

УДК 538.913

СТАТИСТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ДИСКРЕТНОГО БРИЗЕРА В КРИСТАЛЛЕ CuPt_7 С ОРТОГОНАЛЬНОЙ И ТРИГОНАЛЬНОЙ КОНФИГУРАЦИЯМИ**А.М. Ерёмин^{1†}, П.В. Захаров², А.И. Чередниченко¹, М.Д. Старостенков³, М.П. Фараджева²**[†]eam77@yandex.ru¹Алтайский государственный гуманитарно-педагогический университет им. В.М. Шукшина, ул. Владимира Короленко, 53, 659333, Бийск, Россия²Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, ул. Политехническая, 29, Санкт-Петербург, 195251, Россия³Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова, пр. Ленина, 46, 656038, Барнаул, Россия

В статье методом молекулярной динамики проводится расчёт статистических характеристик дискретного бризера в модельном кристалле CuPt_7 с ортогональной и тригональной конфигурациями. Роль рассматриваемых объектов в динамике кристаллической решетки остается до конца не ясной в виду сложностей их прямого наблюдения. Платиновые сплавы зачастую обеспечивают необходимые условия существования дискретных бризеров различных размерностей и конфигураций. Обязательными условиями существования дискретных бризеров является существенная нелинейность межатомных связей и наличие запрещенной зоны в фоновом спектре кристалла. Поэтому на первом этапе рассчитаны фоновые спектры этого модельного кристалла, как с ортогональной, так и тригональной конфигурациями. Далее выявлены зависимости среднеквадратичного отклонения, коэффициента вариации и средней частоты модельного дискретного бризера от времени его существования. Анализ статистических данных показывает, что в описанной модели с использованием потенциала межатомного взаимодействия, полученного методом погружённого атома (ЕАМ), квази-бризерное модельное решение незначительно отличается от соответствующего ему точного бризера. В рамках данной модели для обоих сингоний были рассчитаны следующие статистические характеристики и зависимости: группированный статистический ряд абсолютных и относительных частот, гистограмма относительных частот, полигон абсолютных и относительных частот, эмпирическая функция распределения исходной выборки. Статистические данные позволяют вникнуть в причины разрушения бризеров и более полно описать процесс рассеяния ими энергии. Разрушение квази-бризеров происходит в тот момент, когда среднеквадратическое отклонение превышает разность между средней частотой бризера и ближайшей границей фонового спектра кристалла.

Ключевые слова: кристалл CuPt_7 , квази-бризер, дискретный бризер, статистические характеристики, молекулярная динамика.

STATISTICAL CHARACTERISTICS OF A DISCRETE BREATHER IN A CuPt_7 CRYSTAL WITH ORTHOGONAL AND TRIGONAL CONFIGURATIONS**A.M. Eremin^{1†}, P.V. Zakharov², A.I. Cherednichenko¹, M.D. Starostenkov³, M.P. Faradzheva²**[†]eam77@yandex.ru¹Shukshin Altai State University for Humanities and Pedagogy, Vladimira Korolenko Str., 53, Biysk, 659333, Russia²Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, Polytechnicheskaya Str., 29, St. Petersburg, 195251, Russia³I.I. Polzunov Altai State Technical University, Lenin Pr., 46, Barnaul, 656038, Russia

