

02

Распространение сверхзвукового солитона в углеродных нанотрубках типа кресло

© В.В. Шунаев, А.П. Четвериков, О.Е. Глухова

Институт физики, Саратовский национальный исследовательский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского, 410012 Саратов, Россия
e-mail: vshunaev@list.ru

Поступило в редакцию 23 декабря 2022 г.

В окончательном редакции 23 декабря 2022 г.

Принято к публикации 23 декабря 2022 г.

В рамках метода MD/DFTB изучено распространение локализованной кольцевой нелинейной волны в углеродных нанотрубках (УНТ) типа „кресло“. Однозначно показано, что рассматриваемые локализованные волны — солитонного типа, причем чем выше скорость начального возмущения, тем выше установившаяся скорость исследуемого солитона. Установлено, что при высокой энергии начального возбуждения в период времени 0.1–0.2 ps солитон движется со скоростью в диапазоне 245–270 Å/ps, что примерно в 1.22–1.35 раз превышает скорость звука в УНТ (200 Å/ps). Показано, что скорость солитона практически не меняется с увеличением радиуса УНТ

Ключевые слова: молекулярная динамика, углеродные нанотрубки, солитон, сверхзвуковая волна.

DOI: 10.21883/JTF.2023.04.55032.286-22

Введение

В двумерных атомных решетках возмущения с высокой энергией распространяются в виде локализованных волн — солитонов, бризеров, краудонов и т.д. [1,2]. Если вдоль оси распространения волны элементы решетки распределены эквидистантно, как например, в треугольной решетке, то волна движется естественным образом [3–6]. Однако в решетках, атомы которых распределены неравномерно, как, например, в графене, быстрее происходит рассеяние энергии в невозмущенные ряды, и волны затухают быстрее [7,8]. Нелинейные волны были рассмотрены в недавней работе в другом двумерном материале — фосфорене [9]. Неисследованным является распространение кольцевых волн в углеродных нанотрубках (УНТ), в которых начальное возмущение прикладывается ко всем торцевым атомам. Ранее авторами работы было рассмотрено распространение солитоноподобной кольцевой волны, возникающей при импульсном возбуждении продольной скорости у каждого концевых атома зигзагообразного торца перпендикулярно обрезанной трубки [10]. Объектом исследования настоящей работы являются УНТ типа „зигзаг“ с киральностями (8,8), (9,9), (10,10). При этом одна из важных задач исследования показать, что возбуждаемая кольцевая волна в таких трубках является сверхзвуковым солитоном.

1. Метод исследования

Основным методом исследования являлся классический метод молекулярной динамики с временным шагом интегрирования $dt = 0.1$ fs. Сила, действующая на атом

на каждом шаге, вычислялась в рамках теории функционала плотности на основе метода сильной связи с самосогласованием заряда (Self-consistent Charge Density Functional Tight-binding Method — SCC DFTB) [11]. Полная энергия в рамках этого метода может быть найдена как сумма энергии зонной структуры E_{BS} , энергии отталкивания E_{rep} и энергии, учитывающей перетекание заряда на атомах E_{SCC} :

$$E_{tot} = E_{BS} + E_{rep} + E_{SCC}. \quad (1)$$

Равновесное положение исследуемых структур находилось минимизацией выражения (1) путем изменения координат атомов, пока максимальная сила, действующая на атом, не превышала 10^{-5} eV/Å. Для описания взаимодействия атомов углерода использовался базисный набор pbc-0-3 [12]. Использование метода SCC DFTB позволяет учитывать квантовые эффекты, которыми часто пренебрегают в молекулярно-динамических исследованиях низкоразмерных структур, при этом сам метод является менее энергозатратным в сравнении с методом DFT. В связи с этим, потенциал DFTB часто применяется в молекулярно-динамическом моделировании низкоразмерных структур [13,14].

2. Результаты

Рассмотрим атомистическую модель УНТ (9,9) длиной 120 Å (рис. 1) Зададим начальную скорость, равную 80 Å/ps, каждому концевому атому креслообразного торца вдоль оси трубки и запустим молекулярную динамику длиной 0.3 ps.

