

05

## Частотная зависимость порога нелинейной супратрансмиссии при гармоническом возбуждении в интерметаллиде Pt<sub>3</sub>Al

© А.С. Кочкин<sup>1</sup>, М.Д. Старостенков<sup>2</sup>, К.А. Теников<sup>2</sup><sup>1</sup> Алтайский государственный университет, Барнаул, Россия<sup>2</sup> Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова, Барнаул, Россия

E-mail: andre211@mail.ru

Поступило в Редакцию 23 марта 2026 г.

В окончательной редакции 19 мая 2026 г.

Принято к публикации 20 мая 2026 г.

Методом молекулярной динамики исследовано влияние частоты внешнего гармонического воздействия на порог возбуждения нелинейной супратрансмиссии в интерметаллиде Pt<sub>3</sub>Al со сверхструктурой L1<sub>2</sub>. Расчеты показали, что при приближении частоты воздействия к верхней границе акустической ветви фононного спектра пороговая амплитуда изменяется немонотонно. Наблюдаемое поведение связано с изменением условий возбуждения локализованных нелинейных колебаний вблизи границы акустического спектра. Значения пороговой амплитуды по порядку величины сопоставимы с характерными атомными смещениями в Pt<sub>3</sub>Al, что указывает на существенную роль ангармоничности в механизме возбуждения нелинейной супратрансмиссии. Полученные результаты указывают на связь порога возбуждения нелинейной супратрансмиссии с положением частоты внешнего воздействия относительно структуры фононного спектра Pt<sub>3</sub>Al.

**Ключевые слова:** нелинейная супратрансмиссия, молекулярная динамика, Pt<sub>3</sub>Al, дискретные бризеры, перенос энергии.

DOI: 10.61011/PJTF.2026.16.63430.20686

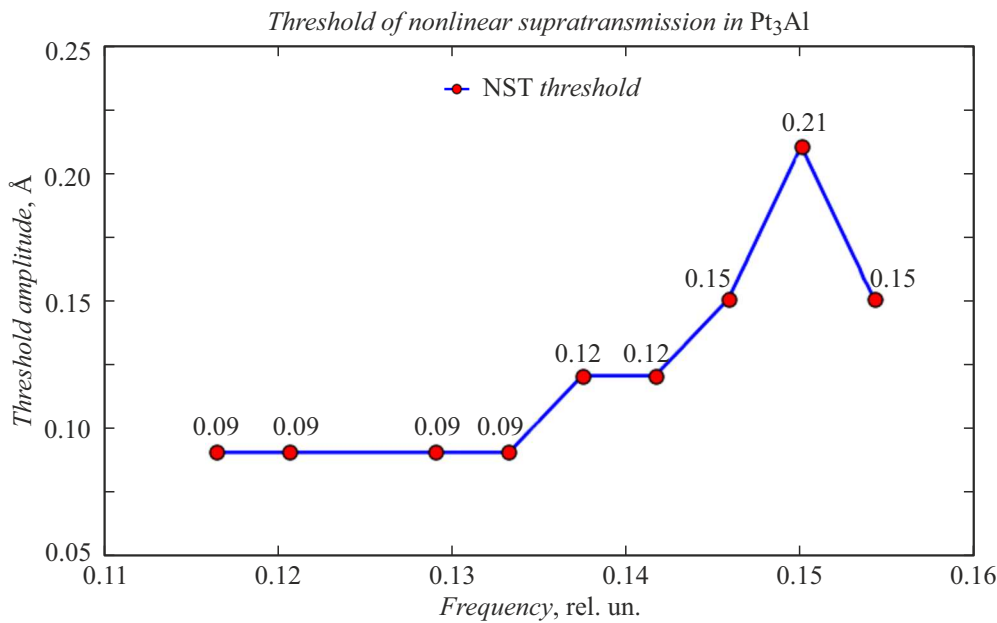
Эффект нелинейной супратрансмиссии (НСТ) относится к числу характерных механизмов переноса энергии в дискретных нелинейных средах. Его физическая природа связана с возможностью передачи энергии в среде при воздействии гармонического сигнала с частотой, расположенной внутри запрещенной зоны спектра линейных колебаний. В линейном приближении распространение волн на таких частотах невозможно вследствие отсутствия соответствующих собственных мод [1–3]. Однако в нелинейной среде при достаточной амплитуде внешнего возбуждения могут формироваться локализованные колебательные состояния — дискретные бризеры, обеспечивающие перенос энергии на значительные расстояния [4,5]. Формирование и устойчивость таких состояний определяются сочетанием межатомного взаимодействия и структуры фононного спектра, что активно исследуется как в теории нелинейных цепей, так и в моделях реальных кристаллов [2,3]. Особый интерес представляют интерметаллические соединения типа A<sub>3</sub>B со сложной зонной структурой фононного спектра и наличием запрещенных зон. Интерметаллид Pt<sub>3</sub>Al со сверхструктурой L1<sub>2</sub> — яркий пример такой системы.

