

# СТАЦИОНАРНЫЕ КВАЗИБРИЗЕРЫ В МОНОАТОМНЫХ МЕТАЛЛАХ С ГЦК-СТРУКТУРОЙ

*П. В. Захаров*<sup>a,b\*</sup>, *С. В. Дмитриев*<sup>c,d</sup>, *М. Д. Старостенков*<sup>b</sup>,  
*А. М. Ерёмин*<sup>a</sup>, *Е. А. Корзникова*<sup>c</sup>

<sup>a</sup> *Алтайский государственный гуманитарно-педагогический университет им. В. М. Шукшина*  
659333, Бийск, Россия

<sup>b</sup> *Алтайский государственный технический университет им. И. И. Ползунова*  
656038, Барнаул, Россия

<sup>c</sup> *Институт проблем сверхпластичности металлов Российской академии наук*  
450001, Уфа, Россия

<sup>d</sup> *Национальный исследовательский Томский государственный университет*  
634050, Томск, Россия

Поступила в редакцию 10 мая 2017 г.

Методом молекулярной динамики изучены характеристики квазибризеров в моноатомных ГЦК-металлах. Рассчитаны среднеквадратичные отклонения частот атомов, входящих в состав бризера, от основной частоты колебаний. Показано, что в рассматриваемых моделях время жизни квазибризера зависит как от начальных условий возбуждения, так и от типа металла.

DOI: 10.7868/S0044451017110220

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Концепция локализации и переноса энергии в кристаллах волнами солитонного типа в последние несколько десятилетий получила интенсивное развитие. В частности, особый интерес вызвали дискретные бризеры (ДБ), которые определяются как пространственно-локализованные, строго периодические во времени колебательные моды большой амплитуды в нелинейных решетках [1, 2]. Однако поиск начальных условий, приводящих к возбуждению ДБ, соответствующих данному строгому определению, для трехмерных кристаллов, описываемых реалистичными межатомными потенциалами, представляется весьма сложной задачей, возможность решения которой теоретически не доказана. Такую точную настройку начальных условий трудно осуществить при проведении молекулярно-динамического моделирования, и тем более она не достижима при постановке любых физических экспериментов, где неизбежно присутствие разнообразных

возмущений [3, 4]. Данное обстоятельство привело Чечина с соавторами к необходимости разработки концепции квазибризера, под которым понимается долгоживущее пространственно-локализованное нелинейное колебание, для которого не наблюдается строгая периодичность во времени [5]. При этом был сформулирован определенный критерий близости квазибризера к соответствующему ему точному ДБ, основанный на вычислении среднеквадратичного отклонения частот колебаний отдельных частиц бризера,  $\eta(t_k)$ , найденных на некотором временном интервале в окрестности момента  $t_k$ , и вычислении среднеквадратичного отклонения частот колебаний выделенной частицы ДБ на различных временных интервалах. Такой подход позволяет охарактеризовать эволюцию ДБ с течением времени. В данной работе для краткости квазибризеры будут именоваться ДБ.

Говоря об актуальности изучения ДБ в кристаллах, отметим, что в последнее время появились работы, где такие объекты рассматриваются в качестве основных при переносе энергии от очага внешнего воздействия в глубь кристалла. Например, в работе [6] идет речь об отжиге дефектов при плазменной обработке германия на значительном рас-

\* E-mail: zakharovpv1@rambler.ru

стоянии от поверхности кристалла. Авторы данной работы предполагают, что перенос энергии осуществляется именно дискретными бризерами. Также имеется немало работ, свидетельствующих о возможном вкладе таких объектов в динамику решетки кристаллов и их вкладе в свойства различных кристаллических структур [7]. В связи с этим возникает необходимость изучения таких локализованных объектов в кристаллах, как квазибризеры. Важным является исследование не только статистических характеристик колебаний частиц, но и время их жизни в зависимости от свойств кристаллов.

