

Влияние упругой деформации на плотность фононных состояний и характеристики щелевых дискретных бризеров в кристалле со структурой NaCl

© С.В. Дмитриев, Ю.А. Баимова

Институт проблем сверхпластичности металлов РАН,
450001 Уфа, Россия
e-mail: julia.a.baimova@gmail.com

(Поступило в Редакцию 15 февраля 2011 г.)

Значительная упругая деформация может приводить к заметному изменению физических свойств кристаллических тел, что легло в основу технологии упругих напряжений, интенсивно развиваемой в последние годы. Методом молекулярной динамики исследовано влияние упругой деформации на плотность фононных состояний и на свойства щелевых дискретных бризеров в кристалле со структурой NaCl для значительной разницы масс анионов и катионов. Рассмотрено несколько различных мод деформации кристалла. Показано, что сдвиговые компоненты тензора деформации могут приводить к заметным изменениям в плотности фононных состояний, но слабо влияют на частоты дискретных бризеров. Деформация сжатия (растяжения) приводит к повышению (понижению) частот дискретных бризеров соответствующей поляризации.

Введение

В последние годы активно исследуется возможность модификации механических и физических свойств кристаллических тел путем значительной упругой деформации [1]. Наиболее ярким достижением в этой области является обнаружение возрастания плотности носителей заряда в кремнии на 50% в условиях упругой деформации порядка 1% [1]. Достичь столь значительной упругой деформации можно только при приближении к теоретической прочности кристалла, что оказывается возможным для наноразмерных объектов [1–3]. Например, исследовалось влияние упругой деформации на теплопроводность кремниевых нановолокон и углеродных нанотрубок [2], а также на оптические свойства графена [3]. В работе [4] исследовалось влияние упругой деформации на спектр двумерного кристалла с межатомным потенциалом Морзе.

В настоящей работе изучается влияние упругой деформации на свойства щелевых дискретных бризеров (ДБ) в модельном кристалле со структурой NaCl. ДБ — это 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 [5], при котором 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 [6].

Роль ДБ активно обсуждается в течение последних двух десятилетий в различных физических си-

стемах таких, как джозефсоновские сверхпроводящие контакты, нелинейные оптические световоды, бозе–эйнштейновский конденсат и т.д. [7–9]. В последние годы большой интерес вызывает исследование ДБ в физике твердого тела [5,10–14] и материаловедении [15]. В работе [10] 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 [11]. ДБ были найдены в углеродных нанотрубках, где они играют важную роль в структурных преобразованиях под действием растягивающей нагрузки [16,17].

С учетом работ [10,11] также рассматриваем кристалл со структурой NaCl со значительной разницей масс анионов и катионов, по методу молекулярной динамики исследуем влияние значительной упругой деформации (до 0.02) на плотность фононных состояний и на харак-

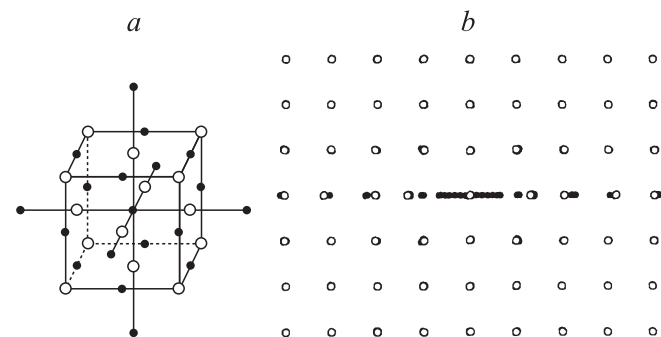


Рис. 1. *a* — кристалл со структурой NaCl. Тяжелые (легкие) атомы показаны светлыми (темными) символами. *b* — стробоскопическая картина движения атомов в окрестности дискретных бризеров для кристалла, подверженного деформации всестороннего сжатия на -0.02 . Смещения атомов от решеточных положений увеличены в 5 раз.

