На правах рукописи

Семёнов Александр Сергеевич

Дискретные бризеры с жестким типом нелинейности в двумерных и трехмерных кристаллах

01.04.07 – физика конденсированного состояния

Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Барнаул – 2015

Работа выполнена в Политехническом институте (филиале) ФГАОУ ВПО «Северо-Восточный федеральный университет имени М.К. Аммосова» в г. Мирном.

Научный руководитель: доктор физико-математических наук, профессор, **Дмитриев Сергей Владимирович**

Официальные оппоненты: **Потекаев Александр Иванович**, доктор физико-математических наук, профессор, ОСП «Сибирский физико-технический институт имени академика В.Д. Кузнецова Томского государственного университета», директор

Захаров Павел Васильевич, кандидат физико-математических наук, ФГБОУ ВПО «Алтайская государственная академия образования имени В.М. Шукшина», доцент кафедры физики и информатики

Ведущая организация: ФГБОУ ВПО «Саратовский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского», г. Саратов

Защита состоится « 27 » мая 2015 г. в 12^{00} часов на заседании диссертационного совета Д 212.004.04 при Алтайском государственном техническом университете им. И.И. Ползунова по адресу: 656038, г. Барнаул, пр. Ленина, 46., **e-mail: veronika_65@mail.ru.**

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке и на сайте Алтайского государственного технического университета им. И.И. Ползунова. http://www.altstu.ru/structure/unit/odia/scienceevent/2414/

Автореферат разослан «____» _____ 2015 г.

Ученый секретарь диссертационного совета, кандидат физико-математических наук, доцент Романенко В.В.

Примечание: отзывы на автореферат, заверенные гербовой печатью организаций, просим присылать **в 2-х экз.** на адрес университета и e-mail: veronika_65@mail.ru

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность проблемы и степень ее разработанности. Изучение колебаний кристаллической решетки составляет одну из основ физики конденсированного состояния. Относительно недавно теоретически и экспериментально было показано, что учение о малоамплитудных линейных колебаниях [1-3] может быть дополнено и расширено концепцией дискретных бризеров (ДБ) [4,5], представляющих собой нелинейные, пространственно локализованные колебательные моды большой амплитуды в бездефектном кристалле. На сегодняшний день установлено, что многие нелинейные дискретные системы поддерживают существование ДБ. В классических работах по изучению ДБ рассматривались модельные дискретные системы низкой размерности с простейшими видами ангармонизмов в межчастичных взаимодействиях [6] и были развиты аналитические и полуаналитические методы построения бризерных решений, изучены их основные свойства. Переход к изучению ДБ в реальных кристаллах потребовал существенного уточнения и усложнения рассматриваемых моделей и решения ряда новых задач, специфических для физики конденсированного состояния. Во-первых, большинство природных кристаллов трехмерны. Во-вторых, межатомные силы чаще всего являются дальнодействующими, и приближение ближайших взаимодействий, использовавшееся в подавляющем числе пионерских работ по ДБ, перестает работать. В-третьих, межатомные потенциалы, при учете дальнодействия, не могут быть сведены к простым ангармонизмам в виде отрезков ряда Тейлора; они должны описываться достаточно сложными функциями и для ряда материалов, например, для металлов, важен учет многочастичных эффектов. В идеале, ДБ в кристаллах должны изучаться на основе первопринципных расчетов, учитывающих электронную структуру вещества. Среди новых задач отметим важность изучения взаимодействия ДБ с дефектами кристаллической структуры, а также необходимость рассмотрения связанных задач, когда учитывается взаимодействие решеточных колебаний с электронной и/или магнитной подсистемой.

Первые сообщения о ДБ в кристаллах, основанные на молекулярно-динамических расчетах, касались щелочно-галоидного кристалла NaI [7], ковалентных кристаллов кремния и германия [8], упорядоченных сплавов [9], и лишь недавно появились работы по ДБ в чистых металлах, ГЦК Ni и ОЦК Nb [10].

ДБ в NaI и упорядоченных сплавах имеют частоты в щели фононного спектра, убывающие с ростом амплитуды ДБ, что принято называть *мягким типом нелинейности*. Фононные спектры Si, Ge и чистых металлов не имеют щели, и поддерживают лишь ДБ с частотами

выше фононного спектра, возрастающими с увеличением амплитуды ДБ, то есть, с *жестким типом нелинейности*.

Первое экспериментальное доказательство существования ДБ в кристаллах было получено методом неупругого рассеяния нейтронов, когда в колебательном спектре кристаллической решетки NaI при температуре 555 K был обнаружен пик, свидетельствующий, по мнению авторов, о возбуждении ДБ в условиях теплового равновесия [11]. В ряде работ показано, что ДБ и другие движущиеся локализованные состояния могут способствовать транспорту электронов [12,13]. Отметим, что экспериментальное наблюдение ДБ в кристаллах остается весьма сложной задачей [14], поэтому трудно переоценить роль компьютерного моделирования в изучении ДБ в кристаллах.

Введение концепции квазибризера [15] стало еще одним важным шагом на пути от теории к практическому знанию. Действительно, в реальных физических системах, где присутствуют различного рода возмущения, более естественно говорить не о строго периодических колебательных модах, а о квазибризерах, имеющих конечное, но достаточно большое время жизни. В настоящей работе рассматриваются квазибризеры, но для краткости они будут именоваться ДБ.

