в выборе методов решения задач, построении алгоритмов программных комплексов, проведении модельных расчетов, анализе и интерпретации результатов, формулировке выводов. Диссертация является самостоятельной работой, обобщившей результаты, полученные лично автором, либо при его непосредственном участии. Автор самостоятельно осуществлял подготовку и представление докладов по полученным результатам на научных конференциях и семинарах.

Публикации. По теме диссертации опубликовано 9 статей в отечественных и международных изданиях, рекомендованных ВАК РФ, 5 из которых индексируются в Web of Science и Scopus, а также тезисы на перечисленных выше конференциях и семинарах.

Объём и структура работы. Диссертация состоит из введения, 5 глав, изложена на 118 страницах, содержит 35 рисунков, 7 таблиц и библиографию из 144 наименований.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснована актуальность работы, сформулирована цель, поставлены основные задачи исследований и указаны методы их решения. Представлены выносимые на защиту положения и краткое содержание по главам. Даны сведения об апробации работы на научных форумах.

ГЛАВА 1. ОБЗОР ЛИТЕРАТУРЫ

В первом и втором разделе описаны различные типы нелинейных колебаний кристаллической решетки, среди которых выделены делокализованные нелинейные колебательные моды и дискретные бризеры, как объекты данного диссертационного исследования.

В третьем разделе рассмотрена история открытия дискретных бризеров. Представлен обзор экспериментальных и теоретических работ, посвященных изучению дискретных бризеров в различных кристаллических структурах, и более подробно в металлах и упорядоченных сплавах. Представлена существующая классификация дискретных бризеров, учитывающая тип химической связи в кристалле, его пространственную размерность.

В четвертом разделе описаны современные методы компьютерного моделирования нелинейной динамики кристаллической решетки. Рассмотрены потенциалы межатомного взаимодействия.

ГЛАВА 2. НУЛЬМЕРНЫЕ ДИСКРЕТНЫЕ БРИЗЕРЫ В ГПУ БЕРИЛЛИИ

Нульмерные ДБ (локализованные по всем трем пространственным направлениям) достаточно активно изучались в ГЦК и ОЦК металлах [12, 21], а также в упорядоченных сплавах на основе ГЦК решетки [8-11]. Металлам с ГПУ решеткой внимания не уделялось. Данная глава посвящена изучению свойств неподвижных и движущихся ДБ в трехмерной решетке ГПУ металла бериллия. Для описания межатомного взаимодействия был взят многочастичный потенциал, построенный на основе метода погруженного атома [30].

Для моделирования была выбрана расчетная ячейка, содержащая $30 \times 10 \times 10$ элементарных ячеек (12000 атомов), что соответствует размеру $68.58 \times 39.59 \times 38.86 \text{ \AA}$ (см. рис. 1). Тестовые расчеты показали, что использование расчетных ячеек большего размера приводит к тем же результатам, что связано с достаточно высокой степенью пространственной локализации исследуемых нелинейных колебательных мод. Периодические граничные условия были наложены вдоль всех трех координатных направлений. Все расчеты проводились при температуре $T=0 \text{ K}$ с применением термодинамического ансамбля NVE (фиксированное число атомов, постоянные объем и энергия).

Возбуждение ДБ осуществлялось в центре расчетной ячейки вдоль плотноупакованного атомного ряда [31], который в ГПУ решетке лежит в базисной плоскости и имеет кристаллографическое направление $[2\bar{1}\bar{1}0]$. Атомы ряда, в котором возбуждался ДБ, нумеровались для удобства индексом n (см. рис. 1). Отметим, что все атомы, лежащие вне выделенного плотноупакованного ряда, в начальный момент времени имели нулевые смещения и скорости.

Начальные условия для возбуждения ДБ в плотноупакованном атомном ряду были следующими [32]:

$$\begin{aligned} x_n(t) &= (-1)^n \cdot P_n \cdot \cos[\omega t + \varphi_0 + \delta(n - x_0)] + S_n, \\ y_n &= 0, \dot{y}_n = 0, z_n = 0, \dot{z}_n = 0. \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь ω – частота ДБ, лежащая выше верхней границы фононного спектра кристалла; φ_0 – начальная фаза колебаний; δ – параметр, задающий разность фаз колебаний соседних атомов.

Функции P_n и S_n определяются выражениями:

$$P_n = \frac{A}{\cosh[\beta(n - x_0)]}, S_n = \frac{-B(n - x_0)}{\cosh[\gamma(n - x_0)]}, \quad (2)$$

где A – амплитуда колебаний ДБ, B – амплитуда смещений центров колебаний атомов, параметры β и γ задают степень пространственной локализации ДБ, а x_0 – начальное положение ДБ, которое может изменяться в пределах от 0 до 1. При $x_0=0$ имеем ДБ центрированный на атоме, а при $x_0=1/2$ центр ДБ находится посередине между двумя соседними атомами. Скорость ДБ зависит от величины δ и при $\delta=0$ имеем неподвижный ДБ.

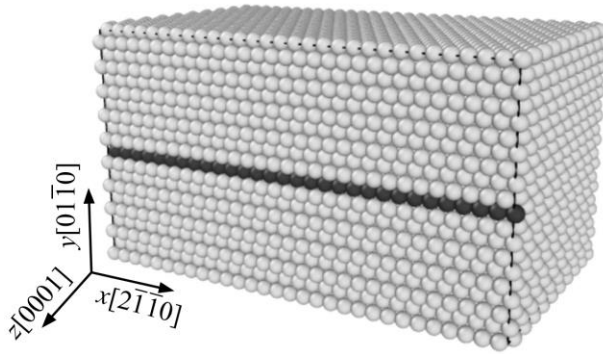


Рис.1. Расчетная ячейка используемая для моделирования ДБ в бериллии. ДБ возбуждались в плотноупакованном ряду атомов (выделен темным цветом).

Функции P_n и S_n в выражениях (2), описывающие соответственно амплитуды колебаний и смещения центров колебаний атомов, рассчитывались в ходе численного эксперимента следующим образом:

$$P_n = \frac{(x_n^{\max} - x_n^{\min})}{2}, S_n = \frac{(x_n^{\max} + x_n^{\min})}{2}, \quad (3)$$

где x_n^{\max} и x_n^{\min} – максимальное и минимальное значение квазипериодической функции $x_n(t)$, описывающей движение n -го атома прямолинейного ряда, в котором был возбужден ДБ.

Неподвижный дискретный бризер. Возбуждение неподвижного ДБ производилось при следующих значениях параметров в выражениях (1) и (2): $A = 0 \div 0.65 \text{ \AA}$; $B = 0.1 \text{ \AA}$; $\beta = 0.6 \div 0.8$; $\gamma = 0.6 \div 0.8$; $x_0 = 0.5$, $\delta = 0 \div 0.6$. Значение полученных амплитуд неподвижного ДБ ($\delta = 0$) лежит в пределах от 0.016 до 0.223 \AA , а частота в интервале от 30.4 до 36.1 ТГц. Следует отметить, что при начальных амплитудах $A \leq 0.2 \text{ \AA}$ и независимо от значений параметра β , возбуждения ДБ не происходит и после нескольких колебаний его энергия рассеивается по объему расчетной ячейки. При $A = 0.25 \text{ \AA}$ ДБ может существовать только в области $0 < \beta \leq 0.25$, а при увеличении β от 0.3 до 0.5 наблюдается его затухание.

Графики зависимости амплитуды колебания атомов P_n и смещения центров колебания атомов S_n представлены на рис. 2. Видно, что у ДБ в бериллии большую амплитуду колебаний P_n имеют два или три атома, при центрировании ДБ на середине связи (см. рис. 2б) или на атоме, соответственно. Статические смещения центров колебаний атомов, S_n , распространяются

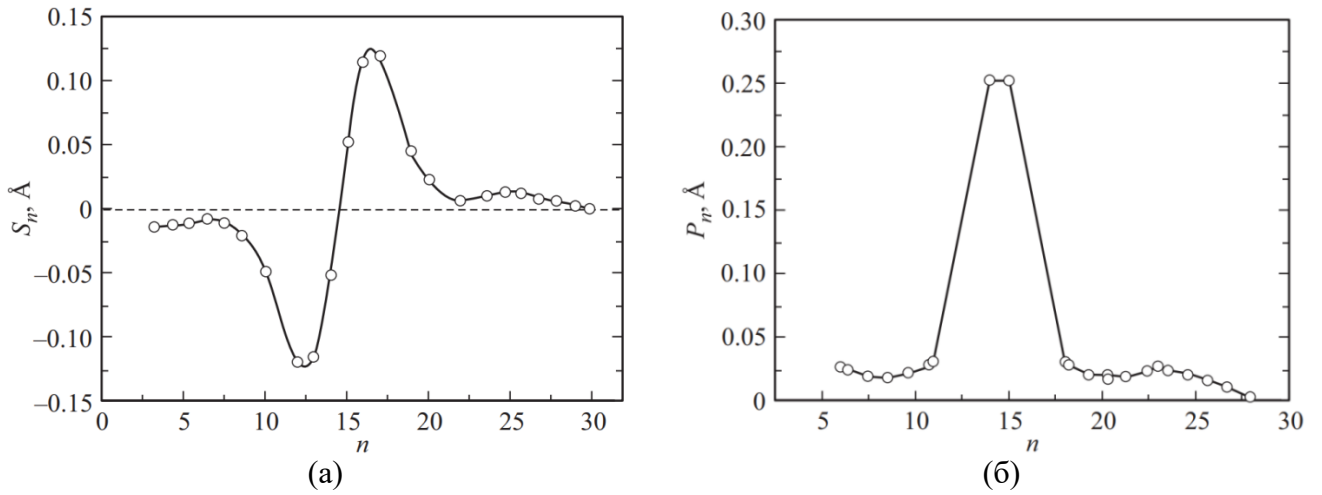


Рис. 2. (а) Смещения центров колебания атомов и (б) амплитуды колебания атомов ДБ в бериллии, возбужденного при следующих значениях параметров: $A=0.35 \text{ \AA}$, $B = 0.1 \text{ \AA}$, $\beta = 0.6$, $\gamma = 0.7$, $x_0=0.5$, $\delta=0$.

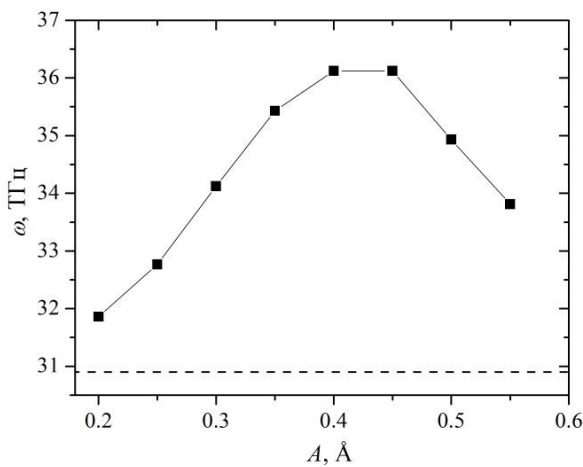


Рис. 3. Зависимость частоты неподвижного ДБ в бериллии от начальной амплитуды колебаний A . Пунктиром показана верхняя граница фононного спектра, которая для бериллия равна 30.8 ТГц.