In the article, the statistical characteristics of a discrete breather in a model CuPt_7 crystal with orthogonal and trigonal configurations are calculated using the molecular dynamics method. The role of the objects under consideration in the dynamics of the crystal lattice remains unclear due to the difficulties of their direct observation. Platinum alloys often provide the necessary conditions for the existence of discrete breathers of various dimensions and configurations. Essential conditions for the existence of discrete breathers are a significant nonlinearity of interatomic bonds and the presence of a band gap in the phonon spectrum of the crystal. Therefore, at the first stage, the phonon spectra of this model crystal were calculated with both orthogonal and trigonal configurations. Further, the dependences of the standard deviation, the coefficient of variation and the average frequency of the model discrete breather on the time of its existence were revealed. Analysis of statistical data shows that in the described model using the interatomic interaction potential obtained by the embedded atom method (EAM), the quasi-breather model solution differs slightly from the corresponding exact breather. Within the framework of this model, the following statistical characteristics and dependencies were calculated for both systems: a grouped statistical series of absolute and relative frequencies, a histogram of relative frequencies, a polygon of absolute and relative frequencies, an empirical distribution function of the original sample. Statistical data allow us to understand the reasons for the destruction of breathers and more fully describe the process of energy dissipation by them. The destruction of quasi-breathers occurs at the moment when the root-mean-square deviation exceeds the difference between the average frequency of the breather and the nearest edge of the phonon spectrum of the crystal.

Keywords: crystal CuPt_7 , quasi-breather, discrete breather, statistical characteristics, molecular dynamics.

Введение

Идея сосредоточения энергии на узлах идеальных кристаллов динамично начала развиваться с работ [1, 2], в дальнейшем данное направление перешло в теорию дискретных бризеров и параллельных направлений [3]. Такие объекты как дискретные бризеры могут стать основой для воплощения ряда идей, к примеру, идеи теплового транзистора, предложенного в работе [4], или радиочастотных фильтров, магнетометров и т.д. [5-9]. С термином дискретный бризер вплотную связан термин нелинейной локализованной моды, поначалу они часто использовались как синонимы. В данном случае мы рассмотрим оба этих термина применительно к высокоамплитудным колебаниям решетки кристалла CuPt_7 .

Выбор объекта исследования в виде сплава CuPt_7 обусловлен рядом факторов. Первостепенно, сплавы на основе Pt обладают рядом интересных свойств, таких как устойчивость к коррозии и высокую температуру плавления. Эти свойства дают перспективу для применения таких сплавов в условиях космоса. Тем не менее, интенсивное внешнее воздействие в виде облучения может приводить к возбуждению таких объектов как дискретные бризеры с мягким типом нелинейности [10-12]. Дискретные бризеры возбуждаемые вблизи поверхности кристаллов [11], могут приводить к формированию уединенных волн, способных распространяться на десятки микрометров вглубь кристалла [13, 14].

Под дискретными бризерами понимают пространственно локализованные высокоамплитудные возбуждения кристаллической решетки, вызванные ангармоничностью межатомных сил, что приводит к зависимости частоты колебаний атомов от их амплитуд. Для существования таких объектов в кристаллах необходимо наличие запрещенной зоны в фоновом спектре кристалла, а также, в случае биатомных кристаллов, существенной разницы в массах компонент сплава. В тоже время стоит отметить, что могут существовать так называемые погруженные дискретные бризеры, частота которых может входить в фоновый спектр кристалла [3]. В случае если частота уменьшается при увеличении амплитуды колебаний, говорят о дискретных бризерах с мягким типом нелинейности, если увеличивается – о дискретных бризерах с жестким типом нелинейности.

В отличие от дискретных бризеров, нелинейные локализованные моды имеют относительно небольшое время жизни, порядка нескольких десятков периодов колебаний решетки. Они достаточно быстро рассеивают свою энергию в виде тепловых колебаний решетки на соседние атомы. Однако их время существования на порядок превосходит обычные тепловые колебания, что вызвано ангармоничностью межатомных сил.

Обращаясь к строгому определению дискретного бризера, в экспериментальных работах следует называть наблюдаемые объекты квази-бризерами, так как они имеют конечное время жизни и не строгую периодичность по времени. По этой причине, в работе [13] появилась концепция квази-бризеров, как локализованных в пространстве, но не строго периодических во времени объектов. Вместе с тем был сформулирован определенный критерий близости квази-бризера к соответствующему ему точному бризеру, базирующийся на вычислении среднеквадратичного отклонения $\eta(t_k)$ частот колебаний отдельных частиц бризера, найденных на некотором интервале в окрестности момента t_k , и вычислении среднеквадратичного отклонения частот колебаний выделенной j -й частицы бризера на различных временных интервалах.