В предыдущих работах для Pt<sub>3</sub>Al показано возникновение уединенных волн НСТ вдоль различных кристаллографических направлений при возбуждении на фиксированной частоте в запрещенной зоне [6]. Однако влияние частоты внешнего воздействия на величину пороговой амплитуды возбуждения нелинейной супратрансмиссии в этой системе систематически не

исследовано. Под пороговой амплитудой понимается минимальная амплитуда внешнего гармонического смещения, при которой устанавливается устойчивый перенос энергии через кристалл. Между тем положение частоты относительно границ фононного спектра может существенно влиять на эффективность возбуждения нелинейных мод. Изменение частоты внешнего сигнала меняет условия резонансного взаимодействия с внутренними модами решетки, что отражается на величине пороговой амплитуды.

Настоящая работа посвящена молекулярно-динамическому исследованию частотной зависимости пороговой амплитуды возбуждения НСТ в интерметаллиде Pt<sub>3</sub>Al. В отличие от предыдущих исследований [6], где анализировалась пространственная структура волновых режимов или влияние анизотропии, здесь выполнена систематическая оценка порога НСТ при варьировании частоты внешнего гармонического воздействия. Полученные результаты позволяют уточнить роль фононного спектра кристалла и нелинейных взаимодействий при формировании условий НСТ.

Моделирование проводилось методом классической молекулярной динамики в пакете LAMMPS. Расчетная область представляла собой трехмерный кристалл Pt<sub>3</sub>Al со структурой L1<sub>2</sub>, содержащий 12 × 12 × 500 ячеек периодической решетки (288 000 атомов). Размеры области составляли 47.04 × 47.04 × 1960 Å. По направлениям X и Y применялись периодические граничные условия, что обеспечивало воспроизведение бесконечных слоев решетки. По оси Z кристалл был ограничен двумя по-



**Рис. 1.** Зависимость пороговой амплитуды возбуждения нелинейной супратрансмиссии от частоты внешнего гармонического воздействия. Точки — результаты расчетов, линии проведены для наглядности.

верхностями: верхняя поверхность подвергалась внешнему воздействию, нижняя жестко закреплялась (нулевые смещения).

Межатомные силы описывались многочастичным потенциалом типа ЕАМ, разработанным Zhou и др. [7], который показал адекватное воспроизведение физических свойств систем Pt–Al. Численное интегрирование уравнений движения выполнялось с использованием алгоритма Верле с шагом 1 fs. Начальная температура системы устанавливалась близкой к 0 К (выполнялась энергетическая релаксация системы), чтобы исключить влияние тепловых флуктуаций на пороговые параметры.

Внешнее воздействие задавалось как периодическое смещение атомов в одном из верхних слоев:  $u(t) = A \sin(2\pi\nu t)$ , где  $\nu$  — частота внешнего сигнала,  $A$  — амплитуда. Частота варьировалась в диапазоне 0.1166–0.1544 в безразмерных единицах  $\nu = f/f_0$ , где  $f_0$  — характерная частота кристаллической решетки.