Отметим, что ДБ можно разделить на два типа по характеру зависимости частоты колебаний атомов от амплитуды. У ДБ мягкого типа частота уменьшается с увеличением его амплитуды (такие дискретные бризеры могут существовать только в кристаллах, имеющих щель в фононном спектре: их частота лежит в щели фононного спектра и поэтому их называют щелевыми). У ДБ жесткого типа частота растет с амплитудой (они могут иметь частоты как в щели, так и выше фононного спектра). ДБ с мягким типом нелинейности могут возбуждаться в биатомных кристаллах, а также в графене и графене [7–17]. Бризеры с жестким типом нелинейности существуют в графене [18] и в чистых металлах с ГЦК-, ОЦК-, ГПУ-структурами [19–21], в альфа-уране [22] и алмазе [23].

В данной работе рассматриваются квазибризеры жесткого типа. В качестве объектов исследования были выбраны следующие металлы, имеющие ГЦК-структуру: Pt, Ni, Cu, Pd, Au. Такой выбор кристаллов позволяет установить корреляцию между временем жизни ДБ и свойствами рассматриваемых материалов. Основные свойства изучаемых кристаллов сведены в табл. 1.

## 2. МОДЕЛЬ И МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

Имеющиеся в литературе сведения говорят о том, что время жизни ДБ в различных кристаллах и при различных условиях составляет от десятков до тысяч периодов колебаний, т. е. достигает порядка 1 нс. Бризеры пространственно локализованы на небольшой группе атомов, от единиц до десятка, т. е. на масштабе порядка 1 нм. Изучение квазибризеров в кристаллах в реальном эксперименте весьма затруднительно в силу их малого времени жизни и малого размера, поэтому для их изучения был выбран метод компьютерного моделирования, который весьма продуктивен при исследованиях в фи-

зике конденсированного состояния и в материаловедении. Одним из наиболее популярных методов изучения ДБ в кристаллах является метод молекулярной динамики, опирающийся на хорошо апробированные межатомные потенциалы. Важно отметить, что в данном методе нелинейная динамика кристаллической решетки исследуется в реальном времени.

Моделирование проводилось с использованием хорошо зарекомендовавшего себя пакета молекулярной динамики LAMMPS [26]. В качестве межатомных потенциалов использовались потенциалы, полученные методом погруженного атома (EAM). В вычислительной химии модель погруженного атома используется для приближенного описания энергии взаимодействия между двумя атомами. Потенциальная энергия кристалла в данном случае будет представляться в виде суммы энергии парного взаимодействия атомов и энергии взаимодействия атомов с электронным газом:

$$E = \frac{1}{2} \sum_{i,j,i \neq j} \varphi_{ij}(r_{ij}) + \sum_i F_i(\rho_i), \quad (1)$$

где  $\varphi_{ij}$  представляет энергию парного взаимодействия атомов  $i$  и  $j$ , находящихся на расстоянии  $r_{ij}$  друг от друга, а  $F_i$  — энергия внедрения  $i$ -го атома в электронную подсистему, характеризующуюся электронной плотностью  $\rho_i$ . Электронную плотность можно рассчитать по формуле

$$\rho_i = \sum_{i,j \neq i} f_j(r_{ij}),$$

где  $f_j(r_{ij})$  — электронная плотность в точке расположения  $i$ -го атома, находящегося на расстоянии  $r_{ij}$  от  $j$ -го атома. Таким образом, EAM-потенциал чистого элемента описывается тремя функциями: парной энергией  $\varphi$ , электронной плотностью  $\rho$  и энергией внедрения  $F$ . Более подробно о данных функциях и методах получения их параметров можно узнать как на официальном сайте LAMMPS [26], так, например, в работе [27].

Расчетные блоки кристаллов, представляющие собой кубические ячейки, содержали от  $5 \cdot 10^4$  до  $5 \cdot 10^5$  атомов. Расчетных ячеек таких размеров достаточно, для того чтобы избежать влияния граничных условий на время жизни квазибризеров, учитывая их высокую степень пространственной локализации. Вдоль трех координатных осей накладывались периодические граничные условия, которые позволяют устранить влияние поверхности на динамику ДБ.

