

Щелевые дискретные бризеры в двухкомпонентном трехмерном и двумерном кристаллах с межатомными потенциалами Морзе

© С.В. Дмитриев¹, Л.З. Хадеева¹, А.И. Пшеничнюк¹, Н.Н. Медведев²

¹ Институт проблем сверхпластичности металлов РАН,
Уфа, Россия

² Бийский педагогический государственный университет,
Бийск, Россия

E-mail: dmitriev.serгей.v@gmail.com

(Поступила в Редакцию в окончательном виде 23 декабря 2009 г.)

Методом молекулярной динамики исследуются свойства щелевых дискретных бризеров в трехмерном и двумерном кристаллах состава A_3B с межатомными связями, описываемыми потенциалами Морзе, при различных соотношениях масс компонентов m_A/m_B . Для двумерного кристалла также исследуется процесс перехода к тепловому равновесию из состояния, далекого от него. При этом в кристалле возбуждается коротковолновая колебательная фоннная мода, которая при не слишком малых амплитудах оказывается модуляционно неустойчивой. В процессе перехода к состоянию с равным распределением энергии между всеми колебательными модами кристалла наблюдается локализация энергии в виде щелевых дискретных бризеров, которые существуют на временных интервалах, на несколько порядков превосходящих их период колебаний.

Работа поддержана грантами РФФИ № 09-08-00695-а, 08-02-91316-ИНД_а, грантом Академии наук Республики Башкортостан „Поволжье“ № 40/61-П и грантом фонда „Интелс“ (г. Магнитогорск).

1. Введение

Физика нелинейных явлений развивается в течение нескольких последних десятилетий как междисциплинарная область знаний. В последнее время наметилась тенденция активного проникновения идей и методов физики нелинейных явлений в различные разделы физики, в том числе и в физику твердого тела. Например, одним из вопросов, интенсивно изучаемых в последнее время в контексте нелинейной динамики кристаллической решетки, является роль нелинейных локализованных колебательных мод в бездефектной решетке. Такие моды получили название дискретных бризеров (ДБ). Возможность существования ДБ как точных решений нелинейных дискретных уравнений доказана в целом ряде уже ставших классическими работ [1,2]. Дискретные бризеры экспериментально наблюдаются в нелинейной оптике [3], джозефсоновских сверхпроводящих контактах [4] и других разделах физики [5]. Недавно были получены экспериментальные доказательства существования щелевых ДБ в кристалле NaI в состоянии теплового равновесия [6]. Однако вопросы о возможных механизмах возникновения щелевых ДБ в моделях кристаллов с реалистичными нелинейными взаимодействиями, а также об их роли в различных физических процессах остаются весьма слабо изученными.

Ферми, Паста и Улам (ФПУ) на заре компьютерной техники провели численный эксперимент по установлению в одномерной цепочке теплового равновесия, характеризуемого равномерным распределением энергии по всем колебательным модам, возбудив в начальный момент времени всего одну моду с наибольшей длиной волны [7]. Оказалось, что закаченная таким образом энергия сначала делится между некоторыми другими модами,

но затем значительная ее часть возвращается обратно в самую длинную моду, и этот процесс повторяется несколько раз, до тех пор пока в системе не установится тепловое равновесие. Прошло несколько десятилетий, прежде чем были проведены серьезные исследования в аналогичной постановке, но при возбуждении самой короткой моды [8]. Эта проблема нередко называется анти-ФПУ, и сценарий перехода к тепловому равновесию здесь оказался качественно иным. Модуляционная неустойчивость коротковолновой моды, имеющей не слишком малую амплитуду, приводит к разрушению ее симметрии и к постепенной локализации энергии в виде ДБ, часто называемых хаотическими [8]. ДБ имеют частоту, лежащую вне фононного спектра, и потому излучают энергию весьма медленно, что обеспечивает их существование в течение долгого времени. По истечении этого времени энергия оказывается равномерно распределенной по всем колебательным модам.

В настоящей работе изучается возможность существования щелевых дискретных бризеров в трехмерном и двумерном кристаллах состава A_3B с межатомными взаимодействиями, описываемыми потенциалами Морзе, при различных отношениях масс тяжелых (A) и легких (B) атомов. Кроме того, рассматривается явление локализации энергии по анти-ФПУ-механизму в двумерном кристалле при значительной разнице масс компонентов, что обеспечивает наличие достаточно широкой щели в спектре малоамплитудных колебаний кристалла, а также существование сильно локализованных щелевых ДБ [9–15].

