

СТАТИСТИЧЕСКИЙ ПОДХОД К ДИСКРЕТНЫМ БРИЗЕРАМ В МОНОАТОМНЫХ ГЦК И БИАТОМНОМ ГЦТ КРИСТАЛЛАХ

¹ЕРЁМИН А. М., ¹ЗАХАРОВ П. В., ²СТАРОСТЕНКОВ М. Д., ³ДМИТРИЕВ С. В.

¹ Алтайский государственный гуманитарно-педагогический университет им. В.М. Шукшина, 659333, Алтайский край, г. Бийск, ул. Короленко, 53

² Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова, 656038, Алтайский край, г. Барнаул, пр. Ленина, 46

³ Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, 450001, Республика Башкортостан, г. Уфа, ул. Степана Халтурина, 39

АННОТАЦИЯ. Методом молекулярной динамики проводится расчёт и анализ статистических характеристик квази-бризера с жёстким типом нелинейности в монокристаллах металлов, на примере Cu и Au, а также биатомного ГЦТ кристалла CuAu. В рамках данной модели для квази-бризеров были рассчитаны следующие статистические характеристики и зависимости: группированный статистический ряд абсолютных и относительных частот, полигон абсолютных и относительных частот, гистограмма относительных частот, эмпирическая функция распределения, оценка математического ожидания и дисперсии исходной выборки. Для всех кристаллов рассчитаны плотности фононных состояний. Для возбуждения квази-бризеров применялись два разных подхода, базирующихся на разных функциях смещения атомов из положения равновесия. Статистические данные позволяют вникнуть в причины разрушения бризеров и более полно описать процесс рассеяния ими энергии.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: кристалл, квази-бризер, дискретный бризер, нелинейная динамика, солитон, молекулярная динамика.

ВВЕДЕНИЕ

Задачи модификации свойств материалов являются актуальными на сегодняшний день в связи с интенсивным развитием ряда областей науки и техники. Появившиеся экспериментальные работы по трактовке транспорта энергии солитонами при отжиге дефектов [1 – 3] приводят к активному поиску их возможного применения. Так автор одной из таких работ, М.Е. Manley, предложил использовать один из видов солитонов (дискретный бризер) в сильно нелинейных материалах в качестве своеобразного диода, позволяющего манипулировать тепловыми потоками [4].

Под дискретным бризером (ДБ) понимают пространственно локализованные колебательные моды большой амплитуды [5, 6]. ДБ локализуют энергию от долей до нескольких электронвольт, могут быть как неподвижными, так и подвижными, их время существования лежит в диапазоне от десятков до тысяч периодов атомных колебаний, что может быть достаточным для модификации дефектной структуры кристалла [6]. 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. Бризеры с жестким типом нелинейности существуют в графене и в чистых металлах с ГЦК-, ОЦК-, ГПУ-структурами, в альфа-урани и алмазе [6 – 17]. Для чистых металлов или упорядоченных сплавов с небольшой разницей масс компонент, условия возбуждения ДБ с жестким типом

нелинейности более специфичны, чем при возбуждении щелевых ДБ с мягким типом нелинейности.

Необходимо сделать терминологическую оговорку. В математической физике под ДБ понимаются строго периодические, локализованные в пространстве, незатухающие во времени нелинейные колебания на одной частоте, но в реальных системах, где неизбежно наличие всевозможных возмущений, следует рассматривать квази-бризеры, имеющие нестрогую периодичность колебаний, с частотами в некотором диапазоне и конечное время существования [17]. В отличие от идеализированных ДБ, квази-бризеры имеют не бесконечное, но достаточно большое время существования. Квази-бризеры возникают при наличии малых отклонениях от точных бризерных решений в многомерном пространстве всех возможных начальных условий при решении задачи Коши для нелинейных дифференциальных уравнений, поскольку в этом случае не происходит полного подавления вкладов от колебаний периферийных частиц со своими собственными частотами. Таким образом, ослабление лидирующего колебания ядра бризера (в наших расчетах, ядро симметричного бризера образует одна частица, а в случае антисимметричного бризера – две его центральные частицы) приводит к наличию в бризерном решении дополнительных частот колебаний. Эти малые вклады можно обнаружить в колебаниях всех частиц квази-бризера, 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. Далее термины бризер, дискретный бризер и квази-бризер будут использоваться как синонимы.

