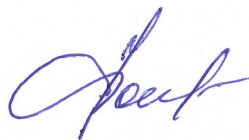


На правах рукописи



Фомин Сергей Юрьевич

**ВОЗБУЖДЕНИЕ И ИЗУЧЕНИЕ СВОЙСТВ ДИСКРЕТНЫХ
БРИЗЕРОВ В МОНОАТОМНЫХ И БИАТОМНЫХ КРИСТАЛЛАХ**

Специальность: 01.04.07 — физика конденсированного состояния

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Барнаул – 2016

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Уфимский государственный авиационный технический университет»

Научный руководитель: **Корзникова Елена Александровна**,
кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник, ФГБУН «Институт проблем сверхпластичности металлов РАН»

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

Захаров Павел Васильевич,
кандидат физико-математических наук, доцент кафедры математики, физики, информатики, ФГБОУ ВО «Алтайский государственный гуманитарно-педагогический университет им. В.М. Шукшина»

Ведущая организация: ФГБУН «Институт физики молекул и кристаллов Российской академии наук», г. Уфа

Защита состоится «_____» января 2017 г. в _____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/3092/>

Автореферат разослан «_____» _____ 2016 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 работы. Физика нелинейных явлений, активно развиваемая с середины прошлого столетия, существенно обогатила понятийный аппарат современного естествознания. В частности, возникло понятие солитона, то есть уединенной волны, способной двигаться в среде практически не рассеивая свою энергию и, более того, сохраняя свою индивидуальность при столкновении с другими солитонами [1,2]. Математиками были найдены несколько примеров нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных, допускающих точные решения в виде волн солитонного типа, к ним относятся уравнения Кортевега-де-Фриза, Клейн-Гордона, нелинейное уравнение Шредингера и ряд других. Оказалось, что солитоны являются вездесущими объектами, связанными с различными физическими явлениями, например, волны цунами на поверхности океана, самофокусирующееся распространение света в оптически нелинейной среде, доменные стенки или дислокации в кристаллах и т.п. Устойчивая пространственная локализация энергии в солитонах обусловлена тем, что нелинейность среды компенсирует явление дисперсии, то есть распывание волновых пакетов. Следующим важным шагом в развитии нелинейной физики стало открытие солитонов в **дискретных** нелинейных системах. Первой полностью интегрируемой нелинейной цепочкой, для которой были получены точные решения в виде уединенных волн, стала цепочка Тоды [3], которая в континуальном пределе переходит в уравнение Кортевега-де-Фриза. Вскоре была открыта и интегрируемая цепочка Абловица-Ладика [4], в континуальном приближении переходящая в нелинейное уравнение Шредингера. Существование интегрируемых нелинейных цепочек показало, что дискретность среды не является препятствием для движения нелинейных пространственно локализованных возбуждений, несмотря на отсутствие трансляционной симметрии. Однако число известных дискретных нелинейных систем, допускающих точные солитонные решения, было весьма ограниченным. Три десятилетия назад Долгов показал возможность пространственной локализации колебательной энергии в неинтегрируемой дискретной нелинейной цепочке [5]. Позже в целом ряде математических работ было доказано, что подобные решения могут быть точными и устойчивыми [6]. Такие решения получили название дискретных бризеров (ДБ). Данный термин происходит от английского слова *breath* (дыхание), отражая периодичность колебания ДБ во времени, подобно дыханию.

Исследование широкого класса систем различной размерности показало, что дискретность и нелинейность среды являются двумя необходимыми ингредиентами для существования ДБ, в то время как конкретный вид нелинейного потенциала взаимодействия между частицами влияет лишь на свойства ДБ, но не на саму возможность их существования. ДБ не рассеивают

свою энергию потому, что их частота лежит вне спектра малоамплитудных колебаний решетки. Выход частоты ДБ из спектра происходит за счет зависимости частоты нелинейных колебаний от амплитуды. Если частота ДБ растет (уменьшается) с амплитудой, говорят, что он демонстрирует жесткий (мягкий) тип нелинейности. Очевидно, что ДБ с мягким типом нелинейности возможны только в решетках, имеющих запрещенную зону (щель) в спектре малоамплитудных колебаний.

Спустя десятилетие после пионерских математических работ по изучению ДБ, их стали находить экспериментаторы в нелинейных дискретных средах разной физической природы, например, в массивах джозефсоновских сверхпроводящих контактов, в массивах нелинейных оптических волноводах, в периодических электрических цепях, в цепочках микромеханических кантелеверов и т.д. По прошествии еще одного десятилетия, исследователи, изучающие ДБ, стали уделять внимание кристаллам, которые являются природными дискретными и нелинейными средами, если их рассматривать на атомном уровне.

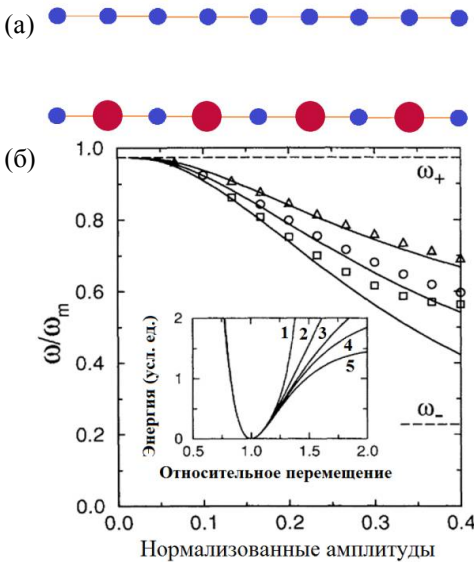


Рис. 1. (а) Одномерные моноатомный (сверху) и биатомный (снизу) кристаллы. (б) Безразмерная частота ДБ как функция амплитуды щелевого ДБ для биатомного кристалла для потенциалов 3 (треугольники), 4 (кружки) и 5 (квадраты). На вставке показаны пять парных межатомных потенциалов: 1- K_2 - K_3 - K_4 , 2 - Тоды, 3 - Борн-Маера, 4 - Леннарда-Джонса и 5 - Морзе. Щель в фоновом спектре биатомного кристалла располагается в диапазоне частот от ω_- до ω_+ .

Первая работа, выполненная с использованием метода молекулярной динамики (МД), в которой была показана возможность возбуждения ДБ в кристалле, касалась щелочно-галогенидного кристалла NaI [7]. Для этого же кристалла был проведен ряд экспериментов, доказывающих наличие в них ДБ в условиях теплового равновесия при повышенных температурах [8]. Совершенно неслучайно, что первые попытки исследования ДБ в кристаллах

связаны с кристаллом NaI. О причинах следует поговорить особо, поскольку это пояснит мотивацию данной диссертационной работы.

Отправной точкой является статья Киселева и др. [9], где исследовался одномерный кристалл [рис. 1(а)] с атомами, взаимодействующими посредством одного из пяти парных межатомных потенциалов: полиномиального K_2 - K_3 - K_4 , Тоды, Борн-Маера, Леннарда-Джонса и Морзе, которые изображены на вставке на рис. 1(б) под цифрами от 1 до 5, соответственно. Потенциалы нормированы так, что совмещены их точки минимума, в которых совпадают значения потенциалов, а также первые и вторые производные. Сразу заметим, что потенциалы 1 и 2 не могут применяться для описания межатомных взаимодействий в кристаллах, поскольку они описывают связь, которая не разрывается на бесконечном удалении атомов. Потенциалы 3, 4 и 5 качественно подходят для этих целей и широко используются в МД расчетах.