Таблица 1. Свойства рассматриваемых ГЦК-металлов [24, 25]

Параметр\Металл	Pt	Ni	Cu	Pd	Au
$a_0, \text{Å}$	3.92	3.52	3.615	3.89	4.078
$E_0, \text{эВ/ат}$	-5.77	-4.45	-3.54	-3.91	-3.93
$c_{11}, 10^{11} \text{ Па}$	3.47	2.63	1.75	2.35	1.97
$c_{12}, 10^{11} \text{ Па}$	2.53	1.54	1.24	1.8	1.65
$c_{44}, 10^{11} \text{ Па}$	0.78	1.27	0.79	0.82	0.45
Модуль упругости, ГПа	282	186	141	188	178
Модуль Юнга, ГПа	180	217	46	127	78
Модуль сдвига, ГПа	65	84	48	46	27.5
Коэффициент Пуассона	0.36	0.35	0.38	0.39	0.4
Плотность, г/см <sup>3</sup>	21.45	8.91	8.92	12.02	19.32

Уравнения движения атомов интегрировались с использованием численной схемы четвертого порядка точности с шагом интегрирования 0.5 фс.

Главным фактором, определяющим время жизни ДБ в реальных кристаллах, является близость его частоты к частотам фононного спектра, поэтому были рассчитаны дисперсионные кривые и плотности фононных состояний для рассматриваемых кристаллов (см. рис. 1). В расчетах использовался программный пакет LAMMPS, который включает необходимые для этих целей процедуры, базирующиеся на преобразовании Фурье автокорреляционных функций перемещений атомов от времени [26].

Бризеры жесткого типа локализованы преимущественно в одном плотноупакованном атомном ряду, атомы которого занумерованы индексом  $n$ . Координатная ось  $x$  выбрана вдоль данного ряда. Атомы в ядре ДБ колеблются вдоль плотноупакованного ряда в противофазе с ближайшими соседями. Начальные условия для возбуждения неподвижного ДБ с жестким типом нелинейности задавались согласно работе [28] следующим образом:

$$x_n^0 = T_n + S_n, \quad \dot{x}_n^0 = 0, \quad (2)$$

где  $x_n^0$  и  $\dot{x}_n^0$  — компоненты векторов начальных перемещений и начальных скоростей  $n$ -го атома плотноупакованного ряда кристалла. Все остальные атомы кристалла имели нулевые начальные перемещения и начальные скорости. Функции  $T_n$  и  $S_n$  описывают амплитуды колебания и смещения центров колебания атомов соответственно. Таким образом,

$$T_n = \frac{1}{2}(x_{n,max} - x_{n,min}), \quad S_n = \frac{1}{2}(x_{n,max} + x_{n,min}),$$

где  $x_{n,max}$ ,  $x_{n,min}$  — максимальное и минимальное значение функции  $x_n(t)$ , описывающей движение  $n$ -го атома. Данные функции имеют вид

$$T_n = \frac{(-1)^n A}{\text{csh}[\beta(n - x_0)]}, \quad S_n = \frac{-B(n - x_0)}{\text{csh}[\gamma(n - x_0)]}, \quad (3)$$

где параметр  $A$  определяет амплитуду ДБ, параметр  $B$  определяет амплитуду смещений центров колебаний атомов, параметры  $\beta$  и  $\gamma$  задают степень пространственной локализации ДБ, а  $x_0$  — его начальное положение [28].

На рис. 2 приведен вид начальных смещений атомов из положения равновесия.