В данной работе рассматриваются моноатомные ГЦК металлы Cu и Au, а также биатомный ГЦТ кристалл CuAu. Основной целью работы является расчет и анализ статистических характеристик квази-бризеров с жестким типом нелинейности в указанных материалах. Полученные данные позволят охарактеризовать эволюцию квази-бризера с течением времени.

КОМПЬЮТЕРНАЯ МОДЕЛЬ И ОПИСАНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТА

Рассматриваемые нами модели представляют собой объемные кристаллы, содержащие от 10^5 до $3 \cdot 10^5$ частиц (рис. 1), взаимодействующих посредством потенциала, полученного методом погруженного атома (EAM-потенциал). Моделирование осуществлялось посредством пакета LAMMPS [18]. В вычислительной химии модель погружённого атома используется для приближенного описания энергии взаимодействия между двумя атомами, с учетом присутствия соседних атомов. Выбор потенциала и обоснованность его использования для конкретной задачи является важным этапом при моделировании.

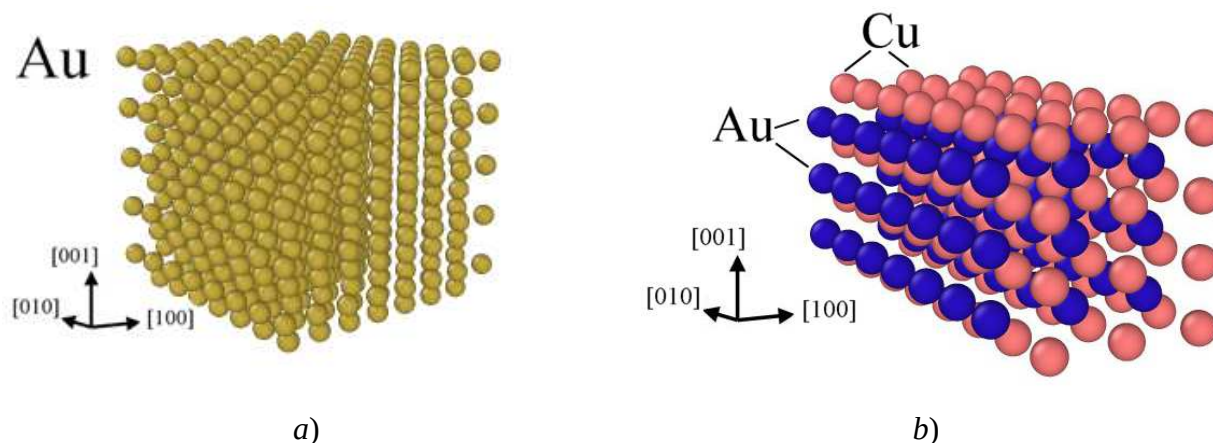


Рис. 1. Структура кристаллов: (a) ГЦК Cu или Au и (b) ГЦТ упорядоченный сплав CuAu

Полная энергия E кристалла может быть выражена как $E = \frac{1}{2} \sum_{i,j,i \neq j} \varphi_{ij}(r_{ij}) + \sum_i F_i(\rho_i)$, где φ_{ij} представляет парную энергию взаимодействия атомов i и j , расположенных на расстоянии r_{ij} друг от друга, а F_i энергия вложения, связанная с помещением атома i в местоположение с электронной плотностью ρ_i . Электронная плотность учитывает положение окружающих атомов и может быть рассчитана по формуле $\rho_i = \sum_{j,j \neq i} f_j(r_{ij})$, где $f_j(r_{ij})$ – электронная плотность на участке атома i , находящегося на расстоянии r_{ij} от атома j .

ЕАМ-потенциал чистого элемента определяется тремя функциями: парной энергией φ , электронной плотностью ρ , и энергией вложения F . Для сплава ЕАМ-потенциал содержит не только три функции φ , ρ , и F для каждого из составляющих элементов, но также парные энергии φ_{ab} между разными элементами a и b ($a \neq b$). В результате, функции φ , ρ , и F вычисленные для чистых металлов не могут быть непосредственно применены к сплаву или многослойным системам. Тем не менее, процедура обобщения ЕАМ-потенциалов и их расстояния обрезки путем нормализации ЕАМ-потенциалов и введения модели сплава, была предложена автором работы [19]. Эта процедура дает возможность построения ЕАМ-потенциалов сплавов из ЕАМ-потенциалов для отдельных элементов. Такие потенциалы сплавов использовались при молекулярном моделировании и дали хорошие результаты в экспериментах [19], такого рода потенциал применялся нами для кристалла CuAu.