Строгие математические расчеты, проведенные в работе [9], показали, что в одномерных моноатомных кристаллах с потенциалами 2, 3, 4 и 5 ДБ существовать не могут, поскольку данные потенциалы обеспечивают мягкий тип нелинейности, а щели в спектре моноатомного кристалла нет. Рассмотрев биатомный кристалл с чередующимися легкими и тяжелыми атомами, авторам удалось возбудить щелевые ДБ, то есть ДБ с частотами, лежащими в щели фононного спектра. Безразмерная частота щелевого ДБ как функция его амплитуды представлена на рис. 1(б) для потенциалов 3 (треугольники), 4 (кружки) и 5 (квадраты). Отметим, что среди трех данных потенциалов наиболее мягким является потенциал Морзе, поскольку частота ДБ для него спадает с амплитудой быстрее, чем для двух других потенциалов.

На основании результатов данной работы был сделан вывод о том, что реалистичные парные межатомные потенциалы дают мягкий тип нелинейности и в кристаллах со сплошным спектром не могут реализовываться ДБ с частотами выше фононного спектра. Следовательно, при поиске ДБ внимание следует уделять только кристаллам, имеющим достаточно широкую щель в фононном спектре. Например, атом натрия в 5,5 раз легче атома йода, что обеспечивает наличие щели в фононном спектре кристалла NaI и, следовательно, возможность существования в нем щелевых ДБ.

Данный вывод затормозил поиски ДБ в чистых металлах и других важных кристаллах, не имеющих щели в фононном спектре.

Возникает вопрос, не является ли сделанный вывод следствием одномерности кристалла, рассмотренного в [9]? Нет ли возможности возбудить ДБ с частотами выше фононного спектра в моноатомных кристаллах Морзе размерности два и три? Данное диссертационное исследование было направлено на то, чтобы ответить на этот вопрос и ответ оказался положительным.

Таким образом, целью диссертационной работы являлось возбуждение и моделирование свойств ДБ в монокристаллах и биатомных кристаллах Морзе размерности два и три, с использованием метода молекулярной динамики. Достижение данной цели потребовало решения следующих задач:

1. Создание молекулярно-динамических моделей кристаллов Морзе различного состава и различной размерности.

2. Поиск начальных условий, приводящих к возбуждению в рассматриваемых моделях кристаллов ДБ.

3. Определение свойств ДБ, таких, как зависимость частоты от амплитуды, степень пространственной локализации, способность или неспособность к движению по кристаллу и др.

4. Объяснение механизмов существования ДБ в двумерных и трехмерных кристаллах Морзе.

Научная новизна:

1. Впервые показана возможность возбуждения ДБ в монокристаллах двумерных и трехмерных кристаллах Морзе.

2. Впервые для кристаллов Морзе реализован способ возбуждения ДБ путем наложения колоколообразных функций на коротковолновую фоновую моду, частота которой в нелинейном режиме выходит из фонового спектра малоамплитудных колебаний кристалла.

3. Впервые доказано существование ДБ нового типа в двумерных и трехмерных кристаллах Морзе, отличающихся более высокой симметрией от известных ранее ДБ, локализованных в одном плотноупакованном атомном ряду.

4. Установлено, что в кристаллах Морзе различные колебательные моды в нелинейном режиме могут проявлять как мягкий, так и жесткий тип нелинейности, в случае если больший вклад в динамику атомов дает мягкий хвост или жесткое ядро потенциала, соответственно.

Научная и практическая ценность.

Потенциал Морзе является одним из наиболее популярных межатомных потенциалов, используемых в молекулярной динамике для решения широкого круга задач физики конденсированного состояния и материаловедения. Доказательство существования ДБ с жестким типом нелинейности в **монокристаллах** двумерных и трехмерных кристаллах Морзе развеяло существовавшее долгое время предположение о том, что в кристаллах с реалистичными межатомными взаимодействиями (имеющими жесткое ядро и мягкий хвост) ДБ с частотами выше фонового спектра существовать не могут. Данное предположение строилось на математически обоснованном факте, что в одномерных кристаллах Морзе такие ДБ действительно не существуют. Следовательно, в диссертации наглядно продемонстрировано нетривиальное значение размерности кристаллической решетки в вопросах существования и

изучения свойств ДБ. Настоящая работа стимулирует постановку экспериментальных исследований по обнаружению ДБ с жестким типом нелинейности в кристаллах с простой структурой, например, в чистых металлах, не имеющих щели в фононном спектре.

Достоверность результатов диссертации обеспечивается использованием стандартных, хорошо апробированных алгоритмов метода молекулярной динамики для решения новых задач о нелинейной динамике плотноупакованных кристаллов различной размерности с классическим межатомным потенциалом Морзе. Получаемые результаты многократно тестировались на сходимость при увеличении размеров расчетной ячейки и уменьшении шага численного интегрирования уравнений атомных движений. Сравнивались результаты, полученные 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. Показана непротиворечивость численных результатов базовым физическим законам и известным результатам по изучению нелинейной динамики морзевских кристаллов.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. В двумерных и трехмерных моноатомных кристаллах Морзе, в отличие от одномерных, возможно существование ДБ с жестким типом нелинейности с частотами выше бесщелевого фононного спектра. Их существование обеспечивается тем, что в кристаллах размерности выше единицы повышается вклад в динамику атомов жесткого ядра потенциала Морзе, по сравнению с его мягким хвостом.
2. Эффективным способом возбуждения ДБ в кристаллах является наложение колоколообразной функции с правильно выбранными параметрами (амплитуда и степень локализации) на коротковолновую фононную моду, частота которой в режиме больших амплитуд колебаний выходит из фононного спектра кристалла.
3. Кристаллы Морзе размерности два и три допускают существование нескольких типов ДБ с жестким типом нелинейности, отличающиеся симметрией и зависимостью их частоты от амплитуды.

Апробация работы.

Основные результаты работы были представлены на следующих научных форумах: International Workshop "Discrete Breathers in Crystals", 21-25 сентября 2015, г. Уфа; Всероссийская молодежная научная конференция «Мавлютовские чтения», 28-30 октября 2015, УГАТУ, г.Уфа; Международная конференция Фазовые переходы, критические и нелинейные явления в конденсированных средах 24-28 августа 2015 г, г. Челябинск; Всероссийская научная конференция «Мавлютовские чтения», посвященная 90-летию со дня рождения член-корреспондента РАН Р.Р. Мавлютова, 21-24 марта 2016,

УГАТУ г.Уфа; ; LVII Международная конференция "Актуальные проблемы прочности" 24-27 мая 2016 г., Севастопольский государственный университет, г. Севастополь; Школа - конференция стран СНГ "Ультрамелкозернистые и наноструктурные материалы" , 3-7 октября 2016, Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, г. Уфа.

Личный вклад автора. Автор принимал активное участие в постановке цели и частных задач диссертации, а также в планировании компьютерных экспериментов и написании программного обеспечения используемого для расчетов, самостоятельно получил все представленные в работе численные данные. Автор самостоятельно провел анализ полученных данных, активно участвовал в обсуждении результатов, в написании статей. Самостоятельно осуществлял подготовку и представление докладов по полученным результатам на научных конференциях.