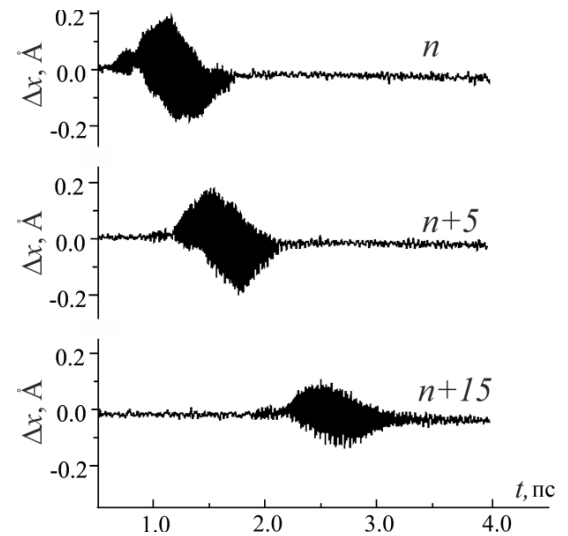


Рис. 4. Колебания атомов n , $(n+5)$ и $(n+15)$ в направлении оси x $[2\bar{1}\bar{1}0]$ при прохождении через них движущегося ДБ.

на 8–10 атомов. Из рис. 2 также видно, что максимальные смещения центров колебания атомов S_n одного порядка со значениями максимальной амплитуды колебания P_n .

На рис. 3 показана зависимость частоты неподвижного ДБ ω от начальной амплитуды A . Горизонтальной пунктирной прямой показана верхняя граница фононного спектра, которая для бериллия равна 30.8 ТГц. Видно, что частота колебаний ДБ всегда лежит выше фононного спектра, и сначала возрастает с увеличением A , но после достижения максимального значения 36.1 ТГц при $A=0.40 \text{ \AA}$, начинает убывать при более высоких амплитудах. Такое немонотонное поведение частоты в зависимости от A наблюдалось ранее для ДБ в металлах [33] и в кристаллах с ковалентной связью [34, 35]. Это связано, прежде всего, с тем, что при больших отклонениях от положения равновесия происходит уменьшение жесткости связи.

Движущийся дискретный бризер. При значениях $\delta \neq 0$, начальные условия (1) и (2) порождают движущийся ДБ. На рис. 4 представлены смещения атомов n , $(n+5)$ и $(n+15)$ вдоль координаты x как функции времени, чтобы показать прохождение через них ДБ. Для возбуждения данного ДБ брались следующие значения параметров в выражениях (1) и (2): $A = 0.30 \text{ \AA}$; $B = 0.1 \text{ \AA}$; $\beta = 0.8$; $\gamma = 0.8$; $x_0=0.5$, $\delta = 0.1$. Можно отметить наблюдаемые смещения среднего положения атомов при прохождении через него ДБ и постепенное уменьшение амплитуды ДБ за счет излучаемых им малоамплитудных бегущих волн (фононов) (см. рис. 4). После прохождения ДБ все атомы возвращаются в свои равновесные решеточные положения.

Движущийся бризер достаточно быстро теряет свой начальный импульс и останавливается, пройдя несколько десятков межатомных расстояний.

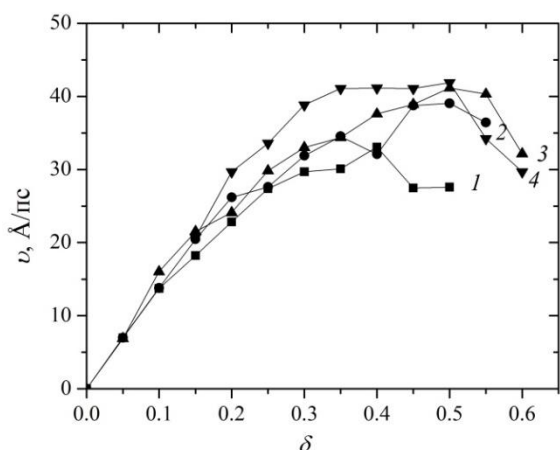


Рис. 5. Зависимость скорости движущегося ДБ в бериллии от параметра δ , рассчитанная при различных значениях начальной амплитуды: $A = 0.30$ (кривая 1), $A = 0.35$ (2), $A = 0.40$ (3), $A = 0.45$ (4).

На рис. 4 также видно, что скорость ДБ уменьшается с падением его амплитуды. Причем для значений параметра δ от 0 до 0.15 имеет место более значительное падение скорости, в то время как для δ от 0.20 до 0.50, уменьшение скорости выражено слабее.

Зависимость скорости движения ДБ от параметра δ , определяющего разность фаз колебаний соседних атомов, представлена на рис. 5. Из рисунка видно, что сначала скорость приблизительно линейно растет с увеличением параметра δ , а затем выходит на насыщение. Максимальная скорость движения ДБ достигается при значениях $A = 0.5 \text{ \AA}$, $\delta = 0.3$ и равна 43.5 \AA/ps (4.35 км/с), что составляет 33.7% от скорости продольного звука в бериллии равной 12.9 км/с .

Таким образом, впервые показана возможность существования и изучены свойства неподвижных и движущихся ДБ в ГПУ бериллии в широком интервале амплитуд. Степень пространственной локализации ДБ в бериллии достаточно велика, большие амплитуды колебаний имеют 2-3 атома в зависимости от центрирования ДБ. Движущиеся ДБ в бериллии показывают высокую стабильность в интервале начальных амплитуд $A = 0.25 - 0.50 \text{ \AA}$ и параметра δ в интервале от $0.05 \div 0.6$.

ГЛАВА 3. ОДНОМЕРНЫЕ ДИСКРЕТНЫЕ БРИЗЕРЫ В ГЦК МЕТАЛЛАХ

В данной главе методом молекулярной динамики исследуются одномерные ДБ в металлах с ГЦК решеткой (Al, Cu, Ni). Для моделирования были выбраны многочастичные потенциалы межатомного взаимодействия, основанные на методе погруженного атома [36]. Периодические граничные условия использовались вдоль трех взаимно перпендикулярных направлений. Размеры расчетных ячеек, количество атомов в них и постоянные решеток исследуемых металлов приведены в таблице 1. Изучение влияния размера расчетной ячейки на время жизни одномерного ДБ и другие его свойства проводилось для никеля (см. таблицу 1).

Таблица 1. Размеры расчетной ячейки вдоль x -, y - и z -направлений, число атомов в ячейке N , постоянная решетки a_0 при $T = 0 \text{ К}$, верхняя граница фононного спектра ω для исследуемых ГЦК металлов. Монокристалл Ni с меньшей расчетной ячейкой обозначен как Ni*.

Металл	Расчетная ячейка (Å)	N	a_0 (Å)	ω (ТГц)
Al	157.6×125.1×76.1	92928	4.05	10.0
Cu	141.7×112.5×68.4	92928	3.62	7.9
Ni	138.0×109.6×67.1	92928	3.54	10.3
Ni*	69.0×54.8×67.1	23232	3.54	10.3

Моделирование проводилось при температуре $T = 0 \text{ К}$ с применением термодинамического ансамбля NVE. Расчеты при нулевой температуре позволили изучить свойства ДБ в случае, когда их время жизни максимально. При численном интегрировании уравнений движения частиц шаг по времени был выбран равным 1 фс. Продолжительность численных расчетов составила 20 пс, что оказалось достаточным для наблюдения изучаемых явлений. Одномерные ДБ в ГЦК металлах возбуждались в одной плотноупакованной цепочке атомов, ориентированной вдоль направления $[10\bar{1}]$, как показано на рис. 6. Четные и нечетные

атомы смещались на величину A и $(-A)$, соответственно, где A – начальная амплитуда, которая варьировалась в интервале от 0.05 до 0.5 Å. Остальные атомы в расчетной ячейке имели нулевые начальные смещения и скорости.

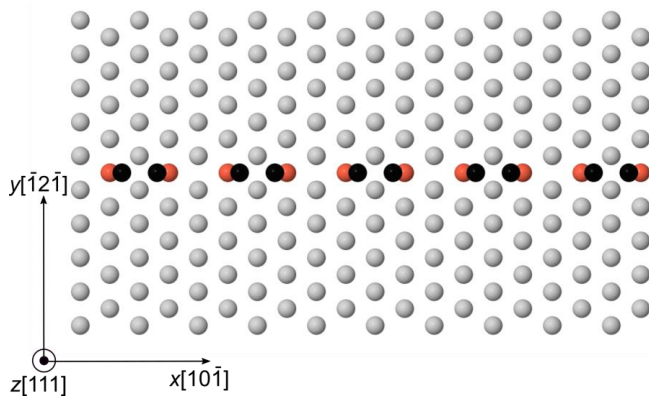


Рис. 6. Смещения атомов одномерного ДБ в ГЦК решетке. Черным цветом показаны атомы колебательной моды в момент максимального отклонения от положения равновесия, а красным их начальные положения. Остальные атомы показаны серым.

во всех трех металлах. В интервале амплитуд от 0.05 до 0.125 Å время жизни ДБ довольно мало и не превышает 2 пс. При начальных амплитудах 0.25 Å для Al и Cu и 0.2 Å для Ni наблюдается резкое увеличение времени жизни до максимальных значений 16, 17 и 14 пс, что соответствует 163, 140 и 142 колебаниям, соответственно. После чего с увеличением амплитуды от 0.3 до 0.5 Å время жизни начинает уменьшаться и уже при $A = 0.5$ Å не превышает 2.2 пс. Таким образом, интервал начальных амплитуд, при которых может возбуждаться одномерный ДБ, для исследованных металлов относительно узкий, то есть $0.225 < A < 0.45$.

Время жизни моды, полученное для Ni* несколько меньше, чем для Ni. Наибольшая разница (около 1.7 пс) соответствует максимальному времени жизни (см. рис. 7а). Уменьшение времени жизни с уменьшением размера ячейки связано с ростом влияния малоамплитудных волн, испускаемых при установлении колебаний моды. В ячейке большего размера плотность энергии этих волн меньше и, соответственно, меньше их влияние на динамику одномерного ДБ.

