

А.М. Ерёмин¹, П.В. Захаров², А.И. Чередниченко³

*¹Бийский технологический институт (филиал) Алтайского
государственного технического университета им. И.И. Ползунова,
г. Бийск, Россия*

*²Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
г. Санкт-Петербург, Россия*

*³Алтайский государственный гуманитарно-педагогический
университет им. В.М. Шукшина,
г. Бийск, Россия*

НЕЛИНЕЙНЫЕ ВЫСОКОАМПЛИТУДНЫЕ КОЛЕБАНИЯ АТОМОВ НА ПОВЕРХНОСТИ С ПОЛОЖИТЕЛЬНОЙ КРИВИЗНОЙ

Динамические дискретные структуры играют важную роль в большом количестве процессов в природе и технике. Возможность поддерживать локализованные возбуждения такими структурами расширяет перспективы их применения [1]. Локализованные состояния в дискретной системе возможны при проявлении нелинейности связей. В общем случае это приводит к формированию различных типов локализованных мод и состояний структуры.

Локальные возбуждения атомной структуры вблизи поверхности кристаллов могут приводить к различным нелинейным эффектам, влияющим на структурные и энергетические превращения материала на значительном расстоянии от поверхности. При этом свойства локализованных возбуждений изменяются в зависимости от энергетического рельефа поверхности. Для простых случаев в [2] рассмотрены колебательные моды у поверхности и их характеристики с позиций концепции дискретных бризеров [3]. При этом следует отметить, что речь идет о локализованных модах вблизи неоднородностей, так как дискретным бризером можно назвать нелинейную локализованную моду, если она существует в среде с трансляционной симметрией без искажения. Наличие каких-либо дефектов и неоднородностей не

обеспечивает этого условия. Однако показанная нами в [2] возможность передачи энергии с поверхности внутрь такой системы указывает на прямую связь между этими типами колебаний.

Внешние периодические воздействия могут приводить к проявлению эффекта супратрансмиссии. Который должен передавать энергию на частотах вне спектра системы. Следует отметить роль дискретных бризеров в формировании условий транспорта энергии через кристалл. Внешние колебания, в свою очередь, могут имитировать граничные условия, соответствующие динамике объема кристалла, что приводит к рассмотрению мод, находящихся далеко от поверхности.

В данной работе рассматривается влияние кривизны поверхности с цилиндрической симметрией на возможность возбуждения поверхностных локализованных мод. Мы рассмотрели такие моды с позиций дискретных бризеров и квазибризеров. Исследование проводилось с использованием метода молекулярной динамики. Модель представляла собой гранецентрированный кубический кристалл состава A_3B со сверхструктурой $L1_2$, где компонент A – Pt, B – Al. Взаимодействие частиц описывалось межатомным потенциалом, полученным методом погруженного атома. Показана принципиальная возможность существования локализованных мод на рассматриваемой поверхности. Рассчитаны энергетические и динамические характеристики локализованных возбуждений в зависимости от кривизны и положения атома на поверхности кристалла.

Литература

1. Chong C., Porter M., Kevrekidis P., Daraio Ch. Nonlinear Coherent Structures in Granular Crystals // Journal of physics Condensed matter. – 2016. – Vol. 29. – P. 1–41.
2. Zakharov P.V., Korznikova E.A., Dmitriev S.V., Ekomasov E.G., Zhou K. Surface discrete breathers in Pt_3Al intermetallic alloy // Surface Science. – 2019. – Vol. 679. – P. 1–5.
3. Flach S., Willis C. R. Discrete Breathers // Phys. Rep. – 1998. – Vol. 295. – P. 181–264.