Публикации. Основное содержание диссертационной работы изложено в 15 научных публикациях, в том числе, в 10 статьях в рецензируемых журналах, включенных в перечень изданий, рекомендованных ВАК РФ, четыре из которых индексируются в Scopus и/или Web of Science.

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и списка литературы из 126 наименований. Работа изложена на 138 страницах машинописного текста и содержит 56 рисунков.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении описан круг изучаемых явлений, даны основные определения, обоснована актуальность темы диссертационного исследования, определены цель и задачи работы, представлены научная новизна, практическая ценность и сформулированы основные защищаемые положения. Кратко изложено содержание глав диссертации.

Глава 1. Обзор литературы. Метод молекулярной динамики

Несмотря на то, что дискретные бризеры в кристаллах стали активно изучаться всего лишь около десятилетия назад, уже имеется значительный объем опубликованной литературы [10], анализ которой и составил основу первой главы диссертации. Представлены известные экспериментальные работы по идентификации дискретных бризеров в кристаллах. Описаны основные успехи и нерешенные проблемы исследования ДБ в кристаллах методами атомистического моделирования. Перечислены имеющиеся результаты по свойствам дискретных бризеров в кристаллах различного типа: ионных щелочно-галоидных (со структурой NaCl), ковалентных (кремний, германий), в чистых металлах с ГЦК, ОЦК и ГПУ решеткой, в упорядоченных сплавах (модельных и в интерметаллиде Pt_3Al), в двумерных кристаллах

графена и графана, в углеродных нанотрубках. На основе известных свойств дискретных бризеров, следуя литературным данным, делается прогноз их роли в физике и механике кристаллов.

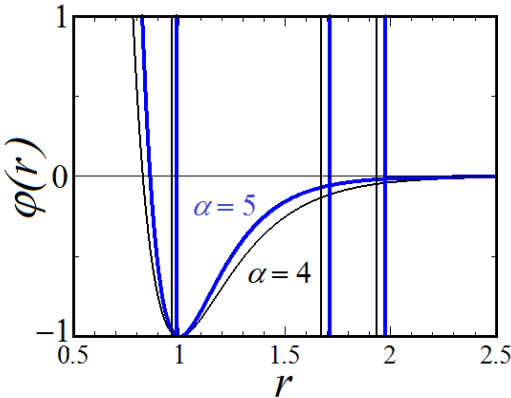


Рис. 2. Потенциал Морзе (1), построенный для значений параметров $D = r_m = 1$ и $\alpha = 4$ (черная кривая), $\alpha = 5$ (синяя кривая).

Глава дополнена краткими сведениями о методе молекулярной динамики, использовавшемся при получении основных результатов диссертации. Описан потенциал Морзе

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

где φ – энергия взаимодействия пары атомов, расположенных на расстоянии r друг от друга и D , r_m , α – параметры потенциала, определяющие энергию разрыва связи, равновесное межатомное расстояние и жесткость связи, соответственно (см. рис. 2). Особо отметим существование точки перегиба у потенциала Морзе, правее которой потенциал демонстрирует мягкий, а левее – жесткий тип нелинейности. Данное свойство является общим для всех без исключения реалистичных межатомных потенциалов, отражая природу межатомных взаимодействий, определяемых преимущественно вкладом электронов на больших расстояниях и взаимодействием ядер на малых.

Особое внимание уделено проблеме поиска начальных условий для возбуждения ДБ в кристаллах.

Исходя из проведенного анализа литературных данных, сформулированы нерешенные проблемы, связанные с влиянием размерности кристалла на возможность возбуждения и на свойства дискретных бризеров в кристаллах с парным межатомным потенциалом Морзе. Определен круг вопросов, решаемых в настоящей диссертации с целью получения новых данных о дискретных бризерах в моноатомных и биатомных кристаллах Морзе.

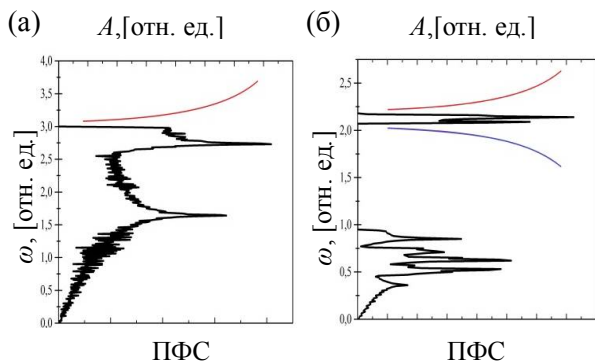


Рис. 3. Плотности фоновых состояний двумерного кристалла Морзе для случаев (а) моноатомного и (б) биатомного кристалла стехиометрии A_3B . На (а) все атомы имеют единичную массу, на (б) атом В в 10 раз легче атома А весом 1,29, так что плотность кристалла сохраняется.

Глава 2. Дискретные бризеры в двумерных моноатомных и биатомных кристаллах Морзе

Анализ начинается с сопоставления плотности фоновых состояний моноатомного и биатомного кристалла Морзе стехиометрии A_3B . В моноатомном кристалле все атомы имеют единичную массу, а в биатомном масса атома В в десять раз меньше атома А с сохранением плотности как у моноатомного кристалла. Параметры потенциала Морзе не зависят от типа атома и равны $D=r_m=1$, $\alpha=5$. Результат представлен на рис. 3. Видно, что биатомный кристалл на (б), в отличие от моноатомного на (а), имеет достаточно широкую щель в фоновом спектре. Следовательно, в биатомном кристалле возможны ДБ не только с частотами выше спектра, как в

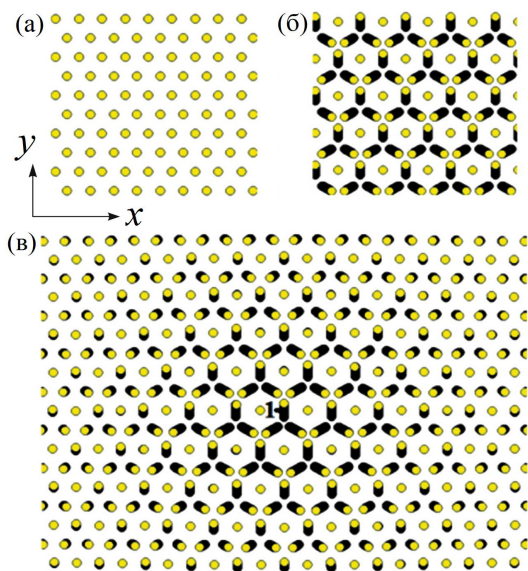


Рис. 4. (а) Двумерный плотноупакованный кристалл. Атомы занимают положения треугольной решетки. Ось x совпадает с одним из трех плотноупакованных направлений. (б) Колебательная фоновая мода с волновым вектором $\mathbf{q}=(\pi,\pi)$, лежащим на границе зоны Бриллюэна. (в) ДБ, полученный наложением колоколообразной функции на фоновую моду, представленную на (б). Данный ДБ имеет ось симметрии третьего порядка.

моноатомном, но и щелевые ДБ. Красные кривые на рис. 3 условно показывают зависимость частоты ω от амплитуды A бризера с жестким типом нелинейности, а на (б) синяя кривая показывает то же самое для щелевого ДБ. Отметим, что щелевые ДБ в биатомных кристаллах Морзе к настоящему моменту изучены достаточно хорошо, и основной результат данной работы состоит в том, чтобы показать возможность существования и определить основные свойства ДБ в моноатомном кристалле. Оказалось, что в моноатомном кристалле можно возбудить не один, а как минимум два типа ДБ. Представим данный результат подробнее.

