

П. В. Захаров^{1,2*}, И. С. Луценко¹, С. В. Фенский¹

¹ Алтайский государственный гуманитарно-педагогический университет имени В. М. Шукшина, г. Бийск

² Алтайский государственный технический университет имени И. И. Ползунова, г. Барнаул

*zakharovpvl@rambler.ru

ВОЗБУЖДЕНИЕ ВОЛН СОЛИТОННОГО ТИПА ДИСКРЕТНЫМИ БРИЗЕРАМИ

В работе методом молекулярной динамики изучается возможность возбуждения волн солитонного типа вблизи поверхности кристалла, а также их распространение вглубь кристалла. В качестве рассматриваемого материала выбрано интерметаллическое соединение Pt_3Al , поддерживающее существование дискретных бризеров с мягким типом нелинейности. Показана роль дискретных бризеров в формировании уединенных волн, изучено их распространение по кристаллу.

Ключевые слова: дискретный бризер, солитон, метод молекулярной динамики, нелинейность, колебания решетки.

P. V. Zakharov, I. S. Lucenko, S. V. Fenskii

EXCITATION OF WAVES OF SOLITONE TYPE BY DISCRETE BREATHERS

In this paper, by the method of molecular dynamics studies the possibility of exciting soliton-type waves near the surface of a crystal, as well as their propagation deep into the crystal. The intermetallic compound Pt_3Al , which supports the existence of discrete breathers with a soft type of nonlinearity, was chosen as the material under consideration. The role of discrete breathers in the formation of solitary waves is shown, their propagation through the crystal is studied.

Key words: discrete breather, soliton, molecular dynamics method, nonlinearity, lattice vibrations.

Потоки энергии от поверхности кристаллов оказывают влияние на структурные и энергетические трансформации материалов, обеспечивая модификацию приповерхностных слоев вещества. В данной работе нами рассмотрен эффект передачи энергии при периодическом воздействии на поверхность кристалла стехиометрического состава

ва A_3B , имеющего запрещенную зону в фононном спектре кристалла. Эффект передачи энергии на частотах вне фононного спектра кристалла был назван нелинейной супратрансмиссией [1]. Интерес к данному эффекту не угасает как для относительно простых нелинейных систем [2], так и для более сложных систем и материалов [3–5]. В классическом подходе к супратрансмиссии имеется начальная величина амплитуды, при которой возникает данный эффект. Однако в работе [3] на примере деформированного графена показана возможность транспорта энергии посредством нелинейной супратрансмиссии без ограничений по минимальному значению амплитуды воздействия. Этим обосновано исследование данного эффекта для различных кристаллов и поиск механизмов передачи энергии в нелинейных системах. Рассматриваемый механизм обусловлен возбуждением нелинейных локализованных мод большой амплитуды вблизи зоны воздействия — дискретных бризеров. Строго говоря, такие объекты следует называть квазibriзерами [6–9] в силу того, что они имеют конечное время жизни и нестрогую периодичность по времени. К тому же остается неясной роль таких объектов в передаче энергии от поверхности кристалла вглубь.

Рассматриваемая нами модель представляет собой объемный ГЦК-кристалл Pt_3Al , содержащий $3 \cdot 10^5$ частиц, взаимодействующих посредством потенциала, полученного методом погруженного атома (ЕАМ-потенциал) [10]. Моделирование осуществлялось с помощью пакета LAMMPS [11].

Полная энергия E кристалла может быть выражена как $E = \frac{1}{2} \sum_{i,j,i \neq j} \phi_{ij}(r_{ij}) + \sum_i F_i(\rho_i)$, где ϕ_{ij} представляет парную энергию между атомами i и j , отделенными друг от друга расстоянием r_{ij} , а F_i — энергия вложения, связанная с вложенным атомом i в локальном местоположении с электронной плотностью ρ_i . Электронную плотность можно рассчитать по формуле $\rho_i = \sum_{j,j \neq i} f_j(r_{ij})$, где $f_j(r_{ij})$ — электронная плотность на участке атома i , находящегося на расстоянии r_{ij} от атома j .

В рассматриваемой модели вдоль осей X , Y накладывались периодические граничные условия, вдоль оси Z — свободные. Процесс моделирования состоял из подготовительного этапа моделирования и разбиения ячейки на блоки. Верхний блок представлял собой 3–4 слоя атомов, которые осуществляли колебания по гармоническому закону в соответствии с диапазонами частот и амплитуд колебаний атомов. Далее находился блок — поглотитель энергии, по которому происходило оценивание поглощенной кристаллом энергии. В самой нижней части

расчетной ячейки выделялся блок из 4–5 слоев атомов, жестко зафиксированных, выполняющих роль демпфера. Это обеспечивало отсутствие движения всей модели кристалла Pt₃Al.