Зависимость частоты одномерного ДБ от начальной амплитуды представлена на рис. 7б. В интервале начальных амплитуд от 0.05 до 0.225 Å частота колебаний увеличивается незначительно. При амплитудах более 0.25 Å происходит значительное увеличение частоты ДБ по линейному закону, что соответствует жесткому типу нелинейности, типичному для металлов с различной кристаллической решеткой. Важно отметить, что найденные частоты колебаний для Al, Cu и Ni находятся выше соответствующих значений верхнего края фононного спектра для этих металлов (см. таблицу 1), что обеспечивает отсутствие взаимодействия моды с тепловыми колебаниями решетки.

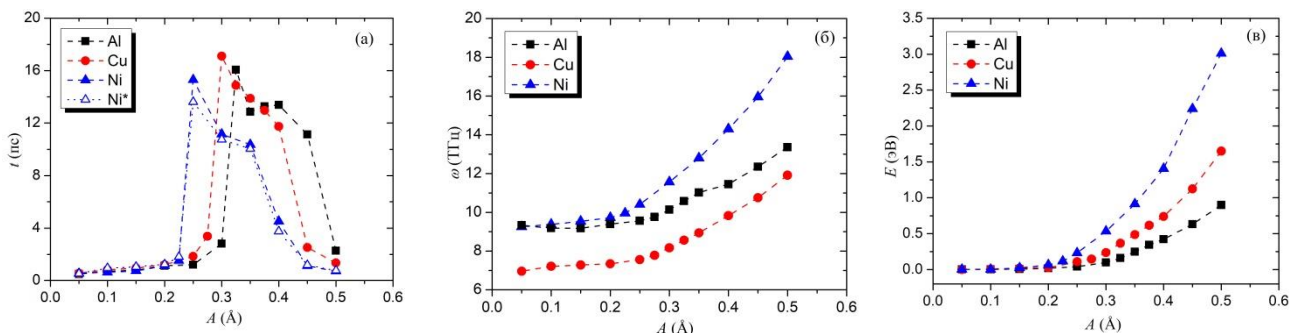


Рис. 7. Зависимость а) времени жизни б) частоты и в) полной колебательной энергии одномерного ДБ от начальной амплитуды для ГЦК металлов Al, Cu и Ni.

На рис. 7а представлена зависимость времени жизни одномерного ДБ от начальной амплитуды колебаний A . Следует отметить, что задаваемая начальная амплитуда в течение нескольких периодов колебаний уменьшается из-за некоторого рассеивания энергии на соседних атомах, в результате чего происходит небольшое уменьшение амплитуды атомных колебаний, которая затем остается постоянной довольно длительный промежуток времени. Эта амплитуда называется установившейся. При этом период колебаний от момента возбуждения ДБ до его затухания практически не изменяется. Как видно из рис. 7а, одномерный ДБ может существовать

На рис. 7в показана зависимость полной (кинетическая плюс потенциальная) колебательной энергии, приходящейся на один осциллирующий атом одномерного ДБ, от начальной амплитуды A . Как видно, в интервале амплитуд от 0.05 до 0.225 Å происходит незначительный рост энергии, а при $A > 0.25$ Å энергия начинает быстро увеличиваться. Наиболее долгоживущие ДБ имеют амплитуды колебаний в интервале от 0.2 до 0.4 Å, и максимальную энергию около 0.9, 1.6 и 3.4 эВ на атом для Al, Cu и Ni соответственно. Таким образом, одномерный ДБ в Ni может накапливать большую колебательную энергию по сравнению с Al и Cu, что непосредственно связано с жесткостью межатомных связей задаваемых потенциалом взаимодействия для данного конкретного металла. Частота колебаний и полная колебательная энергия для Ni* не показаны на рис. 7б и 7в, поскольку они практически совпадают с соответствующими результатами для Ni.

Таким образом, впервые исследованы свойства одномерных ДБ в трехмерных монокристаллах ГЦК-металлов Al, Cu и Ni. Атомы возбужденного плотноупакованного ряда осциллируют с амплитудами, намного превышающими амплитуды колебаний в соседних атомных рядах, что говорит о высокой степени пространственной локализации одномерных ДБ. Максимальное время жизни достигает 15-17 пс, а колебательная энергия 0.9-3.0 эВ на атом. Исследованные одномерные ДБ в Al, Cu и Ni демонстрируют жесткий тип нелинейности. Размер расчетной ячейки незначительно влияет на время жизни одномерного ДБ.

ГЛАВА 4. ДВУМЕРНЫЕ ДИСКРЕТНЫЕ БРИЗЕРЫ В МЕТАЛЛАХ

Глава посвящена изучению двумерных ДБ в трехмерных кристаллах с ГЦК и ГПУ кристаллическими решетками. Двумерные ДБ возбуждались на основе ДНКМ двумерной треугольной решетки [37], которые были найдены Чечиным и Рябовым с использованием теории групп. ДНКМ являются точными решениями нелинейных уравнений движения атомов и диктуются симметрией решетки, а потому не зависят от межатомных потенциалов, используемых при моделировании [38]. Динамика ДНКМ может быть описана небольшим числом K связанных уравнений движения, при этом K определяет число компонент моды. На рис. 8 представлены восемь однокомпонентных (1-8) и одна двухкомпонентная (9) ДНКМ треугольной решетки, обнаруженные в работе [37].

Плоскость (111) ГЦК кристалла и базисная плоскость (0001) ГПУ кристалла представляют собой двумерную треугольную решетку. Возбуждение двумерных ДБ в трехмерных решетках ГЦК и ГПУ металлов проводилось в одной из плотноупакованных плоскостей в соответствии с ДНКМ треугольной решетки.

Двумерные ДБ в ГПУ титане возбуждались путем начальных смещений атомов в одной из базисных плоскостей расчетной ячейки в соответствии с одной из восьми однокомпонентных ДНКМ (см. рис. 8). Для ГПУ титана было выбрано два потенциала межатомного взаимодействия [39, 40], первый из которых представляет собой многочастичный параметризованный полуэмпирический потенциал типа Финниса-Синклера (Ti_1992) [40], а второй сочетает потенциал Стиллингера-Вебера и потенциал основанный на модифицированном методе погруженного атома (Ti_2008). Условимся считать, что ДБ стабилен, если в течение времени более 1 пс амплитуды колебаний атомов в возбужденной плоскости остаются практически постоянными.

Расчеты показали, что только некоторые из восьми ДНКМ в Ti порождают долгоживущий двумерный ДБ (см. таблицу 2).

На рис. 9 показаны зависимости времени жизни, частоты колебаний и полной колебательной энергии на атом от начального смещения атомов A для двумерных ДБ в Ti, порожденных на основе ДНКМ 9, рассчитанные при помощи двух потенциалов Ti_1992 и Ti_2008. Долгоживущими, с временем жизни от 5 до 18 пс, оказались ДБ возбужденные на основе ДНКМ 2, 5 и 6 для Ti_1992, в то время как максимальное время жизни остальных не превысило 5 пс. Для Ti_2008 получились похожие результаты, а именно, характерное время жизни всех ДБ лежит в интервале от 3 до 13 пс. Наиболее долгоживущим для Ti_2008 оказался

ДБ, порожденный ДНКМ 7, время жизни которого составило 26 пс, что соответствует 145 колебаниям. Времена жизни ДБ порожденных ДНКМ 2, 5 и 6 лежат в интервале от 8 до 15 пс, а другие ДНКМ порождают весьма короткоживущие ДБ для обоих потенциалов. Независимо от используемого потенциала, ДБ порожденные ДНКМ 1 оказались нестабильными и колебания атомов затухали почти сразу после начала моделирования. Для ДНКМ 3 и 4 характерное время жизни ДБ составило менее 3.3 пс. Интересно также отметить, что ДБ на основе ДНКМ 4 в Ti_1992 возбуждался только при начальных амплитудах $A \geq 0.40 \text{ \AA}$, в то время как в Ti_2008 возбуждения двумерного ДБ не происходит. Отметим, что время жизни ДБ, рассчитанное при определенном значении начальной амплитуды, растет с увеличением размера расчетной ячейки используемой при моделировании, что связано с уменьшением влияния излучения фононов при запуске ДНКМ.

Таблица 2. Результаты моделирования двумерных ДБ в ГПУ Ti. Результаты приведены для двух межатомных потенциалов взаимодействия (Ti_1992 и Ti_2008). Знак «+» обозначает, что двумерный ДБ существует, а знак «-» что ДБ не существует.

металл	ДНКМ							
	1	2	3	4	5	6	7	8
Ti_1992	-	+	+	+ $A \geq 0.40 \text{ \AA}$	+	+ $A \leq 0.35 \text{ \AA}$	+	+
Ti_2008	-	+	+ $A \geq 0.25 \text{ \AA}$	-	+	+ $A \leq 0.40 \text{ \AA}$	+	+

