

ИССЛЕДОВАНИЕ ОДНОМЕРНОЙ НЕЛИНЕЙНОЙ КОЛЕБАТЕЛЬНОЙ МОДЫ В ГЦК АЛЮМИНИИ

О.В. Бачурина¹, Р.Т. Мурзаев^{2*}, Е.А. Корзникова², С.В. Дмитриев^{2,3}

¹Уфимский государственный нефтяной технический университет, 450062, Уфа, Россия

²Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, 450001, Уфа, Россия

³Национальный исследовательский Томский государственный университет, 634050, Томск, Россия

*e-mail: mur611@mail.ru

Аннотация. Известно, что нелинейность межатомных взаимодействий может обеспечить существование пространственно локализованных колебательных мод в кристаллической решетке. В настоящей работе проведено исследование одномерной нелинейной колебательной моды нового типа в бездефектном монокристалле ГЦК алюминия. В данной моде атомы одного плотноупакованного ряда колеблются с одинаковой амплитудой в противофазе с ближайшими соседями. Амплитуды колебаний атомов в соседних плотноупакованных цепочках намного меньше и быстро убывают с удалением от возбужденной цепочки. Рассмотренная колебательная мода может быть классифицирована как дискретный бризер (ДБ) особого вида, в котором колебания локализованы в двух пространственных направлениях и делокализованы в третьем направлении (вдоль плотноупакованного атомного ряда). Полученные результаты расширяют наши представления о нелинейной динамике кристаллической решетки ГЦК металлов.

Ключевые слова: молекулярная динамика, алюминий, линейный дискретный бризер.

1. Введение

Нелинейные колебательные моды кристаллической решетки можно разделить на два вида: делокализованные, обладающие трансляционной симметрией по всем координатным направлениям, и локализованные, где существенные амплитуды колебаний имеет лишь небольшая группа атомов системы. Впервые общая теория делокализованных нелинейных колебательных возбуждений в динамических системах с дискретной симметрией было разработано в [1]. Локализованные и периодические во времени колебания решетки в пространстве получили название дискретный бризер (ДБ) [2-7]. Стремительное увеличение числа работ, посвященных изучению свойств ДБ в различных материалах, связано с развитием компьютерных технологий, методов молекулярной динамики, а также с созданием потенциалов межатомного взаимодействия. Свойства ДБ в чистых металлах с различной кристаллической решеткой стали изучаться совсем недавно [8-15]. Все ДБ в чистых металлах, обнаруженные на сегодняшний день, обладают одинаковой структурой, а именно, они локализованы в плотноупакованном ряду примерно на десятке атомов. При этом все атомы плотноупакованного ряда колеблются с одинаковой амплитудой в противофазе со своими соседями с частотой, превышающей верхнюю границу фононного спектра и возрастающей с увеличением амплитуды колебаний. Физические принципы существования таких ДБ были объяснены в работах [16-22].

До настоящего времени в чистых металлах исследовались только ДБ локализованные по всем трем координатным направлениям [8-15]. Однако существование делокализованных колебательных мод наталкивает на мысль о возможности существования в трехмерном кристалле ДБ, делокализованных в одном направлении и локализованных по двум другим направлениям. Основной задачей настоящей работы является исследование свойств такого одномерного ДБ в ГЦК решетке Al при помощи методов молекулярной динамики.

2. Описание модели

Расчеты в настоящей работе проводились с использованием пакета программ молекулярно-динамических расчетов LAMMPS [23]. Межатомное взаимодействие описывалось при помощи многочастичного потенциала для ГЦК алюминия, построенного на основе метода погруженного атома [24]. Расчетные ячейки были выбраны размером $68.52 \times 54.29 \times 66.6 \text{ \AA}$, состоящая из 92928 атомов. Периодические граничные условия были использованы вдоль всех трех координатных направлений. Компьютерный эксперимент проводился при температуре $T=0 \text{ K}$ с применением термодинамического ансамбля NVE (неизменные число атомов, объем и энергия). Шаг по времени при численном интегрировании уравнений движения атомов был равен 0.001 пс, а продолжительность численных экспериментов составляла 10000 шагов по времени (10 пс), что было вполне достаточно для наблюдения изучаемых явлений.