Парные межатомные потенциалы, в том числе потенциалы Морзе, не могут воспроизвести некоторые важные свойства определенных кристаллов (в особенности металлов). Однако, на наш взгляд, потенциал

Морзе существенно ближе к действительности по сравнению с упрощенными законами взаимодействия, часто используемыми в теоретическом анализе ДБ (учет взаимодействия только ближайших соседей и ангармонизмов простейшего полиномиального вида) [9–12,16–19]. Таким образом, представляется важным исследование вопроса о возможности существования ДБ в кристалле с морзевскими межатомными взаимодействиями.

2. Описание компьютерного эксперимента

Нами рассматривается трехмерный кристалл состава A_3B на основе ГЦК-решетки, имеющий сверхструктуру $L1_2$ с пространственной группой симметрии $Pm-3m$, а также двумерная модель, представляющая собой плоскость (111) этого кристалла (рис. 1).

Взаимодействие атомов задается парными потенциалами Морзе:

$$\phi_{KL}(r_{ij}) = D_{KL}\beta_{KL}e^{-\alpha_{KL}r_{ij}}(\beta_{KL}e^{-\alpha_{KL}r_{ij}} - 2), \quad (1)$$

где использовались следующие параметры [20]: $\alpha_{AA} = 1.36605 \text{ \AA}^{-1}$, $\beta_{AA} = 41.0494$, $D_{AA} = 0.470513 \text{ eV}$, $\alpha_{BB} = 1.02658 \text{ \AA}^{-1}$, $\beta_{BB} = 27.4979$, $D_{BB} = 0.318004 \text{ eV}$, $\alpha_{AB} = 1.16809 \text{ \AA}^{-1}$, $\beta_{AB} = 27.1260$, $D_{AB} = 0.4995026 \text{ eV}$.

При радиусе обрезки потенциала 16 \AA равновесный параметр трехмерной ГЦК-решетки составил 3.25 \AA , а для двумерной гексагональной решетки он оказался равным 2.6 \AA . Масса атома A составляет $9.75 \cdot 10^{-26} \text{ kg}$, а масса атома B варьировалась, оставаясь всегда меньше массы атома A [13].

Расчетная ячейка с наложенными периодическими граничными условиями содержала в трехмерном случае $12 \times 12 \times 12$ и в двумерном случае 32×32 ячеек периодичности кристалла, в каждой из которых, согласно рассмотренной стехиометрии, находилось по три атома A и по одному атому B .

Использовались два типа начальных условий. Первый из них состоял в задании отклонения одного легкого атома из положения равновесия, при этом остальные

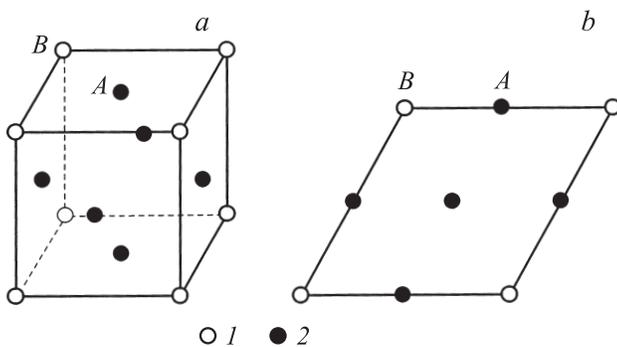


Рис. 1. Ячейки периодичности сверхструктуры $L1_2$ (a) и двумерного кристалла, представляющего собой плоскость (111) сверхструктуры $L1_2$ (b). 1, 2 — атомы легкого и тяжелого компонентов соответственно.

атомы находились в положениях равновесия и начальные скорости всех атомов равнялись нулю. Таким образом, мы пытались возбудить ДБ в трехмерном и двумерном кристаллах. Второй тип начальных условий применялся только для двумерного кристалла при исследовании анти-ФПУ-механизма локализации энергии. В этом случае в начальный момент времени атомы сорта B выводились из положения равновесия следующим образом:

$$u_{m,n,4} = \alpha_u \cos(q_x m + q_y n),$$

$$v_{m,n,4} = \alpha_v \cos(q_x m + q_y n), \quad (2)$$

где $u_{m,n,i}$, $v_{m,n,i}$ — компоненты вектора перемещения атома m , n , i из решеточного положения, α_u , α_v — амплитуды моды, а ее поляризация задавалась компонентами волновых векторов q_x , q_y . Индексы $1 \leq m, n \leq 32$ определяют номер примитивной ячейки кристалла в пределах расчетной ячейки, а $1 \leq i \leq 4$ — номер атома в данной примитивной ячейке (легкие атомы располагались в узлах подрешетки $i = 4$). При этом начальные смещения атомов сорта A , а также начальные скорости всех атомов были нулевые. Таким образом, в кристалле возбуждалась коротковолновая колебательная мода, в которой колебались только легкие атомы.