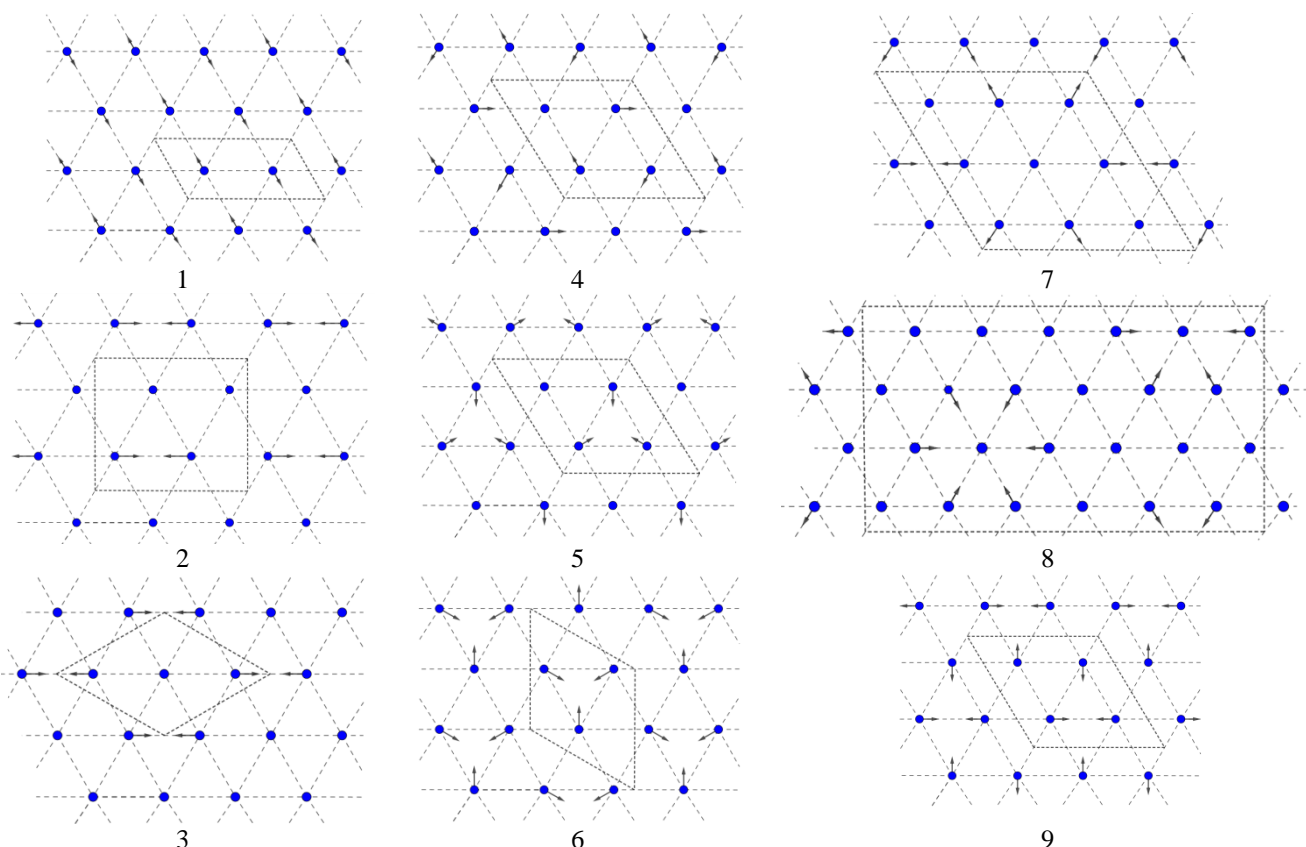


Рис. 8. Восемь однокомпонентных ДНКМ (1-8) и одна двухкомпонентная ДНКМ 9 в двумерной треугольной решетке. Пунктиром показаны элементарные трансляционные ячейки колебательных состояний решетки. Атомные смещения показаны стрелками. Длина всех векторов смещений одинакова и равна A . Амплитуды смещений атомов для ДНКМ 9 в направлении осей x и y различны и равны A_x и A_y , соответственно.

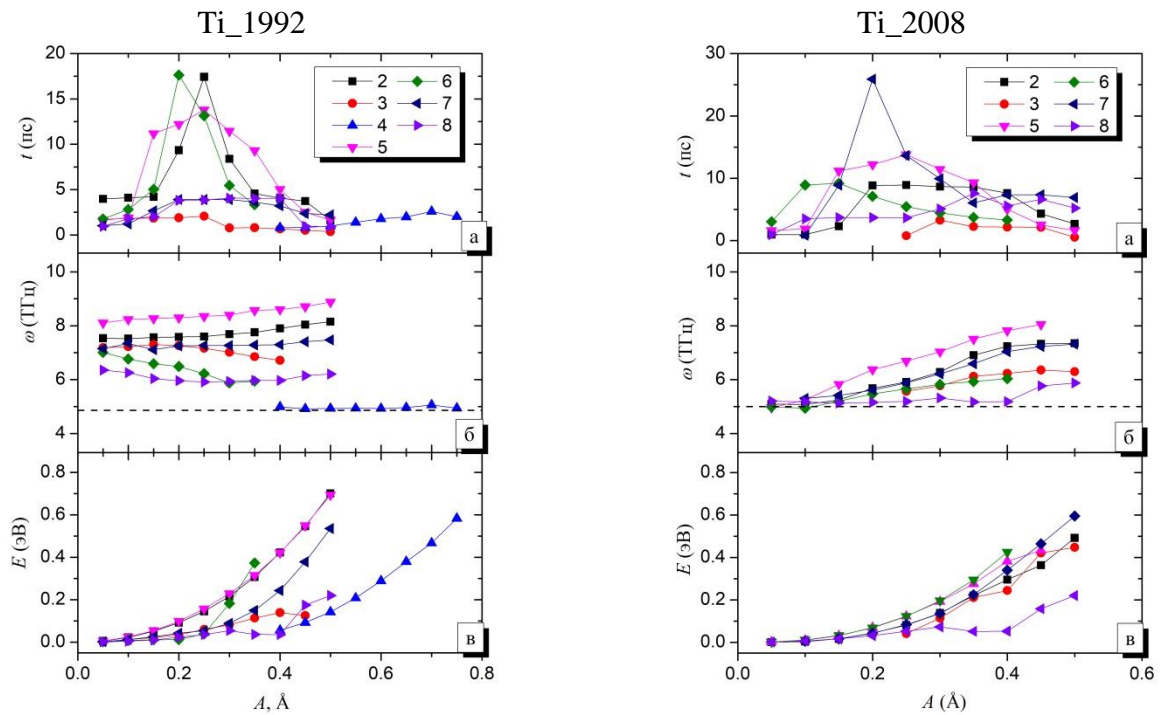


Рис. 9. Зависимости времени жизни, частоты колебаний и полной энергии колебаний на атом в ДНКМ от начального смещения атомов A , рассчитанные при помощи двух различных межатомных потенциалов Ti_{1992} и Ti_{2008} . Цифрами в легенде обозначены номера соответствующих однокомпонентных ДНКМ, используемых для возбуждения ДБ (см. рис. 8). Пунктирной линией на (б) показана верхняя граница фононного спектра.

Возбуждение двумерного ДБ происходит только тогда, когда его частота лежит вне спектра малоамплитудных колебаний кристаллической решетки. Причем выход частоты ДБ из спектра происходит за счет зависимости частоты нелинейных колебаний от амплитуды. На рис. 9б видно, что ДБ на основе ДНКМ 2, 5 и 7, рассчитанные при помощи потенциала Ti_{1992} , показывают жесткий тип нелинейности, а у ДНКМ 3, 6 и 8 частота колебаний уменьшается с ростом амплитуды вследствие несимметричности этих мод, то есть максимальные положительные и отрицательные смещения от положений равновесия не равны по абсолютной величине. При этом для Ti_{2008} все ДБ показывают жесткий тип нелинейности и зависимости частоты от амплитуды значительно отличаются от полученных с помощью потенциала Ti_{1992} (см. рис. 9б), демонстрируя, таким образом, что выбор потенциала межатомного взаимодействия играет существенную роль при изучении нелинейных эффектов в кристалле. Частоты колебаний ДБ на основе ДНКМ 4 лежат немного выше максимальной частоты фононного спектра, равной 4.87 ТГц для Ti_{1992} . Именно этим и объясняется тот факт, что ДБ на основе ДНКМ 4 не стабилен при использовании потенциала Ti_{2008} , а его частоты колебаний лежат в фононном спектре кристалла, верхняя граница которого равна 5.0 ТГц, что обуславливает их взаимодействие с атомами решетки и быстрое излучение энергии.

На рис. 9 в показана зависимость полной колебательной энергии на атом E для всех исследованных двумерных ДБ от начальной амплитуды A . Видно, что энергия возрастает с увеличением амплитуды. ДБ на основе ДНКМ 3 (для Ti_{1992}) довольно быстро рассеивают свою энергию на соседние атомы. Отметим, что для ДБ на основе ДНКМ 8 при обоих использованных потенциалах имеется характерный «провал» в энергии в интервале амплитуд $A=0.35\div 0.40\text{Å}$.

Установившаяся амплитуда колебаний двумерных ДБ a как функция начальной амплитуды A , рассчитанная при помощи межатомных потенциалов Ti_{1992} и Ti_{2008} , представлена на рис. 10. Видно, что, как правило, $A > a$, что связано с рассеянием энергии, переданной системе в начальный момент времени. Во всем интервале амплитуд наблюдается увеличение a с ростом A , причем в некоторых случаях эта зависимость оказывается близкой к линейной, хотя имеются и исключения, например, для ДНКМ 4, 6 и 7 (Ti_{1992}). Заметим, что

установившаяся амплитуда ДБ на основе ДНКМ 6 (Ti_1992) и 3, 6 (Ti_2008) превышает начальную. Это связано с несимметричностью этих мод, то есть для них максимальные и минимальные значения атомных смещений, взятые по абсолютной величине, отличаются.

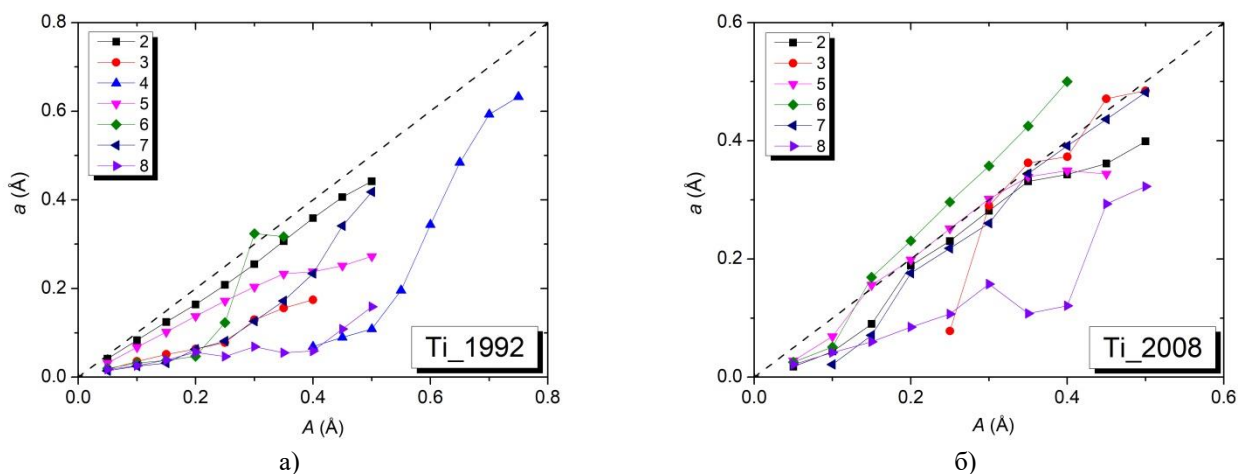


Рис. 10. Зависимость установившейся амплитуды колебаний двумерных ДБ a от начальной амплитуды A , рассчитанная при помощи двух потенциалов взаимодействия: а) Ti_1992 и б) Ti_2008. Цифрами в легенде обозначены номера соответствующих ДНКМ, которые использовались для возбуждения ДБ (см. рис. 8). Пунктирной линией показана зависимость $a=A$.

Двумерные ДБ в ГЦК металлах Al, Cu и Ni. Сначала исследуем свойства двумерных ДБ возбужденных на основе *однокомпонентных ДНКМ (1-8)*, а потом на основе *двухкомпонентной ДНКМ (9)*. Расчеты показали, что так же как и для Ti, только ДНКМ 2, 3, 5 и 7 из восьми однокомпонентных ДНКМ порождают устойчивые двумерные ДБ в ГЦК металлах (см. таблицу 3).