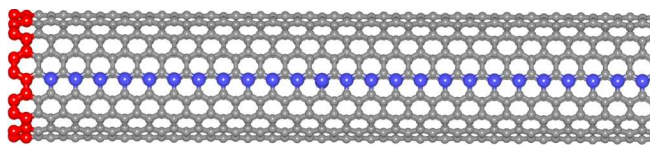


Рис. 1. Фрагмент атомистической модели исследуемой УНТ (9,9). Кольцевая волна возбуждается за счет начальных импульсов, получаемых торцевыми атомами (выделены красным (в онлайн версии)), направленных вдоль оси трубки. Скорости атомов в каждый момент времени фиксируются в ряду атомов, отмеченных синими окружностями (в онлайн версии).

Распределение продольной скорости атомов v_i в одном продольном ряду нанотрубки в различные моменты времени представлены на рис. 2. Можно заметить, что уже через 0.05 ps образуется пик скорости ($v_{\max} \approx 30 \text{ \AA/ps}$), который сохраняется при дальнейшем распространении волны. Из рис. 2 следует, что возбужденная локализованная волна может быть классифицирована как сверхзвуковой солитон, поскольку никакие другие возмущения впереди нее не наблюдаются.

Для проверки данной гипотезы используем как образец для задания начальных условий состояние $v_0 = 80 \text{ \AA/ps}$, $t = 0.2 \text{ ps}$. На рис. 3, *e* наблюдается максимум скорости при $n = 21$, для $n < 19$ и $n > 24$ скорости полагаем равными нулю, а отклонения координат от равновесных значений считаем равными, как у $n = 19$. Солитон образуется сжатием трубки слева от солитона, а трубка слева от солитона находится в равновесном состоянии, но все частицы сдвинуты от своих равновесных положений, чтобы образовать компрессию в области солитона.

Запустив молекулярную динамику с состояния системы, указанного на рис. 3, *a*, отследим изменения скорости распространения солитона от номера атома в ряду. Можно заметить, что возмущения решетки слева от солитона маленькие, а провал, расположенный прямо сзади основного пика, можно считать частью солитона (рис. 3).

Рассмотрим встречу двух таких же солитонов, запускаемых с противоположных концов трубки. Для второго солитона возьмем зеркальное возбуждение, направленное справа налево. Расчеты проведем в течение того же времени. Полученные графики (рис. 4), во-первых, несомненно, подтверждают, что рассматриваемые локализованные волны — солитонного типа. Они проходят друг через друга при встрече, практически не изменяясь. Поэтому начальный солитон можно использовать без опасения, что сзади него сразу будет образовываться мощный хвост. Во-вторых, очень существенно, что обнаруженный солитон включает возмущения поперечных компонентов скорости и координат. Поверхность трубки становится слегка „рифленной“.

Теперь оценим зависимость скорости кольцевого солитона в нанотрубке от величины скорости частиц

торцевого слоя в начальный момент времени. Для этого проведем опыты, где начальная скорость на торцевых атомах УНТ (9,9) равна 20, 40, 60 и 100 \AA/ps .

Рассмотрим зависимость максимальной скорости частиц в нанотрубке от времени при различной начальной скорости частиц торцевого слоя. Из рис. 5, *a* видно, что длительность переходного процесса равна примерно 0.025 ps, что следует из зависимости максимальной по ансамблю скорости частиц от времени. К этому времени устанавливаются максимальные значения скоростей частиц, примерно в два раза меньшие, чем начальные скорости и которые потом почти не изменяются в течение оставшегося времени исследования. Заметно, что чем выше скорость начального возмущения, тем выше установившаяся скорость исследуемого солитона. Рассмотрим зависимость скорости кольцевого солитона в нанотрубке от величины скорости частиц торцевого слоя в начальный момент времени. Скорость солитона оценивалась на основе среднего расстояния, прошедшего солитоном на интервале времени 0.1–0.2 ps, при этом координата солитона ассоциировалась с максимумом в распределении скорости частиц. Поскольку это распределение является дискретной функцией, то точность определения скорости была не очень высокой из-за того, что пройденное за время 0.1 ps расстояние составляло не более 26.8 \AA , а шаг дискретизации составлял один гексагон. Из рис. 5, *b* можно сделать вывод, что с увеличением энергии начального возбуждения происходит увеличение скорости солитона до значений 245 и 270 \AA/ps , что примерно в 1.22–1.35 раз превышает скорость звука в УНТ (200 \AA/ps).