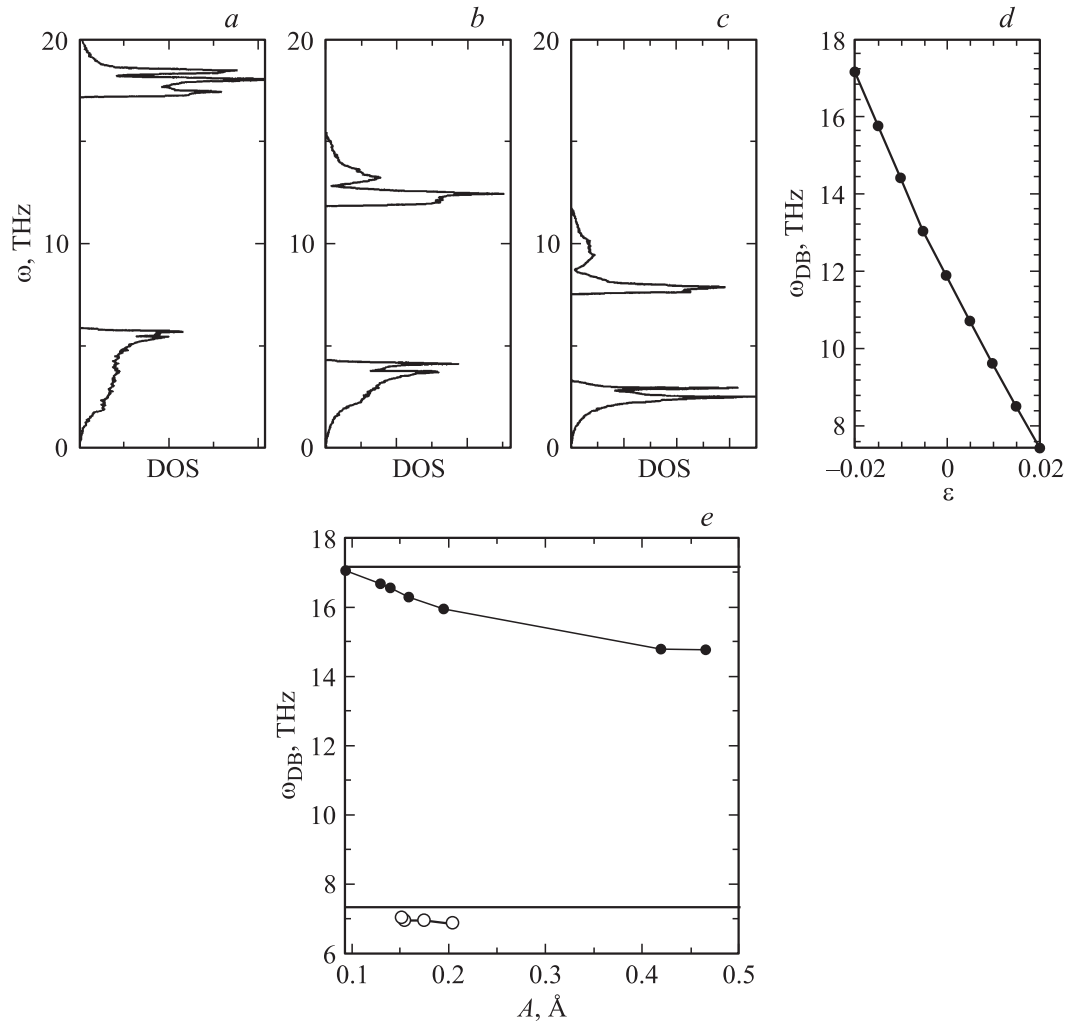


Рис. 2. Результаты для деформации всестороннего растяжения-сжатия $\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \varepsilon_{zz} = \varepsilon$. Плотности фоновых состояний кристалла для a — $\varepsilon = -0.02$, b — $\varepsilon = 0$, c — $\varepsilon = 0.02$. d — зависимость частоты ДБ от ε для ДБ с минимально возможной амплитудой, e — зависимость частоты ДБ от его амплитуды при $\varepsilon = -0.02$ (темные символы) и $\varepsilon = 0.02$ (светлые символы). Горизонтальные линии показывают верхнюю границу щели фоновонного спектра.

