

05

Влияние упругой деформации на фононный спектр и на характеристики щелевых дискретных бризеров в кристалле со структурой NaCl

© С.В. Дмитриев, Ю.А. Баимова

Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа
E-mail: julia.a.baimova@gmail.com

Поступило в Редакцию 10 декабря 2010 г.

Методами компьютерного моделирования исследуется влияние упругой деформации на фононный спектр и на свойства щелевых дискретных бризеров (ДБ) в кристалле со структурой NaCl для случая значительной разницы масс анионов и катионов. Рассмотрены две моды деформации кристалла: всестороннее растяжение-сжатие и чистый сдвиг. Показано, что плотности фононных состояний заметно изменяются при обоих видах деформации, но частоты щелевых ДБ зависят от деформации всестороннего растяжения-сжатия и практически не зависят от деформации чистого сдвига.

Дискретными бризерами (ДБ) называются локализованные в пространстве колебательные моды большой амплитуды в бездефектной кристаллической решетке. Их существование обеспечивается влиянием ангармонизмов межатомных сил, приводящих к зависимости частоты колебаний атомов от амплитуды. Как правило, в кристаллах реализуется мягкий тип нелинейности, когда частота колебательных мод уменьшается с ростом амплитуды. При достаточно большой амплитуде локализованной колебательной моды ее частота может входить в щель фононного спектра, если таковая имеется. В этом случае колебательная мода (ДБ) перестает излучать энергию в виде малоамплитудных колебаний и, при нулевой температуре кристалла, теоретически может существовать вечно [1].

В течение последних двух десятилетий активно обсуждается роль ДБ в различных физических системах, таких как джозефсоновские сверхпроводящие контакты, нелинейные оптические световоды, бозе-эйнштейновский конденсат и т. д. [2-4].

В последние годы большой интерес вызывает исследование ДБ в физике твердого тела [5–11] и материаловедении [12]. В работе [5] щелевые ДБ были идентифицированы экспериментально в кристалле NaI в состоянии термодинамического равновесия. Возможность их существования в этом кристалле при нулевой температуре была показана ранее методом молекулярной динамики [6]. ДБ были найдены в углеродных нанотрубках, где они играют важную роль в структурных преобразованиях под действием растягивающей нагрузки [13,14]. Локализация энергии в форме щелевых ДБ по механизму анти-Ферми–Паста–Улама исследовалась для двумерного и трехмерного биатомных кристаллов [7,8].

В последнее время активно исследуется возможность модифицирования механических и физических свойств наноразмерных монокристаллов, подвергнутых значительной упругой деформации [15]. Наиболее ярким достижением в этой области является обнаружение возрастания плотности носителей заряда в кремнии на 50% в условиях упругой деформации порядка 1% [15]. В работе [9] исследовалось влияние упругой деформации на спектр двумерного кристалла с межатомным потенциалом Морзе.

В данной работе методом молекулярной динамики исследуется влияние значительной упругой деформации (до 2%) на фоновый спектр и на характеристики щелевых ДБ в кристалле со структурой NaCl и значительной разницей масс анионов и катионов. Выбранный нами уровень деформации (2%) достаточно велик, чтобы существенно повлиять на фоновые спектры кристалла, но возникающие при этом напряжения значительно меньше его теоретической прочности.

Кристалл NaCl состоит из двух ГЦК-подрешеток с параметром решетки a , в узлах одной из них располагаются анионы, а другой — катионы (рис. 1, a). Решетки сдвинуты относительно друг друга на вектор $(a/2, 0, 0)$. Каждый атом имеет шесть соседей противоположного типа, которые находятся в вершинах правильного октаэдра. Таким образом, каждая ячейка периодичности состоит из четырех анионов и четырех катионов.

Взаимодействие атомов описывается парными потенциалами, учитывающими кулоновское взаимодействие, борн-майеровское отталкивание и дисперсионное взаимодействие. Параметры потенциалов даны в работе [8]. Равновесный параметр решетки равен $a = 6.25 \text{ \AA}$. Атомная масса тяжелого атома составляла $M_K = 100 \text{ g/mol}$, а легкого атома —