Согласно данным работы [6], запрещенная зона фононного спектра Pt<sub>3</sub>Al расположена в диапазоне 5.9–8.5 THz. Частоты 6.48, 7.05 и 8.28 THz соответствуют областям щели, расположенным ближе к акустической ветви, в центральной части запрещенной зоны и вблизи оптической ветви спектра соответственно.

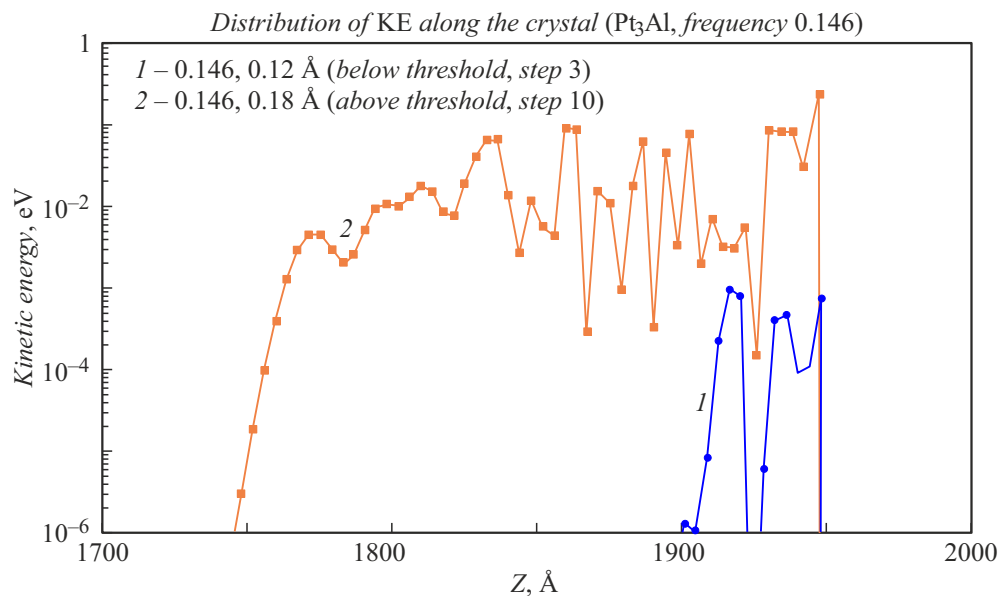
Для каждого выбранного значения частоты  $\nu$  моделирование проводилось для серии амплитуд  $A$ . Пороговой амплитудой возбуждения НСТ считалось минимальное значение  $A$ , при котором возмущение устойчиво распространялось через весь кристалл. При амплитудах ниже порога энергия возбуждения быстро затухала вблизи области воздействия и не доходила до нижней границы системы.

На рис. 1 и в таблице представлена зависимость пороговой амплитуды  $A_{thr}$  от частоты внешнего воздействия  $\nu$ . Как видно, в области низких частот ( $\nu \approx 0.116–0.133$ ) порог остается почти неизменным ( $\sim 0.09$  Å). С дальнейшим увеличением  $\nu$  порог возрастает, достигая максимума 0.21 Å при  $\nu \approx 0.1502$ . При  $\nu > 0.1502$  наблюдается снижение порога до 0.15 Å при  $\nu = 0.1544$ . Такой немонотонный характер зависимости отражает изменение условий возбуждения нелинейных локализованных мод при переходе из акустического диапазона спектра в область, близкую к верхней границе акустической ветви.