теристики щелевых ДБ. Выбранный нами максимальный уровень деформации (0.02) достаточно велик, чтобы существенно повлиять на фоновонные спектры кристалла, но возникающие при этом напряжения значительно меньше его теоретической прочности. Настоящая работа продолжает исследование, опубликованное в [18].

1. Описание модели

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 [12]. Равновесный параметр решетки равен $a = 6.25 \text{ \AA}$. Атомная масса тяжелого атома составляла $M_K = 100 \text{ g/mol}$, а легкого атома — $M_L = 10 \text{ g/mol}$. Большая разница масс компонент обеспечивает наличие достаточно широкой щели в фоновонном 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

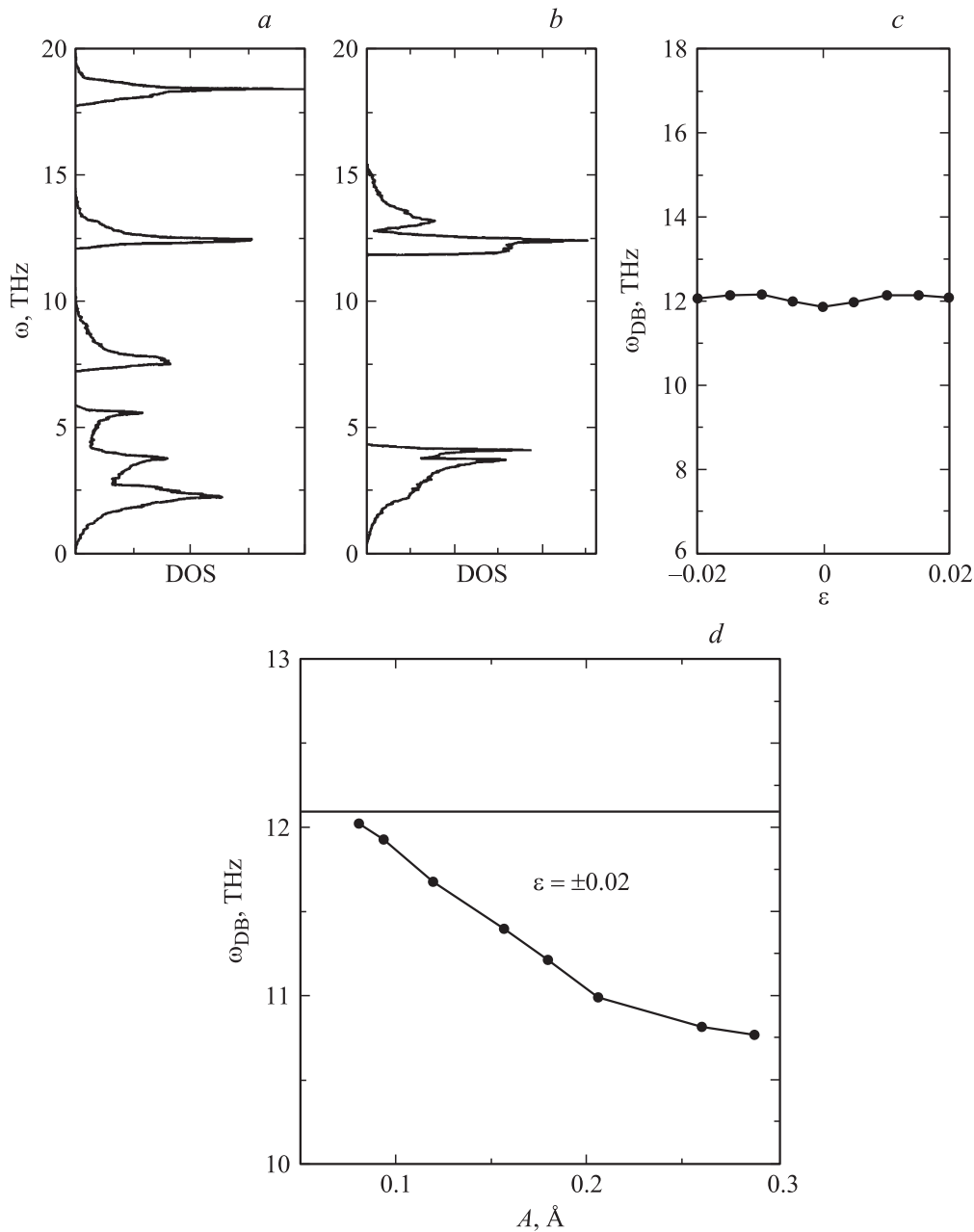


Рис. 3. Результаты для деформации чистого сдвига в плоскости xy : $\varepsilon_{xx} = -\varepsilon_{yy} = \varepsilon$, $\varepsilon_{zz} = 0$. Плотности фоновых состояний кристалла для a — $\varepsilon = \pm 0.02$, b — $\varepsilon = 0$, c — зависимость частоты ДБ от ε для ДБ с минимально возможной амплитудой, d — зависимость частоты ДБ от его амплитуды для $\varepsilon = \pm 0.02$. Горизонтальная линия показывает верхнюю границу соответствующей щели фоновонного спектра.

(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.

2. Результаты моделирования

На рис. 1, b представлена стробоскопическая картина движения атомов в окрестности ДБ в кристалле, подтверждением деформации всестороннего сжатия