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

В процессе интегрирования осуществляется мониторинг следующих параметров: кинетическая, потенциальная и полная энергии атомов, усредненных в пределах временного интервала, содержащего несколько периодов колебания атомов, а также параметр локализации, определяемый следующим образом:

$$L = \frac{\sum E_k^2}{(\sum E_k)^2}, \quad (3)$$

где E_k — полная энергия атома, усредненная по нескольким периодам колебания; суммирование в формуле (3) выполняется по всем легким атомам (тяжелые атомы не включаются в расчет L).

3. Результаты моделирования

3.1. Дискретные бризеры. На рис. 2 представлены спектры малоамплитудных колебаний рассматриваемого трехмерного кристалла при различных отношениях масс компонентов: $m_A/m_B = 2.18, 3.91, 5.87$ и 9.79 . На рис. 3 показаны аналогичные результаты, полученные для двумерного кристалла. Как видно из рисунков, уменьшение массы атомов сорта B приводит к значительному росту частот ряда оптических мод (всего имеется двенадцать мод в трехмерном и восемь мод в двумерном кристаллах по числу степеней свободы атомов примитивной ячейки), в результате чего в спектре может образовываться широкая запрещенная зона.

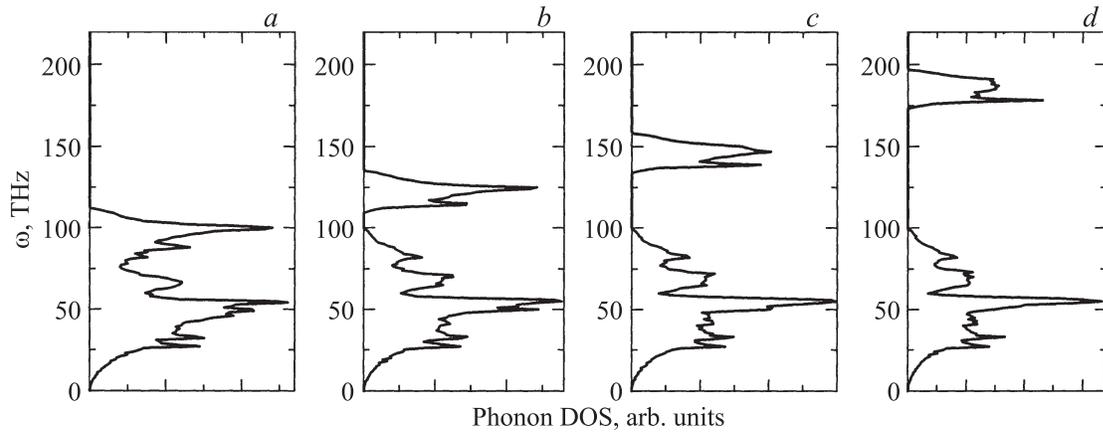


Рис. 2. Плотности фоновых состояний трехмерного кристалла при различных отношениях масс атомов компонентов, достигавшихся изменением массы легкого компонента B . $m_A/m_B = 2.18$ (a), 3.91 (b), 5.87 (c) и 9.79 (d).