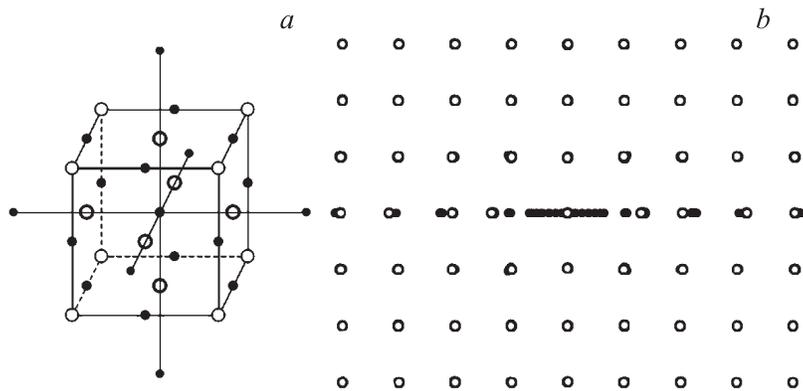


Рис. 1. *a* — кристалл со структурой NaCl: тяжелые (легкие) атомы показаны светлыми (темными) точками. *b* — стробоскопическая картина движения атомов в окрестности ДБ кристалла, подверженного деформации всестороннего сжатия на -2% ; смещения атомов от решеточных положений увеличены в пять раз.

$M_L = 10 \text{ g/mol}$. Большая разница масс компонентов обеспечивает наличие достаточно широкой щели в фононном спектре, что является необходимым условием существования щелевых ДБ.

Расчетная ячейка содержала $8 \times 8 \times 8$ ячеек периодичности кристалла. Для того чтобы избежать влияния свободной поверхности использовалось периодическое продолжение потенциала на границах расчетного блока. Тепловые колебания атомов не вводились, т. е. расчет проводился для нулевой температуры кристалла.

ДБ возбуждался в кристалле следующим образом. В нулевой момент времени один из легких атомов (в центре ячейки периодичности) отклонялся от положения равновесия на малую величину порядка 0.001 \AA , при этом все остальные атомы находились в узлах решетки и начальные скорости всех атомов равнялись нулю. Далее на выбранный атом действовала внешняя сила, направленная к положению его равновесия. Эта сила включалась только на отрезке траектории при приближении атома к положению равновесия, и она равнялась нулю при удалении от положения равновесия. Параметры, регулирующие такой процесс накачки энергии, подбирались таким образом, чтобы обеспечить не

слишком быстрое возрастание амплитуды колебания легкого атома. Когда амплитуда колебаний атома достигала заданной величины, воздействие внешней силы на атом прекращалось.

На рис. 1, *b* представлена стробоскопическая картина движения атомов в окрестности ДБ в кристалле, подверженном деформации всестороннего сжатия на -2% . Смещения атомов от решеточных положений увеличены в пять раз. При выбранных параметрах модели ДБ является сильно локализованным в пространстве. Только один легкий атом имеет большую амплитуду колебаний, около 0.4 \AA .

На рис. 2, *a* представлены плотности фононных состояний кристалла (density of states, DOS) для различных значений деформации всестороннего растяжения-сжатия $\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \varepsilon_{zz} = \varepsilon$: $\varepsilon = -2\%$ — жирная линия, $\varepsilon = 0$ — тонкая линия, $\varepsilon = 2\%$ — пунктирная линия. На рис. 2, *b* показано, как меняется частота ДБ в зависимости от величины деформации. В этом случае речь идет о ДБ с минимально возможной амплитудой, когда его частота близка к верхней границе соответствующей щели. Отметим, что частота ДБ как функция деформации с хорошей точностью может быть аппроксимирована линейной зависимостью

$$\omega_{\text{DB}} = 11.9 - 2.4\varepsilon, \quad (1)$$

где коэффициенты даны в ТГц.

Интересно выяснить, какова частота ДБ по отношению к спектру малоамплитудных колебаний и как она зависит от амплитуды ДБ. Эта информация приведена на рис. 2, *c* для деформации гидростатического растяжения-сжатия $\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \varepsilon_{zz} = \varepsilon$ для $\varepsilon = -2\%$ — темные точки и $\varepsilon = 2\%$ — светлые точки соответственно. Сопоставляя эти данные с рис. 2, *a*, легко заметить, что частоты ДБ лежат в щели спектра, близко к верхней ее границе. С уменьшением амплитуды ДБ его частота растет, в конце концов входя в спектр, что приводит к исчезновению ДБ. Рост частоты моды с уменьшением ее амплитуды свидетельствует о мягком типе нелинейности системы.