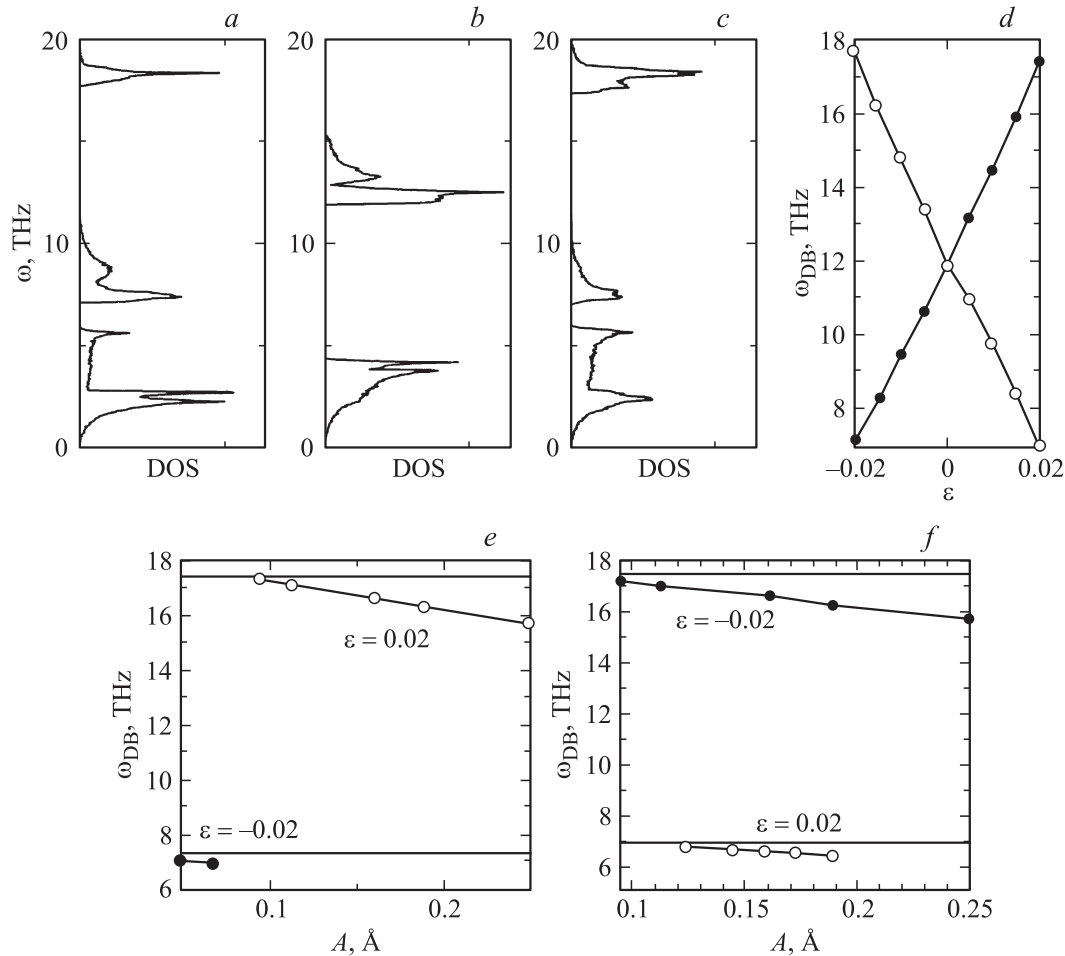


Рис. 4. Результаты для деформации $\varepsilon_{xx} = -\varepsilon_{yy} = -\varepsilon_{zz} = \varepsilon$. Плотности фоновых состояний кристалла для a — $\varepsilon = -0.02$, b — $\varepsilon = 0$, c — $\varepsilon = 0.02$, d — частоты ДБ с минимально возможной амплитудой в зависимости от ε для ДБ, колеблющегося в направлении x (светлые символы) и y или z (темные символы). e — зависимости частоты ДБ, колеблющегося в направлении x , от его амплитуды при $\varepsilon = -0.02$ (темные символы) и $\varepsilon = 0.02$ (светлые символы). f — то же, что и на рис. e , но для ДБ, колеблющегося в направлении y или z . Горизонтальные линии на рис. e и f показывают верхнюю границу щели фонованого спектра.

$\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \varepsilon_{zz} = -0.02$. Смещения атомов от решеточных положений увеличены в 5 раз. Тяжелые (легкие) атомы показаны светлыми (темными) символами. 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 – c представлены плотности фоновых состояний кристалла (density of states, DOS) для различных значений деформации всестороннего растяжения–сжатия $\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \varepsilon_{zz} = \varepsilon$. Для