### 3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЯ

Путем подбора параметров уравнения (3) были получены ДБ во всех исследованных ГЦК-кристаллах. В зависимости от значений параметров уравнения (3), время жизни ДБ может существенно изменяться. В качестве примера приведем зависимость времени жизни ДБ в Pd от вариации амплитуды (рис. 3а) и параметра  $\gamma$  (рис. 3б). Аналогичные зависимости имели место для других рассмотренных кристаллов. Подбор параметров осуществлялся путем проб и ошибок, так чтобы получить максимальное время жизни бризера. Максимальная продолжительность жизни, которой удалось достичь в наших численных экспериментах, и соответствующую

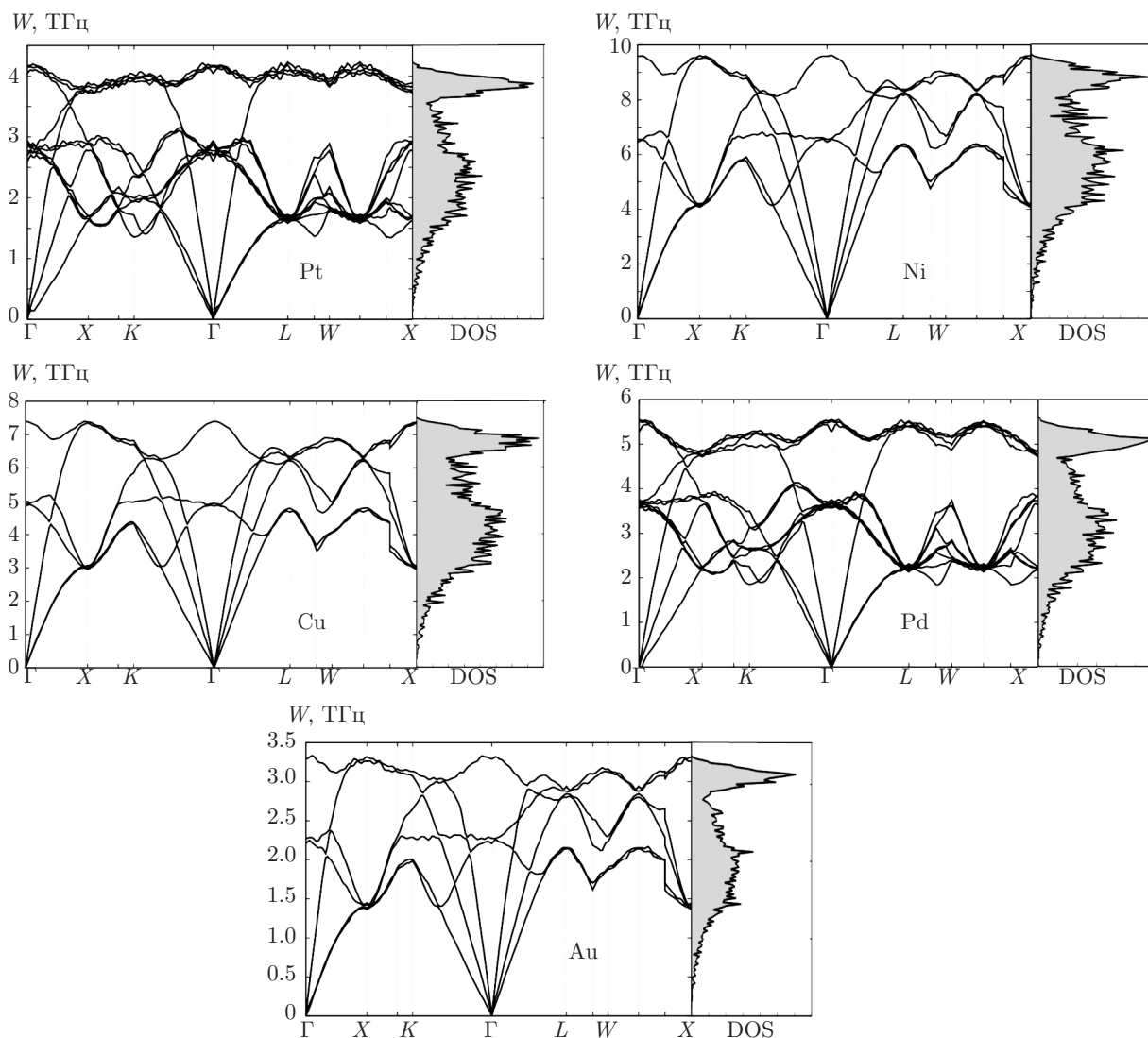


Рис. 1. Дисперсионные кривые и плотности фононных состояний для различных металлов

щие значения параметров уравнения (3) приведены в табл. 2.