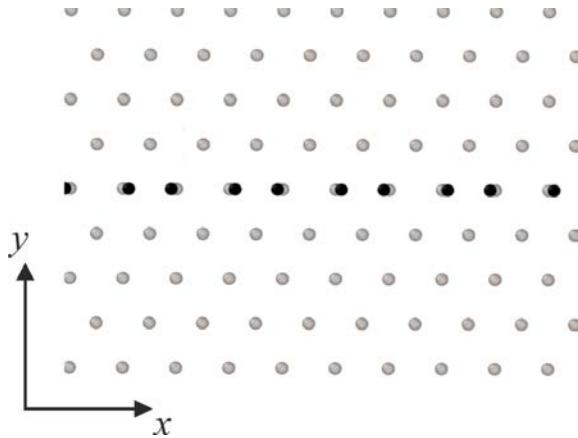


Рис. 1. Локализованная колебательная мода в ГЦК решетке Al. Плотноупакованная плоскость (111) параллельна плоскости xy декартовой системы координат. Черным цветом показаны атомы колебательной моды в момент максимального отклонения от положения равновесия. Остальные атомы отмечены серым. Возбуждены все атомы одного плотноупакованного ряда, и число атомов в данном ряду, в пределах расчетной ячейки, четно.

Одномерная локализованная колебательная мода в трехмерной модели ГЦК Al возбуждалась в плотноупакованной цепочке вдоль направления [111], как показано на Рис. 1. Амплитуды начальных смещений атомов от узлов кристаллической решетки в данном плотноупакованном атомном ряду одинаковы, а знаки у четных и нечетных атомов противоположные. Начальная амплитуда варьировалась в интервале от 0.05 до 0.5 \AA . Все остальные атомы в нулевой момент времени находятся в решеточных положениях и все атомы расчетной ячейки имеют нулевые начальные скорости. Возбуждаемая таким образом колебательная мода делокализована в направлении x и локализована в двух других координатных направлениях. Поэтому она может быть названа одномерным ДБ, в отличие от нульмерных ДБ, локализованных по всем трем координатным направлениям [8-15].

3. Результаты моделирования

На Рис. 2 представлена зависимость времени жизни одномерного ДБ от начальной амплитуды колебаний. Как видно из графика, в диапазоне начальных амплитуд от 0.05 до 0.3 Å время жизни ДБ мало и не превышает 2 пс. При амплитуде 0.325 Å наблюдается резкое увеличение времени жизни до максимального значения 16.0 пс, что соответствует 160 колебаниям. После чего с увеличением начальной амплитуды от 0.325 Å время существования локализованной моды монотонно уменьшается. Такое поведение кривой на Рис. 2 объясняется следующим образом. Используемые очень простые начальные условия не являются точными, поэтому часть энергии возбуждаемого плотноупакованного атомного ряда расходуется на возбуждение соседних атомных рядов. При начальной амплитуде 0.3 Å и меньше, энергии подводимой к системе в нулевой момент времени недостаточно для возбуждения колебательной моды, и поэтому время ее жизни мало. При более высоких начальных амплитудах ДБ возбуждается, но время его жизни падает с ростом начальной амплитуды за счет увеличения радиации, связанной с установлением колебаний моды при неточных начальных условиях.

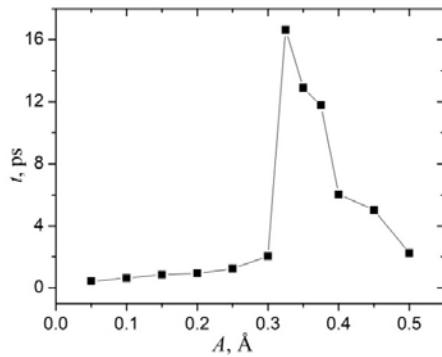


Рис. 2. Зависимость времени жизни одномерного дискретного бризера от начальной амплитуды колебаний A .