данной моды деформации кристалл устойчив при $-0.039 \leq \varepsilon \leq 0.032$. Вне этого диапазона деформаций в спектре колебаний появляются мнимые частоты. В силу высокой симметрии данного вида деформации ДБ, колеблющиеся в направлении осей x , y и z , эквивалентны. Нам не удалось возбудить устойчивость ДБ с направлением колебаний, отличным от $[100]$. На рис. 2, d показано как меняется частота ДБ в зависимости от величины деформации. Здесь 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

$$\omega_{DB} = \omega_0 + \alpha\varepsilon, \quad (1)$$

где $\omega_0 = 11.9 \text{ THz}$ — частота ДБ в недеформированном кристалле и $\alpha = -240 \text{ THz}$. Интересно выяснить, как частота ДБ зависит от его амплитуды. Эта информация приведена на рис. 2, e для деформации всестороннего растяжения–сжатия при $\varepsilon = -0.02$ и $\varepsilon = 0.02$ соответственно. Сопоставляя эти данные с рис. 2, a, c , 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. Это приводит к исчезновению ДБ. Рост частоты моды с уменьшением ее амплитуды свидетельствует о мягком типе нелинейности системы.

На следующих рисунках приводятся результаты, аналогичные тем, что представлены на рис. 2, но для других мод упругой деформации кристалла.

