

Павел Васильевич Захаров^{1*}

¹Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, г. Санкт-Петербург, Россия

*zakharovpvl@rambler.ru

ЛОКАЛИЗОВАННЫЕ ВОЛНЫ В КРИСТАЛЛАХ

В работе рассмотрены механизмы зарождения уединённых волн в модельных кристаллах с запрещённой зоной в фононном спектре. Рассмотрено два механизма проявления эффекта нелинейной супратрансмиссии: путём генерации волны солитонного типа и при распространении дискретных бризеров вдоль кристалла. Произведена оценка переносимой энергии волной, роли анизотропии кристалла в характеристиках волны. Показано, что распространение уединённых волн вдоль более плотноупакованных направлений обеспечивает большую плотность энергии на атом, однако сама волна является менее устойчивой к влиянию топологических дефектов и тепловых флуктуаций решётки.

Ключевые слова: молекулярная динамика, солитон, дискретный бризер, транспорт энергии, локализация энергии.

Pavel V. Zakharov

LOCALIZED WAVES IN CRYSTALS

This work studies mechanisms for generating solitary waves in model crystals with a phononic bandgap. Two mechanisms for nonlinear supratransmission to manifest are considered: the generation of soliton-like waves and the propagation of discrete breathers along the crystal. The energy carried by the wave and the role of the crystal's anisotropy in the wave characteristics are estimated. It is shown that the propagation of solitary waves along more densely packed directions provides a higher energy density per atom, but the wave itself is less stable to the influence of topological defects and thermal lattice fluctuations.

Keywords: molecular dynamics; soliton; discrete breather; energy transport; energy localization

Вопросы посвященные генерации и распространению уединённых возмущений в дискретных структурах затрагиваются во многих работах [1-5]. Несмотря на явные успехи в разработке теоретических моделей для одномерных систем, в более сложных (реалистичных) структурах получить точные решения является крайне сложной задачей. Наличие же дефектов структуры или нарушение ее порядка зачастую приводит к невозможности решения аналитических уравнений динамики. В данной работе исследуются трехмерные кристаллы с упорядоченной структурой, но с наличием точечных дефектов в решетке. В первую очередь рассматривается возможность

возбуждения уединенных волн в таких моделях, а также обсуждается второй механизм распространения энергии через дискретные бризеры.

Модель представляет собой кристалл состава A_3B (рис. 1.), содержащий порядка миллиона частиц, что позволяет рассматривать поведение таких волн не только на наноуровне, но и перейти на микро масштаб. Все вычисления производились методом молекулярной динамики посредством программного пакета LAMMPS [6]. Межатомное взаимодействие описывалось потенциалами, полученными методом погруженного атома. Параметры потенциала соответствовали кристалла Pt_3Al [7,8], данная модель многократно нами апробирована и результаты получаемые в рамках нее удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными.

Механизмы возбуждения локализованных колебаний описаны, например, в работах [9, 10]. Суть заключается в периодическом воздействии на одну из границ кристалла по гармоническому закону. В зависимости от амплитуды воздействия и направления колебаний возбуждаются либо солитоны, либо дискретные кластеры дискретных бризеров. Пример распространения уединенной волны приведен так же на рисунке 1.