Периодическое воздействие осуществлялось по гармоническому закону $z(t) = A \sin(\omega t)$ по оси Z с частотами, близкими собственным частотам бризеров (6–8 ТГц), а также с амплитудами от 0,2 до 0,3 Å. Такой диапазон позволяет охватить наиболее активную часть возбуждения дискретных бризеров.

В итоге воздействия возбуждались дискретные бризеры вблизи поверхности кристалла, которые, в свою очередь, порождали уединенные волны, способные перемещаться по кристаллу. Такая уединенная волна, имеющая колоколообразный вид (рис. 1), является солитоном, т. к. она нелинейная, распространяется с постоянной скоростью и при столкновении с другими волнами не взаимодействует с ними.

В теории уединенных волн в твердых телах [12] известно решение уравнения синус-Гордона вида

$$U(x,t) = \frac{2\alpha^2 \cosh \varepsilon^2}{1 + \alpha^2 \cosh \varepsilon^2}, \quad (1)$$

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 солитона в кристалле Pt₃Al (рис. 1).

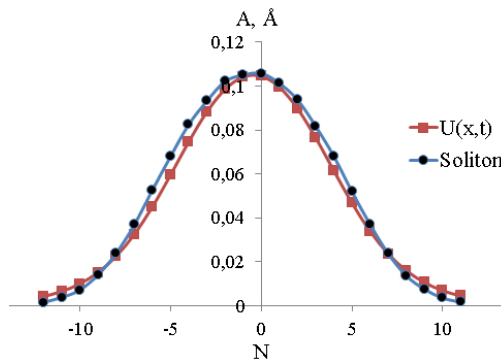


Рис. 1. Профиль солитона в Pt₃Al и профиль, описываемый функцией (1).
Вдоль вертикальной оси отложена амплитуда, по горизонтальной — номер атома в ряду

Данные уединенные волны способны распространяться на сотни нанометров вглубь кристалла без изменения формы и скорости. При этом

на каждом ряду атомов может быть сосредоточено порядка 2 эВ энергии. Совокупный объем энергии, переносимый волной, определяется количеством рядов атомов, вовлеченных в колебания. Таким образом, данный механизм транспорта энергии по кристаллу посредством уединенных волн видится одним из наиболее эффективных, а механизм генерации таких волн относительно прост.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект № 16-12-10175

ЛИТЕРАТУРА

- 1 Geniet F., Leon J. Energy Transmission in the Forbidden Band Gap of a Nonlinear Chain // Phys. Rev. Lett. 2002. V. 89. 134102.
- 2 Khomeriki R., Lepri S., Ruffo S. Nonlinear supratransmission and bistability in the Fermi-Pasta-Ulam model // Phys. Rev. E, Stat. Nonlin. Soft Matter Phys. 2004. V. 70 (6 Pt2). 066626.
- 3 Energy transfer in strained graphene assisted by discrete breathers excited by external ac driving / I. Evazzade [et al.] // Physical Review B. 2017. V. 95 (3). 035423.
- 4 Yousefzadeh B., Srikantha Phani A. Supratransmission in a Disordered Nonlinear Periodic Structure. arXiv:1510.00058.
- 5 Leon J. Nonlinear supratransmission as a fundamental instability // Physics Letters A. 2003. V. 319. P. 130–136
- 6 Chechin G. M., Dzhelauhova G. S., Mehonoshina E. A. Quasibreathers as a generalization of the concept of discrete breathers // Physical Review E. 2006. V. 74. 036608.
- 7 Поведение нелинейной локализованной моды вблизи комплексов вакансий в кристалле Pt₃Al / П. В. Захаров [и др.] // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2014. Т. 11. № 2. С. 260–264.
- 8 Возбуждение щелевых дискретных бризеров в кристалле состава A₃B потоком частиц / П. В. Захаров [и др.] // Физика твердого тела. 2017. Т. 59. № 2. С. 217–222.
- 9 Динамика дискретных бризеров в кристалле Pt₃Al / М. Д. Старостенков [и др.] // Известия высших учебных заведений. Физика. 2015. Т. 58. № 9. С. 136–140.
- 10 Zhou X. W., Johnson R. A., Wadley H. N. G. Misfit-energy-increasing dislocations in vapor-deposited CoFe / NiFe multilayers // Physical Review B. 2004. V. 69. 144113.
- 11 LAMMPS Molecular Dynamics Simulator [Электронный ресурс] : [официальный сайт]. URL: <http://lammps.sandia.gov/>
- 12 Аэро Э. Л., Булыгин А. Н. Теория нелинейных волн в твердых телах, испытывающих кардинальную перестройку кристаллической структуры // Вычислительная механика сплошных сред. 2009. Т. 2. № 4. С. 19–43.