Цель представленной работы – это расчет и анализ статистической оценки характеристик квази-бризеров в рассматриваемом кристалле CuPt_7 с ортогональной и тригональной конфигурациями. Методом исследования в нашей работе выступил метод молекулярной динамики. Этот метод является весьма результативным методом в физике конденсированного состояния и в материаловедении. Это обусловлено постоянным ростом мощности и доступности вычислительных машин, разработкой и программной реализацией численных методов.

1. Описание метода и методика эксперимента

Рассматриваемые нами модели представляют собой объемные ГЦК кристаллы CuPt_7 , который содержал 50000 частиц (рис.1), взаимодействующих посредством потенциала, полученного методом погруженного атома (ЕАМ-потенциал) [16]. Рассматривались два варианта решетки с ортогональными базисными векторами (рис.1а) и тригональная конфигурация (рис.1б) [17].

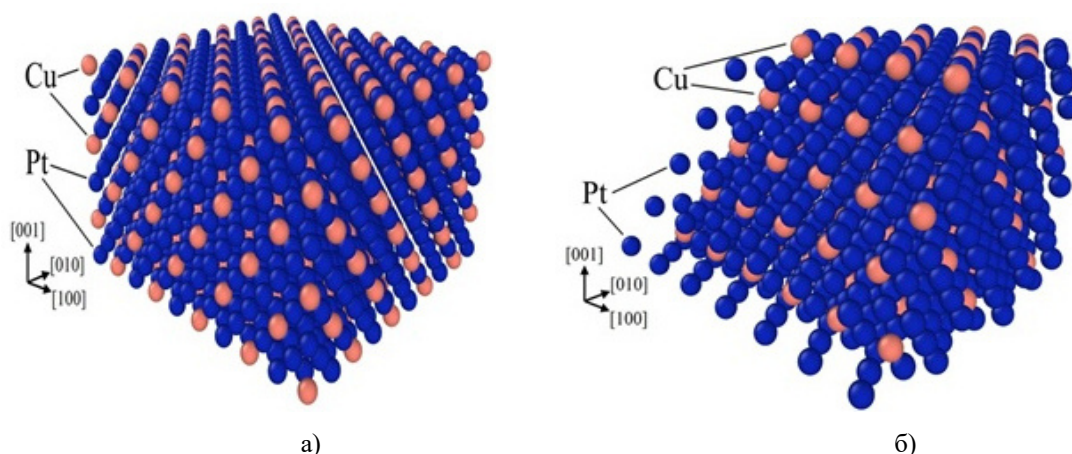


Рис.1. Структура кристалла CuPt_7 , а) с ортогональными базисными векторами, б) тригональная структура [14]

Моделирование и расчет плотности фоновых состояний осуществлялись посредством пакета LAMMPS [18]. Уравнения движения атомов интегрировались с использованием численной схемы четвертого порядка точности с

шагом интегрирования 0,5 фс. Результаты для решетки с ортогональными базисными векторами приведены на рис.2а, для тригональной структуры на рис.2б.