Таблица 3. Результаты моделирования двумерных ДБ на основе восьми однокомпонентных (1-8) и одной двухкомпонентной (9) ДНКМ в ГЦК металлах Al, Cu и Ni. Знак «+» обозначает, что двумерный ДБ возбужденный на основе данной ДНКМ существует, а знак «-» что не существует.

металл	ДНКМ								
	1	2	3	4	5	6	7	8	9
Al	-	+	+ $A \geq 0.40 \text{ \AA}$	-	+	-	+	-	+
Cu	-	+	+ $A \geq 0.40 \text{ \AA}$	-	+	-	+	-	+
Ni	-	+	+ $A \geq 0.40 \text{ \AA}$	-	+	-	+	-	+

На рис. 11 показаны зависимости времени жизни, частоты колебаний и полной энергии колебаний на атом для двумерных ДБ, которые порождались на основе *однокомпонентных ДНКМ* от начального смещения атомов A для Al, Cu и Ni. В области малых амплитуд $A = 0.05 \div 0.15 \text{ \AA}$ время жизни мало и не превышает 5 пс. Максимум достигается для ДБ на основе ДНКМ 2 и равен 23, 47 и 37 пс при начальных амплитудах 0.25 0.20 и 0.20 \AA для Al, Cu и Ni, соответственно. Следует отметить, что максимальное время жизни ДБ на основе ДНКМ 5 также довольно велико (17.7 пс для Al, 25.0 пс для Cu и 17.3 пс для Ni) и приходится на те же начальные амплитуды, что и у ДБ на основе ДНКМ 2. Возбуждая двумерный ДБ с помощью ДНКМ 7, получим устойчивые колебания атомов при $A = 0.3 \text{ \AA}$ для Al и при $A = 0.1 \text{ \AA}$ для Cu и Ni, с небольшим временем жизни от 6 до 10 пс. Для сравнения, в Ti это время не превышает 4 пс для потенциала Ti_1992.

Все обнаруженные двумерные ДБ в ГЦК металлах имеют жесткий тип нелинейности. У ГЦК металлов наблюдается более быстрое увеличение частоты с ростом амплитуды по сравнению с Ti, что видно из сравнения рис. 9 и 11 (средние панели).

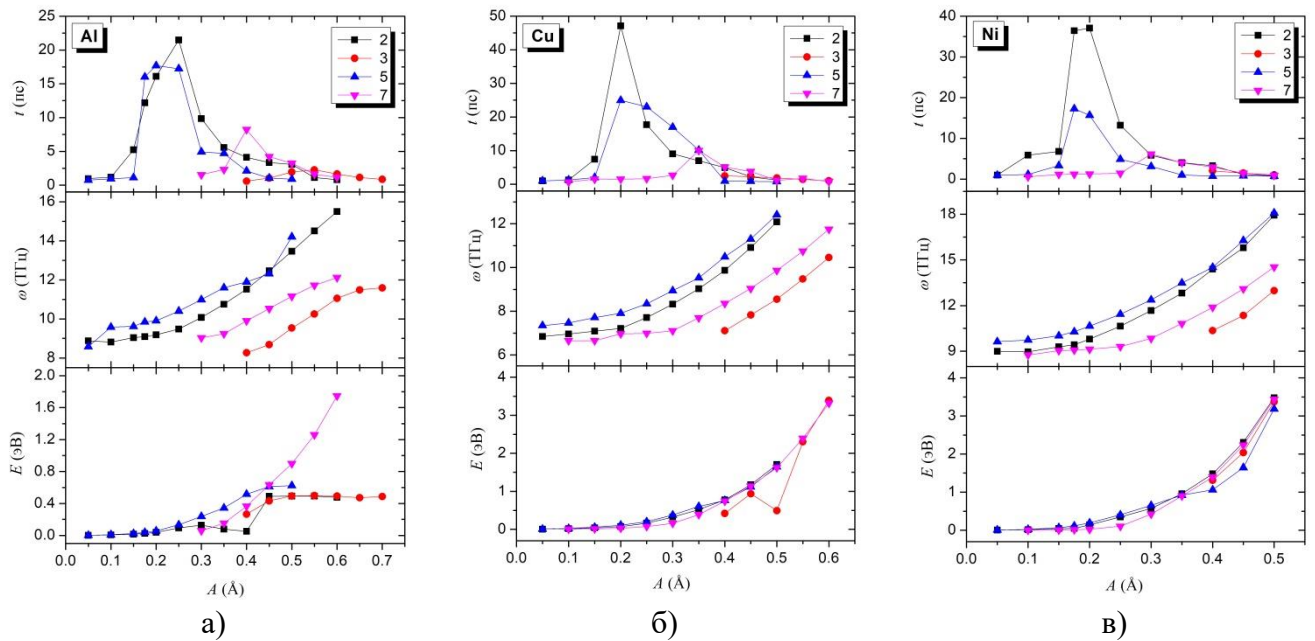


Рис.11. Зависимости времени жизни, частоты колебаний и полной энергии колебаний на атом для двумерных ДБ, порожденных на основе однокомпонентных ДНКМ от начальной амплитуды A , рассчитанные для ГЦК-металлов Al, Cu и Ni. Цифрами в легенде обозначены номера соответствующих ДНКМ, которые использовались для возбуждения ДБ (см. рис. 8).

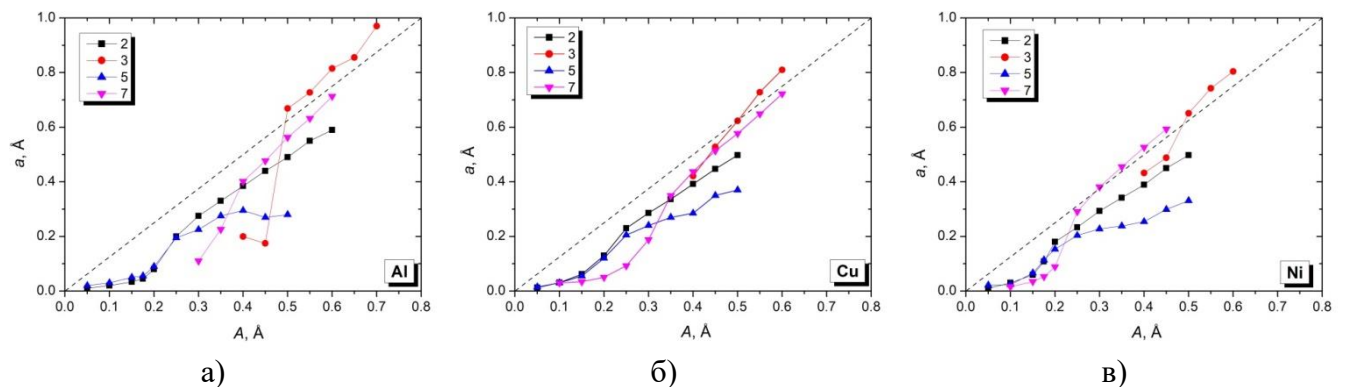


Рис. 12. Зависимость установившейся амплитуды колебаний двумерных ДБ a от начальной амплитуды A для ГЦК-металлов: а) Al, б) Cu и в) Ni. Пунктирной линией показана зависимость $a=A$. Цифрами в легенде обозначены номера соответствующих ДНКМ, которые использовались для возбуждения ДБ (см. рис. 8).

На рис. 12 показаны зависимости $a(A)$ для ДБ порожденных на основе ДНКМ 2, 3, 5 и 7. Отметим, что практически для всех металлов данные зависимости имеют близкий к линейному характер. Установившаяся амплитуда для ДБ на основе ДНКМ 3 для Al и Cu и ДНКМ 3 и 7 для Ni превышает начальную амплитуду. Как было сказано выше, это связано с несимметричностью данных мод [37].

Перейдем к анализу двумерных ДБ в ГЦК металлах Al, Cu и Ni порожденных на основе двухкомпонентной ДНКМ 9 треугольной решетки. Такие ДБ возбуждались путем задания следующих начальных условий. Атомы одной плотноупакованной плоскости (111) смещались вдоль осей x и y , по схеме показанной на рис. 8. Система координат выбрана так, что плотноупакованные плоскости (111) параллельны плоскости xy , при этом ось x направлена вдоль кристаллографического направления $[10\bar{1}]$, ось y вдоль $[\bar{1}2\bar{1}]$, а ось z вдоль $[111]$. Начальные амплитуды смещений атомов в направлении осей x и y обозначим A_x и A_y , соответственно. Атомы не принадлежащие выбранной плотноупакованной плоскости имеют нулевые начальные смещения. Все атомы расчетной ячейки в начальный момент времени имеют нулевые скорости.

Начальные амплитуды колебаний менялись в интервалах $A_x=0.05\div 0.5 \text{ \AA}$ и $A_y=0.05\div 0.2 \text{ \AA}$. Путем перебора параметров A_x и A_y решалась задача о нахождении условий, при которых может быть возбужден долгоживущий двумерный ДБ в рассматриваемых ГЦК металлах. Естественно, что после запуска молекулярно-динамического расчета, часть энергии возбужденной плоскости передавалась соседним плоскостям. В результате этого переходного процесса, при должном выборе начальных амплитуд A_x и A_y , возбуждался долгоживущий двумерный ДБ, в котором колебания с большой амплитудой совершали лишь атомы возбужденной атомной плоскости, с удалением от которой амплитуды атомных колебаний экспоненциально убывали. Установлено, что устойчивое состояние ДНКМ 9 возможно лишь при условии $A_y < A_x$. Параметр A_x является основным для исследуемой двухкомпонентной колебательной моды. После выбора величины A_x проводились расчеты для различных значений A_y . Увеличение параметра A_y сверх 0.2 \AA приводило либо к уменьшению времени жизни ДБ, либо к нарушению исходной структуры кристаллической решетки. При определенных значениях параметров A_x и A_y время жизни ДБ было максимальным. В конце жизни двумерный ДБ распадался на цепочку одномерных ДБ, рассмотренных ранее в главе 3. Далее, в каждой из цепочек происходила концентрация колебательной энергии на 6-8 атомах, что соответствовало образованию нульмерных ДБ.