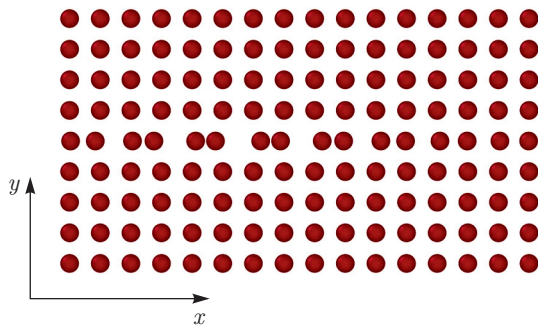
Добиться существенного увеличения времени жизни ДБ дальнейшим подбором параметров уравнения (3) не удалось. Таким образом, очевидно, что время жизни ДБ не только зависит от начальных условий, но и наблюдается определенная корреляция со свойствами кристаллов (см. рис. 4) В частности, наиболее ярко выражена зависимость времени жизни от модуля сдвига. В целом для рассматриваемых кристаллов соблюдается тенденция, когда с уменьшением модуля сдвига увеличивалось время жизни бризера.

Как уже отмечалось, в отличие от точных ДБ, квазибризеры являются не строго периодическими

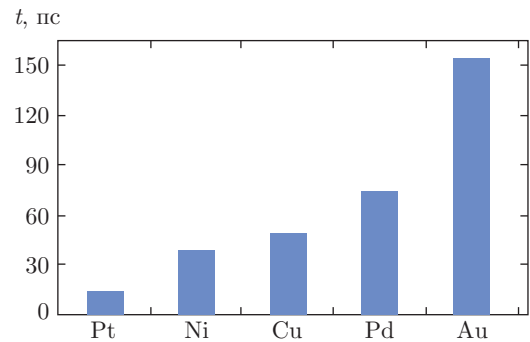
во времени динамическими объектами и имеют конечное время жизни. Для металлов, рассмотренных в данной работе, максимальное время жизни квазибризеров измеряется десятками и сотнями периодов колебаний. Отметим, что тепловые флуктуации большой амплитуды, не являющиеся квазибризерами, затухают через 2–3 периода колебаний. Таким образом, квазибризеры имеют время жизни на порядки превышающее время жизни тепловых флуктуаций, что позволяет рассматривать их как самостоятельные физические объекты, вносящие определенный вклад в формирование свойств рассматриваемых систем. Максимальная амплитуда колебаний квазибризеров достигает значительных величин, в нашем случае порядка 0.4–0.6 Å.

**Таблица 2.** Максимальное время жизни квазибризеров и параметры уравнения (3), использованные для их возбуждения в различных ГЦК-металлах

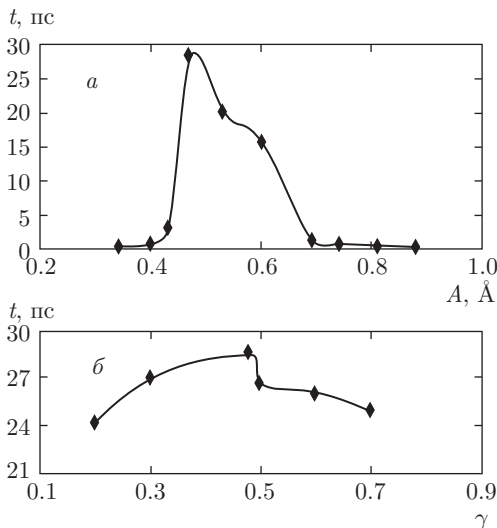
Параметр\Металл	Pt	Ni	Cu	Pd	Au
Время жизни ДБ, пс	14	39	49	74	154
Параметр уравнения (3) $A$	0.58	0.45	0.46	0.5	0.65
Параметр уравнения (3) $\beta$	0.18	0.07	0.12	0.05	0.25
Параметр уравнения (3) $B$	0.3	0.51	0.41	0.3	0.45
Параметр уравнения (3) $\gamma$	0.5	0.46	0.55	0.46	0.5