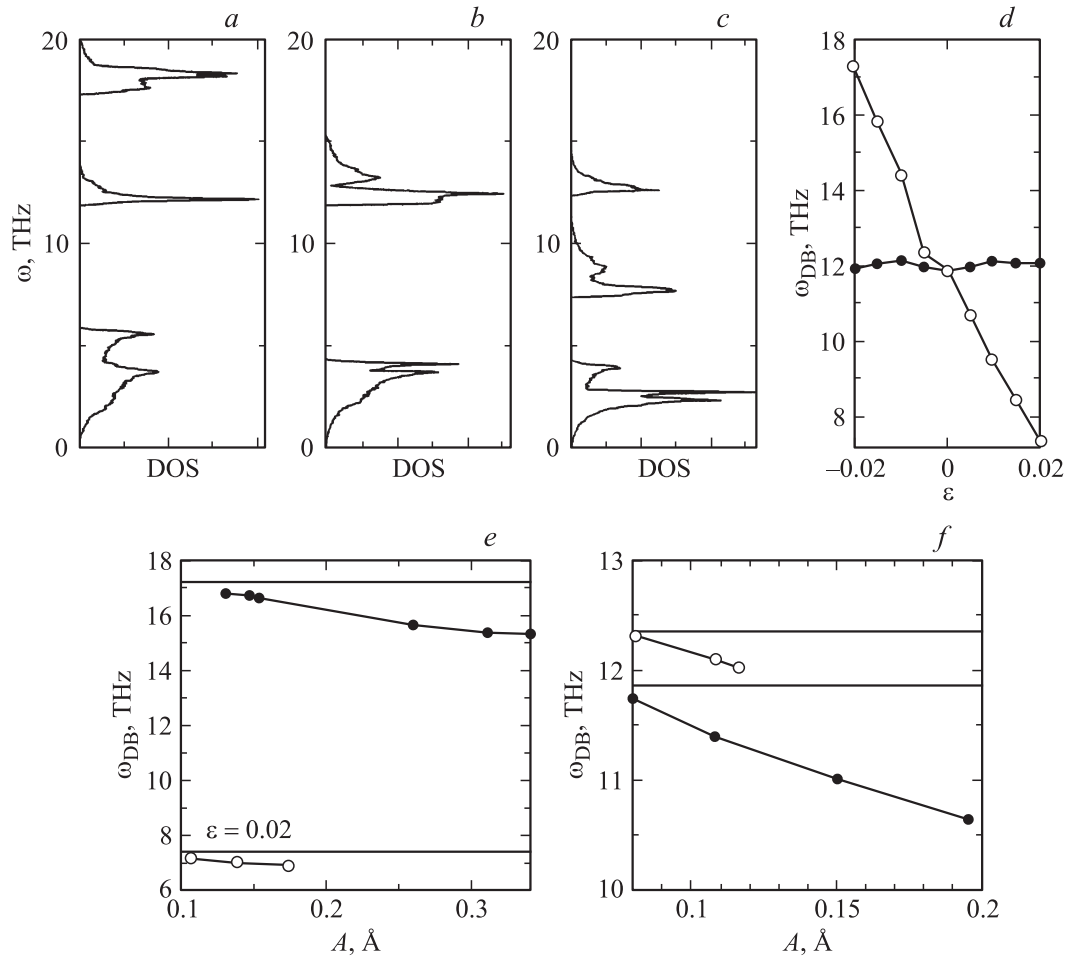


Рис. 5. Результаты для деформации $\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \varepsilon$, $\varepsilon_{zz} = 0$. Плотности фоновых состояний кристалла для a — $\varepsilon = -0.02$, b — $\varepsilon = 0$, c — $\varepsilon = 0.02$, d — зависимости частоты ДБ от ε для ДБ с минимально возможной амплитудой, колеблющегося в направлении x или y (светлые символы) и z (темные символы), e — частота ДБ как функция его амплитуды в случае колебания в направлении x или y , для $\varepsilon = -0.02$ (темные символы) и $\varepsilon = 0.02$ (светлые символы). f — то же, что и на рис. e , но для ДБ, колеблющегося в направлении z . Горизонтальные линии на рис. e и f показывают верхние границы щели фоновонного спектра.

Результаты моделирования

Вид упругой деформации	Границы устойчивости кристалла	Направление колебания ДБ	Коэффициент α в выражении (1), ТГц
$\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \varepsilon_{zz} = \varepsilon$	$-0.039 \leq \varepsilon \leq 0.032$	x, y или z	-240
$\varepsilon_{xx} = -\varepsilon_{yy} = \varepsilon, \varepsilon_{zz} = 0$	$-0.032 \leq \varepsilon \leq 0.032$	z	0
$\varepsilon_{xx} = -\varepsilon_{yy} = -\varepsilon_{zz} = \varepsilon$	$-0.032 \leq \varepsilon \leq 0.032$	x	-260
		y или z	-260
$\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \varepsilon, \varepsilon_{zz} = 0$	$-0.040 \leq \varepsilon \leq 0.032$	x или y	-250
		z	0

На рис. 3, a, b показаны плотности фоновых состояний кристалла для случая деформации чистого сдвига в плоскости xy .

