

ПЛОСКО-РАДИАЛЬНЫЙ ДИСКРЕТНЫЙ БРИЗЕР В МЕДИ

Бачурина О.В.¹, Мурзаев Р.Т.², Дмитриев С.В.²¹Уфимский государственный нефтяной технический университет, Уфа, Россия, obachurina@mail.ru²Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа, Россия.

В настоящей работе с помощью методов молекулярной динамики исследуются пространственно-локализованные высокоамплитудные колебательные моды [1,2], которые могут существовать в металлах с различной кристаллической решеткой [3-7], сплавах [8-10], алмазе [11], графене [12-14], графене [15-16] и других материалах. Такие колебательные моды получили название дискретных бризеров (ДБ), свойства которых могут оказывать влияние на теплоёмкость и теплопроводность кристаллов [17].

Исследования по обнаружению плоских пространственно-локализованных высокоамплитудных колебательных мод в ГЦК металлах проводились в работах [18,19].

В настоящей работе взаимодействие между атомами описывалось при помощи потенциала на основе метода погруженного атома для меди [20], взятого из

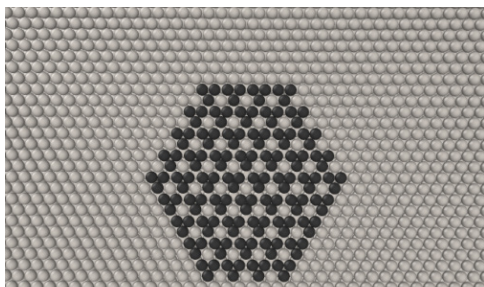


Рисунок 1 - Локализация колебаний атомов плоско-радиального дискретного бризера, расположенного в плотноупакованной плоскости [111] в ГЦК меди.

библиотеки LAMMPS. Возбуждение атомов происходило в центре расчетной ячейки в одной плотноупакованной плоскости [111]. В выбранной для рассмотрения колебательной моде каждый четвертый атом в плоскости [111] остается неподвижным, в то время как остальные атомы в начальный момент времени получают одну и ту же амплитуду смещений от положения равновесия. Локализация колебаний атомов плоско-радиальной колебательной моды в ГЦК меди показана на рис. 1. Степень отклонения атомов от положения равновесия определяется

выражением $r = r_0 + dr \cdot e^{-\frac{r_0}{R}}$, где r_0 – исходное расстояние от центра ДБ, dr – максимальное отклонения атома от положения равновесия, R – определяет степень локализации отклонения атомов в зависимости от удаленности центра дискретного бризера. Таким образом, отклонения атомов вблизи центра ДБ максимальны и по мере удаления уменьшаются по экспоненте. Степень пространственной локализации такова, что значительную амплитуду колебаний имеют от 200 до 400 атомов, в зависимости от амплитуды моды. Предварительные расчеты показали, что устойчивая делокализованная плоская колебательная мода в ГЦК меди наблюдается при начальной амплитуде смещения от положения равновесия в интервале от 0,20 до 0,30 Å, поэтому в ходе моделирования исходной структуры рассматривался только данный интервал амплитуд. Установлено, что в ГЦК решетке меди колебательная мода обладает жестким типом нелинейности, при котором частота увеличивается с ростом амплитуды в диапазоне от 7,35 до 11,95 ТГц. Вследствие этого можно говорить о существовании локализованной колебательной моды или дискретного бризера в ГЦК решетке меди.

На рис. 2 показана зависимость x- и y-компонент смещения от времени одного из атомов, совершающих колебания вдоль оси x и y соответственно. Количество локализованных атомов $R=250$. По сравнению с x- и y-компонентами колебания этого

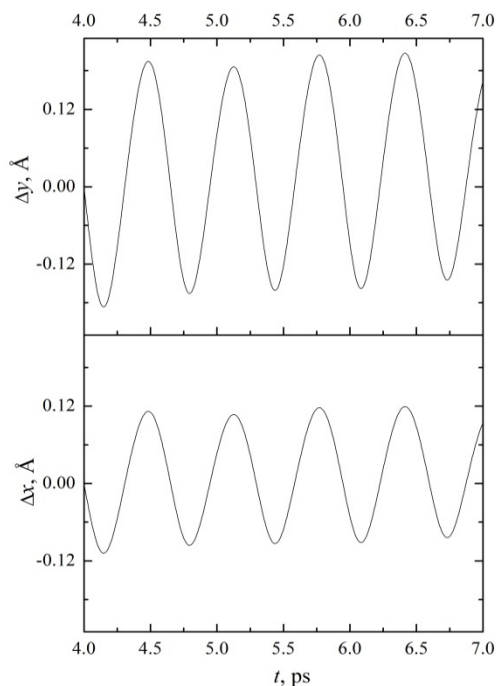


Рисунок 2 - Зависимость x- и y-компонент смещения от времени одного из атомов, совершающих колебания вдоль оси x и y соответственно. Параметр локализации R=250.

атома вдоль оси z оказались незначительны и поэтому в расчет амплитуды колебаний дискретного бризера не принимались. Видно, что данные колебания имеют устойчивый характер в диапазоне от 4 до 7 пс.

Изменение амплитуды колебаний плоско-радиального дискретного бризера в зависимости от номера атома представлено на рис 3. Увеличение количества возбужденных атомов приводит к рассеянию энергии на соседние атомы и уменьшению времени жизни плоско-радиального дискретного бризера.