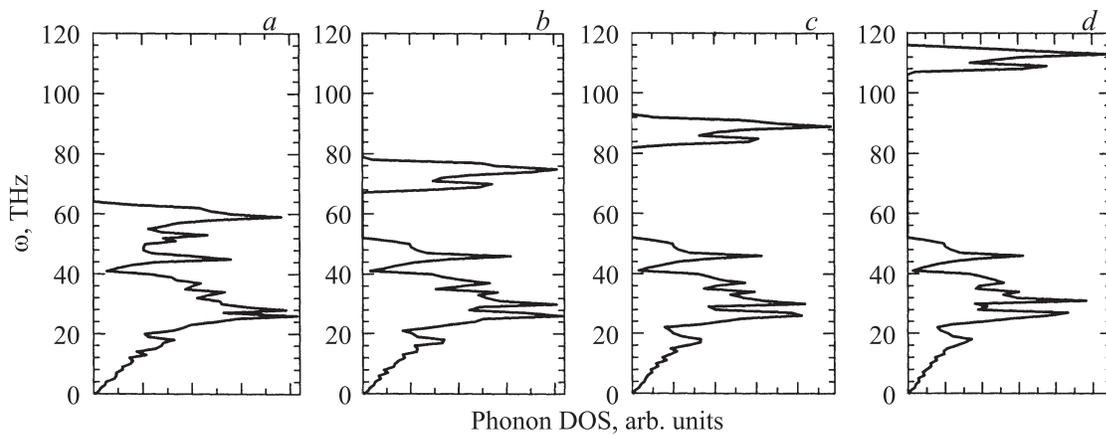


Рис. 3. То же, что на рис. 2, для двумерного кристалла.

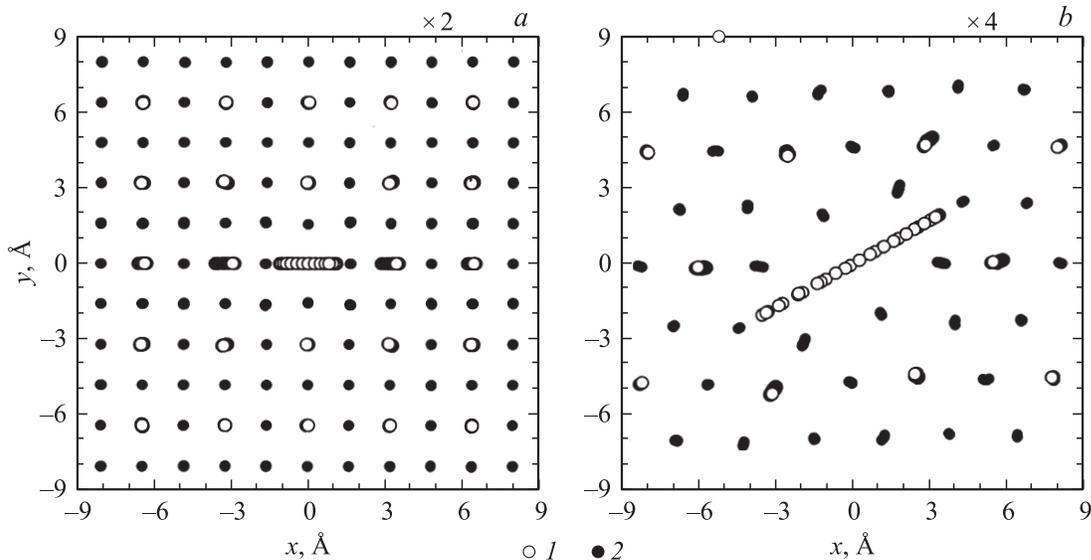


Рис. 4. Стробоскопическое представление движения атомов в щелевых ДБ для трехмерного (a) двумерного (b) кристаллов с отношением масс компонентов $m_A/m_B = 9.79$. Смещения атомов из положения равновесия увеличены в два (a) и в четыре раза (b). 1, 2 — атомы легкого и тяжелого компонентов соответственно.

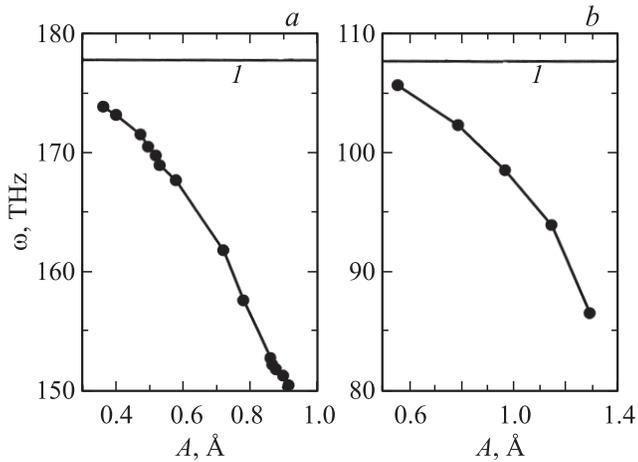


Рис. 5. Зависимость частоты от амплитуды для щелевых ДБ в трехмерном (а) и двумерном (б) кристаллах для $m_A/m_B = 9.79$. 1 — положение верхней границы запрещенной зоны фононного спектра (см. рис. 2 и 3 соответственно).