Зависимость пороговой амплитуды  $A_{thr}$  от частоты внешнего воздействия  $\nu$ , представленная на рис. 1, показывает, что наименее благоприятные условия возбуждения нелинейной супратрансмиссии реализуются при  $\nu \approx 0.1502$ , где пороговая амплитуда максимальна. Для сравнения в работе [6] при возбуждении нелинейной супратрансмиссии в Pt<sub>3</sub>Al на частоте 8.28 THz (внутри

Пороговая амплитуда возбуждения НСТ в зависимости от частоты воздействия

Безразмерная частота $\nu = f/f_0$	Пороговая амплитуда, Å
0.1166	0.09
0.1208	0.09
0.1292	0.09
0.1334	0.09
0.1376	0.12
0.1418	0.12
0.1460	0.15
0.1502	0.21
0.1544	0.15



**Рис. 2.** Профиль кинетической энергии атомов вдоль направления распространения возмущения (ось  $Z$ ) при  $\nu = 0.146$ . Ось ординат представлена в логарифмическом масштабе. 1 — амплитуда возбуждения  $0.12 \text{ \AA}$  (подпороговый режим), 2 —  $0.18 \text{ \AA}$  (надпороговый режим).

запрещенной зоны фононного спектра) пороговая амплитуда составляла  $\sim 20 \text{ \AA}$ , что на два порядка превышает значения, полученные в настоящей работе для частот, примыкающих к верхней границе акустической ветви. Это различие указывает на более эффективное возбуждение НСТ для частот, расположенных вблизи верхней границы акустической ветви.

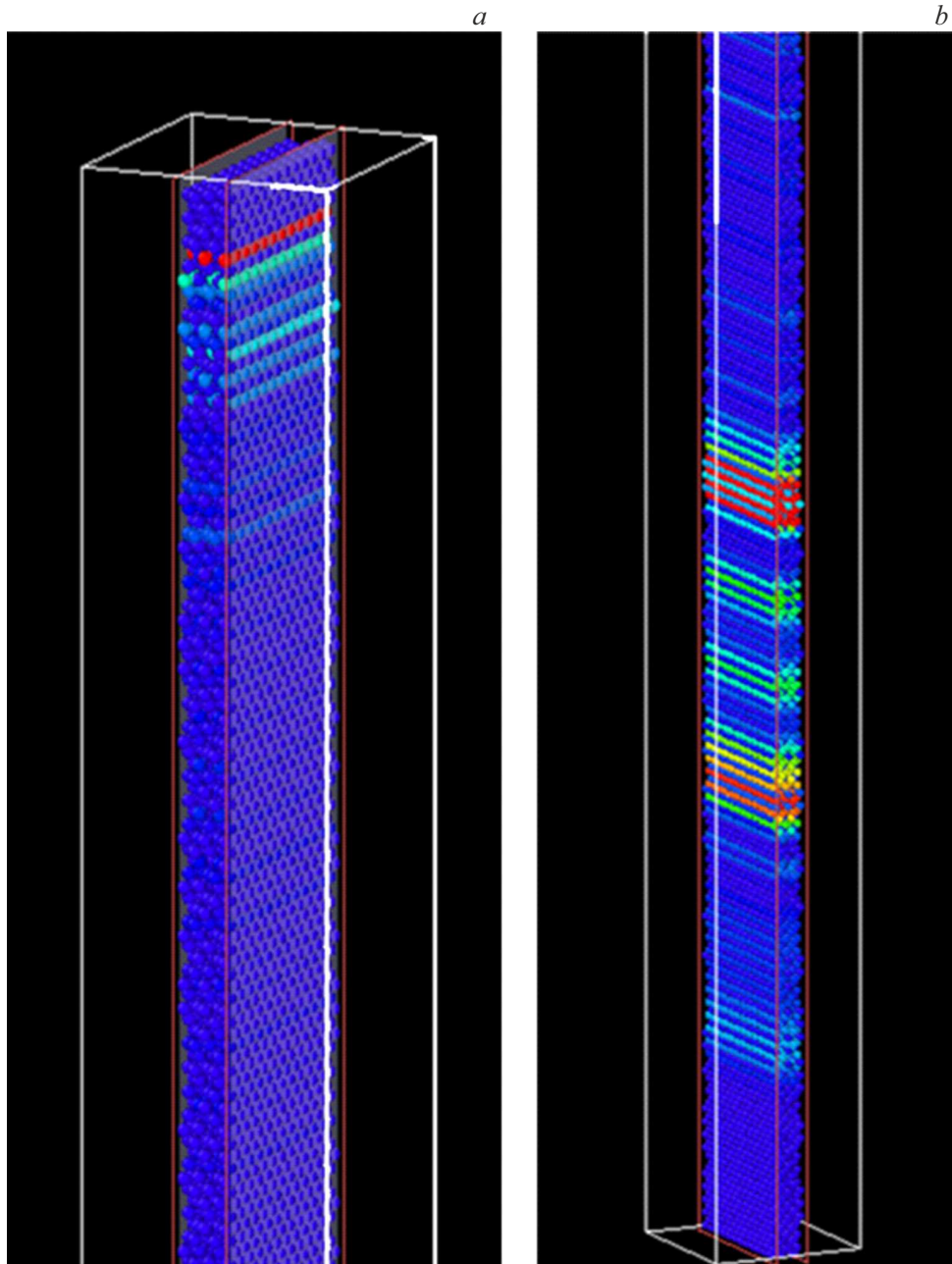
Для иллюстрации результатов моделирования рассмотрим профили кинетической энергии атомов вдоль направления  $Z$  (оси распространения возмущения). На рис. 2 показаны примеры таких профилей для фиксированной частоты  $\nu = 0.146$  и двух амплитуд: чуть ниже порога ( $0.12 \text{ \AA}$ ) и выше порога ( $0.18 \text{ \AA}$ ). При амплитуде  $0.12 \text{ \AA}$  возмущение быстро затухает на небольшой глубине образца, энергия не доходит до противоположной границы. При амплитуде  $0.18 \text{ \AA}$  (превышающей порог) формируется ясно выраженная локализованная волна: наблюдается пик кинетической энергии на уровне порядка  $0.1 \text{ eV/atom}$ , который распространяется через весь кристалл.