На рис. 3, *a* показаны плотности фононных состояний кристалла для случая деформации чистого сдвига в плоскости xu , $\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \varepsilon$, $\varepsilon_{zz} = 0$, для $\varepsilon = \pm 2\%$ — жирная линия и для $\varepsilon = 0$ — тонкая линия соответственно. Заметим, что для рассматриваемой деформации чистого сдвига знак деформации не имеет значения. На рис. 3, *b* показано, как меняется частота ДБ в зависимости от величины деформации для

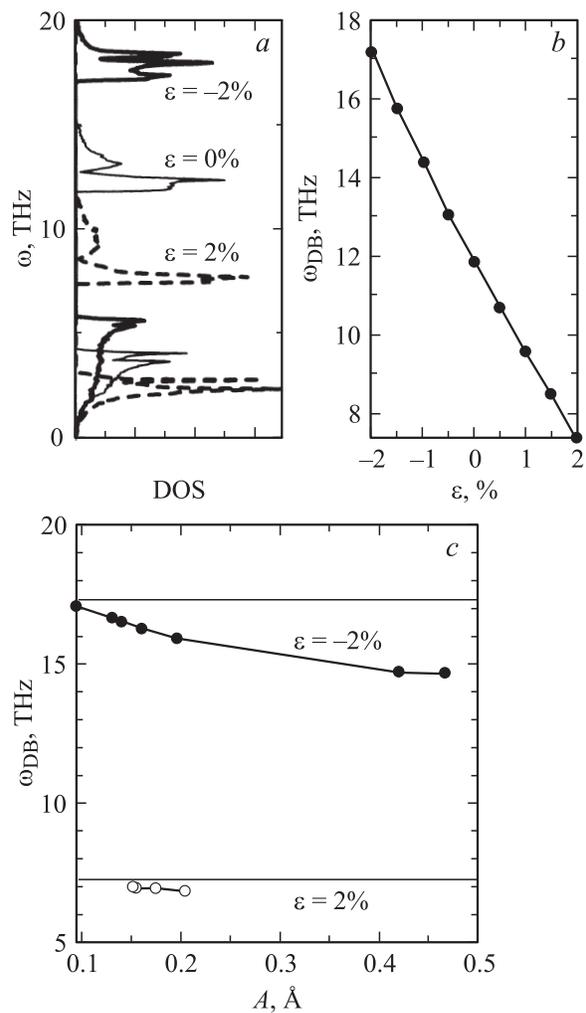


Рис. 2. Результаты для деформации всестороннего растяжения-сжатия $\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \varepsilon_{zz} = \varepsilon$. Плотности фононных состояний кристалла для: *a* — $\varepsilon = -2\%$, *b* — $\varepsilon = 0$, *c* — $\varepsilon = 2\%$; *d* — зависимость частоты ДВ от ε . Зависимость частоты ДВ от его амплитуды при: *e* — $\varepsilon = -2\%$, *f* — $\varepsilon = 2\%$. Горизонтальные линии показывают верхнюю границу щели фононного спектра.