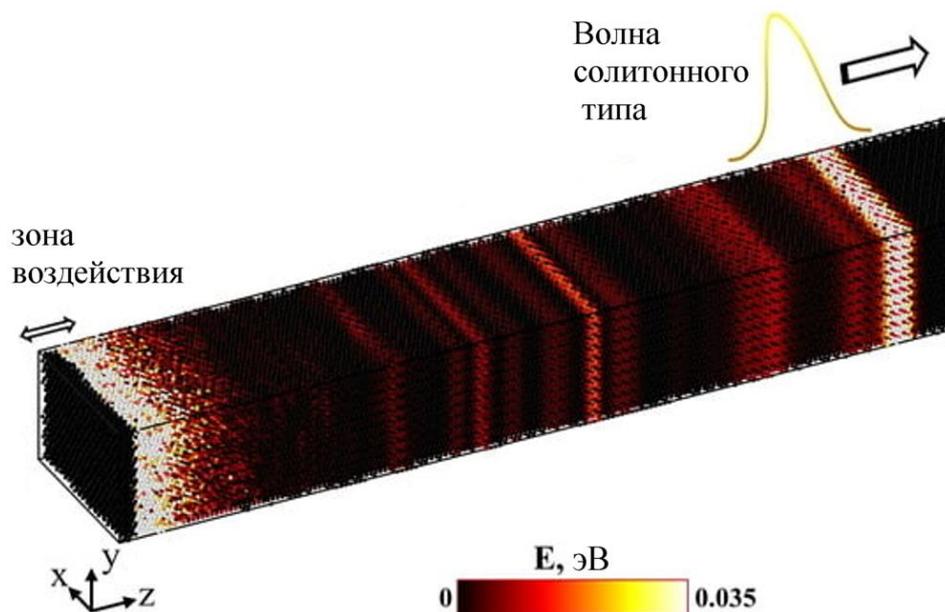


Рис. 1. Фрагмент модели кристалла с указанием области воздействия и сформированная волна

Форма волны соответствует решению уравнения \sin -Гордона вида $U(x, t) = \frac{2\alpha^2 \cosh \varepsilon^2}{1 + \alpha^2 \cosh \varepsilon^2}$, где $\varepsilon = x - Vt$, α – амплитудный множитель, x – координата, V – скорость движения солитона, t – время. Подбирая соответствующие значения параметров данного решения получен профиль уединенной волны, хорошо согласующийся с профилем полученного солитона, в кристалле Pt_3Al . Для различных направлений профиль волны

имеет особенности (рис. 2). Однако для каждого случая можно подобрать параметры функции $U(x,t)$, позволяющие описать солитон.

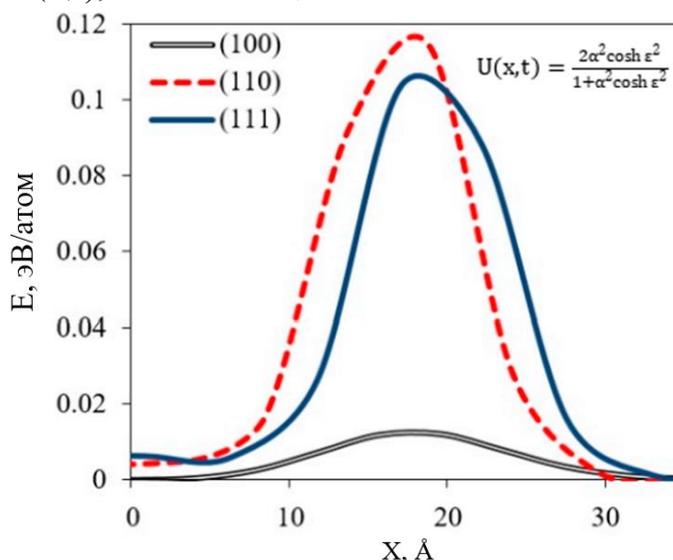


Рис. 2. Энергетический профиль волн солитонного типа в зависимости от направления распространения в кристаллах, с указанием аналитической функции, описывающей волну.

В результате показано, что локализованные возмущения в кристаллах могут распространяться в виде волн солитонного типа или посредством последовательного возбуждения цепочек дискретных бризеров (кластеров дискретных бризеров). Рассчитанные энергетические характеристики показывают, что концентрированная энергия на атомах может достигать нескольких эВ, в зависимости от типа возмущения.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-22-20038 (<https://rscf.ru/project/24-2220038/>) и гранта Санкт-Петербургского научного фонда № 24-22-20038. Часть результатов работы была получена с использованием вычислительных ресурсов суперкомпьютерного центра Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого (www.scc.spbstu.ru).

СПИСОК ИСТОЧНИКОВ

1. Geniet F. Energy transmission in the forbidden band gap of a nonlinear chain/ Geniet F., Leon, J.// Phys. Rev. Lett. 2002, V. 89, P. 134102. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.89.134102>.
2. Caputo J.-G. Nonlinear energy transmission in the gap / Caputo J.-G., Leon, J.S.// Phys. Lett. A. 2001. V. 283. P. 129–135. [https://doi.org/10.1016/S0375-9601\(01\)00192-X](https://doi.org/10.1016/S0375-9601(01)00192-X).
3. Shepelev I.A. Supersonic voidions in 2D Morse lattice / Shepelev I.A. [et al.]// Chaos Solitons Fractals. 2020. V. 140. P. 110217. <https://doi.org/10.1016/j.chaos.2020.110217>.
4. Chechin G.M. Quasibreathers as a generalization of the concept of discrete breathers / Chechin G.M., Dzhelauhova G.S., Mehonoshina E.A. // Phys. Rev. E. 2006, V. 74, P. 036608. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.74.036608>.