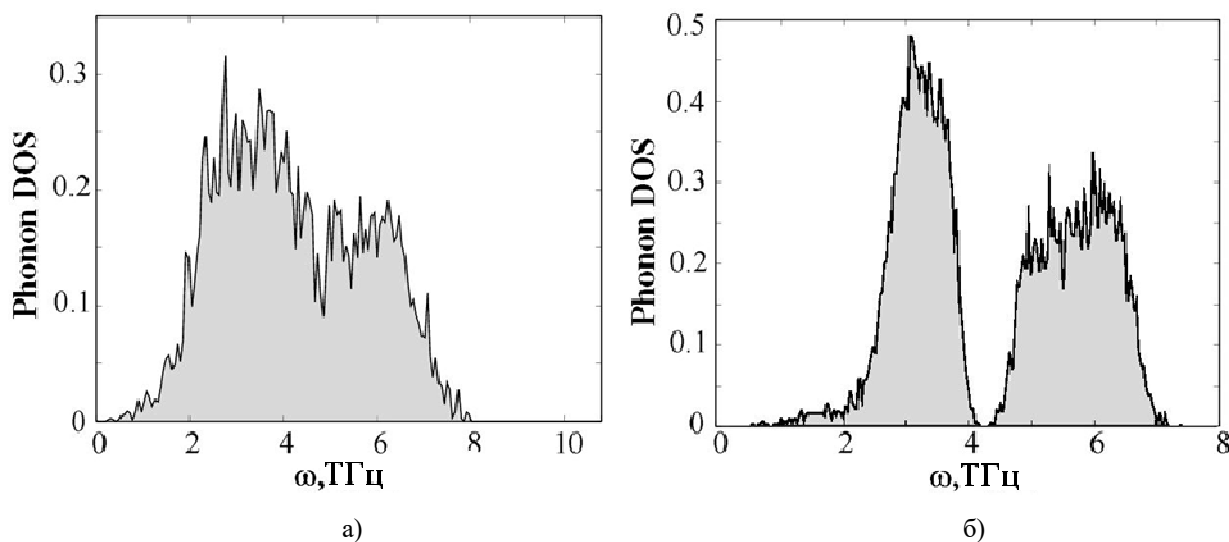


Рис.2. Плотности фоновых состояний кристалла CuPt_7 , а) с ортогональными базисными векторами, б) тригональная структура

Анализ структуры кристалла и рассчитанного фоновых спектра позволяет говорить о возможном существовании таких объектов, как дискретный бризер с мягким типом нелинейности в CuPt_7 . Так в кристалле, представленном на рис.1б, присутствует запрещенная зона, что является необходимым условием для существования дискретного бризера. Кроме того более легкие атомы меди окружены тяжелыми атомами платины, что также должно оказывать благоприятное влияние на локализацию колебаний легкой подрешетки. Однако масса меди

меньше массы платины менее чем в 3 раза, что зачастую недостаточно для формирования условия существования дискретного бризера.

В противоположность точным дискретным бризерам, квази-бризеры являются не строго периодическими во времени динамическими объектами, хотя, и локализованными в пространстве. Они возникают при любых достаточно малых отклонениях от точных бризерных решений в многомерном пространстве всех возможных начальных условий при решении задачи Коши. Именно поэтому, «ослабление

диктатуры» со стороны ядра (центральных атомов) бризера приводит к наличию в бризерном решении малых вкладов, имеющих разные частоты. Эти малые вклады можно обнаружить в колебаниях всех частиц цепочки, в частности, и центральных. Если найти достаточно точно частоты колебаний всех частиц квази-бризера, вычисленные на некотором временном интервале вблизи $t = t_k$, то они не будут строго одинаковыми. В связи с этими рассуждениями найдём среднеквадратичные отклонения $\eta(t_k)$ частоты колебаний различных частиц бризера от средней бризерной частоты $\bar{\omega}$:

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

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

Чем больше величина $\eta(t_k)$, тем больше отличается квази-бризерное решение от точного бризерного решения, для которого $\eta(t_k)=0$ в любой момент времени t_k .

2. Результаты и обсуждение

Приведем некоторые расчёты статистических характеристик квази-бризера. В таблице 1 приведены показатели среднеквадратичного отклонения η частот модельного квази-бризера от времени его существования t_k для ортогональной и тригональной конфигураций кристаллической решётки.