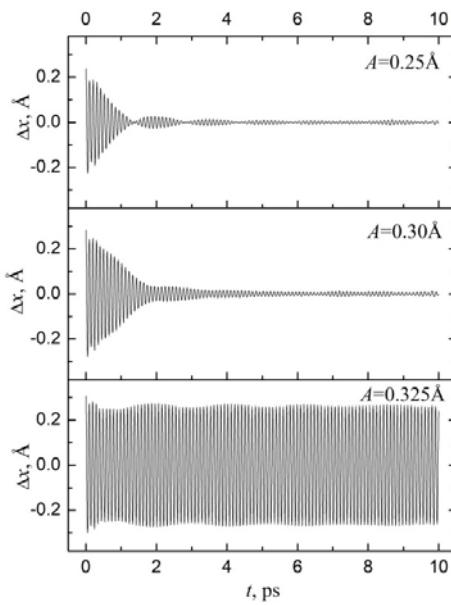


Рис. 3. Зависимость x -компоненты перемещения из положения равновесия от времени для одного из атомов плотноупакованного ряда, где возбужден одномерный ДБ, для различных значений начальной амплитуды, A (указаны на каждой панели).

Зависимость x -компоненты перемещения одного из атомов от времени, для различных значений начальной амплитуды A представлена на Рис. 3. С увеличением начальной амплитуды от 0.3 до 0.325 Å происходит резкий рост времени жизни ДБ, после чего имеет место постепенное его уменьшение.

Зависимость частоты ДБ колебательной моды от начальной амплитуды представлена на Рис. 4а. В интервале начальных амплитуд от 0.05 до 0.3 Å исследуемая колебательная мода имеет быстро убывающую во времени амплитуду и частота колебаний такой моды увеличивается несущественно. Далее, при амплитудах более 0.325 Å, происходит значительный линейный рост частоты ДБ с амплитудой, что соответствует жесткому типу нелинейности, типичному для металлов с различной кристаллической решеткой [8-15].

На Рис. 4б показана также зависимость полной (кинетической плюс потенциальной) колебательной энергии ДБ E_n (в расчете на атом) от начальной амплитуды A . Как видно, поведение функции $E_n(A)$ повторяет вид зависимости частоты от начальной амплитуды.

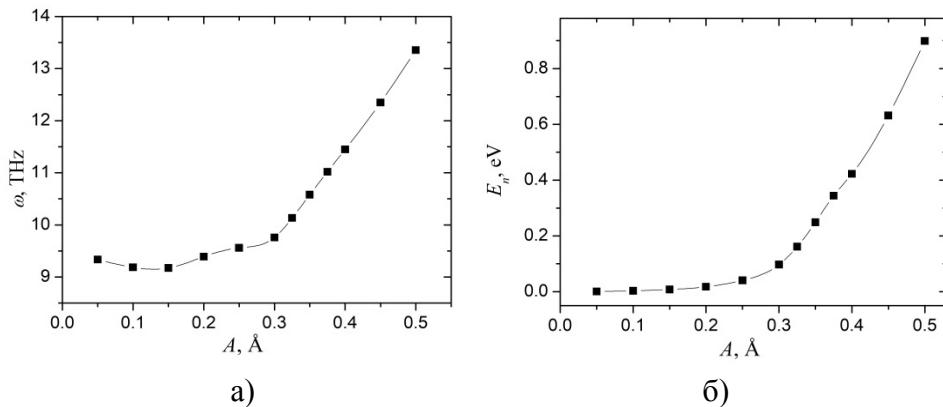


Рис. 4. Зависимость частоты ДБ (а) и его полной колебательной энергии в расчете на атом (б) от начальной амплитуды колебаний A .

Зависимость установившейся амплитуды a , найденной в момент времени 1 пс, от начальной амплитуды A изображена на Рис. 5. Значения параметра a для данной локализованной колебательной моды всегда ниже значений параметра A , что связано с тем, что часть энергии атомов, возбуждаемых в нулевой момент времени, передается соседним атомам при установлении колебательной моды. Отметим, что в интервале амплитуд от 0.05 до 0.3 Å имеется заметное отклонение от линейной зависимости, связанное с уже опоминавшимся быстрым уменьшением во времени амплитуды колебательной моды с малой начальной амплитудой (см две верхние панели Рис. 3). При амплитудах более 0.35 Å четко наблюдается прямая пропорциональность между заданной и установившейся амплитудой колебаний моды.