Теперь дадим оценку зависимости скорости кольцевого солитона в нанотрубке от размера радиуса УНТ. Для этого проведем опыты с УНТ (8,8), (9,9) и (10,10). Начальную скорость на торцевых атомах возьмем равную 80 \AA/ps . Рассмотрим максимальную скорость частиц в нанотрубке при различных радиусах УНТ (рис. 6, *a*). Длительность переходного процесса на данном графике также примерно равна 0.025 ps, к этому времени устанавливается максимальное значение скорости частиц, которое потом почти не изменяется в течение оставшегося времени исследования. Очевидно, что от размера радиуса УНТ скорость исследуемого солитона практически не зависит. Лишь после 0.2 ps можно заметить, что чем меньше радиус УНТ, тем меньше становится скорость солитона, но данные показатели практически минимальны. Также составим график зависимости скорости кольцевого солитона в нанотрубке от размера радиуса УНТ, регулируемого индексами киральности (рис. 6, *b*). Скорость солитона оценивалась на основе среднего расстояния, прошедшего солитоном на интервале времени 0.1–0.2 ps, при этом координата солитона ассоциировалась с максимумом в распределении скорости частиц. Показано, что скорость солитона практически не меняется с увеличением радиуса УНТ (изменение скорости не превышает 0.4 \AA/ps).

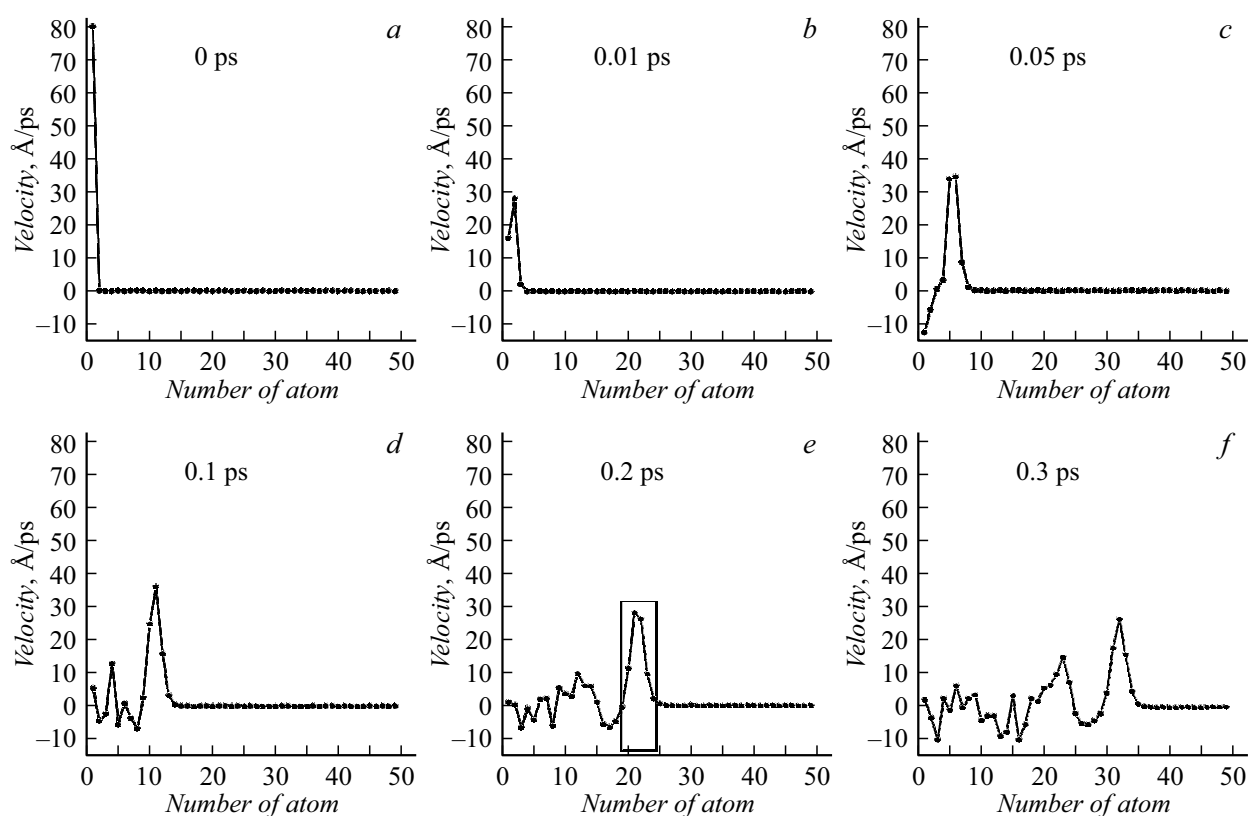


Рис. 2. Распределение продольной скорости атомов v_i в одном продольном ряду нанотрубки в различные моменты времени при начальной скорости торцевых атомов $v_0 = 80$ Å/ps.