Среднеквадратичное отклонение характеризует разброс значений относительно среднего (математического ожидания). В рассматриваемых случаях это отклонение частот периферийных атомов модельного квази-бризера от частоты ядра квази-бризера. Из таблицы 1 видно, что среднеквадратичное отклонение квази-бризера варьируется от 0,0064977295 до 0,0264001837 для ортогональной конфигурации, и от 0,0070914382 до 0,0380036815 для тригональной конфигурации кристаллической решётки. Это соответствует незначительному рассеянию частоты периферийных атомов от частоты ядра модельного квази-бризера, как в случае рассмотрения ортогональной конфигурации кристаллической решётки, так и в случае тригональной конфигурации кристаллической решётки.

Таблица 1. Показатели среднеквадратичного отклонения η частот модельного квази-бризера от времени его существования t_k (в пикосекундах (пс)) для ортогональной и тригональной конфигураций кристаллической решётки

t_k	Ортогональная конфигурация	Тригональная конфигурация
	η	η
2	0,006497729551640	0,007091438269281
4	0,012817127389592	0,030488859484358
6	0,018924690108774	0,034120587916851
8	0,021396274311916	0,037052331399112
10	0,026400183776961	0,038003681595525

Среднеквадратичное отклонение показывает абсолютное отклонение измеренных значений от среднеарифметического, оно даёт оценку меры разброса. В связи с этим чтобы понять, насколько разброс велик относительно самих значений (т.е. независимо от их масштаба), необходим относительный показатель. Этот показатель называется коэффициентом вариации и рассчитывается по следующей формуле:

$$V = \frac{\eta}{\omega_{cp}}. \quad (3)$$

По этому показателю можно сравнивать однородность самых разных явлений независимо от их масштаба и единиц измерения. В таблице 2 приведены показатели коэффициента вариации V от времени существования квази-бризера t_k для ортогональной и тригональной конфигураций кристаллической решётки.

Таблица 2. Показатель коэффициента вариации V от времени существования квазибризера t_k (в пикосекундах (пс)) для ортогональной и тригональной конфигураций кристаллической решётки

t_k	Ортогональная конфигурация	Тригональная конфигурация
	V	V
2	0,0014837338655899	0,0014837849882996
4	0,0029994685437642	0,0066018100277258
6	0,0045399773297438	0,0075727660985270
8	0,0051940050160643	0,0082757975590056
10	0,0065139482135562	0,0086030522069119

Коэффициент вариации является показателем, отражающим разброс значений относительно среднего (отношение стандартного отклонения к среднему значению). Чем больше

значение коэффициента вариации, тем относительно больший разброс и меньшая выравненность исследуемых значений. Как видно из таблицы для обеих конфигураций кристаллической решетки значения коэффициента вариации небольшие. Это говорит о маленьком разбросе исследуемых значений.

В таблице 3 приведена средняя частота ω_{cp} модельного квази-бризера, от времени его существования t_k для ортогональной и тригональной конфигураций кристаллической решетки.

Таблица 3. Средняя частота ω_{cp} (ТГц) модельного квази-бризера, от времени его существования t_k (в пикосекундах (пс)) для ортогональной и тригональной кристаллической решетки

t_k	Ортогональная конфигурация	Тригональная конфигурация
	ω_{cp}	ω_{cp}
2	4,3793096260	4,7792894900
4	4,2731326617	4,6182575493
6	4,1684584380	4,5056968080
8	4,1194172770	4,4771915620
10	4,0528698010	4,4174649980

Таблица 3 показывает, что отклонение частоты периферийных атомов модельного квази-бризера от частоты ядра квази-бризера крайне мало как в случае ортогональной конфигурации кристаллической решетки, так и в случае тригональной конфигурации кристаллической решетки. При этом средняя частота варьируется в пределах от 4,0528698010 ТГц до 4,3793096260 ТГц для ортогональной конфигурации и от 4,4174649980 ТГц до 4,7792894900 ТГц для тригональной конфигурации.