Для запуска ДБ нами систематически использовался подход, основанный на анализе зависимости частот коротковолновых фононных мод от их амплитуд. Известно, что частота линейной колебательной моды не зависит от амплитуды, но с увеличением амплитуды фононной моды такая зависимость появляется за счет нелинейности потенциала Морзе. Если частота моды с ростом амплитуды выходит из фононного спектра, то можно попытаться, наложив на нее колоколообразную функцию, получить пространственно локализованную колебательную моду, то есть ДБ.

На рис. 4 изображены: (а) двумерный плотноупакованный кристалл атомы которого занимают положения треугольной решетки. Ось x совпадает с одним из трех плотноупакованных направлений; (б) колебательная фононная мода с волновым вектором $\mathbf{q}=(\pi,\pi)$, лежащим на границе зоны Бриллюэна; (в) ДБ, полученный наложением колоколообразной функции на фононную моду, представленную на (б). Данный ДБ имеет ось симметрии третьего порядка.

Для того, чтобы объяснить существование ДБ, показанного на рис. 4(в), были посчитаны зависимости частоты ДБ от амплитуды, а также зависимость частоты от амплитуды для фононной моды, изображенной на рис. 4(б) для случаев постоянного размера расчетной ячейки и нулевого давления. В последнем случае размер расчетной ячейки увеличивался с ростом амплитуды колебательной моды так, чтобы среднее за период колебаний давление в кристалле равнялось нулю. Результаты этих вычислений сведены на рис. 5.

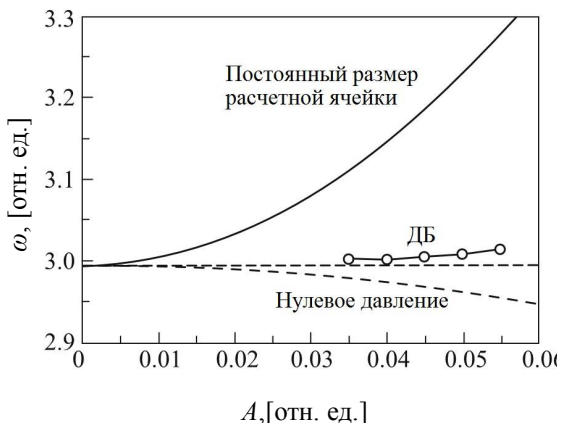


Рис. 5. Зависимость частоты ДБ, показанного на рис. 4(в) от амплитуды (светлые точки, соединенные линией); зависимость частоты от амплитуды для фононной моды, изображенной на рис. 4(б), для случаев постоянного размера расчетной ячейки (сплошная кривая) и нулевого давления (пунктир). Горизонтальная пунктирная линия показывает верхнюю границу бесщелевого фононного спектра.

Как видно из рис. 5, фононная мода, изображенная на рис. 4(б), показывает мягкий либо жесткий тип нелинейности в зависимости от граничных условий. Если кристалл имеет возможность свободно расширяться при нулевом внешнем давлении, то больший вклад в динамику решетки дает мягкий хвост потенциала Морзе, и частота фононной моды падает с амплитудой, отщепляясь от верхней границы фононного спектра. Если же размер ячейки не изменяется, то с увеличением амплитуды колебания атомов растет вклад жесткого ядра потенциала и частота моды растет. ДБ является пространственно локализованной колебательной модой. Поэтому в ядре ДБ имеем локальное увеличение межатомных расстояний, которое до определенной степени сдерживается окружающей частью кристалла. Ввиду этого частота ДБ лежит между частотами фононной моды в двух рассмотренных режимах. Как оказалось, сдерживающего давления, действующего на ядро ДБ со стороны его окружения, достаточно для того, чтобы частота ДБ росла с амплитудой и оказалась выше фононного спектра (см. светлые точки, соединенные линией, на рис. 5).

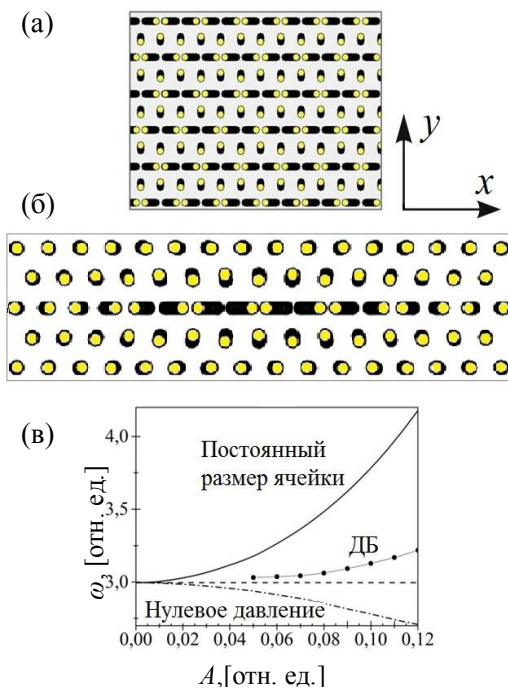


Рис.6.(а) Колебательная фононная мода с волновым вектором $\mathbf{q}=(\pi,0)$, лежащим на границе зоны Бриллюэна. (б) ДБ, полученный наложением двух колоколообразных функций на фононную моду, представленную на (а). Данный ДБ имеет ось симметрии второго порядка. (в) Зависимость частоты ДБ, показанного на (б), от амплитуды (точки, соединенные линией); зависимость частоты от амплитуды для фононной моды, изображенной на (а), для случаев постоянного размера расчетной ячейки (сплошная кривая) и нулевого давления (штрихпунктир). Горизонтальная пунктирная линия показывает верхнюю границу бесщелевого фононного спектра.

Вдали от ядра ДБ перемещения атомов малы и их колебаниями можно пренебречь. Чтобы рассчитать поля радиальных перемещений и напряжений, создаваемых ДБ, можно воспользоваться линейной статической теорией упругости. Данный расчет показал, что в двумерном кристалле радиальное перемещение атомов, созданное ДБ, уменьшается пропорционально R^{-1} , где R – расстояние от центра ДБ. Радиальное и окружное напряжения убывают пропорционально R^{-2} . Попутно отметим, что для трехмерного кристалла подобный расчет дает закон R^{-2} для убывания радиальных перемещений и R^{-3} для убывания напряжений с удалением от центра ДБ.

Другая фононная мода, с волновым вектором $\mathbf{q}=(\pi,0)$, лежащим на границе зоны Бриллюэна [см. рис. 6(а)], также показала жесткий тип нелинейности при постоянном размере расчетной ячейки и мягкий при нулевом давлении, как изображено на рис. 6(в). Поскольку данная мода нарушает упругую изотропию кристалла, для получения ДБ, представленного на рис. 6(б), использовались две колоколообразные функции, одна вдоль оси x , а другая вдоль y , причем последняя имела существенно большую степень

локализации. Полученный ДБ вытянут вдоль плотноупакованного атомного ряда и имеет ось симметрии второго порядка. В данном случае существование ДБ с жестким типом нелинейности объясняется его квазиодномерной структурой. Очевидно, что плотноупакованный атомный ряд, в котором возбужден ДБ, испытывает действие локального периодического потенциала, наведенного остальной частью кристалла. Данный потенциал сдерживает увеличение межатомных расстояний в плотноупакованном ряду, приводя к большему вкладу жесткого ядра потенциала Морзе в динамику атомов, и частота ДБ растет с амплитудой, как показано на рис. 6(в) точками, соединенными линией.