Кристалл устойчив в пределах $-0.032 \leq \varepsilon \leq 0.032$. Заметим, что в данном случае знак деформации не имеет значения, и нам удалось возбудить только ДБ, колеблющийся в направлении оси z . На рис. 3 для

ДБ с минимально возможной амплитудой показано как меняется его частота в зависимости от величины деформации. В данной случае частота ДБ от деформации практически не зависит, (рис. 3, c), т.е. в выражении (1) $\alpha = 0$. Частота ДБ как функция его амплитуды A , при деформации чистого сдвига, при $\varepsilon = \pm 0.02$ дана на рис. 3, d .

На рис. 4, *a-c* даны плотности фоновых состояний кристалла при деформации вида $\varepsilon_{xx} = -\varepsilon_{yy} = -\varepsilon_{zz} = \varepsilon$. Границы устойчивости кристалла для данного вида деформации $-0.032 \leq \varepsilon \leq 0.032$. На рис. 4, *d* показано как меняется частота ДБ с минимально возможной амплитудой колебаний в зависимости от величины деформации. Светлым символом соответствует ДБ, колеблющийся в направлении x (направление растяжения), а темным — в направлении y или z (направления сжатия). Частота ДБ как функция деформации с хорошей точностью может быть аппроксимирована линейной зависимостью (1) с $\alpha = -260$ ТГц вне зависимости от поляризации бризера. Частота ДБ как функция его амплитуды A для ДБ, колеблющегося в направлении x , показана на рис. 4, *e* для $\varepsilon = -0.02$ и $\varepsilon = 0.02$. То же, но для ДБ, колеблющегося в направлении y или z , показано на рис. 4, *f*.

На рис. 5, *a-c* представлены плотности фоновых состояний кристалла для деформации вида $\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \varepsilon$, $\varepsilon_{zz} = 0$. Границы устойчивости кристалла для данного вида деформации $-0.040 \leq \varepsilon \leq 0.032$. На рис. 5, *d* показано как меняется частота ДБ с минимально возможной амплитудой в зависимости от величины деформации. Светлые символы соответствуют ДБ, колеблющемуся в направлении x или y , а темные — в направлении z . В первом случае коэффициент в выражении (1) равен $\alpha = -250$ ТГц, а во втором частота ДБ практически не зависит от деформации, т.е. приближенно имеем $\alpha = 0$. Частота ДБ как функция его амплитуды для ДБ, колеблющегося в направлении x или y , показана на рис. 5, *e* для $\varepsilon = -0.02$ и $\varepsilon = 0.02$. То же, но для ДБ, колеблющегося в направлении z , показано на рис. 5, *f*.

3. Обсуждение результатов и выводы

В данной работе с помощью метода молекулярной динамики исследовано влияние упругой деформации на плотность фоновых состояний и на частоты щелевых ДБ различной поляризации в кристалле со структурой NaCl при значительной разнице масс анионов и катионов. Были рассмотрены четыре вида упругой деформации:

всестороннее растяжение–сжатие $\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \varepsilon_z = \varepsilon$;
 чистый сдвиг в плоскости xy $\varepsilon_{xx} = -\varepsilon_{yy} = \varepsilon$, $\varepsilon_{zz} = 0$;
 растяжение (сжатие) вдоль оси x с одновременным сжатием (растяжением) в плоскости yz $\varepsilon_{xx} = -\varepsilon_{yy} = -\varepsilon_{zz} = \varepsilon$;

растяжение–сжатие в плоскости xy при нулевой деформации в направлении оси z $\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \varepsilon$, $\varepsilon_{zz} = 0$.

Для всех случаев исследован диапазон величины деформации $-0.02 \leq \varepsilon \leq 0.02$ и результаты сведены в таблицу.

Прежде всего отметим, что упругая деформация любого вида оказывает заметное влияние на плотность фоновых состояний, как видно из соответствующих результатов, представленных на рис. 2–5. При этом деформация всестороннего растяжения–сжатия приводит к изменению ширины щели спектра (рис. 2, *a-c*), а другие

моды деформации приводят к появлению нескольких щелей за счет расщепления частот различных мод оптических колебаний.