На Рис. 6 показаны смещения от положений равновесия как функции времени для атома в плотноупакованном ряду, где возбужден ДБ ($\Delta r = \Delta x$, пунктирная кривая), и двух атомов в соседних плотноупакованных рядах ($\Delta r = \Delta y$, черная и серая сплошные кривые). Начальная амплитуда колебаний центрального атома $A=0.325$ Å. Следует отметить, что колебания атомов ДБ в возбужденном атомном ряду и в соседних атомных рядах происходят вдоль взаимно перпендикулярных направлений, x и y , соответственно. Как видно из графика, значения амплитуд колебаний соседних атомов в несколько раз меньше амплитуд атомов в ядре ДБ. Таким образом, при возбуждении атомов кристаллической решетки в цепочке вдоль оси ДБ происходит незначительное рассеяние энергии на соседние атомы. Поскольку колебания атомов с наибольшей амплитудой

происходят вдоль одной линии, а соседние атомы колеблются с амплитудами на порядок ниже, то такой бризер действительно можно считать одномерным.

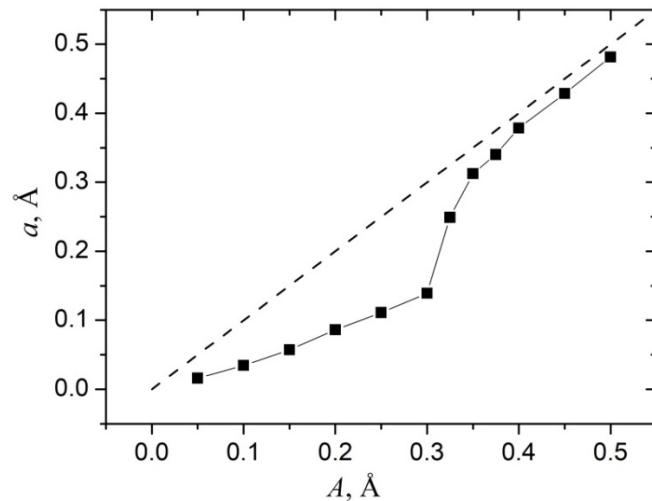


Рис. 5. Зависимость установившейся амплитуды колебаний нелинейной одномерной моды, a , от начальной амплитуды, A . Пунктирной линией, в качестве ориентира, показана зависимость $a=A$.

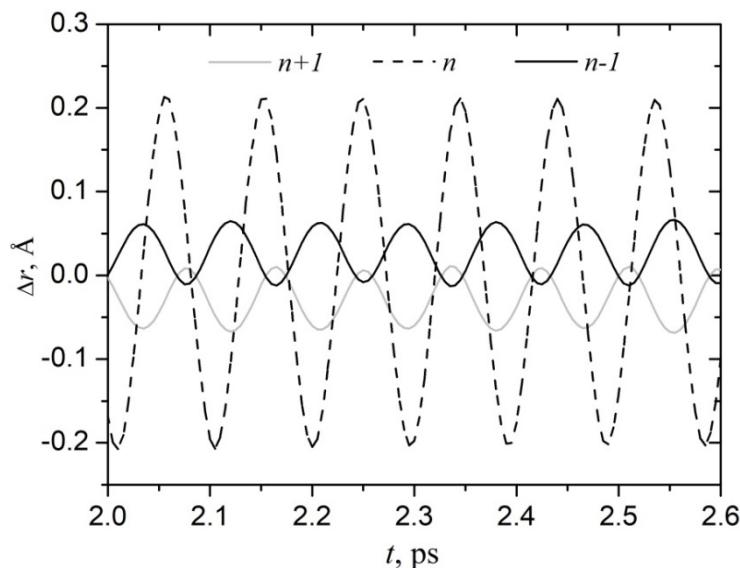


Рис. 6. Смещения от положений равновесия как функции времени для атома в плотноупакованном ряду, где возбужден ДБ ($\Delta r=\Delta x$, пунктирная кривая), и двух атомов в соседних плотноупакованных рядах ($\Delta r=\Delta y$, черная и серая сплошные кривые). Начальная амплитуда колебаний центрального атома $A=0.325 \text{ \AA}$.