В диссертационной работе приведены данные параметрического анализа ДБ, представленных на рис. 4(в) и рис. 6(б). Как функции амплитуды ДБ посчитаны их энергии (кинетическая, потенциальная и полная), скорость излучения энергии в виде малоамплитудных волн, степень пространственной локализации и ряд других. Изучено влияние параметра α потенциала Морзе на свойства ДБ.

Как уже отмечалось, щелевые ДБ в биатомных кристаллах Морзе изучались достаточно интенсивно. Тем не менее, остался ряд вопросов, которым было уделено недостаточно внимания и они были рассмотрены в данной работе. Например, проведено детальное сопоставление свойств щелевого ДБ в зависимости от его поляризации для кристалла стехиометрии A_3B с массой атома B в 10 раз меньше, чем A . На рис. 7 показаны два возможных щелевых ДБ, когда легкий атом движется либо вдоль плотноупакованного направления, либо под углом 30° к нему. Для обоих ДБ рассчитаны их частоты в зависимости от амплитуды, исследовано влияние параметра α потенциала Морзе на их свойства и решен ряд других задач.

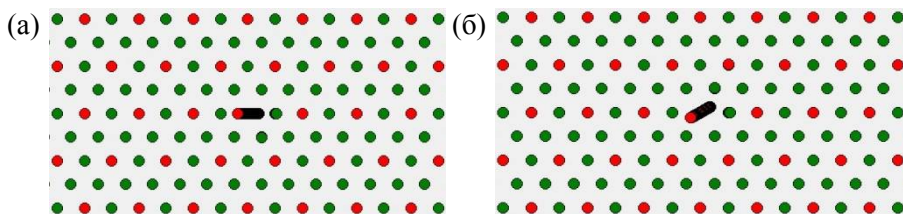


Рис. 7. Стробоскопическая картина движения атомов в окрестности щелевого ДБ в биатомном кристалле Морзе: легкий атом колеблется (а) вдоль плотноупакованного атомного ряда, (б) под углом 30° к плотноупакованному ряду.

Глава 3. Дискретные бризеры в трехмерных моноатомных кристаллах Морзе

Большинство кристаллов, с которыми имеют дело физика и технологии, являются трехмерными, поэтому важно рассмотреть ДБ в трехмерных кристаллах Морзе в сравнении с ДБ в двумерных кристаллах. Поскольку щелевым ДБ в трехмерных биатомных кристаллах Морзе было посвящено большое количество работ, в данном исследовании акцент сделан на рассмотрении ДБ с жестким типом нелинейности в моноатомных кристаллах. Все расчеты в данной главе проведены для параметров потенциала $D = r_m = 1$ и $\alpha = 5$.

На рис. 8 показаны стробоскопические картины движения атомов в (а) двумерном и (б) трехмерном ГЦК кристалле Морзе в проекции на плоскость (x, y) . ДБ возбуждены в плотноупакованных атомных рядах. Атомы плотноупакованного ряда занумерованы индексом n , как показано на рис. 8. Начальные условия для возбуждения ДБ задавались следующим образом

$$x_n(t) = (-1)^n T_n \cos[\omega t + \varphi_0 + \delta(n - x_0)] + S_n, \quad y_n = 0, \quad \dot{y}_n = 0, \quad (2)$$

где ω – частота ДБ, лежащая выше фононного спектра кристалла, φ_0 – начальная фаза колебаний, δ – параметр, определяющий разность фаз колебаний соседних атомов, T_n и S_n определены выражениями

$$T_n = \frac{A}{\cosh[\beta(n - x_0)]}, \quad S_n = \frac{-B(n - x_0)}{\cosh[\gamma(n - x_0)]}, \quad (3)$$

где параметр A определяет амплитуду ДБ, параметр B определяет амплитуду смещений центров колебаний атомов, параметры β и γ задают степень пространственной локализации ДБ, а x_0 – его начальное положение. При $x_0=0$ имеем ДБ центрированный на атоме, а при $x_0=1/2$ по середине между двумя соседними атомами. Функции T_n и S_n в (3) 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 прямолинейного ряда. Отметим, что скорость ДБ зависит от δ , и $\delta = 0$ соответствует случаю неподвижного ДБ. Все атомы кроме выделенного плотноупакованного ряда имели нулевые начальные перемещения и скорости.

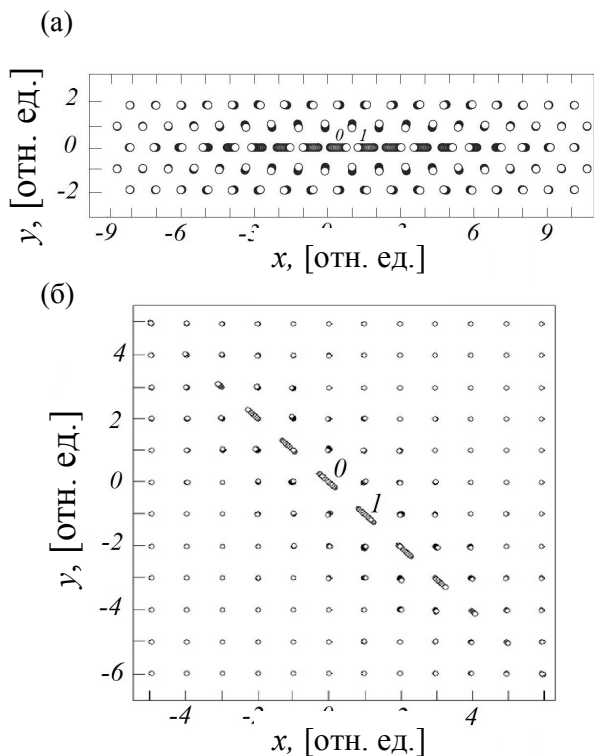


Рис. 8. Стробоскопические картины движения атомов в моноатомных (а) двумерном кристалле и (б) трехмерном ГЦК кристалле Морзе в проекции на плоскость (x,y) . ДБ возбуждены в плотноупакованных атомных рядах с использованием выражений (2), (3) для задания начальных условий.

Зависимости частоты от амплитуды показаны на рис. 9 для ДБ в (а) двумерном и (б) трехмерном кристаллах. Горизонтальные штриховые линии показывают границы фононных спектров. Видно, что максимальные фононные частоты в трехмерном кристалле выше, чем в двумерном. Это связано с тем, что равновесное межатомное расстояние в трехмерном кристалле меньше, чем в двумерном, поэтому жесткость межатомных связей в нем выше. Для обоих кристаллов частота ДБ лежит выше фононного спектра и растет с увеличением амплитуды. Максимальные амплитуды колебаний ДБ составляют в обоих случаях около 15% от межатомного расстояния. При больших значениях амплитуд ДБ быстро излучают энергию весьма быстро.