**Рис. 2.** Начальные отклонения атомов в ГЦК-кристалле для возбуждения стационарного дискретного бризера с жестким типом нелинейности, ось  $x$  направлена вдоль плотноупакованного кристаллографического направления  $\langle 110 \rangle$



**Рис. 4.** Максимальное время жизни квазибризера для различных металлов



**Рис. 3.** Зависимость времени жизни квазибризера в кристалле Pd от вариации начальной амплитуды ( $a$ ) и параметра  $\gamma$  ( $b$ ) в уравнении (3)

Для характеристики степени близости квазибризера к ДБ, для всех атомов в ядре квазибризера были рассчитаны частоты колебаний, вычисленные на некотором временном интервале вблизи  $t = t_k$ . Как и ожидалось, они не были строго одинаковыми. В свете этого найдем среднеквадратичные отклонения  $\eta(t_k)$  частоты колебаний различных атомов от средней частоты бризера  $\bar{\omega}$ :

$$\bar{\omega}(t_k) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \omega_i(t_k), \tag{4}$$

$$\eta(t_k) = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (\omega_i(t_k) - \bar{\omega}(t_k))^2}{N(N-1)}}. \tag{5}$$

Чем больше величина  $\eta(t_k)$ , тем больше отличается квазибризерное решение от точного бризерного решения, для которого  $\eta(t_k) = 0$  в любой момент времени  $t_k$ . Далее рассматривалась группа из восьми частиц, составляющих ядро бризера.

Полученные зависимости (см. рис. 5) показывают, что чем быстрее нарастает среднеквадратичное