Наличие щели в спектре фононных колебаний кристалла позволяет искать щелевые ДБ. Они действительно могут быть легко возбуждены путем задания в нулевой момент времени достаточно большого отклонения одного из легких атомов из положения равновесия (все другие атомы остаются в решеточных положениях и начальные скорости всех атомов равны нулю). После непродолжительного переходного процесса часть энергии возбужденного таким образом атома распределится по всей расчетной ячейке в виде малоамплитудных колебаний. Другая часть энергии останется локализованной в пространстве в виде ДБ, т.е. нелинейной колебательной моды с достаточно большой амплитудой. Амплитудой ДБ можно управлять с помощью изменения начального отклонения легкого атома, выводимого из равновесия в нулевой момент времени. Примеры ДБ приведены на рис. 4 для трехмерного (а) и двумерного (б) кристаллов для $m_A/m_B = 9.79$.

Представлены стробоскопические картины, показывающие положения атомов в различные моменты времени. В первом случае отклонения атомов от решеточных положений умножены на коэффициент 2, а во втором — на коэффициент 4. Показаны устойчивые поляризации ДБ. Заметим, что с уменьшением отношения m_A/m_B степень локализации ДБ уменьшается.

Интересно выяснить, каковы частоты ДБ по отношению к спектру малоамплитудных колебаний и как они меняются с изменением амплитуды ДБ. Эта информация приведена на рис. 5 для трехмерного (а) и двумерного (б) кристаллов для $m_A/m_B = 9.79$. Сопоставляя эти данные с рис. 2 и 3 соответственно, 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. По этой причине в кристаллах с потенциалом Морзе вряд ли возможны ДБ с частотами, лежащими выше фононного спектра.

3.2. Локализация энергии по анти-ФПУ-механизму в двумерном кристалле. Все результаты данного раздела получены для двумерного кристалла с соотношением масс компонентов $m_A/m_B = 9.79$. Возбуждалась мода (2) с $q_x = q_y = \pi$, при этом исследовалось пять значений амплитуды моды: $\alpha_u = \alpha_v = \alpha = 0.3, 0.25, 0.2, 0.15$ и 0.1 .

На рис. 6 показано изменение во времени параметра локализации для всех пяти значений амплитуды моды. Наибольшее значение амплитуды $\alpha = 0.3$ соответствует рис. 6, а, на рис. 6, б–е показаны результаты для убывающих амплитуд. Следует обратить внимание на то, что для оси ординат на всех панелях выбран одинаковый масштаб, а для оси абсцисс разный. Как следует из приведенных данных, во всех случаях наблюдался начальный период, где параметр локализации L оставался малым, затем наблюдался его рост, и после достижения некоторого максимального значения он уменьшался до величины, близкой к начальной. Уменьшение амплитуды

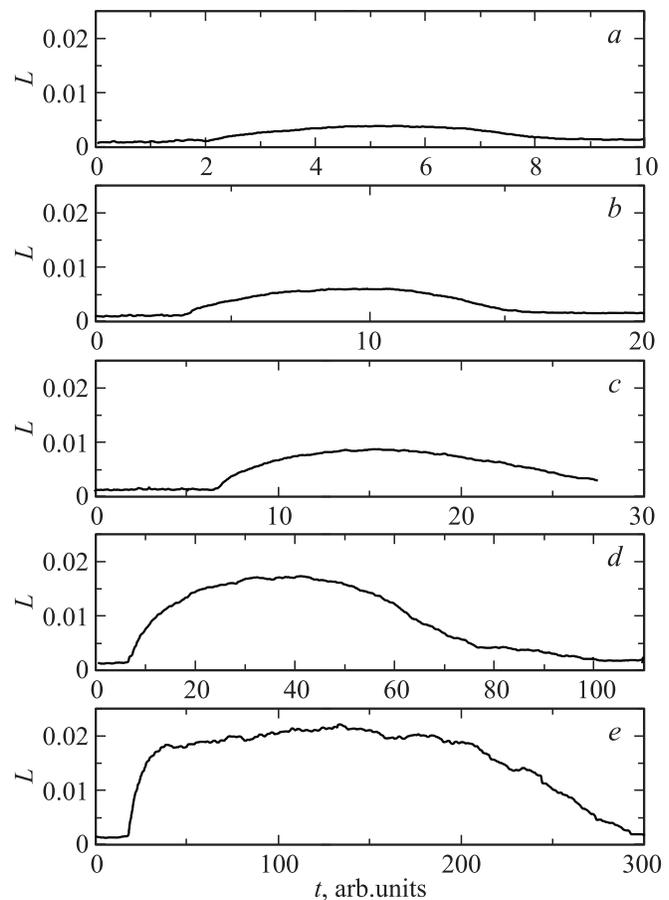


Рис. 6. Зависимость параметра локализации L от времени для различных значений амплитуд α возбуждаемой коротковолновой фононной моды. $\alpha = 0.3$ (а), 0.25 (б), 0.2 (с), 0.15 (д) и 0.1 (е).