5. Manley M.E. Impact of intrinsic localized modes of atomic motion on materials properties // *Acta Mater.* 2010, V. 58, P. 2926–2935. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2010.01.021>.
6. Plimpton S. Fast parallel algorithms for short-range molecular-dynamics // *J Comput Phys.* 1995. V. 117. P. 1–19. <https://doi.org/10.1006/jcph.1995.1039>.
7. Чередниченко А.И. Анализ eam и meam потенциалов для моделирования локализованных состояний кристаллов Ni3Al и Pt3Al/ Чередниченко А.И. [и др.]// *Фундаментальные проблемы современного материаловедения.* 2021. Т. 18(2). С. 188–195. <https://doi.org/10.25712/ASTU.1811-1416.2021.02.006>
8. Zhou X.W. Misfit-energy-increasing dislocations in vapordeposited CoFe/NiFe multilayers / Zhou X.W., Johnson R.A., Wadley H N.G. // *Physical Review B.* 2004. V. 69. P. 144113. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.69.144113>.
9. Захаров П.В. Эффект нелинейной супратрансмиссии в дискретных структурах: обзор // *Компьютерные исследования и моделирование.* 2023. Т. 15(3). С. 599-617. <https://doi.org/10.20537/2076-7633-2023-15-3-599-617>.
10. Zakharov P.V. The Influence of Crystal Anisotropy on the Characteristics of Solitary Waves in the Nonlinear Supratransmission Effect: Molecular Dynamic Modeling / Zakharov P.V. [et al.] // *Computation.* 2023. V. 11(10). P. 193. <https://doi.org/10.3390/computation11100193>

REFERENCES

1. Geniet F. Energy transmission in the forbidden band gap of a nonlinear chain/ Geniet F., Leon, J.// *Phys. Rev. Lett.* 2002, V. 89, P. 134102. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.89.134102>.
2. Caputo J.-G. Nonlinear energy transmission in the gap / Caputo J.-G., Leon, J.S.// *Phys. Lett. A.* 2001. V. 283. P. 129–135. [https://doi.org/10.1016/S0375-9601\(01\)00192-X](https://doi.org/10.1016/S0375-9601(01)00192-X).
3. Shepelev I.A. Supersonic voidions in 2D Morse lattice / Shepelev I.A. [et al.]// *Chaos Solitons Fractals.* 2020. V. 140. P. 110217. <https://doi.org/10.1016/j.chaos.2020.110217>.
4. Chechin G.M. Quasibreathers as a generalization of the concept of discrete breathers / Chechin G.M., Dzhelauhova G.S., Mehonoshina E.A. // *Phys. Rev. E.* 2006, V. 74, P. 036608. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.74.036608>.
5. Manley M.E. Impact of intrinsic localized modes of atomic motion on materials properties // *Acta Mater.* 2010, V. 58, P. 2926–2935. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2010.01.021>.
6. Plimpton S. Fast parallel algorithms for short-range molecular-dynamics // *J Comput Phys.* 1995. V. 117. P. 1–19. <https://doi.org/10.1006/jcph.1995.1039>.
7. Cherednichenko A.I. Analysis of eam and meam potentials for modeling localized states of Ni3Al and Pt3Al crystals/ Cherednichenko A.I. [et al.]// *Fundamental problems of modern materials science.* 2021. V. 18(2). P. 188–195. <https://doi.org/10.25712/ASTU.1811-1416.2021.02.006>

8. Zhou X.W. Misfit-energy-increasing dislocations in vapordeposited CoFe/NiFe multilayers / Zhou X.W., Johnson R.A., Wadley H N.G. // *Physical Review B*. 2004. V. 69. P. 144113. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.69.144113>.
9. Zaharov P.V. The effect of nonlinear supratransmission in discrete structures: a review // *Computer Research and Modeling*. 2023. V. 15(3). P. 599-617. <https://doi.org/10.20537/2076-7633-2023-15-3-599-617>.
10. Zakharov P.V. The Influence of Crystal Anisotropy on the Characteristics of Solitary Waves in the Nonlinear Supratransmission Effect: Molecular Dynamic Modeling / Zakharov P.V. [et al.] // *Computation*. 2023. V. 11(10). P. 193. <https://doi.org/10.3390/computation11100193>