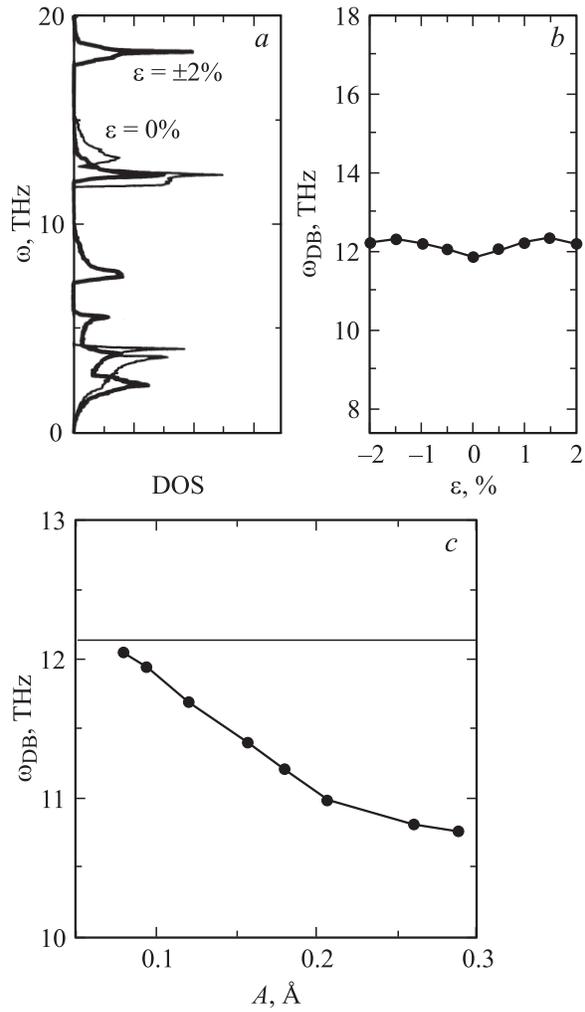


Рис. 3. Результаты для деформации чистого сдвига $\varepsilon_{xx} = -\varepsilon_{yy} = \varepsilon$, $\varepsilon_{zz} = 0$. Плотности фоновых состояний кристалла для: a — $\varepsilon = \pm 2\%$, b — $\varepsilon = 0$. Зависимость частоты ДВ: c — от ε ; d — от его амплитуды для $\varepsilon = \pm 2\%$. Горизонтальная линия показывает верхнюю границу соответствующей щели фоновонного спектра.

ДБ с минимально возможной амплитудой. В данном случае частота ДБ от деформации практически не зависит, т.е. вместо (1) приближенно имеем $\omega_{\text{ДБ}} = 12 \text{ THz}$.

Частота ДБ как функция его амплитуды для деформации чистого сдвига, $\epsilon_{xx} = -\epsilon_{yy} = \epsilon$, $\epsilon_{zz} = 0$ при $\epsilon = \pm 2\%$ дана на рис. 3, с.

Как видно из сравнения рис. 2, а с рис. 3, а, упругая деформация всестороннего растяжения-сжатия приводит к изменению ширины щели спектра, а деформация сдвига — к появлению нескольких щелей за счет расщепления частот различных мод оптических колебаний.

В заключение отметим, что в данной работе методом молекулярной динамики исследовано влияние упругой деформации на плотность фононных состояний и частоты щелевых ДБ в кристалле со структурой NaCl при значительной разнице масс анионов и катионов. Были рассмотрены две моды деформации кристалла: всестороннего растяжения-сжатия и чистого сдвига для величин упругой деформации вплоть до 2%. Показано, что оба вида деформации существенно влияют на плотность фононных состояний, однако частоты щелевых ДБ зависят от деформации всестороннего растяжения-сжатия, но не от деформации чистого сдвига.

Список литературы

- [1] *Sievers A.J., Takeno S.* // Phys. Rev. Lett. 1988. V. 61. P. 970–973.
- [2] *Flach S., Gorbach A.V.* // Phys. Rep. 2008. V. 467. P. 1–116.
- [3] *Campbell D.K., Flach S., Kivshar Yu.S.* // Phys. Today. 2004. V. 571. P. 43–49.
- [4] *Kivshar Yu.S., Agrawal G.P.* // Optical Solitons: From Fibers to Photonic Crystals. New York: Academic, 2003.
- [5] *Manley M.E., Sievers A.J., Lynn J.W., Kiselev S.A., Agladze N.I., Chen Y., Llobet A., Alatos A.* // Phys. Rev. B. 2009. V. 79. P. 134304 (5).
- [6] *Kiselev S.A., Sievers A.J.* // Phys. Rev. B. 1997. V. 55. P. 5755 (4).
- [7] *Dmitriev S.V., Sukhorukov A.A., Pshenichnuuk A.I., Khadeeva L.Z., Iskandarov A.M., Kivshar Yu.S.* // Phys. Rev. B. 2009. V. 80. P. 094302 (9).
- [8] *Khadeeva L.Z., Dmitriev S.V.* // Phys. Rev. B. 2010. V. 81. P. 214306 (8).
- [9] *Дмитриев С.В., Медведев Н.Н., Мулюков Р.Р., Пожидаева О.В., Потемкаев А.И., Старостенков М.Д.* // Изв. вузов. Физика. 2008. Т. 51. В. 8. С. 73–79.
- [10] *Медведев Н.Н., Старостенков М.Д., Захаров П.В., Пожидаева О.В.* // Письма в ЖТФ. 2011. Т. 37. В. 3. С. 7–15.

- [11] *Дмитриев С.В., Хадеева Л.З., Пиенчик А.И., Медведев Н.Н.* // ФТТ. 2010. Т. 52. В. 7. С. 1398–1403.
- [12] *Manley M.E.* // Acta Mater. 2010. V. 58. P. 2926.
- [13] *Shimada T., Shirasaki D., Kitamura T.* // Phys. Rev. B. 2010. V. 81. P. 035401 (4).
- [14] *Kinoshita Y., Yamayose Y., Doi Y., Nakayani A., Kitamura T.* // Phys. Rev. B. 2008. V. 77. P. 024307 (6).
- [15] *Zhu T., Li J.* / Progr. Mater. Sci. 2010. V. 55. P. 710–757.