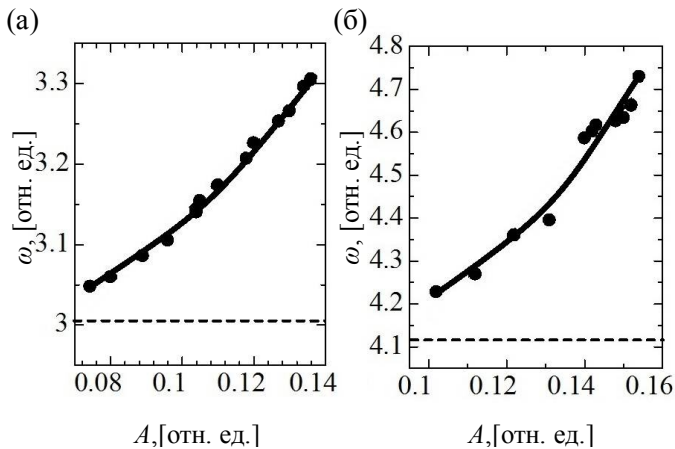


Рис. 9. Зависимость частоты от амплитуды для ДБ в (а) двумерном и (б) трехмерном кристаллах Морзе. Горизонтальные штриховые линии показывают границы фоннных спектров. ДБ возбуждены в плотноупакованных атомных рядах с помощью выражений (2), (3).

На рис. 10 и рис. 11 для двумерного и трехмерного монокристаллов, соответственно, показаны (а) зависимость перемещений атомов 0 и 1 (см. рис. 8) от времени в центре ДБ, возбужденного в плотноупакованном атомном ряду с использованием выражений (2), (3); (б) амплитуды колебаний атомов, T_n , и смещения центров их колебаний, S_n в окрестности ДБ.

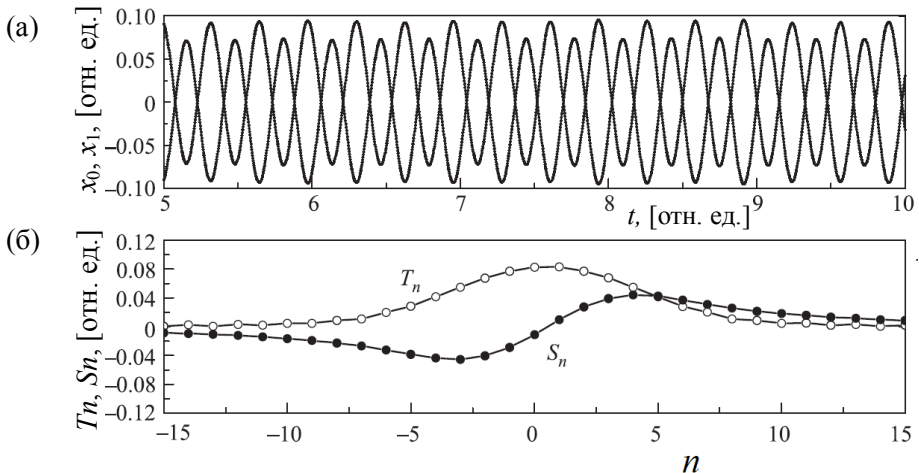


Рис. 10. (а) Зависимость перемещений атомов 0 и 1 [см. рис. 8(а)] от времени в центре ДБ, возбужденного в двумерном кристалле с использованием выражений (2), (3). (б) Амплитуды колебаний атомов, T_n , и смещения центров их колебаний, S_n в окрестности ДБ.

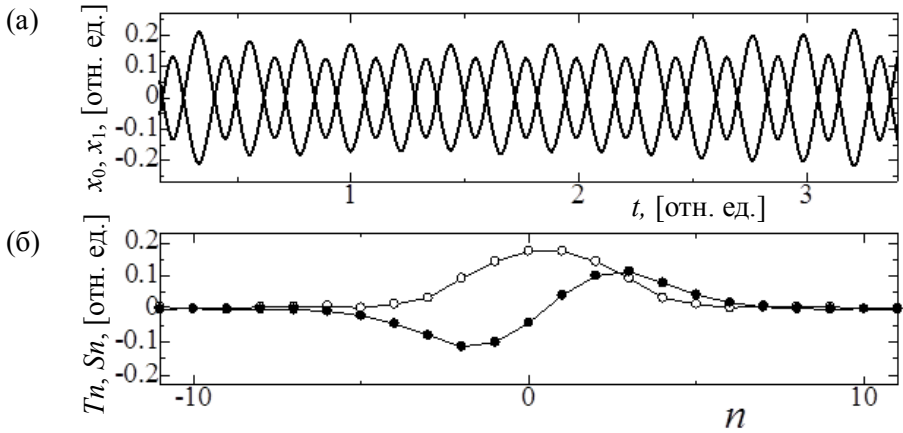


Рис. 11. То же, что и на рис. 10, но для трехмерного кристалла.

Отметим, что основным отличием ДБ в трехмерном кристалле является его более высокая степень пространственной локализации по сравнению с двумерным, как это видно из сравнения рис. 10(б) и рис. 11(б). Объяснение этого факта кроется в том, что в трехмерном кристалле локальный потенциал, наведенный атомами, окружающими плотноупакованную цепочку в которой возбужден ДБ, оказывается более глубоким, чем в двумерном. Такой потенциал более эффективно сдерживает «тепловое расширение» этого атомного ряда.

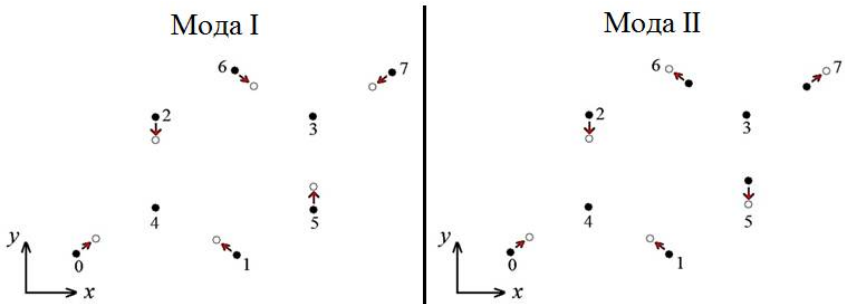


Рис. 12. Две колебательные фоновые моды в ГЦК кристалле Морзе на основе которых удалось возбудить ДБ с частотой выше фонованого спектра, наложив на них колоколообразную функцию сферической симметрии.

По аналогии с высокосимметричным ДБ в двумерном кристалле [см. рис. 4(в)] удалось возбудить два подобных ДБ в трехмерном монокристалле Морзе, наложив колоколообразную функцию сферической симметрии на колебательные моды представленные на рис. 12. Показаны атомы, принадлежащие одной трансляционной ячейке. Плоскость xu совпадает с кристаллографической плоскостью (111). Атомы 0,1,2,3 лежат в дной плоскости, а атомы 4,5,6,7 в ближайшей параллельной плоскости. Для возбуждения Моды I атомы 0,1,2,4 а также атомы 3,5,6,7 в начальный момент смещаются к равноудаленной от них точке. Мода II отличается противоположным знаком перемещений для атомов 3,5,6,7.