Несмотря на существующие теоретические и экспериментальные доказательства существования ДБ в бездефектных кристаллических твердых телах, роль ДБ в физике конденсированного состояния остается не понятой. Особенно слабо изученными являются ДБ в чистых металлах. Например, в металлах с ГПУ решеткой ДБ до сих пор вообще не изучались. Это связано с тем, что в отличие от ДБ в NaI, Si и Ge, ДБ с жестким типом нелинейности в чистых металлах сравнительно слабо локализованы и их возбуждение в молекулярно-динамических расчетах представляет собой более сложную задачу. В свете сказанного, представляется весьма ***актуальным*** изучение свойств дискретных бризеров с жестким типом нелинейности в двумерных и трехмерных кристаллах, включая ГПУ металлы. Настоящая диссертационная работа посвящена решению этой задачи.

Для данного исследования были выбраны двумерные и трехмерные кристаллы с парным межатомным взаимодействием Морзе и ГПУ металлы Ti, Co и Mg с межатомными взаимодействиями, описываемыми многочастичными потенциалами, полученными по методу погруженного атома (EAM-потенциалы). Потенциал Морзе был взят как классический парный потенциал, использовавшийся до нас в огромном числе работ по изучению нелинейной динамики кристаллической решетки. ГПУ металлы выбраны потому, что для них, как уже упоминалось, исследования ДБ не проводились.

Таким образом, ***целью*** данного диссертационного исследования было изучение условий существования, способов возбуждения и свойств дискретных бризеров с жестким типом нелинейности в двумерных и трехмерных кристаллах, включая ГПУ металлы.

Для достижения данной цели решались следующие задачи:

1. Формулировка молекулярно-динамических моделей двумерных и трехмерных кристаллов с хорошо апробированными межатомными потенциалами для изучения дискретных бризеров.
2. Расчет плотностей фононных состояний двумерных и трехмерных кристаллов.
3. Поиск начальных условий для возбуждения щелевых дискретных бризеров с жестким типом нелинейности.
4. Изучение свойств дискретных бризеров в рассматриваемых материалах.
5. Изучение взаимодействия движущихся дискретных бризеров друг с другом и с вакансией.

Научная новизна данной работы состоит в следующем.

1. Впервые методом молекулярной динамики показана возможность существования *движущихся* ДБ в ГПУ металлах Ti, Co и Mg, рассчитаны их частоты, скорости движения, изучены столкновения между ними и установлено, что при столкновениях возможен обмен энергией между ДБ.
2. Впервые изучено взаимодействие ДБ с вакансией в двумерном кристалле Морзе и показано, что в промежуток времени, когда осуществляется взаимодействие (порядка 100 атомных колебаний), ДБ понижает энергетический барьер миграции вакансии. Таким образом, впервые показано, что ДБ могут вносить вклад в диффузию в кристаллах, понижая энергетический барьер миграции вакансии.

Практическая ценность работы заключается в расширении наших представлений об условиях существования, свойствах и механизмах взаимодействия ДБ в с жестким типом нелинейности в модельных кристаллах с морзевским взаимодействием и в чистых ГПУ металлах Ti, Co и Mg. Показано путем численного эксперимента, что ДБ понижают энергетический барьер миграции вакансии, внося определенный вклад в самодиффузию. Представляется практически важным установление возможности обмена энергией между сталкивающимися ДБ с жестким типом нелинейности, поскольку обмен энергией приводит к энергетической накачке одного из ДБ.

Методы исследования ДБ в настоящей работе - это метод молекулярной динамики (МД) и расчет фононных спектров кристаллов при нулевой температуре.

На защиту выносятся следующие положения:

1. Математические модели двумерных и трехмерных кристаллов, разработанные для исследования свойств дискретных бризеров с жестким типом нелинейности.
2. Моноатомные 2D и 3D кристаллы Морзе, а также ГПУ металлы Ti, Co и Mg поддерживают движущиеся дискретные бризеры, локализованные примерно на десятке атомов в одном плотноупакованном атомном ряду. Частоты дискретных бризеров лежат выше фононного спектра и растут с ростом амплитуды.
3. Дискретные бризеры в изученных кристаллах могут обмениваться энергией при столкновениях.
4. Дискретные бризеры при взаимодействии с вакансией понижают энергетический барьер ее миграции.

Апробация работы. Основные результаты работы докладывались на следующих научных конференциях: Всероссийская научно-практическая конференция молодых ученых, аспирантов и студентов «Современное состояние и проблемы естественных наук» (Юрга, 2014 г.); Научно-практическая конференция студентов, аспирантов и молодых ученых-физиков и межрегиональная школа-конференция «Теоретические и экспериментальные исследования в конденсированных средах» (Уфа, 2014 г.); XI Российская ежегодная конференция молодых научных сотрудников и аспирантов «Физико-химия и технология неорганических материалов» (Москва, 2014 г.); Открытая школа-конференция стран СНГ «Ультрамелкозернистые и наноструктурные материалы» (Уфа, 2014 г.); Международная школа-конференция студентов, аспирантов и молодых ученых «Фундаментальная математика и её приложения в естествознании» (Уфа, 2014 г.); II Всероссийская конференция «Нелинейные и резонансные явления в конденсированных средах» (Уфа, 2014 г.); Международной конференции «Физика конденсированного состояния дефектных структур», (Барнаул, 2014 г.); Всероссийская конференция «Актуальные вопросы науки и образования» (Уфа, 2014 г.).