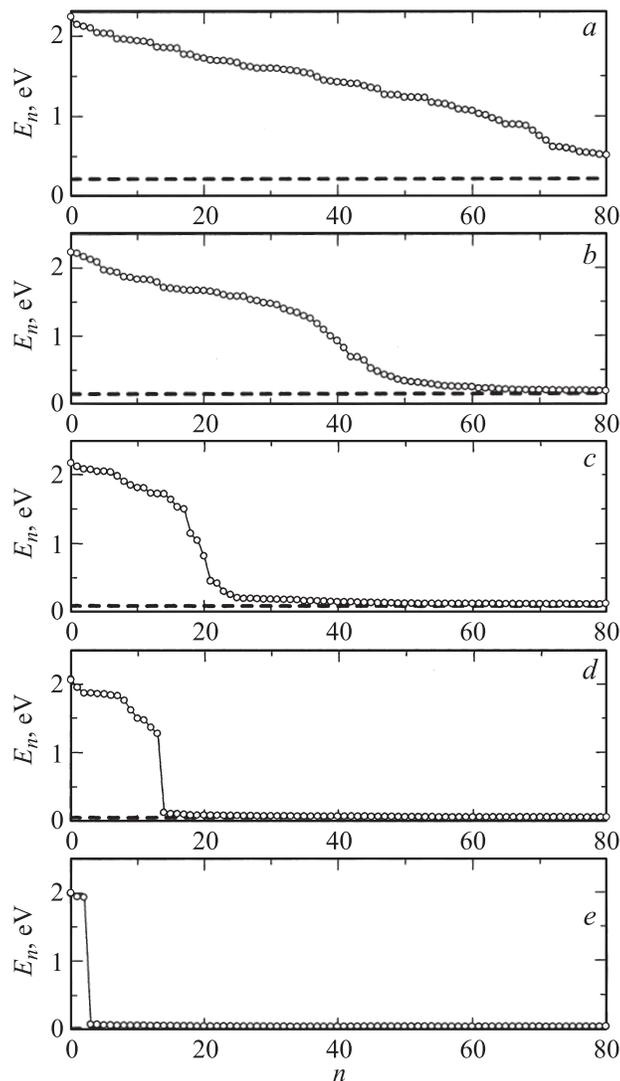


Рис. 7. Энергии легких атомов (сорта B) в момент максимальной локализации энергии, упорядоченные по убыванию. Показаны первые восемьдесят наиболее высокоэнергетических атомов. Горизонтальные штриховые линии показывают распределение энергии в начальный момент времени. Приведены результаты для тех же значений амплитуд α коротковолновой фоновой моды, что на рис. 6.

возбуждаемой колебательной моды приводит к увеличению максимума кривой $L(t)$ и к увеличению временного интервала с большим значением параметра локализации. Колебательная мода при не слишком малых амплитудах α оказывается модуляционно неустойчивой, в результате чего асимметрия, вносимая ошибками округления, экспоненциально нарастает, равномерное распределение энергии по атомам легкого компонента нарушается и параметр локализации монотонно растет.

Представляется интересным проанализировать распределение энергии по атомам легкого компонента (сорт B) в момент достижения параметром локализации максимального значения. Для этого мы упорядочили

атомы сорта B по убыванию их полной энергии и результат для первых восьмидесяти атомов представили на рис. 7 для всех пяти значений амплитуды α коротковолновой колебательной моды, возбуждаемой в начальный момент времени. Из рис. 7, a видно, что при возбуждении коротковолновой моды с относительно большой амплитудой $\alpha = 0.3$ в состоянии с максимальным параметром локализации наблюдается пологое распределение энергии по атомам легкого компонента. С уменьшением α распределение становится ступенчатым. Например, для случая $\alpha = 0.15$, представленного на рис. 7, d , в момент максимальной локализации энергии имеется всего 14 высокоэнергетических атомов (т.е. 14 ДБ), а для $\alpha = 0.1$ (рис. 7, e) — всего три ДБ, в то время как остальные атомы находятся практически в покое. Максимальная энергия, которая может локализоваться на отдельном атоме (максимальная энергия ДБ), несколько превышает 2 eV и практически не зависит от α . Штриховые линии на рис. 7 показывают начальное состояние с равным распределением энергии по всем атомам легкого компонента.