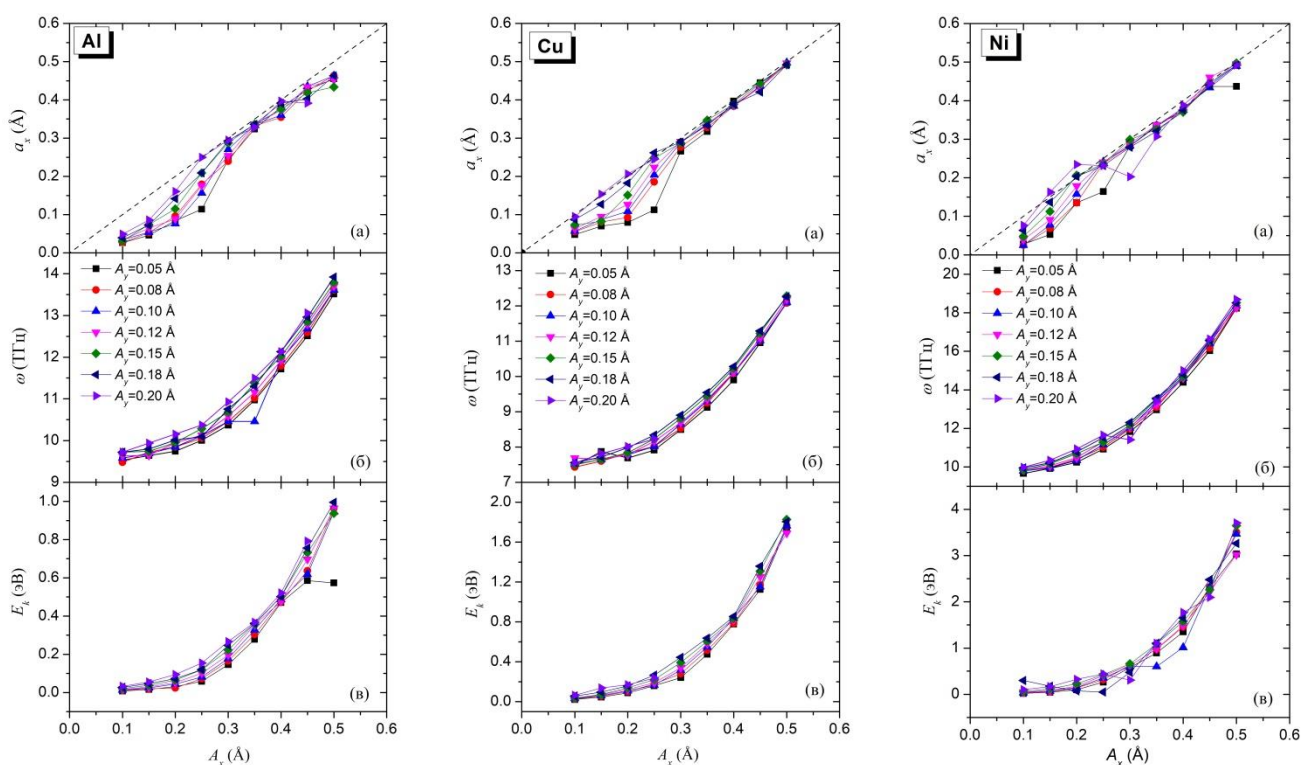


Рис. 13. Зависимость (а) установившейся амплитуды, (б) частоты колебаний и (в) полной энергии колебаний на атом от начального смещения атомов A_x для двумерных ДБ, порожденных на основе двухкомпонентной ДНКМ 9 в ГЦК металлах Al, Cu и Ni. Пунктирная линия на (а) показывает зависимость $a_x = A_x$, для иллюстрации того факта, что практически всегда $a_x < A_x$.

Амплитуда установившегося ДБ, a_x , определяемая как половина разницы между максимальным и минимальным значениями смещения вдоль оси x , представлена на рис. 13а как функция начальной амплитуды A_x . Значения a_x практически всегда ниже A_x за счет передачи части энергии от возбуждаемой атомной плоскости соседним плоскостям. В тех редких случаях, когда $a_x > A_x$, происходит переход части энергии y -колебаний в x -колебания. Отметим, что в интервале $A_y = 0.08\div 0.18 \text{ \AA}$ имеется отклонение от линейной зависимости $a_x(A_x)$ в интервале $0.1\div 0.30 \text{ \AA}$, а при $A_x > 0.3 \text{ \AA}$ зависимость для Cu и Al становится близкой к линейной при различных значениях A_y . В Ni «переломной» точкой является значение $A_x = 0.25 \text{ \AA}$. Линейная зависимость $a_x(A_x)$ устанавливается ввиду выхода двумерного ДБ на стационарный режим колебаний. На рис. 13б и 13в показаны частоты ω и энергии колебаний на атом E для

двумерных ДБ в режиме устойчивых колебаний как функции A_x . Поведение кривой $E(A_x)$ аналогично поведению $\omega(A_x)$. Двумерный ДБ с исследованном интервале начальных амплитуд демонстрирует жесткий тип нелинейности, то есть частота увеличивается с увеличением амплитуды. Частоты колебаний атомов при $A_x > 0.2^\circ \text{ \AA}$ лежат выше верхнего края фононного спектра, равного 10.0, 7.9 и 10.3 ТГц для Al, Cu и Ni, соответственно. В случае $A_x < 0.2^\circ \text{ \AA}$, время жизни двумерного ДБ очень мало и составляет около 10-15 колебаний, поскольку его энергия расходуется на возбуждение фононов.

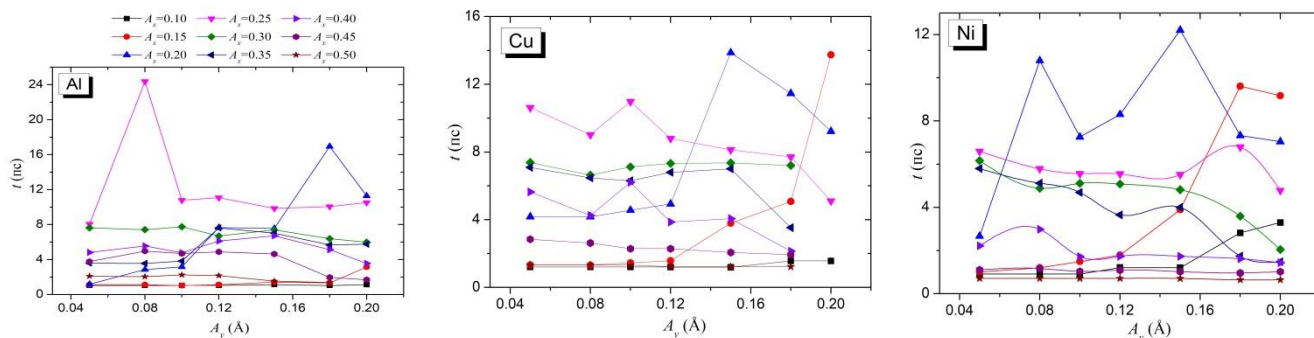


Рис. 14. Зависимость времени жизни двумерного ДБ, порожденного на основе двухкомпонентной ДНКМ 9 от начальной амплитуды A_y для ГЦК металлов, рассчитанная для разных значений A_x .

На рис. 14 представлены зависимости времени жизни двумерного ДБ от начальной амплитуды A_y для трех ГЦК металлов, рассчитанные при различных значениях A_x . В Al время жизни ДБ варьируется от 0 до 7 пс для всех A_x , кроме $A_x=0.25 \text{ \AA}$, $A_y = 0.08 \text{ \AA}$ и $A_x=0.20 \text{ \AA}$, $A_y = 0.18 \text{ \AA}$, где наблюдается повышение времени жизни. В Cu и Ni наблюдается большой разброс значений времени жизни. Легко заметить, что при определенных значениях A_x и A_y достигается максимальный период существования двумерного ДБ. Таковыми являются: $A_x=0.25 \text{ \AA}$ и $A_y=0.08 \text{ \AA}$, $A_x = 0.20 \text{ \AA}$ и $A_y=0.18 \text{ \AA}$ для Al; $A_x = 0.25 \text{ \AA}$ и $A_y=0.05 \text{ \AA}$, $A_x = 0.25 \text{ \AA}$ и $A_y=0.10 \text{ \AA}$, $A_x = 0.35 \text{ \AA}$ и $A_y=0.15 \text{ \AA}$, $A_x = 0.15 \text{ \AA}$ и $A_y=0.20 \text{ \AA}$ для Cu; $A_x = 0.20 \text{ \AA}$ и $A_y=0.08 \text{ \AA}$, $A_x = 0.20 \text{ \AA}$ и $A_y=0.15 \text{ \AA}$, $A_x = 0.15 \text{ \AA}$ и $A_y=0.18 \text{ \AA}$, $A_x = 0.15 \text{ \AA}$ и $A_y=0.20 \text{ \AA}$ для Ni.

Таким образом, впервые показано существование двумерных ДБ, порожденных на основе как однокомпонентной, так и двухкомпонентной ДНКМ в трехмерной ГЦК и ГПУ решетках. В трехмерной кристаллической решетке Ti возможно возбуждение 6 или 7 типов двумерных ДБ в зависимости от межатомного потенциала взаимодействия (ДНКМ 2-7), в то время как в ГЦК-металлах Al, Cu, Ni только 4 (ДНКМ 2, 3, 5, 7). Все изученные в данной главе ДБ имеют жесткий тип нелинейности. Для ДНКМ 3 и 7 наблюдается превышение установившейся амплитуды над начальной, ввиду их несимметричности. Максимальное время жизни ДБ в Ti достигает 17-26 пс, а в ГЦК-металлах 23-47 пс. Максимальные значения накопленной колебательной энергии составляют порядка 0.7 эВ в Ti и 1.8-3.5 эВ в Al, Cu и Ni на атом соответственно. Выяснено главное условие существования устойчивых ДБ, возбужденных на основе двухкомпонентной ДНКМ 9 в ГЦК металлах (Al, Cu и Ni), а именно начальная амплитуда атомных смещений вдоль оси y должна быть меньше соответствующих смещений вдоль оси x . Максимальное время жизни такого ДБ составляет 24 пс (Al), 14 пс (Cu) и 12 пс (Ni). Максимальные значения колебательной энергии находятся в интервале 1.0-4.0 эВ на атом. В конце жизни распад ДНКМ 9 приводит к постепенному уменьшению пространственной размерности ДБ.

ГЛАВА 5. НУЛЬМЕРНЫЕ ДИСКООБРАЗНЫЕ ДИСКРЕТНЫЕ БРИЗЕРЫ

В данной главе показывается, что на основе двумерных ДБ в трехмерных ГЦК металлах возможно возбуждение устойчивых дискообразных нульмерных ДБ, которые получаются путем наложения локализирующих функций на ДНКМ с радиальной симметрией. Это является

системным подходом для определения начальных условий необходимых для возбуждения ДБ [13, 15, 16].

Возбуждение атомов происходило в одной плотноупакованной (111) плоскости. Система координат выбиралась так, чтобы плоскость xu была параллельна плотноупакованным плоскостям ГЦК решетки. Начальные смещения атомов соответствовали ДНКМ 5 треугольной решетки (см. рис. 8), которая была выбрана ввиду того, что двумерный ДБ, порожденный на ее основе имеет продолжительное время жизни.