С другой стороны, на частоты ДБ заметное влияние оказывают только деформации растяжения–сжатия, но не деформация сдвига. Примечательно, что растяжение–сжатие в одном из направлений [100], существенно изменяя частоту ДБ, колеблющегося в этом направлении, практически не сказывается на частоте ДБ, колеблющегося в другом направлении. Более того, коэффициент α , показывающий чувствительность частоты ДБ к деформации растяжения–сжатия (см. выражение (1)), оказывается близким по величине для различных сочетаний деформаций вдоль осей x , y и z , составляя примерно -250 ТГц, как видно из таблицы. С учетом того, что частота ДБ в отсутствие упругой деформации равна примерно 12 ТГц, даже не очень значительная деформация, скажем, 10^{-3} , приведет к изменению частоты ДБ на 0.25 ТГц, т.е. на 2%, что может быть измерено экспериментально.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ грант 10-08-90012-Бел_а.

Список литературы

- [1] Zhu T., Li J. // *Progr. Mater. Sci.* (2010) Vol. 55. P. 710–757.
- [2] Li X., Maute K., Dunn M.L., Yang R. // *Phys. Rev. B*. 2010. Vol. 81. P. 245 318 (11).
- [3] Pellegrino F.M.D., Angilella G.G.N., Pucci R. // *Phys. Rev. B*. 2010. Vol. 81. P. 035 411 (12).
- [4] Дмитриев С.В., Медведев Н.Н., Мулюков Р.Р., Пожудаева О.В., Потеев А.И., Старостенков М.Д. // *Изв. вузов. Физика*. 2008. Т. 51. Вып. 8. С. 73–79.
- [5] Dmitriev S.V., Sukhorukova A.A., Pshenichyuk A.I., Khadeeva I.Z., Iskandarov A.M., Kivshar Yu.S. // *Phys. Rev. B*. 2009. Vol. 80. P. 094 302 (9).
- [6] Sievers A.J., Takeno S. // *Phys. Rev. Lett.* 1988. Vol. 61. P. 970–973.
- [7] Flash S., Gorbach A.V. // *Phys. Rep.* 2008. Vol. 467. P. 1–116.
- [8] Campbell D.K., Flach S., Kivshar Yu.S. // *Phys. Today*. 2004. Vol. 57. P. 43–49.
- [9] Kivshar Yu.S., Agrawal G.P. *Optical Solitons: From Fibers to Photonic Crystals* Academic. N.Y., 2003.
- [10] Manley M.E., Sievers A.J., Lynn J.W., Kiselev S.A., Agladze N.I., Chen Y., Llobet A., Alatas A. // *Phys. Rev. B*. 2009. Vol. 79. P. 134 304 (5).
- [11] Kiselev S.A., Sievers A.J. // *Phys. Rev. B*. 1997. Vol. 55. P. 5755 (4).
- [12] Khadeeva L.Z., Dmitriev S.V. // *Phys. Rev. B*. 2010. Vol. 81. P. 214 306 (8).
- [13] Медведев Н.Н., Старостенков М.Д., Захаров П.В., Пожудаева О.В. // *Письма в ЖТФ*. 2011. Т. 37. Вып. 3. С. 7–15.
- [14] Дмитриев С.В., Хадеева Л.З., Пиеничнюк А.И., Медведев Н.Н. // *ФТТ* 2010. Т. 52. Вып. 7. С. 1398–1403.
- [15] Manley M.E. // *Acta Mater.* 2010. Vol. 58. P. 2926.
- [16] Shimada T., Shirasaki D., Kitamura T. // *Phys. Rev. B*. 2010. Vol. 81. P. 035 401 (4).
- [17] Kinoshita Y., Yamayose Y., Doi Y., Nakatani A., Kitamura T. // *Phys. Rev. B*. 2008. Vol. 77. P. 024 307 (6).
- [18] Дмитриев С.В., Баимова Ю.А. // *Письма в ЖТФ*. 2011. Т. 37. Вып. 10. С. 13–20.