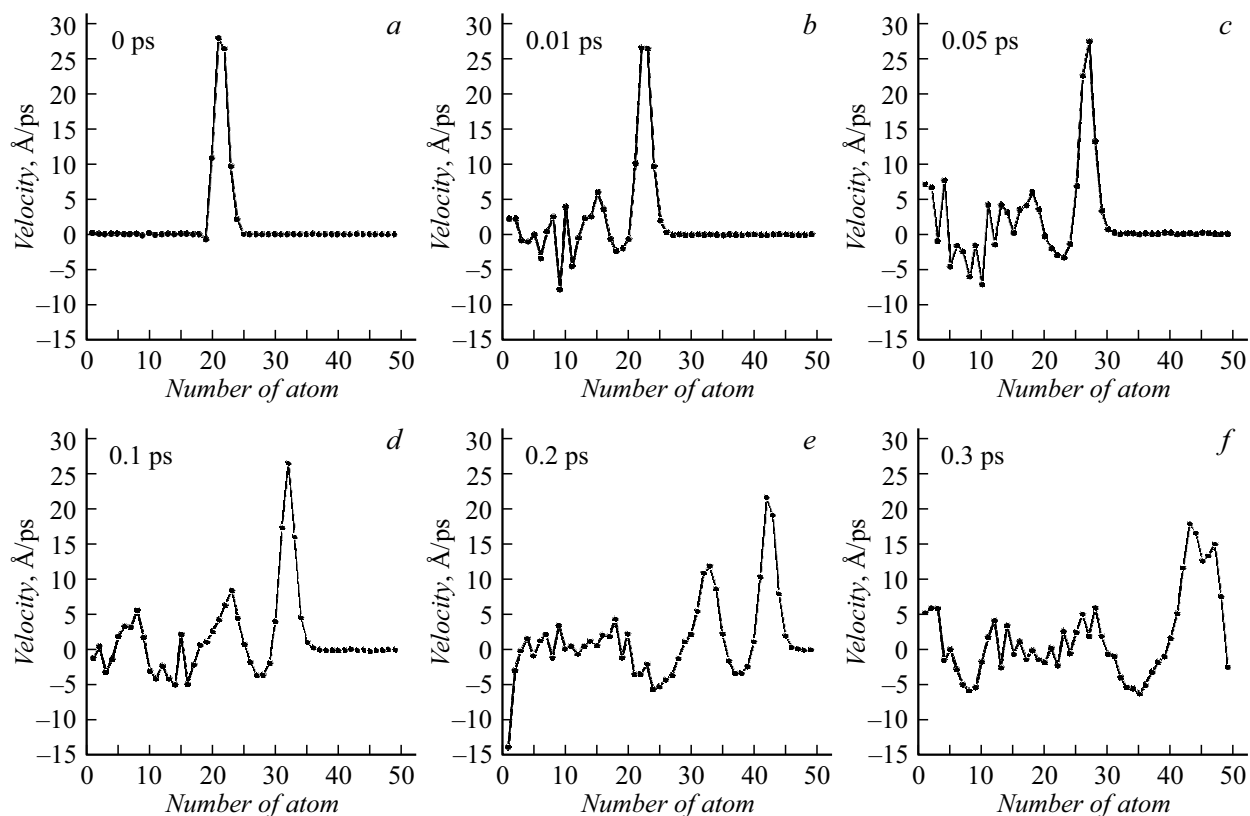


Рис. 3. Распределение продольной скорости атомов v_i в одном продольном ряду нанотрубки в зависимости от времени.