Локализация колебаний атомов ДНКМ 5, проводилась с помощью радиально-симметричной функции, которая определяла зависимость начальных амплитуд атомов от расстояния до некоторого центра в точке r_0 , как $A(\mathbf{r}) = A_0 \cdot e^{-\frac{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|}{R}}$, где \mathbf{r} – это радиус-вектор произвольной точки на плоскости xu , \mathbf{r}_0 – радиус-вектор, определяющий положение центра ДБ на плоскости xu , A_0 – начальная амплитуда колебаний в его центре, R – параметр, определяющий степень локализации радиально-симметричного ДБ. Таким образом, начальные смещения атомов в центре такого дискообразного ДБ максимальны и экспоненциально уменьшаются по мере удаления от центра. Сначала задается амплитуда в центре ДБ A_0 , которая обычно не превышает 20% от межатомного расстояния. Затем методом проб и ошибок подбирается параметр локализации R из условия максимизации времени жизни дискообразного ДБ, структура которого схематически представлена на рис. 16. Расчеты показали, что степень пространственной локализации R лежит в интервале 200÷400, а значительную амплитуду колебаний имеют от 200 до 400 атомов, в зависимости от амплитуды моды.

Чтобы проследить как ДБ эволюционирует с течением времени, вдоль одной из осей симметрии были выбраны 12 наиболее близко расположенных атомов, участвующих в колебательном движении. На рис. 17

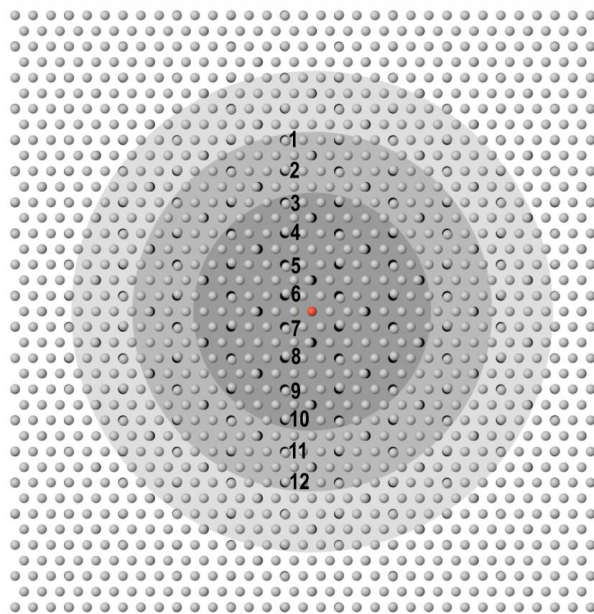


Рис. 16. Иллюстрация начальных атомных смещений, используемых для возбуждения дискообразного ДБ, в плоскости (111) ГЦК решетки. Атомы в решеточных положениях отображаются серым цветом, а смещенные атомы – черным. Атом в центре ДБ окрашен в красный цвет. Вектора начальных смещений соответствуют ДНКМ 5 (см. рис. 8), но амплитуда смещений экспоненциально убывает с удалением от центра ДБ. Показаны реальные смещения атомов. Концентрические круги, окрашенные в разные оттенки серого, схематично демонстрируют уменьшение амплитуды колебаний атомов дискообразного ДБ с удалением от его центра.

представлены амплитуды колебаний этих атомов в моменты времени 1, 3 и 5 пс для (а) Cu и (б) Ni. В 1 пс амплитуды в зависимости от N имеют четко определенную экспоненциальную форму для обоих металлов, что хорошо видно на рис. 17. Это связано с тем, что до этого момента времени существенного рассеяния энергии колебательного движения атомов не происходит. Далее амплитуды колебаний начинают постепенно уменьшаться, причем в Ni такое уменьшение более выражено, чем в Cu. В частности, в момент времени 5 пс в Ni происходит перераспределение колебательной энергии и ее концентрации на атоме 6, в результате чего его амплитуда колебаний становится максимальной, а амплитуды колебаний других атомов значительно уменьшаются. Такая сильная локализация энергии не наблюдается в Cu и в момент времени 5 пс атомы с номерами 5–10 колеблются с амплитудами превышающими 0.1 \AA . Стоит отметить, что абсолютные значения смещений в Cu выше, чем в Ni, что указывает на наличие менее жестких связей между атомами в Cu. Результаты для Al не приводятся, поскольку для него не удалось обнаружить долгоживущий дискообразный ДБ на основе ДНКМ 5.

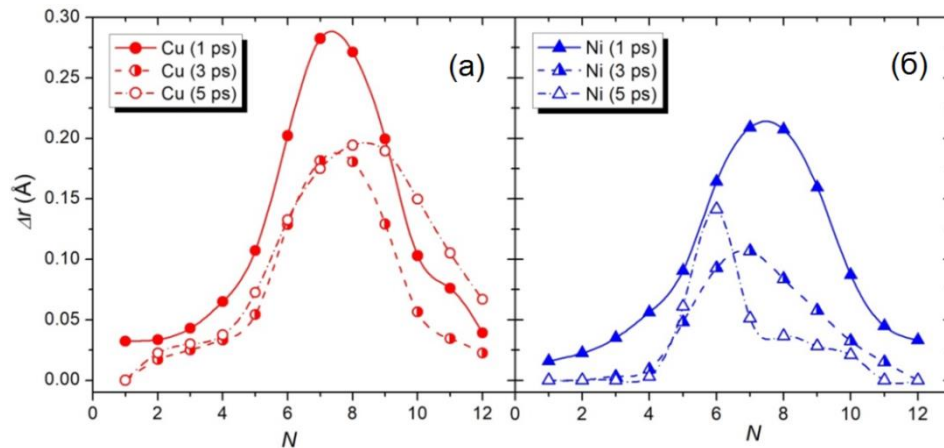


Рис. 17. Амплитуда колебаний атомов в зависимости от положения атома N в дискообразном ДБ, рассчитанная в разные моменты времени для (а) Cu и (б) Ni.

Таким образом, проведенные в настоящей главе исследования впервые позволяют сделать вывод о существовании в ГЦК решетках Cu и Ni нульмерного дискообразного ДБ. Одним из важных параметров является степень пространственной локализации, которая влияет на устойчивость дискообразных ДБ. Их времена жизни оказались меньше времен жизни соответствующих двумерных ДБ, порожденных на основе ДНКМ 5. Перераспределение колебательной энергии между атомами дискообразного ДБ приводит к нарушению симметрии и его постепенному затуханию. Начальные условия для возбуждения долгоживущего дискообразного ДБ в Al найти не удалось.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Методом молекулярной динамики показана возможность существования дискретных бризеров различной пространственной размерности в ряде ГЦК и ГПУ металлов. В результате предложена новая спецификация бризеров по их пространственной размерности.
2. Установлено, что в модели ГПУ кристалла бериллия возможно существование неподвижных и движущихся нульмерных стержневых дискретных бризеров, которые ранее изучались только в ГЦК и ОЦК металлах.
3. Во всех исследованных моделях ГЦК металлов (алюминий, медь, никель) были успешно возбуждены долгоживущие одномерные дискретные бризеры, локализованные в одном плотноупакованном атомном ряду. Для запуска одномерных дискретных бризеров использовались начальные смещения атомов, соответствующие известной делокализованной нелинейной колебательной моде одномерной решетки. Рассчитаны параметры данных бризеров, такие как диапазон возможных частот колебаний и энергий на атом. Одномерные дискретные бризеры обладают высокой степенью пространственной локализации и жестким типом нелинейности.
4. С использованием делокализованных нелинейных колебательных мод двумерной треугольной решетки, в ряде моделей ГЦК металлов (алюминий, медь, никель). в плотноупакованной плоскости были успешно возбуждены различные двумерные дискретные бризеры. Две из восьми существующих делокализованных нелинейных колебательных мод приводят к долгоживущим бризерам, две другие к бризерам с меньшим временем жизни и остальные четыре не порождают дискретных бризеров. Наибольшее время жизни имеют дискретные бризеры основанные на симметричных делокализованных колебательных модах у которых максимальные положительные и отрицательные отклонения от положений равновесия равны по абсолютной величине. В ГПУ модели титана возможно возбуждение трех или четырех типов долгоживущих двумерных ДБ в зависимости от используемого межатомного потенциала взаимодействия, остальные имеют меньшее время жизни, и только одна колебательная мода не порождает дискретного

бризера. Для всех двумерных бризеров рассчитаны диапазоны возможных частот колебаний и энергий.

- Путем наложения радиально-симметричной локализирующей функции на один из долгоживущих двумерных дискретных бризеров в моделях ГЦК металлов (алюминий, медь, никель) удалось возбудить нульмерный дискообразный дискретный бризер. Для таких бризеров найдена степень пространственной локализации, при которой время его жизни максимально. Рассчитаны их энергии и частоты в зависимости от амплитуды колебаний атомов в центре дискретного бризера.

В таблице 4 представлены типы ДБ в ГЦК и ГПУ металлах, изученных в настоящей диссертационной работе при помощи молекулярно-динамического моделирования.

Таблица 4. Результаты моделирования ДБ различных типов в ГПУ и ГЦК металлах.

тип ДБ	Al	Cu	Ni	Ti	Be
Нульмерный (стержневой)					✓
Одномерный	✓	✓	✓		
Двумерный (плоский)	✓	✓	✓	✓	
Нульмерный (дискообразный)	✓	✓	✓		

СПИСОК СТАТЕЙ, ОПУБЛИКОВАННЫХ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

- Бачурина О.В., Мурзаев Р.Т., Дмитриев С.В. Моделирование линейного дискретного бризера в никеле // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2017. Т. 14. №. 3. С. 363-367.
- Бачурина О.В., Мурзаев Р.Т., Дмитриев С.В. Исследование плоской колебательной моды в ГЦК металле никеля в плоскости [111] // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2017. т. 14. №. 3. С. 283-288.
- Бачурина О.В., Мурзаев Р.Т., Корзникова Е.А., Дмитриев С.В. Исследование одномерной нелинейной колебательной моды в ГЦК алюминии // *Materials Physics and Mechanics*. 2017. V. 33. P. 49-56.
- Бачурина О.В., Мурзаев Р.Т., Семенов А.С., Корзникова Е.А., Дмитриев С.В. Свойства движущихся дискретных бризеров в бериллии // *Физика твердого тела*. 2018. Т. 60. №. 5. С. 978-983.
- Бачурина О.В., Мурзаев Р.Т., Дмитриев С.В. Двумерная нелинейная колебательная мода в никеле // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2018. Т. 15. №. 2. С. 203-207.
- Bachurina O.V., Murzaev R.T, Semenova M.N., Semenov A.S., Ryabov D.S., Chechin G.M., Korznikova E.A., Dmitriev S.V. Two-dimensional discrete breathers in hcp titanium. *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, IOP Publishing, 2018, p. 012033.
- Bachurina O.V., Murzaev R.T., Bachurin D.V. Molecular dynamics study of two-dimensional discrete breather in nickel // *Journal of Micromechanics and Molecular Physics* - 2019. - V. 3 – N. 4. 1950001.
- Bachurina O.V. Linear discrete breather in fcc metals // *Computational Materials Science* -2019. - V. 160. - P. 217-221.
- Bachurina O.V. Plane and plane-radial discrete breathers in fcc metals // *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* -2019. - V. 27. - N. 5. 055001.