Публикации. Результаты исследований опубликованы в 10 печатных работах, из них 8 статей в журналах из списка ВАК, 2 работы в журналах, индексируемых в Web of Science и Scopus.

Личный вклад автора. Все численные результаты, вошедшие в диссертационную работу, были получены лично автором. Автор принимал непосредственное участие в постановке задач, обсуждении результатов моделирования, подготовке рукописей статей и докладов на научных конференциях.

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения, одного приложения и списка литературы из 101 наименования. Работа изложена на 129 страницах машинописного текста, содержит 47 рисунков.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснована актуальность изучаемой проблемы, сформулированы основные цели и задачи исследования, описаны научная новизна и практическая ценность диссертационной работы, а также представлены основные положения, выносимые на защиту.

В первой главе дан обзор теоретических и экспериментальных работ по дискретным бризерам в различных нелинейных системах, с упором на анализ достижений по изучению дискретных бризеров в кристаллах. В деталях обсуждаются отличия между щелевыми дискретными бризерами и дискретными бризерами с жестким типом нелинейности. В конце главы перечислены нерешенные проблемы, а также сформулированы основные цели и задачи диссертационного исследования.

Во второй главе диссертации показана возможность возбуждения ДБ в 2D и 3D кристаллах (см. рис. 1) с парными межатомными потенциалами Морзе:

$$U(r) = D(e^{-2\alpha(r-r_m)} - 2e^{-\alpha(r-r_m)}), \qquad (1)$$

где r - расстояние между парой атомов, D, α, r_m - параметры потенциала. Функция $U(r)$ имеет минимум при $r=r_m$, глубина минимума (энергия разрыва связи) равна D, а параметр α определяет жесткость межатомной связи. Без потери общности можно положить r_m=1 и D=1, выбрав соответствующие единицы измерения расстояния и энергии. Остается один существенный параметр потенциала, α, влияющий на относительную жесткость кристалла. Массу атомов можно положить единичной, выбрав соответствующим образом единицу измерения времени.

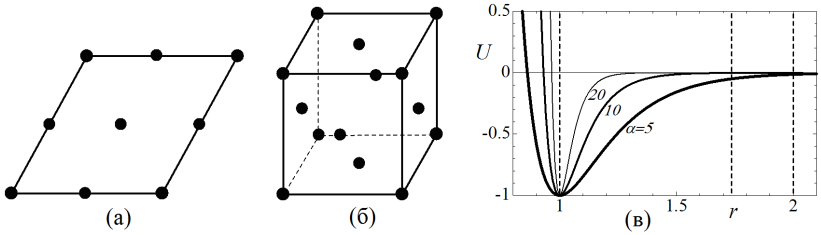

Рис. 1. Структура (а) двумерного плотноупакованного кристалла и (б) трехмерного ГЦК кристалла. (в) Межатомный потенциал Морзе (1) для трех значений параметра α={5;10;20}.

Расчетная ячейка, с наложенными периодическими граничными условиями, содержала в трехмерном случае 32×32×16 и в двумерном случае 80×80 атомов. Уравнения движения атомов, представляющие

собой классические уравнения движения Ньютона, интегрировались методом Штормера шестого порядка точности.

Начальные условия для неподвижного ДБ задавались следующим образом

$$x_n^0 = T_n + S_n, \qquad \dot{x}_n^0 = 0, \qquad y_n^0 = 0, \qquad \dot{y}_n^0 = 0, \tag{2}$$

где x_n^0, y_n^0 и $\dot{x}_n^0$, $\dot{y}_n^0$ - компоненты векторов начальных перемещений и начальных скоростей n-ых атомов выбранного плотноупакованного ряда кристалла. Все остальные атомы кристалла имели нулевые начальные перемещения и начальные скорости. Функции T_n и S_n в (2) описывают амплитуды колебания и смещения центров колебания атомов, соответственно. То есть, T_n =($x_{n,max}$ - $x_{n,min}$)/2, S_n =($x_{n,max}$ + $x_{n,min}$)/2, где $x_{n,max}$ и $x_{n,min}$ - это максимальное и минимальное значение (квази)периодической функции $x_n(t)$, описывающей движение n-го атома. Данные функции имели вид

$$T_n = \frac{(-1)^n A}{\cosh\left[\beta\left(n - x_0\right)\right]}, \qquad S_n = \frac{-B\left(n - x_0\right)}{\cosh\left[\gamma\left(n - x_0\right)\right]}, \tag{3}$$

где параметр A определяет амплитуду ДБ, параметр B определяет амплитуду смещений центров колебаний атомов, параметры $\beta=\gamma$ задают степень пространственной локализации ДБ, а x_0 - его начальное положение. При x_0=0 имеем ДБ центрированный на атоме, а при x_0=1/2 посередине между двумя соседними атомами.

Для задания движущегося ДБ использовался анзац

$$x_n\left(t\right) = T_n \cos\left[\omega t + \varphi_0 + \delta\left(n - x_0\right)\right] + S_n, \tag{4}$$

где ω - частота, лежащая выше фононного спектра кристалла, φ_0 - начальная фаза колебаний, δ - параметр, определяющий разность фаз колебаний соседних атомов, значения x_n^0 определены в (2), (3).