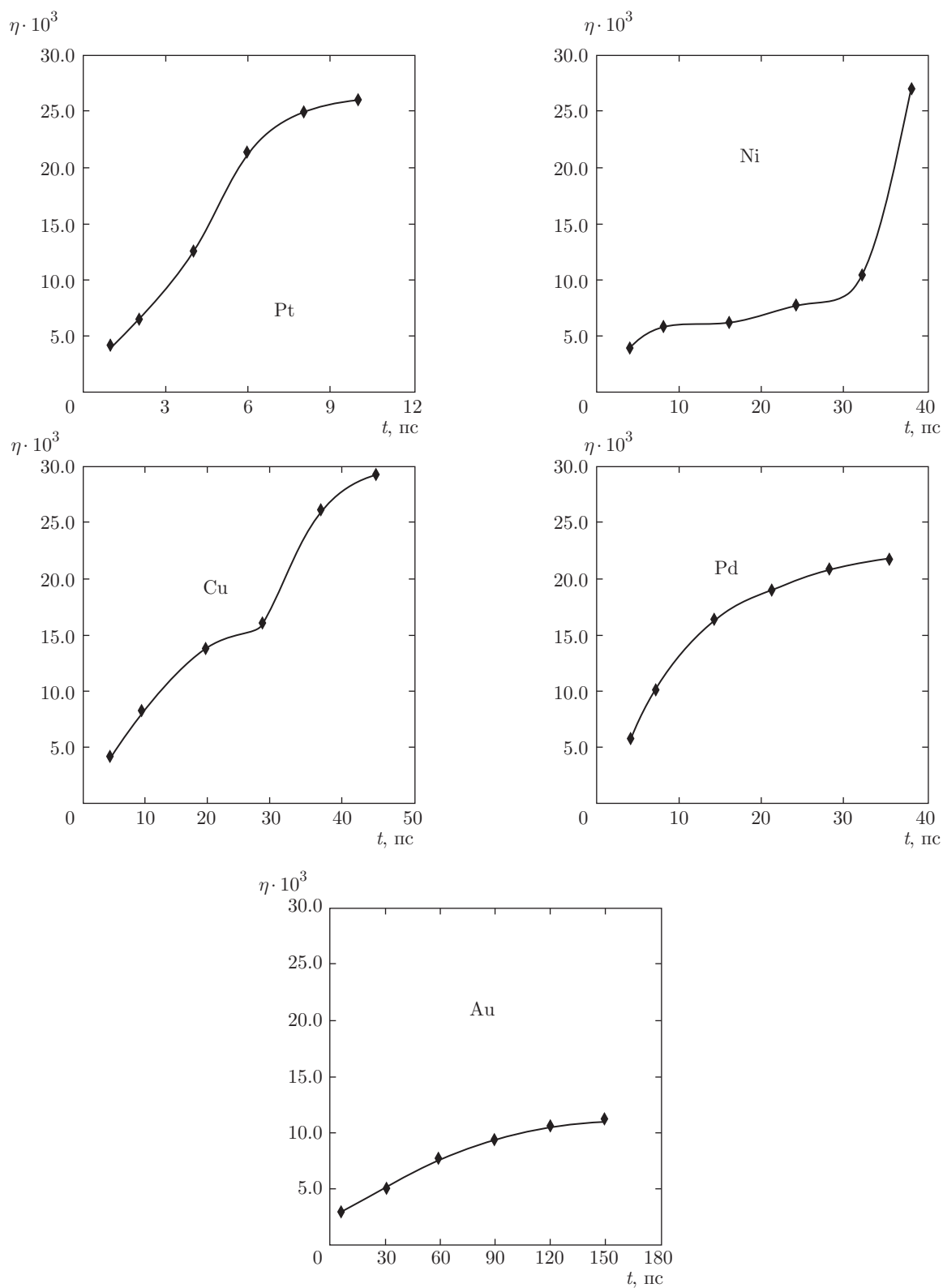


Рис. 5. Зависимости среднеквадратичного отклонения квазиблизера  $\eta$  от времени его существования для различных металлов

отклонение в исследуемой группе атомов, тем быстрее происходит разрушение бризера. Важным является не только скорость нарастания, но и абсолютная величина. Разрушение бризера происходит в тот момент, когда разность основной частоты квазибризера и верхней границы фононного спектра становится меньше величины среднеквадратичного отклонения. В этот момент бризер начинает активно рассеивать энергию в фононную подсистему кристалла и разрушается в течение нескольких периодов колебаний.

#### 4. ВЫВОДЫ

В работе с использованием метода молекулярной динамики проанализированы статистические характеристики стационарных квазибризеров с жестким типом нелинейности для следующих металлов: Pt, Ni, Cu, Pd, Au. Получены зависимости среднеквадратичного отклонения частоты колебаний группы атомов, входящих в ядро бризера, от времени его существования. Выявлено, что разрушение бризера происходит, когда значение среднеквадратичного отклонения превышает величину зазора между основной частотой дискретного бризера и верхней границей фононного спектра рассматриваемого кристалла. Характеризовать квазибризер можно не только статистическими величинами, но и непосредственно временем его жизни в кристалле.

Полученные данные расширяют наши представления о свойствах квазибризеров в чистых ГЦК-металлах, они могут быть полезны при постановке экспериментов по косвенному наблюдению квазибризеров в реальных кристаллах, а также при объяснении эффектов диссипации энергии при интенсивных внешних воздействиях на металлические материалы.

Работа С. В. Д. и П. В. З. выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 16-12-10175); М. Д. С. — при поддержке Министерства образования и науки РФ в рамках базовой части государственного задания (проект № 3.4820.2017/БЧ); работа Е. А. К. поддержана РФФИ (грант № 17-02-00984-А).