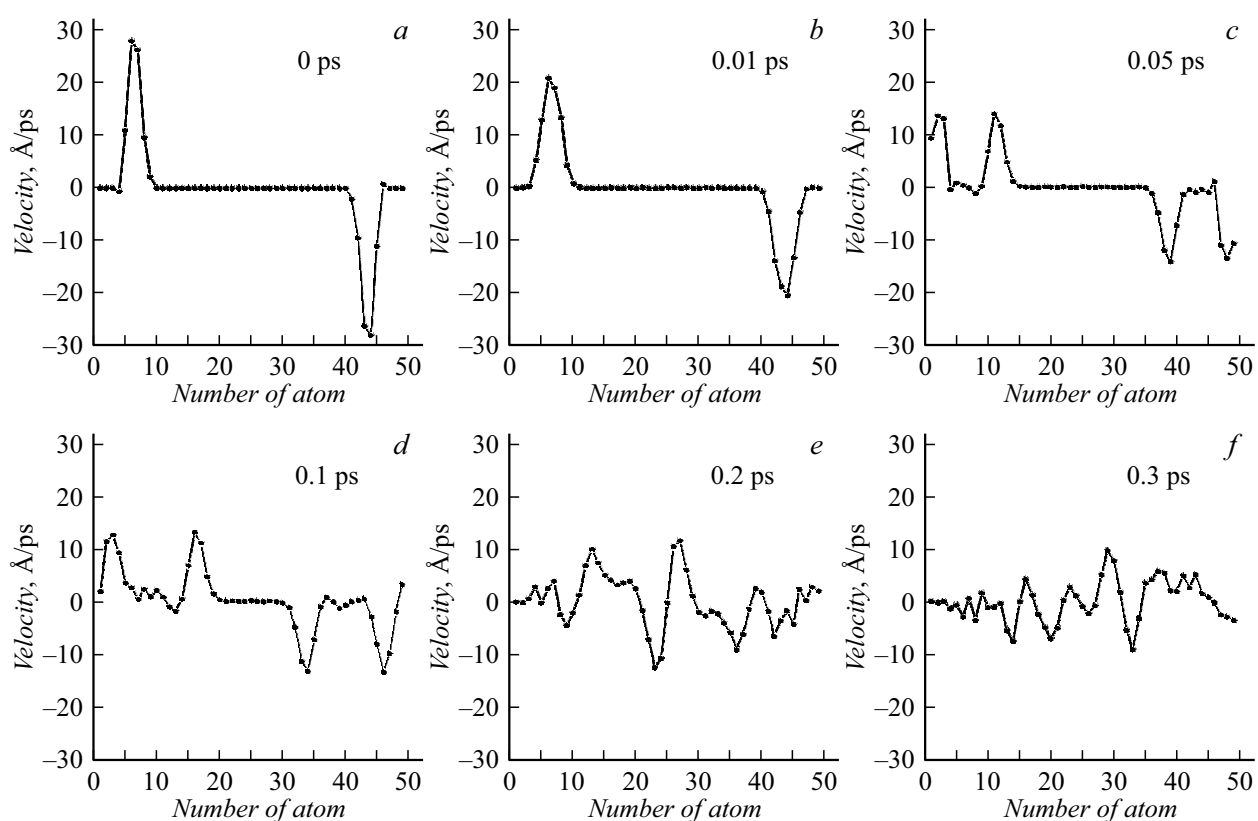


Рис. 4. Графики изменения скорости распространения двух направленных навстречу друг к другу симметричных солитонов. Симметрия распределения скорости атомов сохраняется на всем протяжении времени, даже после соударения солитонов.