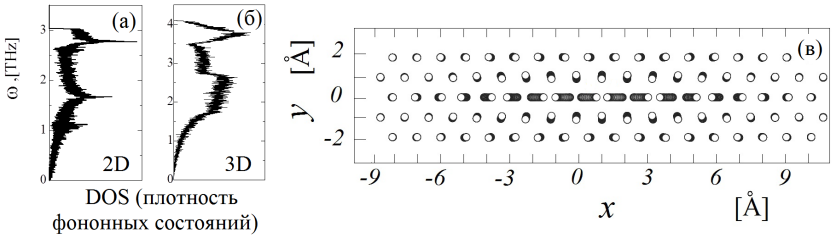

Рис. 2. Плотности фононных состояний (а) двумерного кристалла, (б) трехмерного кристалла Морзе. (в) Стробоскопическое представление движения атомов ДБ с жестким типом нелинейности, возбужденного в плотноупакованном ряду двумерного кристалла. Смещения атомов из положения равновесия увеличены в четыре раза.

На рис. 2, (а) и (б) представлены плотности фононных состояний рассматриваемого двумерного и трехмерного кристаллов, соответственно. В обоих случаях наблюдается сплошной фононный спектр. В таких кристаллах возможно наличие ДБ только с жестким типом нелинейности, то есть, с частотами выше фононного спектра кристалла. Для двумерного кристалла верхняя граница фононного спектра составляет 3.03 THz, для трехмерного 4.08 THz.

Пример ДБ с жестким типом нелинейности в моноатомном двумерном кристалле приведен на рис. 2 (в). Данная стробоскопическая картина, показывает положения атомов в различные моменты времени. Отклонение атомов от решеточных положений увеличены в четыре раза. Бризер локализован примерно на одном десятке атомов, расположенных в одном плотноупакованном атомном ряду, и каждый атом совершает колебания в противофазе с ближайшими соседями на частоте выше фононного спектра.

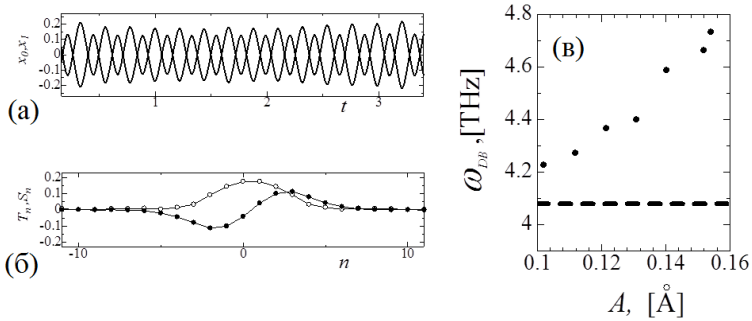

Рис. 3. Пример неподвижного ДБ, возбужденного при помощи анзаца (2), (3) в плотноупакованном ряду трехмерного кристалла. Параметры анзаца представлены в тексте. (а) - Перемещения двух цетральных атомов ДБ как функция времени. (б) – Амплитуды T_n и смещения от решеточных положений S_n для атомов плотноупакованного ряда, где возбужден ДБ. (в) Зависимость частоты от амплитуды для ДБ в трехмерном кристалле. Горизонтальная пунктирная линия показывает положение верхней границы фононного спектра.

На рис. 3. показан пример неподвижного ДБ, возбужденного при помощи анзаца (2), (3) в плотноупакованном ряду трехмерного кристалла Морзе. Параметры анзаца следующие: A= 0.21, B = 0.07, β=γ=0.6, x_0 = 1/2. На (а) представлены зависимости $x_0(t)$ и $x_1(t)$ двух цетральных атомов ДБ, на (б) – функциями T_n и S_n, соответственно, представлены амплитуды и смещения от решеточных положений для атомов плотноупакованного ряда, где возбужден ДБ. (в) Зависимость частоты от амплитуды для ДБ в трехмерном кристалле. Горизонтальная пунктирная линия показывает

положение верхней границы фононного спектра. Видно, что частота ДБ лежит выше фононного спектра и увеличивается с ростом амплитуды ДБ. Аналогичные результаты были получены и для ДБ в 2D кристалле Морзе.

Итак, в главе показано, что в моноатомных 2D и 3D кристаллах Морзе существуют подвижные дискретные бризеры с жестким типом нелинейности. ДБ локализованы примерно на одном десятке атомов, расположенных в одном плотноупакованном атомном ряду, и каждый атом совершает колебания в противофазе с ближайшими соседями на частоте выше фононного спектра. Частота ДБ растет с увеличением амплитуды, выявляя жесткий тип нелинейности ДБ.

В третьей главе рассматриваются движущиеся ДБ в 2D и 3D кристаллах Морзе, исследуются их взаимодействия друг с другом и с вакансией.

Пример ДБ движущегося в двумерном кристалле приведен на рис. 4. Функции (а) T_n и (б) S_n даны с интервалом Δt=5 пс. ДБ движется слева направо. Параметры анзаца (2)-(4), использовавшегося для задания начальных условий в двумерном кристалле: A= 0.108, B = 0.013, β=γ=0.27, ω=3.6, x_0 = 1/2, φ_0=0.1π, δ=0.04π. ДБ движется, сохраняя свой профиль и амплитуду и способен преодолевать расстояния в сотни и тысячи межатомных расстояний, излучая свою энергию весьма медленно в виде малоамплитудных фононов. Аналогичные результаты были получены для ДБ в 3D кристалле Морзе.