Оценка математического ожидания (выборочное среднее) не сгруппированной выборки средних частот группы атомов, входящих в модельный квази-бризер (4,3793096261; 4,2731326617; 4,1684584381; 4,1194172774; 4,0528698013 – для ортогональной конфигурации, 4,7792894900; 4,6182575493; 4,5056968080; 4,4771915620; 4,4174649980 – для тригональной конфигурации) вычисляется по формуле:

$$M = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N X_i. \quad (4)$$

Математического ожидания для ортогональной выборки составляет 4,198638 ТГц, а для тригональной выборки 4,559580 ТГц.

Оценка дисперсии, не сгруппированной той же выборки, вычисляется по формуле:

$$D = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (X_i - M)^2. \quad (5)$$

Вычисляя выборочную дисперсию по указанной формуле, получаем для ортогональной выборки 0,016657, для тригональной выборки 0,020401. Полученные значения показывают, что в рамках данной модели для обоих сингоний кристалла CuPt₇ можно утверждать о близости модельного квази-бризера к соответствующему ему точному бризеру, как и для случая ортогональной конфигурации кристаллической решетки, так и для тригональной конфигурации кристаллической решетки. Аналогично в рамках данной модели для обоих сингоний были рассчитаны следующие статистические характеристики и зависимости: группированный статистический ряд абсолютных и относительных частот, гистограмма относительных частот, полигон абсолютных и относительных частот, эмпирическая функция распределения исходной выборки.

Выводы

С использованием метода молекулярной динамики в работе приведены расчёты статистических характеристик модельного квази-бризера для двух сингоний (ортогональная и тригональная) кристалла CuPt₇. К этим характеристикам относятся среднее квадратичное отклонение частот отдельных атомов, входящих в бризер, от среднего значения частоты ядра квази-бризера, а также коэффициент вариации на различном этапе существования, рассматриваемого объекта.

Заметим, что окончательное разрушение квази-бризера происходит в тот момент, когда среднее квадратичное отклонение частот превышает разность между средней частотой квази-бризера и верхней границей фононного спектра кристалла. В этот момент происходит делокализация колебаний и рассеивание энергии по кристаллу в виде малоамплитудных тепловых колебаний решетки. Показано, что полученный квази-бризер, незначительно отличается от соответствующего ему точного бризера, как в случае рассмотрения ортогональной кристаллической решетки, так и в случае тригональной кристаллической решетки. Этот результат показывает устойчивость полученного дискретного бризера в модельных ячейках и возможности

его получения в реальных сплавах рассмотренного состава [19–21].