Также на рис. 3, *a, b* приведена визуализация распределения кинетической энергии атомов кристалла в динамике. На ранней стадии эволюции (рис. 3, *a*) локализованное возбуждение формируется в ограниченной области решетки. На более позднем этапе (рис. 3, *b*) видно, что возбуждение приобретает форму уединенной волны, сосредоточенной вдоль направления распространения. Такое поведение соответствует формированию бризероподобного локализованного возбуждения в нелинейной решетке [1].

Таким образом, результаты моделирования подтверждают формирование локализованных высокоамплитуд-

ных волн при превышении порога НСТ. Наблюдаемая немонотонная зависимость пороговой амплитуды от частоты воздействия указывает на сложный характер нелинейного взаимодействия внешнего возмущения с фононным спектром решетки. Структура фононного спектра  $\text{Pt}_3\text{Al}$  с выраженной границей акустической ветви и несколькими дисперсионными ветвями приводит к тому, что даже небольшое изменение частоты внешнего сигнала заметно меняет условия возбуждения бризероподобных мод. В частности, резкий пик порога при  $\nu \approx 0.1502$  может быть связан с особенностями спектральной структуры вблизи данной частоты. При дальнейшем росте  $\nu$  наблюдается снижение пороговой амплитуды, что может быть связано с изменением условий нелинейного взаимодействия внешнего возбуждения со спектром решетки.