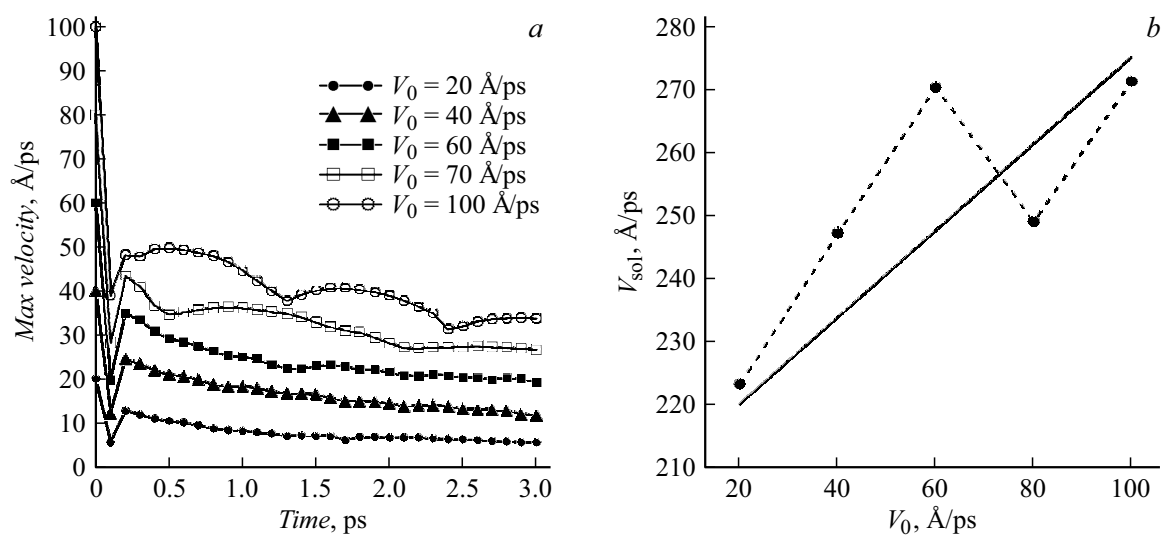


Рис. 5. *a* — эволюция максимальной скорости атомов в УНТ с течением времени; *b* — зависимость скорости кольцевого солитона в нанотрубке от величины скорости частиц торцевого слоя в начальный момент времени. Точками показаны значения скорости, рассчитанные на интервале времени 0.1–0.2 ps, штриховой линией — зависимость скорости солитона при различных значениях начальной скорости, сплошной — аппроксимирующая линия.

В целом можно предположить отсутствие взаимосвязи между скоростью кольцевого солитона в нанотрубке и величиной радиуса УНТ. Данный вопрос требует отдельного рассмотрения для более точного опреде-

ления этой зависимости — необходимо рассмотреть трубки других радиусов, а также рассмотреть процессы с другими начальными скоростями на торцевых атомах.

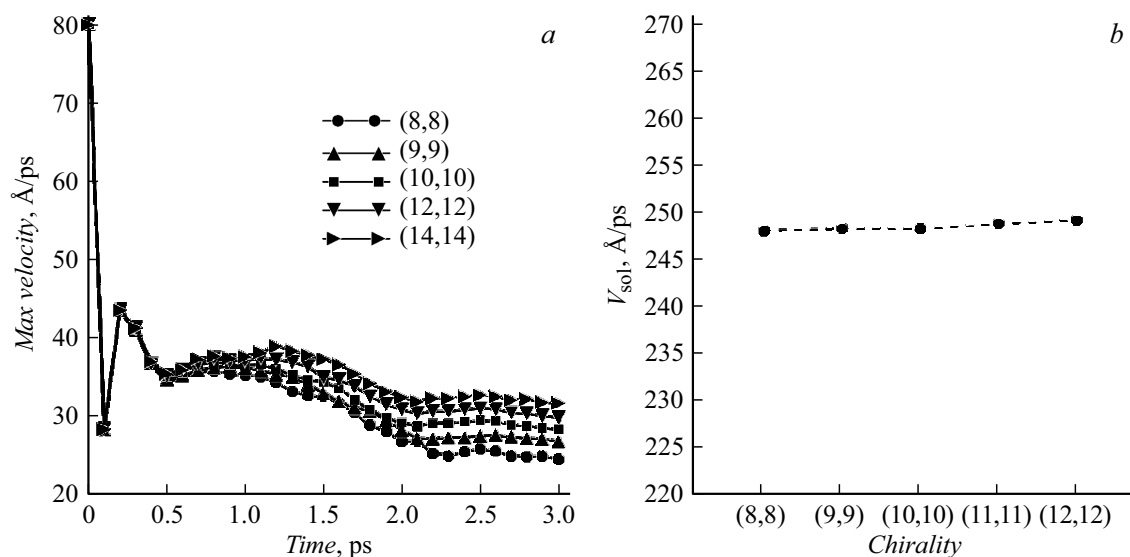


Рис. 6. *a* — эволюция максимальной скорости атомов в УНТ различных диаметров с течением времени (начальная скорость $v_0 = 80 \text{ \AA/ps}$); *b* — зависимость скорости кольцевого солитона в нанотрубке от величины радиуса УНТ. Точками показаны значения скорости, рассчитанные на интервале времени 0.1–0.2 ps, штриховой линией показана зависимость скорости солитона при различных значениях радиуса.