#### ЛИТЕРАТУРА

1. А. С. Долгов, ФТТ **28**, 1641 (1986).
2. А. J. Sievers and S. Takeno, Phys. Rev. Lett. **61**, 970 (1988).
3. M. Sato, B. E. Hubbard, and A. T. Sievers, Rev. Mod. Phys. **78**, 13 (2006).
4. T. Rossler and J. B. Page, Phys. Rev. B **62**, 11460 (2000).
5. G. M. Chechin, G. S. Dzhelauhova, and E. A. Mehnoshina, Phys. Rev. E **74**, 036608 (2006).
6. J. F. R. Archilla et al., Physica D **297**, 56 (2015).
7. С. В. Дмитриев, Е. А. Корзникова, Ю. А. Баимова, М. Г. Веларде, УФН **186**, 471 (2016).
8. Ю. А. Баимова, Р. Т. Мурзаев, И. П. Лобзенко, С. В. Дмитриев, Кун Жоу, ЖЭТФ **149**, 1005 (2016).
9. J. A. Baimova, Lett. Mater. **6**, 31 (2016).
10. I. P. Lobzenko, G. M. Chechin, G. S. Bezuglova, Y. A. Baimova, E. A. Korznikova, and S. V. Dmitriev, Phys. Sol. St. **58**, 633 (2016).
11. J. A. Baimova, E. A. Korznikova, I. P. Lobzenko, and S. V. Dmitriev, Rev. Adv. Mater. Sci. **42**, 68 (2015).
12. J. A. Baimova, L. K. Rysaeva, B. Liu, S. V. Dmitriev, and K. Zhou, Phys. Stat. Sol. B **252**, 1502 (2015).
13. B. Liu, J. A. Baimova, S. V. Dmitriev, X. Wang, H. Zhu, K. Zhou, J. Phys. D: Appl. Phys. **46**, 305302 (2013).
14. E. A. Korznikova, J. A. Baimova, and S. V. Dmitriev, Europhys. Lett. **102**, 60004 (2013).
15. J. A. Baimova, S. V. Dmitriev, and K. Zhou, Europhys. Lett. **100**, 36005 (2012).
16. Е. А. Корзникова, А. В. Савин, Ю. А. Баимова, С. В. Дмитриев, Р. Р. Мулюков, Письма в ЖЭТФ **96**, 238 (2012).
17. А. А. Кистанов, Ю. А. Баимова, and S. V. Dmitriev, Techn. Phys. Lett. **38**, 676 (2012).
18. E. Barani, I. P. Lobzenko, E. A. Korznikova, E. G. Soboleva, S. V. Dmitriev, K. Zhou, and A. M. Marjaneh, Europ. Phys. J. B **90**, 38 (2017).
19. П. В. Захаров, М. Д. Старостенков, А. М. Ерёмин, Е. А. Корзникова, С. В. Дмитриев, ФТТ **59**, 217 (2017).
20. П. В. Захаров, М. Д. Старостенков, А. М. Ерёмин, А. И. Чередниченко, Письма о материалах **6**, 294 (2016).
21. R. T. Murzaev, A. A. Kistanov, V. I. Dubinko, D. A. Terentyev, and S. V. Dmitriev, Comput. Mater. Sci. **98**, 88 (2015).

22. R. T. Murzaev, R. I. Babicheva, K. Zhou, E. A. Korznikova, S. Y. Fomin, V. I. Dubinko, and S. V. Dmitriev, *Europ. Phys. J. B* **89**, 168 (2016).
23. R. T. Murzaev, D. V. Bachurin, E. A. Korznikova, and S. V. Dmitriev, *Phys. Lett. A* **381**, 1003 (2017).
24. *Физические величины*, спр. под ред. И. С. Григорьева, Е. З. Мейлихова, Энергоатомиздат, Москва (1991).
25. EAM potentials (Официальный сайт) URL: <https://sites.google.com/site/eampotentials/>.
26. LAMMPS Molecular Dynamics Simulator (Официальный сайт). URL: <http://lammps.sandia.gov/>.
27. H. W. Sheng, M. J. Kramer, A. Cadien, T. Fujita, and M. W. Chen, *Phys. Rev. B* **83**, 134118 (2011).
28. А. А. Кистанов, Р. Т. Мурзаев, С. В. Дмитриев, В. И. Дубинко, В. В. Хижняков, *Письма в ЖЭТФ* **99**, 403 (2014).