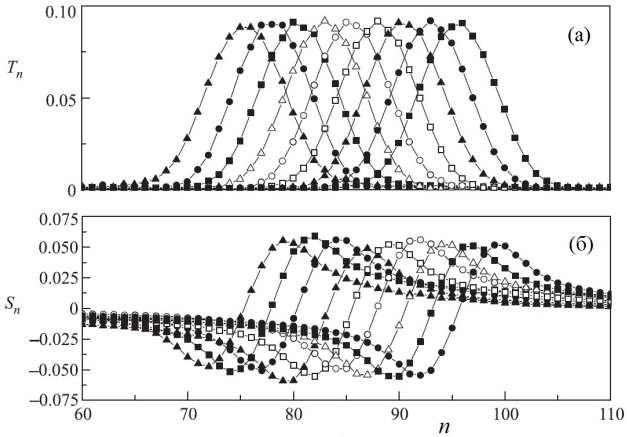

Рис. 4. Пример движущегося ДБ, возбужденного в двумерном кристалле Морзе при помощи анзаца (2)-(4). Параметры анзаца даны в тексте. Функции (а) T_n и (б) S_n приведены с интервалом Δt=5 пс. ДБ движется слева направо, сохраняя свой профиль и амплитуду и способен преодолевать расстояния в сотни и тысячи межатомных расстояний.

На рис. 5 отображены результаты исследования столкновения движущихся ДБ в 2D кристалле Морзе. Рассмотрены случаи встречного движения ДБ в одном плотноупакованном ряду, а также когда ДБ движутся в параллельных несовпадающих рядах навстречу друг другу. Из представленных на рис. 5 результатов видно следующее. Слева: столкновение ДБ в одном и том же плотноупакованном ряду двумерного кристалла приводит к образованию одного ДБ с амплитудой больше чем у исходных ДБ. Середина: Столкновение ДБ, движущихся в соседних плотноупакованных рядах кристалла заканчивается тем, что один ДБ исчезает, но второй приобретает часть его энергии, так что его амплитуда несколько возрастает по сравнению с исходной. Справа: столкновение ДБ, движущихся через два плотноупакованных ряда кристалла. Здесь ДБ отталкиваются друг от друга, теряя часть своей энергии.

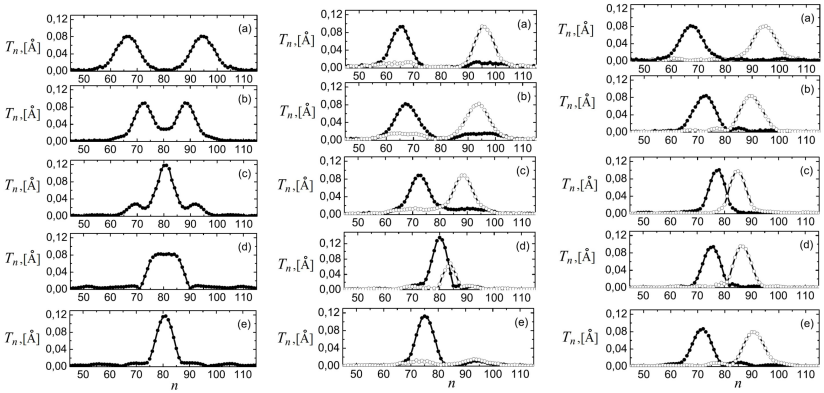

Рис. 5. Примеры столкновения ДБ в 2D морзевском кристалле. Слева: столкновение двух движущихся ДБ, возбужденных в одном и том же плотноупакованном ряду двумерного кристалла. В результате столкновения образуется один ДБ с амплитудой больше чем у исходных ДБ. Середина: Столкновение ДБ, движущихся в соседних плотноупакованных рядах кристалла. Один ДБ исчезает, но второй приобретает часть его энергии, так что его амплитуда несколько возрастает по сравнению с исходной. Справа: столкновение ДБ, движущихся через два плотноупакованных ряда кристалла. ДБ отталкиваются друг от друга, теряя часть своей энергии.

Изучим взаимодействие ДБ с вакансией в 2D кристалле Морзе. Результаты исследования показаны на рис. 6. На (а) показано, что ДБ движется слева направо и взаимодействует с вакансией. На (б) и (в) представлены два примера взаимодействия ДБ с вакансией, положение которой отмечено вертикальной пунктирной линией. На (б) скорость движения ДБ в 2 раза меньше, чем на (в). На (б) происходит практически упругое отталкивание ДБ от вакансии, а на (в) ДБ рассеивается на

вакансии. На (г), (д) дана зависимость отклонения расстояния Y (см. (а)) от равновесного значения Y_0 как функция времени, измеряемого в периодах колебаний ДБ, θ для случаев (б) и (в), соответственно. Видно, что в процессе взаимодействия ДБ с вакансией это расстояние увеличивается, что означает некоторое уменьшение энергетического барьера, связанного с миграцией вакансии. Можно сделать вывод, что ДБ могут вносить вклад в диффузию в кристаллах, понижая энергетический барьер миграции вакансии.