Полученные значения пороговой амплитуды ( $0.09\text{--}0.21 \text{ \AA}$ ) по порядку величины сопоставимы с характерными масштабами атомных смещений, при которых ангармонические эффекты становятся существенными. Оценка среднеквадратичной амплитуды нулевых колебаний гармонического осциллятора  $u_0 = \sqrt{3\hbar/(2m\omega)}$  для атомов алюминия ( $m_{\text{Al}} = 4.48 \cdot 10^{-26} \text{ kg}$ ) в диапазоне частот акустической ветви  $\omega/(2\pi) = 2\text{--}6 \text{ THz}$  дает значения  $u_0 \approx 0.1\text{--}0.17 \text{ \AA}$ . В классическом высокотемпературном пределе тепловая амплитуда  $u_{\text{RMS}} = \sqrt{3k_{\text{B}}T/(m\omega^2)}$  при температурах порядка характерной частоты решетки также составляет для алюминия  $\sim 0.1\text{--}0.2 \text{ \AA}$ . Для атомов платины ( $m_{\text{Pt}} = 3.24 \cdot 10^{-25} \text{ kg}$ ) соответствующие оценки существенно меньше ( $\sim 0.03\text{--}0.06 \text{ \AA}$ ) из-за большей массы. Поэтому именно легкие атомы



**Рис. 3.** Визуализация пространственного распределения кинетической энергии атомов в кристалле  $\text{Pt}_3\text{Al}$  при надпороговом воздействии (цвет соответствует величине кинетической энергии). *a* — стадия формирования локализованного возбуждения, *b* — стадия распространения локализованной нелинейной волны. Цветной вариант рисунка представлен в электронной версии статьи.

алюминия вносят определяющий вклад в формирование высокоамплитудных локализованных мод. Несмотря на то что в рамках классической молекулярной динамики при  $T = 0$  К квантовые и тепловые флуктуации явно не учитываются, совпадение порядков величины пороговой амплитуды НСТ с оценками  $u_0$  и  $u_{\text{RMS}}$  для подрешетки алюминия указывает на то, что возбуждение нелинейной супратрансмиссии происходит при смещениях, где вклад ангармонических членов разложения потенциала становится сравнимым с гармоническим приближением. Следовательно, при рассматриваемых

амплитудах линейного описания динамики системы уже недостаточно, что обосновывает использование концепции нелинейной супратрансмиссии для интерпретации наблюдаемого режима переноса энергии.

Таким образом, порог НСТ, по-видимому, определяется переходом системы в режим, где вклад нелинейности становится сопоставимым с линейной динамикой.

#### Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

**Список литературы**

- [1] F. Geniet, J. Leon, *Phys. Rev. Lett.*, **89**, 134102 (2002).  
DOI: 10.1103/PhysRevLett.89.134102
- [2] D.U. Abdullina, E.K. Naumov, Yu.V. Bebikhov, M.N. Semenova, A.A. Kudreyko, S.V. Dmitriev, *Phys. Lett. A*, **550**, 130587 (2025). DOI: 10.1016/j.physleta.2025.130587
- [3] Yu.V. Bebikhov, E.K. Naumov, M.N. Semenova, S.V. Dmitriev, *Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simul.*, **132**, 107897 (2024).  
DOI: 10.1016/j.cnsns.2024.107897
- [4] S. Flach, C.R. Willis, *Phys. Rep.*, **295** (5), 181 (1998).  
DOI: 10.1016/S0370-1573(97)00068-9
- [5] П.В. Захаров, М.Д. Старостенков, Е.А. Корзникова, А.М. Ерёмин, И.С. Луценко, С.В. Дмитриев, *ФТТ*, **61** (11), 2183 (2019). DOI: 10.21883/FTT.2019.11.48426.507  
[P.V. Zakharov, M.D. Starostenkov, E.A. Korznikova, A.M. Eremin, I.S. Lutsenko, S.V. Dmitriev, *Phys. Solid State*, **61** (11), 2160 (2019).  
DOI: 10.1134/S1063783419110416].
- [6] P.V. Zakharov, E.A. Korznikova, A.A. Izosimov, A.S. Kochkin, *Computation*, **11** (10), 193 (2023).  
DOI: 10.3390/computation11100193
- [7] X.W. Zhou, R.A. Johnson, H.N.G. Wadley, *Phys. Rev. B*, **69** (14), 144113 (2004). DOI: 10.1103/PhysRevB.69.144113