ДБ, возникшие в кристалле на этапе роста параметра порядка, медленно излучают энергию в виде малоамплитудных фононов, при этом атомы тяжелого компонента начинают вовлекаться в движение. Имеются как минимум два механизма излучения энергии высокоамплитудным ДБ. Во-первых, он излучает за счет возмущений, вносимых в его структуру (сравнительно) малоамплитудными колебаниями атомов решетки. Именно этим объясняется тот факт, что для большей амплитуды фоновой моды, возбуждаемой в начальный момент, скорость излучения ДБ возрастает и время их жизни уменьшается. Во-вторых, нами было замечено, что поляризация ДБ (т.е. направление колебания центрального атома) непостоянна во времени и может меняться. Причиной смены поляризации может явиться слабое взаимодействие с другими ДБ и/или с фононами. При каждой смене поляризации ДБ происходит значительная деформация решетки в его окрестности, что также ведет к рассеянию им энергии. Определенное значение имеет и тот факт, что ДБ не может иметь энергию больше ~ 2 eV (рис. 7), по достижении которой процесс накопления им энергии должен приостановиться и должны возобладать процессы, связанные с излучением энергии. Потеря энергии приводит к уменьшению амплитуды ДБ и, как следствие, к вхождению их частоты в спектр фоновых колебаний и к концу их существования. Параметр локализации при этом убывает до величины, соответствующей равномерному распределению энергии по всем атомам сорта B , но уже в режиме теплового равновесия.

Нами также исследовалось влияние поляризации коротковолновой фоновой моды, возбуждаемой в кристалле в начальный момент времени, на поведение кривых $L(t)$. Моды различной поляризации имели одинаковую энергию, и все исследованные моды имели такую симметрию, что подвижными оказывались только атомы легкого компонента. Эффект модуляционной

неустойчивости наблюдался для всех рассмотренных нами видов поляризации мод, и во всех случаях имела место локализация энергии в виде ДБ. Однако для мод, у которых либо $q_x = 0$, либо $q_y = 0$, максимальные значения $L(t)$ были меньше, чем для мод с $q_x \neq 0$ и $q_y \neq 0$.

4. Обсуждение результатов

Методом молекулярной динамики исследована возможность существования ДБ в трехмерном и двумерном двухкомпонентных кристаллах с парными межатомными взаимодействиями, описываемыми потенциалами Морзе при различных соотношениях масс атомов компонентов. Нам не удалось возбудить ДБ с частотами, лежащими выше фононного спектра, но при достаточно большой разнице масс атомов компонентов оказалось возможным существование щелевых ДБ. Частота щелевых ДБ уменьшается с ростом их амплитуды, что свидетельствует о мягком типе нелинейности в морзевских кристаллах и объясняет отсутствие в них ДБ с частотой выше фононного спектра.

Кроме того, методом молекулярной динамики исследован процесс перехода к термодинамическому равновесию в двумерном кристалле состава A_3B из состояния, далекого от равновесия, когда вся энергия кристалла находилась в одной коротковолновой колебательной фононной моде, такой, где колеблются атомы только легкого компонента. Рассмотрен случай значительной разницы масс легкого (B) и тяжелого (A) компонентов, когда, как было показано ранее [13], в кристалле возможно существование высокоамплитудных и сильно локализованных дискретных бризеров.

Показано, что на пути системы к равномерному распределению энергии между всеми колебательными модами наблюдается пространственная локализация энергии на легких атомах в виде щелевых ДБ. Уменьшение амплитуды α коротковолновой моды, возбуждаемой в начальный момент времени, приводит к большей степени локализации энергии и к более продолжительному состоянию с высокой степенью локализации энергии (рис. 3). Так, для наименьшей из изученных нами амплитуд $\alpha = 0.1$ значительная доля энергии всех 1024 атомов сорта B собралась всего лишь на трех атомах, т.е. в расчетной ячейке образовалось три ДБ (рис. 7, *e*). Следует заметить, что при слишком малых значениях α процесс перераспределения энергии между модами невозможен, так как он происходит за счет влияния нелинейности, которая начинает проявлять себя только при значительных амплитудах колебаний атомов.