Заключение

С помощью метода молекулярной динамики на основе потенциала SCC DFTB однозначно показано, что в УНТ типа „кресло“ возможно распространение волн солитонного типа, получаемых путем возбуждения атомов, находящихся на торце. Рассмотрено как распространение одной локализованной нелинейной волны, так и взаимодействие двух встречных волн, возбуждаемых на разных концах трубки конечной длины 120 \AA . Показано, что скорость распространения волн растет с увеличением энергии начального возмущения, а при встрече локализованных волн они проходят друг через друга практически без искажений, что доказывает солитонную природу исследуемых волновых процессов. Установлено, что при высокой энергии начального возбуждения в период времени 0.1–0.2 ps солитон движется со скоростью в диапазоне $245\text{--}270 \text{ \AA/ps}$, что примерно в 1.22–1.35 раз превышает скорость звука в УНТ (200 \AA/ps). Показано, что скорость солитона незначительно возрастает с увеличением радиуса УНТ.

Финансирование работы

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках выполнения государственного задания (проект № FSRR-2023-0008).

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] M. Toda. *Theory of Nonlinear Lattices* (Springer, Berlin, 1989)
- [2] A.J. Sievers, S. Takeno. *Phys. Rev. Lett.*, **61**, 970 (1988). DOI: 10.1103/PhysRevLett.61.970
- [3] P.G. Kevrekidis, B.A. Malomed, Yu.B. Gaididei. *Phys. Rev. E*, **66**, 016609 (2002). DOI: 10.1103/PhysRevE.66.016609
- [4] A.P. Chetverikov, W. Ebeling, M.G. Velarde. *Phys. D*, **240**, 1954 (2011). DOI: 10.1016/j.physd.2011.09.005
- [5] С.В. Дмитриев, Е.А. Корзникова, А.П. Четвериков. *ЖЭТФ*, **153** (3), 417 (2018). DOI: 10.7868/S0044451018030082 [S.V. Dmitriev, E.A. Korznikova, A.P. Chetverikov. *JETP*, **126** (3), 347 (2018). DOI: 10.1134/S1063776118030019]
- [6] A.P. Chetverikov, S.V. Dmitriev, W. Ebeling, E.A. Korznikova, M.G. Velarde. *Mater. Phys. Mech.*, **35**, 16 (2018). DOI: 10.18720/MPM.3512018_3
- [7] J.L. Marin, J.C. Eilbeck, F.M. Russell. *Phys. Lett. A*, **248**, 225 (1998). DOI: 10.1016/S0375-9601(98)00577-5
- [8] I.A. Shepelev, A.P. Chetverikov, S.V. Dmitriev, E.A. Korznikova. *Comput. Mater. Sci.*, **177**, 109549 (2020). DOI: 10.1016/j.commatsci.2020.109549
- [9] I.A. Shepelev, I.D. Kolesnikov, E.A. Korznikova, S.V. Dmitriev. *Phys. E*, **146**, 115519 (2023). DOI: 10.1016/j.physe.2022.115519
- [10] О.Е. Глухова, А.П. Четвериков, В.В. Шунаев. *Письма в ЖТФ*, **47** (19), 15 (2021). DOI: 10.21883/JTF.2023.04.55032.286-22 [O.E. Glukhova, A.P. Chetverikov, V.V. Shunaev. *Tech. Phys. Lett.*, **48** (13), 37 (2021). DOI: 10.21883/TPL.2022.13.53350.18895]
- [11] M. Elstner, D. Porezag, G. Jungnickel, J. Elsner, M. Haugk, Th. Frauenheim, S. Suhai, G. Seifert. *Phys. Rev. B*, **58**, 7260 (1998). DOI: 10.1103/PhysRevB.58.7260
- [12] M. Gaus, A. Goez, M. Elstner. *Chem. Theory Comput.*, **9** (1), 338 (2012). DOI: 10.1021/ct300849w
- [13] Z. Chen, Y. Liu, S. Liao, N. Yi, Q. Hu. *J. Mol. Liq.*, **316**, 113869 (2020). DOI: 10.1016/j.molliq.2020.113869
- [14] N. Prasetyo, T.S. Hofer. *Comput. Mater. Sci.*, **164** (15), 195-204 (2019). DOI: 10.1016/j.commatsci.2019.04.006