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

- Дмитриев С. В., Корзникова Е. А., Баимова Ю. А., Веларде М. Г. Дискретные бризеры в кристаллах // *Успехи физических наук*. – 2016. – Т. 186, № 5. – С. 471-488.
- Flach S., Gorbach A. Discrete breathers—advances in theory and applications // *Physics Reports*. – 2008. – Т. 467, № 1-3. – С. 1-116.

3. Корзникова Е. А., Бокий Д. И., Фомин С. Ю., Дмитриев С. В. Молекулярно-динамическое изучение дискретных бризеров с жестким типом нелинейности в моноатомной двумерной решетке с морзевским взаимодействием // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. – 2015. – Т. 12, № 3. – С. 311-315.
4. Семенов А. С., Корзникова Е. А., Дмитриев С. В. Дискретные бризеры с жестким и мягким типом нелинейности в одномерной цепочке с дальнедействующим морзевским взаимодействием // *Письма о материалах*. – 2015. – Т. 5, № 1.
5. Kiselev S. A., Bickham S. R., Sievers A. J. Anharmonic gap modes in a perfect one-dimensional diatomic lattice for standard two-body nearest-neighbor potentials // *Physical Review B*. – 1993. – Т. 48, № 18. – С. 13508.
6. Kiselev S. A., Sievers A. Generation of intrinsic vibrational gap modes in three-dimensional ionic crystals // *Physical Review B*. – 1997. – Т. 55, № 9. – С. 5755.
7. Manley M. E., Sievers A. J., Lynn J. W., Kiselev S. A., Agladze N. I., Chen Y., Llobet A., Alatas A. Intrinsic localized modes observed in the high-temperature vibrational spectrum of NaI // *Physical Review B*. – 2009. – Т. 79, № 13. – С. 134304.
8. Zakharov P. V., Starostenkov M. D., Dmitriev S. V., Medvedev N. N., Eremin A. M. Simulation of the interaction between discrete breathers of various types in a Pt3Al crystal nanofiber // *Journal of Experimental and Theoretical Physics*. – 2015. – Т. 121, № 2. – С. 217-221.
9. Starostenkov M. D., Potekaev A. I., Dmitriev S. V., Zakharov P. V., Eremin A. M., Kulagina V. V. Dynamics of Discrete Breathers in a Pt3Al Crystal // *Russian physics journal*. – 2016. – Т. 58, № 9. – С. 1353-1357.
10. Medvedev N. N., Starostenkov M. D., Zakharov P. V., Dmitriev S. V. Exciting discrete breathers of two types in a computer 3D model of Pt3Al crystal // *Technical Physics Letters*. – 2015. – Т. 41, № 10. – С. 994-997.
11. Zakharov P. V., Dmitriev S. V., Ekomasov E. G., Zhou K. Surface discrete breathers in Pt3Al intermetallic alloy // *Surface Science*. – 2019. – Т. 679. – С. 1-5.
12. Haas M., Hizhnyakov V., Shelkan A., Klopov M., Sievers A. J. Prediction of high-frequency intrinsic localized modes in Ni and Nb // *Physical Review B*. – 2011. – Т. 84, № 14. – С. 144303.
13. Kistanov A. A., Semenov A. S., Dmitriev S. V. Properties of moving discrete breathers in a monoatomic two-dimensional crystal // *Journal of Experimental and Theoretical Physics*. – 2014. – Т. 119, № 4. – С. 766-771.
14. Kistanov A. A., Dmitriev S. V., Chetverikov A. P., Velarde M. G. Head-on and head-off collisions of discrete breathers in two-dimensional anharmonic crystal lattices // *The European Physical Journal B*. – 2014. – Т. 87, № 9. – С. 211.
15. Barani E., Lobzenko I. P., Korznikova E. A., Soboleva E. G., Dmitriev S. V., Zhou K., Marjaneh A. M. Transverse discrete breathers in unstrained graphene // *The European Physical Journal B*. – 2017. – Т. 90, № 3. – С. 38.
16. Korznikova E. A., Fomin S. Y., Soboleva E. G., Dmitriev S. V. Highly symmetric discrete breather in a two-dimensional Morse crystal // *JETP letters*. – 2016. – Т. 103. – С. 277-81.
17. Chechin G. M., Ryabov D. S., Shcherbinin S. A. Nonlinear vibrational modes in graphene: group-theoretical results // *arXiv preprint arXiv:1601.05200*. – 2016.
18. Chechin G. M., Sakhnenko V. P. Interactions between normal modes in nonlinear dynamical systems with discrete symmetry. Exact results // *Physica D: Nonlinear Phenomena*. – 1998. – Т. 117, № 1-4. – С. 43-76.
19. Baimova J. A. Large systems of discrete breathers in graphene // *Letters on Materials*. – 2016. – Т. 6, № 1. – С. 31-33.
20. Lobzenko I. P., Lobzenko P. V., Bayazitov A. M., Chetverikov A. P., Machmutova R. I., Kistanov A. A. Numerical modeling of 3D discrete breathers in fcc Ni // *Letters on materials*. – 2016. – Т. 6, № 4. – С. 304-308.
21. Murzaev R. T., Kistanov A. A., Dubinko V. I., Terentyev D. A., Dmitriev S. V. Moving discrete breathers in bcc metals V, Fe and W // *Computational Materials Science*. – 2015. – Т. 98. – С. 88-92.

22. Murzaev R. T., Babicheva R. I., Zhou K., Korznikova E. A., Fomin S. Y., Dubinko V. I., Dmitriev S. V. Discrete breathers in alpha-uranium // *The European Physical Journal B*. – 2016. – Т. 89, № 7. – С. 168.
23. Захаров П. В., Дмитриев С. В., Старостенков М. Д., Ерёмин А. М., Корзникова Е. А. Стационарные квазибризеры в моноатомных металлах с ГЦК-структурой // *Журнал экспериментальной и теоретической физики*. – 2017. – Т. 152, № 5. – С. 11.
24. Terentyev D. A., Dubinko A. V., Dubinko V. I., Dmitriev S. V., Zhurkin E. E., Sorokin M. V. Interaction of discrete breathers with primary lattice defects in bcc Fe // *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. – 2015. – Т. 23, № 8. – С. 085007.
25. Bachurina O. V., Korznikova E. A., Murzaev R. T., Dmitriev S. V. Study of one-dimensional nonlinear vibrational mode in fcc aluminum // *Materials Physics and Mechanics*. – 2017. – Т. 33, № 49-56.
26. Бачурина О. В., Мурзаев Р. Т., Семенов А. С., Корзникова Е. А., Дмитриев С. В. Свойства движущихся дискретных бризеров в бериллии // *Физика твердого тела*. – 2018. – Т. 60, № 5. – С. 978.
27. Dmitriev S. V. Discrete breathers in metals and ordered alloys // *Nonlinear Theory and Its Applications, IEICE*. – 2017. – Т. 8, № 2. – С. 85-97.
28. Manley M. E., Yethiraj M., Sinn H., Volz H. M., Alatas A., Lashley J. C., Hulst W. L., Lander G. H., Smith J. L. Formation of a new dynamical mode in α -uranium observed by inelastic X-ray and neutron scattering // *Physical review letters*. – 2006. – Т. 96, № 12. – С. 125501.
29. Manley M. E., Alatas A., Trouw F., Leu B. M., Lynn J. W., Chen Y., Hulst W. L. Intrinsic nature of thermally activated dynamical modes in α -U: Nonequilibrium mode creation by x-ray and neutron scattering // *Physical Review B*. – 2008. – Т. 77, № 21. – С. 214305.
30. Agrawal A., Mishra R., Ward L., Flores K. M., Windl W. An embedded atom method potential of beryllium // *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. – 2013. – Т. 21, № 8. – С. 085001.
31. Haas M., Hizhnyakov V., Shelkan A., Klopov M., Sievers A. J. Prediction of high-frequency intrinsic localized modes in Ni and Nb // *Phys. Rev. B*. – 2011. – Т. 84, № 14. – С. 144303.
32. Кистанов А. А., Дмитриев С. В., Дубинко В. И., Хижняков В. В., Мурзаев Р. Т. Движущиеся дискретные бризеры в моноатомном двумерном кристалле // *Письма в ЖЭТФ* – 2014. – Т. 99, № 6. – С. 403-408.
33. Murzaev R., Kistanov A., Dubinko V. I., Terentyev D., Dmitriev S. Moving discrete breathers in bcc metals V, Fe and W // *Computational Materials Science*. – 2015. – Т. 98. – С. 88-92.
34. Murzaev R. T., Bachurin D. V., Korznikova E. A., Dmitriev S. V. Localized vibrational modes in diamond // *Physics Letters A*. – 2017. – Т. 381, № 11. – С. 1003-1008.
35. Voulgarakis N. K., Hadjisavvas G., Kelires P. C., Tsironis G. Computational investigation of intrinsic localization in crystalline Si // *Physical Review B*. – 2004. – Т. 69, № 11. – С. 113201.
36. Foiles S. M., Baskes M. I., Daw M. S. Embedded-atom-method for the fcc metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and their alloys // *Physical Review B*. – 1986. – Т. 33. – С. 7983.
37. Семёнова М. Н., Семёнов А. С., Бебихов Ю. В., Рябов Д. С., Чечин Г. М., Рахматуллина Ж. Г., Корзникова Е. А., Дмитриев С. В. Некоторые характеристики одномерных делокализованных нелинейных колебательных мод треугольной решетки с морзевским взаимодействием // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. – 2018. – Т. 15, № 2. – С. 257-265.
38. Chechin G. M., Sakhnenko V. P. Interactions between normal modes in nonlinear dynamical systems with discrete symmetry. Exact results // *Physica D: Nonlinear Phenomena*. – 1998. – Т. 117, № 1-4. – С. 43-76.
39. Hennig R. G. Spline-based MEAM+SW potential for Ti // *Phys. Rev. B* – 2008. – Т. 78, № 05412.
40. Ackland G. J. Theoretical study of titanium surfaces and defects with a new many-body potential // *Phil. Mag. A* – 1992. – Т. 66. – С. 917-932
41. Dal Corso A. Ab initio phonon dispersions of transition and noble metals: effects of the exchange and correlation functional // *Journal of Physics: Condensed Matter*. – 2013. – Т. 25, № 14. – С. 145401.