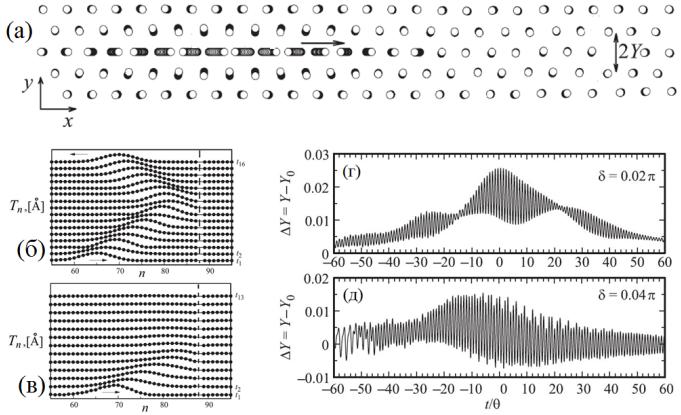

Рис. 6. (а) ДБ движется слева направо и взаимодействует с вакансией. Два примера взаимодействия ДБ с вакансией, положение которой отмечено вертикальной пунктирной линией. На (б) скорость движения ДБ в 2 раза меньше, чем на (в). На (б) происходит практически упругое отталкивание ДБ от вакансии, а на (в) ДБ рассеивается на вакансии. На (г), (д) дана зависимость отклонения расстояния Y (см. (а)) от равновесного значения Y_0 как функция времени, измеряемого в периодах колебаний ДБ, θ для случаев (б) и (в), соответственно.

Таким образом, показано, что в результате столкновения двух ДБ возможен обмен энергией между ними, в результате чего один из бризеров приобретает амплитуду большую, чем у исходных бризеров. Тем самым, установлен механизм накачки дискретных бризеров за счет обмена энергией при столкновениях.

Показано, что дискретные бризеры могут вносить вклад в диффузию в кристаллах, понижая энергетический барьер миграции вакансии в течение порядка 100 атомных колебаний, пока длится взаимодействие.

Четвертая глава посвящена изучению ДБ в ГПУ металлах Ti, Co и Mg. Для моделирования ДБ в металлах использовался известный пакет молекулярно-динамических расчетов LAMMPS, где используются хорошо апробированные многочастичные межатомные потенциалы, построенные по методу погруженного атома (EAM-потенциалы). На

рис. 7 изображена расчетная ячейка для исследования ДБ в ГПУ металлах. Серым выделен плотноупакованный ряд в котором запускался ДБ при помощи анзаца (2)-(4). Структура ДБ в ГПУ металлах аналогична той, что наблюдалась в кристаллах Морзе.

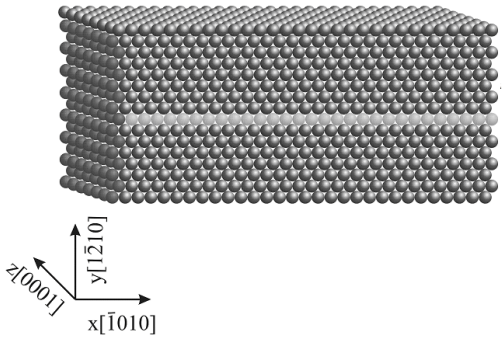

Рис. 7. Расчетная ячейка для исследования ДБ в ГПУ металлах. Серым выделен плотноупакованный ряд в котором запускался ДБ при помощи анзаца (2)-(4).

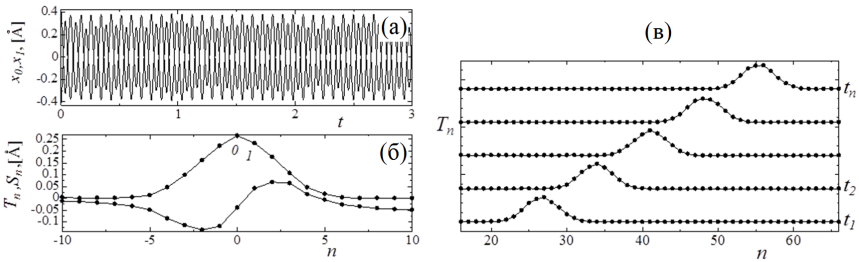

Рис. 8. ДБ в Co представлен (а) движением его двух центральных атомов с течением времени, и (б) амплитудами колебания атомов T_n и смещениями центров колебаний атомов S_n в плотноупакованном атомном ряду. (в) Движущийся ДБ в Co. Амплитуды атомов даны с интервалом в 2пс.

На рис. 8 (а), (б) дан пример неподвижного ДБ, возбужденного при помощи анзаца (2)-(4) в плотноупакованном ряду Co. Параметры анзаца A =0.3 Å, B = 0.08 Å, β = 0.5, γ = 0.6, x_0= 1/2. На (а) видны перемещения двух центральных атомов ДБ как функция времени, а на (б) амплитуды T_n и смещения от решеточных положений S_n для атомов плотноупакованного ряда, где возбужден ДБ.

На рис. 8 (в) со сдвигом по вертикали представлены функции T_n движущегося ДБ в Co для различных моментов времени с интервалом Δt=2 пс, на оси абсцисс указаны номера атомов в плотноупакованном ряду. Параметры анзаца (2)-(4), использованные для задания начальных

условий при возбуждении ДБ, следующие: A=0.3, B=0.08, β=0.5, γ=0.6, ω=3.8 THz, x_0=1/2, δ=0.1π, $\varphi_0 = \pi/2$.