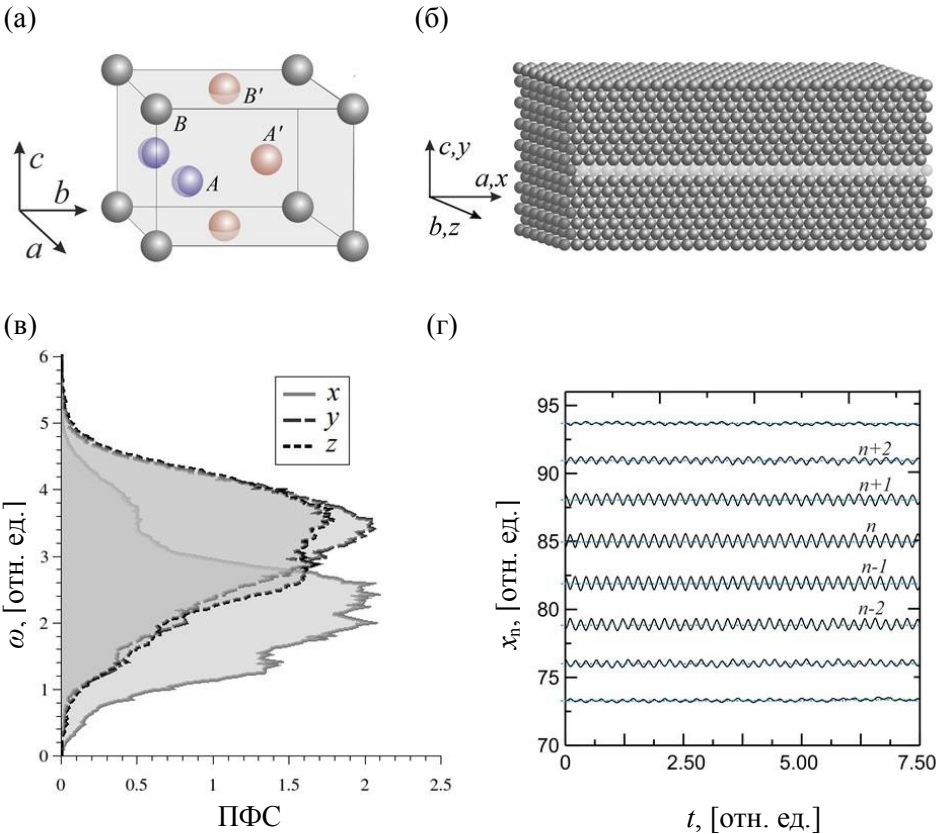


Рис. 13. (а) Структура α -урана. (б) Расчетная ячейка для моделирования ДБ в α -уране. ДБ возбуждался в прямолинейном атомном ряду выделенным серым цветом. (в) Плотности фоновых состояний вдоль трех координатных осей. (г) x -координаты атомов в окрестности ядра ДБ как функции времени.

Глава 4. Дискретный бризер в α -уране

α - уран обладает уникальной низкосимметричной кристаллической решеткой [см. рис. 13(а)], что делает поиск ДБ в нем чрезвычайно интересной задачей. Параметры решетки a, b, c равны 2.827, 5.784 и 4.951 [отн. ед.], соответственно. Расчетная ячейка показана на рис. 13(б). Декартова система координат выбрана так, что $a||x$, $b||z$ и $c||y$. Прямолинейные атомные ряды в уране параллельны оси a . Однако межатомное расстояние в этих рядах несколько больше, чем между атомами А и В (или А' и В'), составляющее 2.750 [отн. ед.]. Сложность состоит в том, что чем меньше межатомное расстояние, тем выше частота колебаний соответствующей связи. Можно ожидать, что колебательные частоты в прямолинейных рядах параллельных оси a будут ниже, чем у межатомных связей А и В, лежащих в плоскости (b, c) . Расчет плотности фононных состояний по трем координатным осям подтвердил это предположение, см. рис. 13(в). Верхняя граница фононного спектра в направлении x составляет примерно 4,8 [отн. ед.], а в плоскости (y, z) примерно 5,2 [отн. ед.]. Тем не менее в работе сделана попытка возбудить ДБ локализованный в прямолинейном атомном ряду используя выражения (2), (3) для задания начальных условий.

Попытка оказалась успешной, x -координаты атомов в окрестности ядра ДБ как функции времени представлены на рис. 13(г). Было найдено, что амплитуда ДБ может изменяться от 0,36 до 0,53 [отн. ед.], при этом частота ДБ возрастает от 4,8 до 5,4 [отн. ед.]. Отметим, что нижняя часть этого диапазона частот лежит в спектре (y, z) фононных мод, но выше спектра x мод. Таким образом, продольные колебания атомов вдоль оси x практически не резонируют с (y, z) фононными модами, что и объясняет существование ДБ с частотами внутри фононного спектра.

Основные результаты и выводы:

1. В работе показано, что **моноатомные** двумерные и трехмерные кристаллы с межатомными взаимодействиями, описываемыми классическими парными потенциалами Морзе, в отличие от одномерных, допускают существование ДБ с жестким типом нелинейности, с частотами выше бесщелевого фононного спектра.

2. Как в двумерном, так и в трехмерном моноатомных кристаллах Морзе удалось возбудить ДБ двух различных типов. Во-первых, возможны ДБ локализованные в одном плотноупакованном атомном ряду и имеющие квазиодномерную структуру [см. рис. 6(б) и 8(б)]. Во-вторых, существуют ДБ, имеющие ядро круговой формы в двумерном случае [см. рис. 4(в)] и формы близкой к сферической в трехмерном. Некоторое отклонение формы ядра ДБ от сферической вызвано упругой анизотропией ГЦК решетки.

3. Существование ДБ в моноатомных кристаллах Морзе размерности выше единицы обусловлено тем, что наряду с мягким хвостом, потенциал Морзе имеет жесткое ядро. Если ядро дает больший вклад в динамику колебательной моды чем хвост, то она проявляет жесткий тип нелинейности, то есть ее частота растет с амплитудой. Для квазиодномерных ДБ, локализованных в одном плотноупакованном атомном ряду, вклад жесткого ядра потенциала возрастает за счет локального потенциала, созданного окружением плотноупакованного ряда, затрудняющего его «тепловое расширение». Для ДБ круговой и сферической симметрии «тепловое расширение» ядра бризера сдерживается упругим отпором его окружения.

4. ДБ в трехмерных моноатомных кристаллах Морзе имеют степень пространственной локализации выше, чем в двумерных. Для ДБ локализованных в плотноупакованном ряду это связано с тем, что в трехмерном случае локальный потенциал, созданный окружением атомного ряда, оказывается более глубоким, чем в двумерном, и он более эффективно сдерживает «тепловое расширение» ряда. Для высокосимметричных ДБ это связано с тем, что в двумерном кристалле упругие напряжения, созданные ядром ДБ, спадают с удалением от ядра как R^{-2} в двумерном случае и более быстро, как R^{-3} в трехмерном.

5. Показано, что α -уран, имеющий уникальную низкосимметричную кристаллическую решетку, поддерживает существование ДБ, локализованного в прямолинейном атомном ряду, ориентированном вдоль оси x . Частота ДБ растет с амплитудой, причем, нижняя часть диапазона частот ДБ лежит в спектре фоновых колебаний с компонентами перемещений в плоскости (y,z) , но выше спектра фоновых колебаний с компонентой перемещения вдоль оси x . Существование ДБ с частотами внутри фононного спектра объясняется слабым взаимодействием колебательных мод, поляризованных вдоль оси x и мод с компонентами перемещений в плоскости (y,z) .