Рассмотренное нами явление локализации энергии в кристаллах в виде ДБ возможно не только при возбуждении коротковолновой моды, но и, например, при наличии в кристалле нестационарных потоков тепла [8]. Обобщая, можно сказать, что принципиально важным условием спонтанного возникновения ДБ в кристаллах

является значительное удаление от состояния теплового равновесия. Такие состояния могут реализовываться при интенсивных воздействиях на кристаллы — механических, тепловых и др., а также вблизи фазовых переходов.

По результатам, представленным в настоящей работе, можно сформулировать следующие выводы.

1) Межатомные потенциалы Морзе при учете дальнего действия приводят к эффективно мягкой нелинейности, когда частота ДБ падает с ростом амплитуды. В этих условиях можно рассчитывать только на существование щелевых ДБ, а следовательно, они могут быть найдены только в кристаллах со сложной структурой, допускающей наличие запрещенных зон в фононном спектре.

2) Для двумерного кристалла подробно исследован анти-ФПУ-механизм локализации энергии и показано, что он качественно подобен механизму, наблюдавшемуся в одномерном кристалле [8]. Этот факт свидетельствует об универсальности данного механизма и позволяет рассчитывать на то, что он также может проявляться и в реальных трехмерных кристаллах.

Список литературы

- [1] A.J. Sievers, S. Takeno. Phys. Rev. Lett. **61**, 970 (1988).
- [2] S. Flach, C.R. Willis. Phys. Rep. **295**, 181 (1998).
- [3] Yu.S. Kivshar, G.P. Agrawal. Optical solitons. Academic Press, Amsterdam (2003). 540 p.
- [4] A.E. Miroshnichenko, S. Flach, M.V. Fistul, Y. Zolotaryuk, J.B. Page. Phys. Rev. E **64**, 066 601 (2001).
- [5] S. Flach, A.V. Gorbach. Phys. Rep. **467**, 1 (2008).
- [6] M.E. Manley, A.J. Sievers, J.W. Lynn, S.A. Kiselev, N.I. Agladze, Y. Chen, A. Llobet, A. Alatas. Phys. Rev. B **79**, 134 304 (2009).
- [7] E. Fermi, J. Pasta, S. Ulam. Los Alamos Science Laboratory Report NLA-1940. Unpublished. Reprinted in Collected Papers of Enrico Fermi / Ed. E. Segre. University of Chicago Press, Chicago (1965). V. 2. P. 978.
- [8] T. Dauxois, R. Khomeriki, F. Piazza, S. Ruffo. Chaos **15**, 15110 (2005).
- [9] A.V. Gorbach, M. Johansson. Phys. Rev. E **67**, 066 608 (2003).
- [10] G. James, M. Kastner. Nonlinearity **20**, 631 (2007).
- [11] Q. Tian, M.-S. Li. Chin. Phys. **16**, 228 (2007).
- [12] A.B. Горбач, А.С. Ковалев, О.В. Усатенко. ФТТ **43**, 2081 (2001).
- [13] С.В. Дмитриев, Н.Н. Медведев, Р.Р. Мулюков, О.В. Пожидаева, А.И. Потеекаев, М.Д. Старостенков. Изв. вузов. Физика **51**, 8, 73 (2008).
- [14] Л.З. Хадеева, С.В. Дмитриев, А.А. Назаров, А.И. Пшеничнюк. Перспективные материалы **7**, 327 (2009).
- [15] С.В. Дмитриев, А.А. Назаров, А.И. Потеекаев, А.И. Пшеничнюк, Л.З. Хадеева. Изв. вузов. Физика **52**, 2, 21 (2009).
- [16] I.A. Butt, J.A.D. Wattis. J. Phys. A: Math. Theor. **40**, 1239 (2007).
- [17] I.A. Butt, J.A.D. Wattis. J. Phys. A: Math. Gen. **39**, 4955 (2006).
- [18] S.V. Dmitriev, A.A. Sukhorukov, A.I. Pshenichnyuk, L.Z. Khadeeva, A.M. Iskandarov, and Y.S. Kivshar. Phys. Rev. B, **80**, 094302 (2009).
- [19] A.A. Kiselev, A.J. Sievers. Phys. Rev. B, **55**, 9, 5755 (1997).
- [20] А.И. Царегородцев, Н.В. Горлов, Б.Ф. Демьянов, М.Д. Старостенков. ФММ, **58**, 2, 336 (1984).