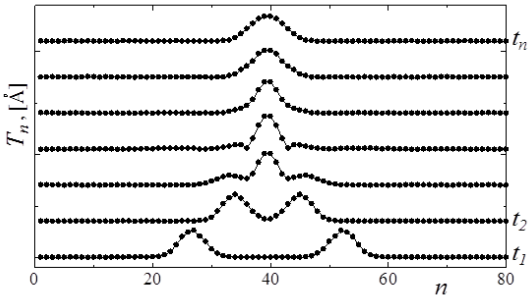

Рис. 9. Пример столкновения двух симметричных ДБ в Co. Столкновение завершается слиянием двух ДБ в покоящийся ДБ.

.

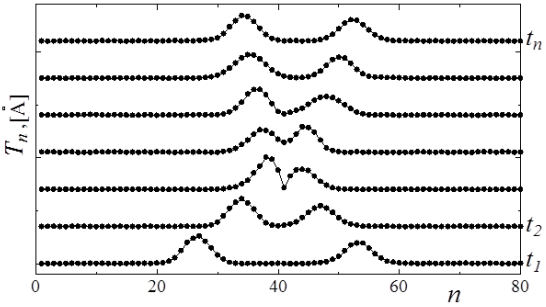

Рис. 10. Столкновение различных по амплитуде ДБ в Co. Столкновение завершается разбеганием ДБ.

На рис. 9 и рис. 10 показано как сталкиваются два ДБ в кобальте, движущиеся навстречу друг другу в одном плотноупакованном ряду. В случае столкновения симметричных ДБ (рис. 9) происходит их слияние в один покоящийся ДБ. Если амплитуды сталкивающихся ДБ различны (рис. 10), они разбегаются после взаимодействия со скоростями, отличными от начальных.

На рис. 11 приводятся выборочные результаты для ДБ в магнии. На (а) дана зависимость частоты ДБ от амплитуды. Горизонтальная прямая отмечает верхнюю границу фононного спектра магния. На (б) приведен еще один пример столкновения несимметричных ДБ, на это раз в Mg. Видно, что два ДБ сливаются в один движущийся ДБ, имеющий скорость выше, чем у сталкивающихся ДБ.

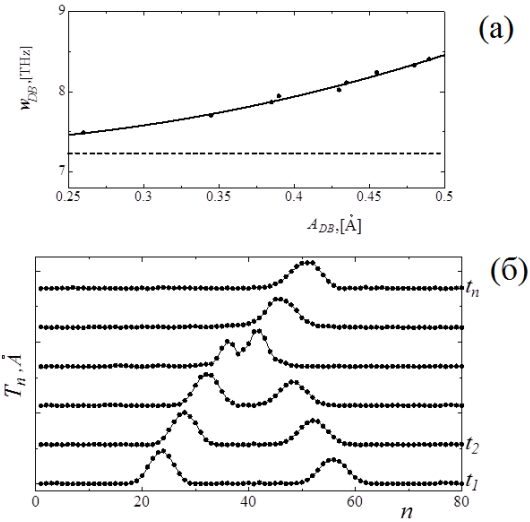

Рис. 11. (а) Зависимость частоты ДБ от амплитуды в Mg. Горизонтальная прямая дает верхнюю границу фононного спектра магния. (б) Пример столкновения несимметричных ДБ в Mg, которые сливаются в один движущийся ДБ.

В автореферате приведены лишь выборочные результаты для кобальта и магния. Отметим, что ДБ во всех трех рассмотренных ГПУ металлах имеют одинаковую структуру и демонстрируют схожие свойства, так что различие между ними количественное, но не качественное.

Таким образом, показано, что в ГПУ металлах Ti, Co и Mg, существуют подвижные дискретные бризеры с жестким типом нелинейности. При столкновении ДБ происходит обмен энергией и моментом между ними.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

- Методами атомистического моделирования, для ряда двумерных и трехмерных кристаллов, рассчитаны спектры малоамплитудных колебаний и определены некоторые свойства пространственно локализованных нелинейных колебательных мод, классифицируемых как дискретные бризеры с жестким типом нелинейности.
- Показано, что в моноатомных 2D и 3D кристаллах Морзе, а также в ГПУ металлах Ti, Co и Mg, существуют подвижные дискретные

бризеры с жестким типом нелинейности. Так же как и в ранее изученных ГЦК и ОЦК металлах, найденные дискретные бризеры локализованы примерно на одном десятке атомов, расположенных в одном плотноупакованном атомном ряду, и каждый атом совершает колебания в противофазе с ближайшими соседями на частоте выше фононного спектра.

- Установлен механизм накачки дискретных бризеров за счет обмена энергией при столкновениях. В результате столкновения двух дискретных бризеров, движущихся навстречу друг другу в одном и том же или в параллельных плотноупакованных атомных рядах, возможен обмен энергией между ними, в результате чего один из бризеров приобретает амплитуду большую, чем у исходных бризеров.
- Установлено, что дискретные бризеры могут вносить вклад в диффузию в кристаллах, понижая энергетический барьер миграции вакансии в течении порядка 100 атомных колебаний, когда длится взаимодействие.