4. Заключение

Расчеты, проведенные с помощью метода молекулярной динамики, показали, что одномерная локализованная колебательная мода, представляющая собой цепочку возбужденных атомов в одном плотноупакованном ряду, может существовать в ГЦК решетке Al и имеет при этом жесткий тип нелинейности. Установившаяся амплитуда колебаний атомов, a , линейно зависит от начальной амплитуды A при значениях $A>0.325 \text{ \AA}$, в то время как при малых A имеется отклонение от линейной зависимости.

Как и для случая нульмерного ДБ [21], амплитуды колебания атомов соседних слоев незначительны по сравнению с атомами одномерного ДБ, что связано с малым рассеянием энергии на соседние атомы. Максимальное время жизни исследованной цепочки ДБ составило более 15 пс, максимальная частота колебаний 13.4 ТГц, при этом энергия колебательного движения оказалась равной 0.9 эВ на атом.

Полученные результаты открывают новое направление в изучении ДБ различной размерности в кристаллах, например, одномерных и двумерных ДБ в трехмерных кристаллах, а также одномерных ДБ в двумерных кристаллах [25-30].

М.Р.Т. благодарит за финансовую поддержку Российской фонд фундаментальных исследований (РФФИ), грант 17-02-00984 (получение численных результатов). Работа К.Е.А. была поддержана грантом Российского научного фонда № 14-13-00982 (обсуждение результатов моделирования). Д.С.В. благодарит грант Российского научного фонда № 16-12-10175 (постановка задачи).

Литература

- [1] G.M. Chechin, V.P. Sakhnenko // *Physica D* **117** (1998) 43.
- [2] A. S. Dolgov // *Soviet Physics Solid State* **28** (1986) 907.
- [3] A. J. Sievers, S. Takeno // *Physical Review Letters* **61** (1988) 970.
- [4] J. B. Page // *Physical Review B* **41** (1990) 7835.
- [5] M.G. Velarde, A.P. Chetverikov, W. Ebeling, S.V. Dmitriev, V.D. Lakhno // *The European Physical Journal B* **89** (2016) 233.
- [6] S. V. Dmitriev, E. A. Korznikova, J. A. Baimova, M. G. Velarde // *Physics-Uspekhi* **59** (2016) 446.
- [7] S.V. Dmitriev // *Nonlinear Theory and Its Applications, IEICE* **8** (2017) 85.
- [8] M. Haas, V. Hizhnyakov, A. Shelkan, M. Klopov, A.J. Sievers // *Physical Review B* **84** (2011) 144303.
- [9] V. Hizhnyakov, M. Haas, A. Shelkan, M. Klopov // *Physica Scripta* **89** (2014) 044003.
- [10] R.T. Murzaev, A.A. Kistanov, V.I. Dubinko, D.A. Terentyev, S.V. Dmitriev // *Computational Materials Science* **98** (2015) 88.
- [11] S.V. Dmitriev, A.P. Chetverikov, M.G. Velarde // *Physica Status Solidi (b)* **252** (2015) 1682.
- [12] V. Hizhnyakov, M. Haas, A. Pishtshev, A. Shelkan, M. Klopov // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B* **303** (2013) 91.
- [13] R.T. Murzaev, R.I. Babicheva, K. Zhou, E.A. Korznikova, S.Y. Fomin, V.I. Dubinko, S.V. Dmitriev // *The European Physical Journal B* **89** (2016) 1.
- [14] I.P. Lobzenko, A.M. Bayazitov, A.P. Chetverikov, R.I. Mahmutova, A.A. Kistanov // *Letters on Materials* **6** (2016) 304.
- [15] D.A. Terentyev, A.V. Dubinko, V.I. Dubinko, S.V. Dmitriev, E.E. Zhurkin, M.V. Sorokin // *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* **23** (2015) 085007.
- [16] E.A. Korznikova, A.A. Kistanov, K.S. Sergeev, D.A. Shepelev, A.R. Davletshin, D.I. Bokii, S.V. Dmitriev // *Letters on Materials* **6** (2016) 221.
- [17] S.V. Dmitriev, A.A. Kistanov, V.I. Dubinko // *Springer Series in Materials Science* **221** (2015) 205.
- [18] A.A. Kistanov, S.V. Dmitriev, A.P. Chetverikov, M.G. Velarde // *The European Physical Journal B* **87** (2014) 5.
- [19] A.A. Kistanov, A.S. Semenov, S.V. Dmitriev // *Journal of Experimental and Theoretical Physics* **119** (2014) 766.
- [20] A.A. Kistanov, S.V. Dmitriev, A.S. Semenov, V.I. Dubinko, D.A. Terent'ev // *Technical Physics Letters* **40** (2014) 657.