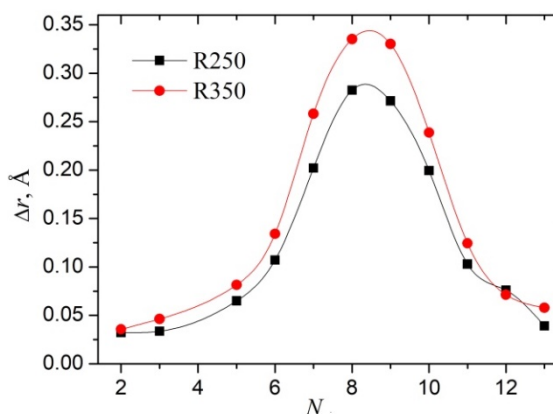


Рисунок 3- Изменение амплитуды колебаний плоско-радиального дискретного бризера в зависимости от номера атома, рассчитанного при двух параметрах локализации R=250 и 350.

Исследования, проведенные при помощи методов молекулярной динамики, позволяют сделать вывод о существовании в ГЦК решетке меди устойчивого плоско-радиального дискретного бризера. Отметим, что дискретный бризер данного типа ранее не был описан в литературе.

Список используемой литературы

1. Сахненко В.П., Чечин Г.М. Симметричные правила отбора в нелинейной динамике атомных смещений // Докл. Акад. Наук. 1993. т. 330. С. 308-310.
2. Chechin G.M., Sakhnenko V.P. Interactions between normal modes in nonlinear dynamical systems with discrete symmetry. Exact results // Physica D: Nonlinear Phenomena. 1998. V.117. №. 1. P. 43-76.
3. Семенов А.С., Мурзаев Р.Т., Кистанов А.А., Бебихов Ю.В. Исследование дискретных бризеров в ГПУ металлах бериллии и цирконии // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2015. т. 12. №. 1. С. 26-30.
4. Murzaev R.T., Kistanov A.A., Dubinko V.I., Terentyev D.A., Dmitriev, S.V. Moving discrete breathers in bcc metals V, Fe and W // Computational Materials Science. 2015. V. 98. P. 88-92.
5. Murzaev R.T., Babicheva R.I., Zhou K., Korznikova E.A., Fomin S.Y., Dubinko V.I., Dmitriev S.V. Discrete breathers in alpha-uranium // The European Physical Journal B. 2016. V.89. №. 7. P. 1-6.

6. Лобзенко И.П., Баязитов А.М., Четвериков А.П., Махмутова Р.И., Кистанов А.А. Численное моделирование трёхмерных дискретных бризеров в ГЦК решётке Ni // Письма о материалах. 2016. т. 6. №. 4. С. 304-308.
7. Бачурина О.В., Мурзаев Р.Т., Дмитриев С.В. Моделирование линейного дискретного бризера в никеле // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2017. т. 14. №. 3. С. 363-367.
8. Медведев Н.Н., Старостенков М.Д., Захаров П.В., Пожидаева О.В. Локализованные колебательные моды в двумерной модели упорядоченного сплава Pt 3 Al // Письма в журнал технической физики. 2011. т. 37. №. 3. С. 7-15.
9. Захаров П.В., Старостенков М.Д., Ерёмин А.М., Чередниченко А.И. Дискретные бризеры в кристалле CuAu // Письма о материалах. 2016. т. 6. №. 4. С. 294-299.
10. Захаров П.В., Старостенков М.Д., Ерёмин А.М. Влияние упругой деформации всестороннего растяжения-сжатия на характеристики дискретного бризера в кристалле Pt 3 Al // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2016. т.13. №. 2. С. 223-229.
10. Murzaev R.T., Bachurin D.V., Korznikova E.A., Dmitriev S.V. Localized vibrational modes in diamond // Physics Letters A. 2017. V. 381. №. 11. P. 1003-1008.
12. Баимова Ю.А., Ямилова А.Б., Лобзенко И.П., Дмитриев С.В., Чечин Г.М. Двумерные кластеры дискретных бризеров в графене // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2014. т. 11. №. 4-2. С. 599-604.
13. Корзникова Е.А., Савин А.В., Баимова Ю.А., Дмитриев С.В., Мулюков Р.Р. Дискретный бризер на краю листа графена ориентации "кресло" // Письма в Журнал экспериментальной и теоретической физики. 2012. т. 96. №. 4. С. 238-242.
14. Хадеева Л.З., Дмитриев С.В., Кившарь Ю.С. Дискретные бризеры в деформированном графене // Письма в Журнал экспериментальной и теоретической физики. 2011. т. 94. №. 7. С. 580-584.
15. Баимова Ю.А., Мурзаев Р.Т., Лобзенко И.П., Дмитриев С.В., Жоу К. // Дискретные бризеры в графене: влияние температуры. Журнал экспериментальной и теоретической физики. 2016. т. 149. вып. 5, С. 1005–1010.
16. Лобзенко И.П., Безуглова Г.С. Численное исследование дискретных бризеров с мягким типом нелинейности в графене и графене с использованием метода функционала плотности. // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2015. т. 12 №3. С. 361-365.
17. Дмитриев С.В., Корзникова Е.А., Баимова Ю.А. Веларде М.Г. Дискретные бризеры в кристаллах // Успехи физических наук. 2016. Т. 186. № 5. С. 471-488.
18. Бачурина О. В., Мурзаев Р. Т., Корзникова Е. А., Дмитриев С.В. Исследование одномерной нелинейной колебательной моды в ГЦК алюминии // Materials Physics and Mechanics. 2017. т. 33. С. 49-56.
19. Бачурина О.В., Мурзаев Р.Т., Дмитриев С.В. Исследование плоской колебательной моды в ГЦК металле никеля в плоскости [111] // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2017. т. 14. №. 3. С. 363-367.
20. Foiles S. M., Baskes M. I., Daw M. S. Embedded-atom-method functions for the fcc metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and their alloys //Physical review B. – 1986. – Т. 33. – №. 12. – С. 7983.