Литература

1. Борн М., Кунь Х. Динамическая теория кристаллических решеток. – М.: Изд-во иностранной литературы, 1958. – 488 с.;
2. Марадудин А., Монтролл Э., Вейсс Дж. Динамическая теория кристаллической решетки в гармоническом приближении. – М.: Мир, 1965. – 384 с.;
3. Косевич А.М. Основы механики кристаллической решетки. – М.: Наука, 1972. – 280 с.;
4. Долгов А.С. // Физика твердого тела. – 1986. – № 6 (Т. 28). – С. 1641-1644;
5. Sievers A.J., Takeno S. Intrinsic localized modes in anharmonic crystals // Phys. Rev. Lett. – 1988. – 61, 970;
6. Flach S., Gorbach A.V.. Discrete breathers - Advances in theory and applications // Phys. Rep. – 2008. – 467 (1), 1-116;
7. Kiselev S.A., Sievers A.J.. Generation of intrinsic vibrational gap modes in three-dimensional ionic crystals // Phys. Rev. – 1997. – B 55, 5755;
8. Voulgarakis N.K., Hadjisavvas G., Kelires P.C., Tsironis G.P. Computational investigation of intrinsic localization in crystalline Si // Phys. Rev. – 2004. – B 69, 113201;
9. Medvedev N.N., Starostenkov M.D., Manley M.E. Energy localization on the Al sublattice of Pt_3Al with $L1_2$ order // J. Appl. Phys. – 2013. – 114, 213506;

10. Haas M., Hizhnyakov V., Shelkan A., Klopov M., Sievers A.J. Prediction of high-frequency intrinsic localized modes in Ni and Nb // Phys. Rev. – 2011. – B 84, 144303;
11. 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 // Phys. Rev. – 2009. – B 79, 134304;
12. Velarde M.G. From polaron to solectron: The addition of nonlinear elasticity to quantum mechanics and its possible effect upon electric transport // J. Comput. Appl. Math. – 2010. – 233(6), 1432-1445;
13. Chetverikov A.P., Ebeling W., Ropke G., Velarde M.G. High electrical conductivity in nonlinear model lattice crystals mediated by thermal excitation of solectrons // Eur. Phys. J. – 2014. – B 87, 153;
14. Sievers A.J., Sato M., Page J.B., Rossler T. Thermally populated intrinsic localized modes in pure alkali halide crystals // Phys. Rev. – 2013. – B 88, 104305;
15. Chechin G.M., Dzhelauhova G.S., Mehonoshina E.A. Quasibreathers as a generalization of the concept of discrete breathers // Phys. Rev. – 2006. – E 74, 036608.

Список публикаций автора по теме диссертации

Публикации в изданиях, рекомендованных ВАК РФ.

1. Семенов А.С., Мурзаев Р.Т., Кистанов А.А., Бебихов Ю.В. Исследование дискретных бризеров в ГПУ металлах бериллии и цирконии // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2015. Т.12. №1. С. 26-30.
2. Семенов А.С., Корзникова Е.А., Дмитриев С.В. Дискретные бризеры с жестким и мягким типом нелинейности в одномерной цепочке с дальнодействующим морзевским взаимодействием // Письма о материалах. 2015. Т. 5(1). С. 11-14.
3. Кистанов А.А., Семенов А.С. Столкновение движущихся дискретных бризеров в двумерном моноатомном кристалле // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2014. Т. 11(2). С. 241.
4. Кистанов А.А., Семенов А.С., Дмитриев С.В. О задании начальных условий для моделирования движущихся дискретных бризеров в моноатомном двумерном кристалле // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2014. Т. 11(2). С. 223.

5. Кистанов А.А., Семенов А.С., Мурзаев Р.Т., Дмитриев С.В. Неподвижные и движущиеся дискретные бризеры в ГПУ металле Co // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2014. Т. 11(3). С. 322.
6. Кистанов А.А., Семенов А.С., Мурзаев Р.Т., Дмитриев С.В. Взаимодействие движущихся дискретных бризеров в ГПУ металле Mg // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2014. Т. 11(4/2). С. 572.
7. Кистанов А.А., Семенов А.С., Дмитриев С.В. Свойства движущихся дискретных бризеров в моноатомном двумерном кристалле // ЖЭТФ. 2014. 146(4), 869.
8. Кистанов А.А., Дмитриев С.В., Семенов А.С., Дубинко В.И., Терентьев Д.А. Взаимодействие движущихся дискретных бризеров с вакансией в двумерном моноатомном кристалле // Письма в ЖТФ. 2014. Т. 40(15), С. 58.

Прочие публикации.

9. Семенов А.С, Кистанов А.А. Движущийся дискретный бризеров в ГПУ металле α-Ti. Физика молекул и кристаллов: Сб. статей. - Уфа: ИП Галиуллин Д.А., 2014. - 296 с. ISBN 978-5-905269-42-4.
10. Кистанов А.А., Семенов А.С. Свойства движущихся дискретных бризеров в ГПУ металле Co. Физика молекул и кристаллов: Сб. статей. - Уфа: ИП Галиуллин Д.А., 2014. - 293 с. ISBN 978-5-905269-42-4.

Подписано в печать 12.03.2015.
Печать – цифровая. Усл. п. л. 1,16.
Тираж 100 экз. Заказ 2015-14

Отпечатано в типографии АлтГТУ,
656038, г. Барнаул, пр-т Ленина, 46
тел.: (8-3852) 36-84-61

Лицензия на полиграфическую деятельность
ПЛД № 28-35 от 15.07.97 г.