- [21] A.A. Kistanov, R.T. Murzaev, S.V. Dmitriev, V.I. Dubinko, V.V. Khizhnyakov // *Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters* **99** (2014) 353.
- [22] A.P. Chetverikov, I.A. Shepelev, E.A. Korznikova, A.A. Kistanov, S.V. Dmitriev, M.G. Velarde // *Computational Condensed Matter*. (in press). <https://doi.org/10.1016/j.cocom.2017.09.004>
- [23] <http://lammps.sandia.gov>.
- [24] X.W. Zhou, H.N.G. Wadley, R.A. Johnson, D.J. Larson, N. Tabat, A. Serezo, A.K. Petford-Long, G.D.W. Smith, P.H. Clifton, R.L. Martens T.F. Kelly // *Acta Materialia* **49** (2001) 4005.
- [25] J.A. Baimova // *Letters on Materials* **6** (2016) 31.
- [26] J.A. Baimova, R.T. Murzaev, A.I. Rudskoy // *Physics Letters A* **381** (2017) 3049.
- [27] J.A. Baimova, R.T. Murzaev, I.P. Lobzenko, S.V. Dmitriev, K. Zhou // *Journal of Experimental and Theoretical Physics* **122** (2016) 869.
- [28] I.P. Lobzenko, G.M. Chechin, G.S. Bezuglova, Y.A. Baimova, E.A. Korznikova, S.V. Dmitriev // *Physics of the Solid State* **58** (2016) 633.
- [29] J.A. Baimova, E.A. Korznikova, I.P. Lobzenko, S.V. Dmitriev // *Reviews on Advanced Materials Science* **42** (2015) 68.
- [30] G.M. Chechin, S.V. Dmitriev, I.P. Lobzenko, D.S. Ryabov // *Physical Review B* **90** (2014) 045432.

INVESTIGATION OF ONE-DIMENSIONAL NONLINEAR VIBRATIONAL MODEL IN FCC ALUMINUM

O.V. Bachurina¹, R.T. Murzaev^{2*}, E.A. Korznikova², S.V. Dmitriev^{2,3}

¹Ufa State Petroleum Technical University

²Institute for Metals Superplasticity Problems

³National Research Tomsk State University

*e-mail: mur611@mail.ru

Abstract. It is known that the nonlinearity of interatomic interactions can ensure the existence of spatially localized vibrational modes in the crystal lattice. In the present work, we investigate a one-dimensional nonlinear vibrational mode of a new type in a defect-free FCC single crystal. In this mode, the atoms of one close-packed series oscillate with the same amplitude in antiphase with the nearest neighbors. The amplitudes of atomic vibrations in neighboring close-packed chains are much smaller and decrease rapidly with distance from the excited chain. The considered vibrational mode can be classified as a discrete breather (DB) of a special form, in which the oscillations are localized in two spatial directions and are delocalized in the third direction (along a close-packed atomic row). The obtained results broaden our understanding of the nonlinear dynamics of the crystal lattice of FCC metals.

Keywords: molecular dynamics, aluminum, linear discrete breathers.

References

- [1] G.M. Chechin, V.P. Sakhnenko // *Physica D* **117** (1998) 43.
- [2] A. S. Dolgov // *Soviet Physics Solid State* **28** (1986) 907.
- [3] A. J. Sievers, S. Takeno // *Physical Review Letters* **61** (1988) 970.
- [4] J. B. Page // *Physical Review B* **41** (1990) 7835.