Цитированная литература

1. Drazin, P. G. Solitons: An Introduction / P. G. Drazin, R. S. Johnson. Cambridge University Press.– 1989.– 226 p.– ISBN 0521433655
2. Kivshar, Y. S. Optical Solitons: From Fibers to Photonic Crystals / Y. S. Kivshar, G. P. Agrawal. Academic Press, San Diego.– 2003.– ISBN 0124105904
3. Toda, M. Wave Propagation in Anharmonic Lattices/ M. Toda // J. Phys. Soc. Jpn.– 1967. – V. 23 – P. 501-506.
4. Ablowitz, M.J. Nonlinear differential-difference equations and Fourier analysis/ M.J. Ablowitz, J.F. Ladik // J. Math. Phys. – 1976.– V.17. – P. 1011–1018.

5. Dolgov, A.S. The localization of vibrations in a nonlinear crystalline structure/ A.S. Dolgov // Sov. Phys. Solid State. – 1986.– V.28. – P.907– 909.
6. MacKay, R.S. Proof of existence of breathers for time-reversible or Hamiltonian networks of weakly coupled oscillators/ R.S. MacKay, S. Aubry. // Nonlinearity. – 1994. – Vol. 7. – P. 1623-1643.
7. Kiselev, S.A. Generation of intrinsic vibrational gap modes in three-dimensional ionic crystals/ S.A. Kiselev, A.J. Sievers // Phys. Rev. B. – 1997. – Vol. 55.– P. 5755.
8. Manley, M.E. Intrinsic localized modes observed in the high-temperature vibrational spectrum of NaI / M.E. Manley, A.J. Sievers, J.W. Lynn, S.A. Kiselev, N.I. Agladze, Y. Chen, A. Llobet, A. Alatas // Phys. Rev. B. – 2009. – Vol. 79.– P. 134304.
9. Kiselev, S.A. Anharmonic gap modes in a perfect one-dimensional diatomic lattice for standard two-body nearest-neighbor potentials / S.A. Kiselev, S.R. Bickham, A.J. Sievers. // Phys. Rev. B. – 1993. – Vol. 48.– P. 13508.
10. Дмитриев, С.В. Дискретные бризеры в кристаллах/ С.В. Дмитриев, Е.А. Корзникова, Ю.А. Баимова, М.Г. Веларде // УФН. – 2016. – V.186. – P. 471–488.

Список публикаций автора по теме диссертации

Публикации в изданиях, рекомендованных ВАК РФ:

1. Properties of discrete breathers in 2D and 3D Morse crystals / A.A. Kistanov, E.A. Korznikova, S.Yu. Fomin, K. Zhou, S.V. Dmitriev // Letters on materials. – 2014.– Т.4(4).–С. 315-318.
2. Зависимость степени локализация дискретных бризеров в двумерном кристалле от степени приложенной деформации / Кистанов А.А., Жоу К., Корзникова Е.А., Фомин С.Ю., Дмитриев С.В. // Фундаментальные проблемы современного материаловедения.– 2015.– Т. 12. № 1.– С. 103-107.
3. Молекулярно-динамическое изучение дискретных бризеров с жестким типом нелинейности в монокристаллической двумерной решетке с морзевским взаимодействием / Корзникова Е.А., Бокий Д.И., Фомин С.Ю., Дмитриев С.В. // Фундаментальные проблемы современного материаловедения.– 2015.– Т. 12. № 3.– С. 311-315.
4. Свойства неподвижных дискретных бризеров в альфа-урани / Мурзаев Р.Т., Корзникова Е.А., Бокий Д.И., Фомин С.Ю., Дмитриев С.В. // Фундаментальные проблемы современного материаловедения.– 2015.– Т. 12. № 3.– С. 324-329.
5. Effect of the interatomic potential stiffness on the properties of gap discrete breathers in 2D biatomic Morse crystal. / Korznikova E.A., Fomin S.Yu.,

Ustiuzhanina S.V., Dmitriev S.V. // Letters on materials.– 2015.– Т. 5 №4.– С. 364-367.

6. Высокосимметричный дискретный бризер в двумерном кристалле Морзе / Е.А. Корзникова, С.Ю. Фомин, С.В. Дмитриев. // "Письма в ЖЭТФ".– Т.103. №4.– С. 303-308.
7. Сравнение свойств различных видов дискретных бризеров в двумерном кристалле Морзе / Фомин С.Ю., Корзникова Е.А., Дмитриев С.В. // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. –2016.– Т.13.№1.– С.54-59.
8. Discrete breathers of different symmetry in monoatomic 2D Morse crystal. / Fomin S.Yu., Korznikova E.A. // Letters on materials. –2016.–Т.6.№1(21).– С.57-60.
9. Murzaev R.T., Babicheva R.I., Zhou K., Korznikova E.A., Fomin S.Yu., Dubinko V.I., Dmitriev S.V. Discrete breathers in alpha-uranium // Eur. Phys. J. B 89, 168 (2016).
10. Korznikova, E.A., Fomin, S.Y., Dmitriev, S.V. Effect of the morse potential stiffness on the properties of discrete breathers in 2D close packed crystal (2016) Materials Science Forum, 845, pp. 211-214.

Прочие публикации.

11. Свойства дискретных бризеров в двумерных биатомных кристаллах с потенциалом Морзе. / Фомин С.Ю., Корзникова Е.А. / Discrete Breathers in Crystals International workshop, г. Уфа.– 2015.– С. 50-51.
12. Возможность существования дискретных бризеров в кристаллах с отрицательным коэффициентом Пуассона. /Фомин С.Ю., Корзникова Е.А., Бокий Д.И. //Тез. Докл. Мавлютовские чтения,.–2016.–Т.7.– С.144-149.
13. Дискретные бризеры в двумерных биатомных кристаллах./Фомин С.Ю., Корзникова Е.А.// Тез. докл. Международной конференции, посвященной 80-летию члена-корреспондента РАН И.К. Камилова, г.Челябинск–2015.– С.137
14. Дискретные бризеры в двумерной решетке с кубической нелинейностью./Д.И. Бокий, С.Ю. Фомин, Е.А. Корзникова.// Тез. докл. IX Всероссийской молодежной научной конференции «Мавлютовские чтения», г.Уфа.–2015.–Т.3–С.177-178.
15. Структура, свойства и роль дискретных бризеров в металлах./ Корзникова Е.А., Фомин С.Ю., Бокий Д.И., Дмитриев С.В.// Тез. докл. открытой школы-конференции стран СНГ «Ультрамелкозернистые и наноструктурные материалы», г. Уфа.–2016.–С.78.

Получено свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2016610362, Программа для исследования нелинейных локализованных колебаний в ауксетических материалах. Авторы: Корзникова Е.А., Бокий Д.И., Дмитриев С.В., Фомин С.Ю.– 2016.

Фомин Сергей Юрьевич

**ВОЗБУЖДЕНИЕ И ИЗУЧЕНИЕ СВОЙСТВ ДИСКРЕТНЫХ
БРИЗЕРОВ
В МОНОАТОМНЫХ И БИАТОМНЫХ КРИСТАЛЛАХ**

Специальность: 01.04.07 — физика конденсированного состояния

АВТОРФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Подписано в печать 23.11.2016 г. Формат 60x84_{1/16}

Печать оперативная. Усл. п. л. 1,2.

Тираж 100 экз. Заказ _____

Отпечатано в типографии АлтГТУ,
656038, г.Барнаул, проспект Ленина, 46