Список используемой литературы

1. Долгов А.С. Локализация колебаний в нелинейной кристаллической структуре // Физика твердого тела. – 1986. – Т.28, №6. – С. 1641.
2. Sievers A.J., Takeno S. Intrinsic Localized Modes in Anharmonic Crystals // Phys. Rev. Lett. – 1988. – V.61, No.8. – P. 970–973.
3. Dmitriev S.V., Korznikova E.A., Baimova J.A., Velarde M.G. Discrete breathers in crystals // Phys. Usp. – 2016. – V.59. – P. 446–461.
4. Manley M.E., Sievers A.J., Lynn J.W., Kiselev S.A., Agladze N.I., Chen Y., Llobet A., Alatas A. Intrinsic Localized Modes Observed in the High Temperature Vibrational Spectrum of NaI // Phys. Rev. B. – 2009. – V.9(13). – P. 134304.
5. Kanakov O.I., Flach S., Shalfeev V.D. Introduction to discrete breathers theory // Известия вузов «ПНД». – 2016. – Т.146, №3. – С. 112–127.
6. Eisenberg H.S., Silberberg Y., Morandotti R., Boyd A.R. and Aitchison J.S. Discrete Spatial Solitons in Waveguide Arrays // Phys. Rev. Lett. – 1998. – V.81. – P. 3383.
7. Kivshar Yu.S., Agrawal G.P. Optical solitons. – Academic Press, Amsterdam. 2003. – 540 p.
8. Miroshnichenko A.E., Flach S., Fistul M.V., Zolotaryuk Y., Page J.B. Breathers in Josephson junction ladders: Resonances and electromagnetic wave spectroscopy // Phys. Rev. E. – 2001. – V.64. – P. 066601.
9. Schwarz U.T., English L.Q., and Sievers A.J. Experimental Generation and Observation of Intrinsic Localized Spin Wave Modes in an Antiferromagnet // Phys. Rev. Lett. – 1999. – V.83. – P. 223.
10. Zakharov P.V., Starostenkov M.D., Eremin A.M., Korznikova E.A., Dmitriev S.V. Excitation of gap discrete breathers in an A_3B crystal with a flux of particles // Physics of the Solid State. – 2017. – V.59(2). – P. 223–228.
11. Zakharov P.V., Korznikova E.A., Dmitirev S.V., Ekomasov E.G., Zhou K. Surface discrete breathers in Pt_3Al intermetallic alloy // Surface Science. – 2019. – V.679. – P. 1–5.
12. Cherednichenko A.I., Zakharov P.V., Starostenkov M.D., Sysoeva M.O., Eremin A.M. Nonlinear supratransmission in a Pt_3Al crystal at intense external influence // Computer Research and Modeling. – 2019. – V.11(1). – P. 109–117.
13. Захаров П.В., Старостенков М.Д., Корзникова Е.А., Еремин А.М., Луценко И.С., Дмитриев С.В. Возбуждение волн солитонного типа в кристаллах стехиометрии A_3B // Физика твердого тела. – 2019. – Т.61, №11. – С. 2183–2189.
14. Захаров П.В., Старостенков М.Д., Еремин А.М., Чередниченко А.И. Дискретные бризеры в кристалле CuAu // Письма о материалах. – 2016. – Т.6, №4(24). – С. 294–299.
15. Chechin G.M., Dzhelauhova G.S., Mehonoshina E.A. Quasibreathers as a generalization of the concept of discrete breathers // Phys. Rev. E. – 2006. – V.74. – P. 036608.
16. Zhou X.W., Johnson R.A., Wadley H N.G. Misfit-energy-increasing dislocations in vapor-deposited CoFe/NiFe multilayers // Physical Review B. – 2004. – V.69. – P. 144113.
17. Material CuPt_7 [Электронный ресурс] / Официальный сайт <https://www.materialsproject.org/materials/mp-12608/> DOI 10.17188/1189009.
18. Information on LAMMPS Molecular Dynamics Simulator [Электронный ресурс] / Официальный сайт <http://lammps.sandia.gov>.
19. Полетаев Г.М., Старостенков М.Д. Структурные изменения тетраэдров дефектов упаковки при поглощении точечных дефектов // Письма в Журнал технической физики. – 2009. – Т.35, №1. – С. 3–10.
20. Старостенков М.Д. Кристаллогеометрическое описание планарных дефектов в сверхструктурах: автореф. ... д-ра физ.-мат. наук. – Барнаул, 1994. – 85 с.
21. Poletaev G.M., Sannikov A.V., Berdychenko A.A., Starostenkov M.D. molecular dynamics study of plastic deformation mechanisms near the interphase boundary in two-dimensional bimetallic systems // Materials Physics and Mechanics. – 2015. – V.22, No.1. – P. 15–19.

Поступила в редакцию 14.12.2020

Сведения об авторах

Еремин Александр Михайлович, к.ф.-м.н., доцент АГТПУ, eam77@yandex.ru
 Захаров Павел Васильевич, д.ф.-м.н., профессор СПбПУ, zakharovpvl@rambler.ru
 Чередниченко Антон Иванович, преподаватель АГТПУ, anton.chered@mail.ru
 Старостенков Михаил Дмитриевич, д.ф.-м.н., профессор, зав. кафедрой АлтГТУ, genphys@mail.ru
 Фараджеева Мислимат Пиралиевна, к.т.н., ст. преподаватель СПбПУ, zakharovpvl@rambler.ru