- [5] M.G. Velarde, A.P. Chetverikov, W. Ebeling, S.V. Dmitriev, V.D. Lakhno // *The European Physical Journal B* **89** (2016) 233.
- [6] S. V. Dmitriev, E. A. Korznikova, J. A. Baimova, M. G. Velarde // *Physics-Uspekhi* **59** (2016) 446.
- [7] S.V. Dmitriev // *Nonlinear Theory and Its Applications, IEICE* **8** (2017) 85.
- [8] M. Haas, V. Hizhnyakov, A. Shelkan, M. Klopov, A.J. Sievers // *Physical Review B* **84** (2011) 144303.
- [9] V. Hizhnyakov, M. Haas, A. Shelkan, M. Klopov // *Physica Scripta* **89** (2014) 044003.
- [10] R.T. Murzaev, A.A. Kistanov, V.I. Dubinko, D.A. Terentyev, S.V. Dmitriev // *Computational Materials Science* **98** (2015) 88.
- [11] S.V. Dmitriev, A.P. Chetverikov, M.G. Velarde // *Physica Status Solidi (b)* **252** (2015) 1682.
- [12] V. Hizhnyakov, M. Haas, A. Pishtshev, A. Shelkan, M. Klopov // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B* **303** (2013) 91.
- [13] R.T. Murzaev, R.I. Babicheva, K. Zhou, E.A. Korznikova, S.Y. Fomin, V.I. Dubinko, S.V. Dmitriev // *The European Physical Journal B* **89** (2016) 1.
- [14] I.P. Lobzenko, A.M. Bayazitov, A.P. Chetverikov, R.I. Mahmutova, A.A. Kistanov // *Letters on Materials* **6** (2016) 304.
- [15] D.A. Terentyev, A.V. Dubinko, V.I. Dubinko, S.V. Dmitriev, E.E. Zhurkin, M.V. Sorokin // *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* **23** (2015) 085007.
- [16] E.A. Korznikova, A.A. Kistanov, K.S. Sergeev, D.A. Shepelev, A.R. Davletshin, D.I. Bokii, S.V. Dmitriev // *Letters on Materials* **6** (2016) 221.
- [17] S.V. Dmitriev, A.A. Kistanov, V.I. Dubinko // *Springer Series in Materials Science* **221** (2015) 205.
- [18] A.A. Kistanov, S.V. Dmitriev, A.P. Chetverikov, M.G. Velarde // *The European Physical Journal B* **87** (2014) 5.
- [19] A.A. Kistanov, A.S. Semenov, S.V. Dmitriev // *Journal of Experimental and Theoretical Physics* **119** (2014) 766.
- [20] A.A. Kistanov, S.V. Dmitriev, A.S. Semenov, V.I. Dubinko, D.A. Terent'ev // *Technical Physics Letters* **40** (2014) 657.
- [21] A.A. Kistanov, R.T. Murzaev, S.V. Dmitriev, V.I. Dubinko, V.V. Khizhnyakov // *JETP Letters* **99** (2014) 353.
- [22] A.P. Chetverikov, I.A. Shepelev, E.A. Korznikova, A.A. Kistanov, S.V. Dmitriev, M.G. Velarde // *Computational Condensed Matter*. (in press). <https://doi.org/10.1016/j.cocom.2017.09.004>
- [23] <http://lammps.sandia.gov>.
- [24] X.W. Zhou, H.N.G. Wadley, R.A. Johnson, D.J. Larson, N. Tabat, A. Serezo, A.K. Petford-Long, G.D.W. Smith, P.H. Clifton, R.L. Martens, T.F. Kelly // *Acta Materialia* **49** (2001) 4005.
- [25] J.A. Baimova // *Letters on Materials* **6** (2016) 31.
- [26] J.A. Baimova, R.T. Murzaev, A.I. Rudskoy // *Physics Letters A* **381** (2017) 3049.
- [27] J.A. Baimova, R.T. Murzaev, I.P. Lobzenko, S.V. Dmitriev, K. Zhou // *Journal of Experimental and Theoretical Physics* **122** (2016) 869.
- [28] I.P. Lobzenko, G.M. Chechin, G.S. Bezuglova, Y.A. Baimova, E.A. Korznikova, S.V. Dmitriev // *Physics of the Solid State* **58** (2016) 633.
- [29] J.A. Baimova, E.A. Korznikova, I.P. Lobzenko, S.V. Dmitriev // *Reviews on Advanced Materials Science* **42** (2015) 68.
- [30] G.M. Chechin, S.V. Dmitriev, I.P. Lobzenko, D.S. Ryabov // *Physical Review B* **90** (2014) 045432.