Главным фактором, определяющим время существования ДБ в реальных кристаллах, является удаленность его частоты от частот фононного спектра, поэтому были рассчитаны плотности фононных состояний для рассматриваемых кристаллов (рис. 2). В расчетах использовался программный пакет LAMMPS, который включает необходимые для этих целей процедуры, базирующиеся на преобразовании Фурье автокорреляционных функций перемещений атомов от времени.

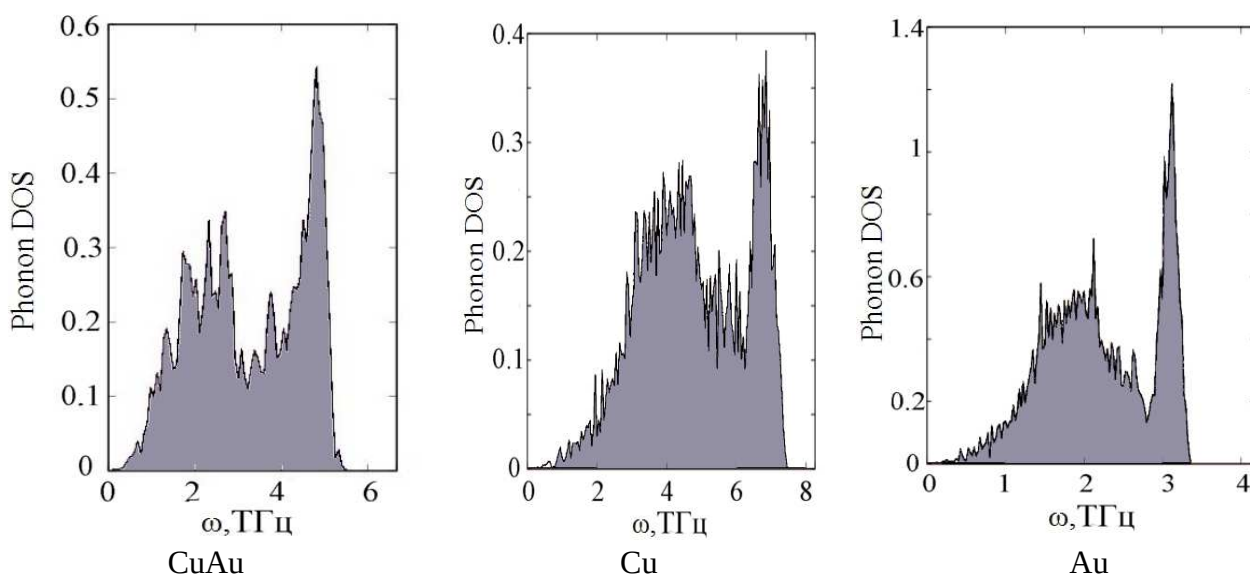


Рис. 2. Плотности фононных состояний моделей рассматриваемых кристаллов

Начальные условия для возбуждения неподвижного ДБ с жестким типом нелинейности в моноатомных кристаллах задавались посредством анзаца, предложенного в работе [21], следующим образом:

$$x_n^0 = T_n + S_n, \quad \dot{x}_n^0 = 0, \quad y_n^0 = 0, \quad \dot{y}_n^0 = 0, \quad (1)$$

где x_n^0 , y_n^0 и $\dot{x}_n^0$, $\dot{y}_n^0$ – 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. То есть, $T_n = (x_{n,\max} - x_{n,\min})/2$, $S_n = (x_{n,\max} + x_{n,\min})/2$, где $x_{n,\max}$ и $x_{n,\min}$ – это максимальное и минимальное значение функции $x_n(t)$, описывающей движение n -го атома. Данные функции имели вид:

$$T_n = \frac{(-1)^n A}{\cosh[\beta(n-x_0)]}, \quad S_n = \frac{-B(n-x_0)}{\cosh[\gamma(n-x_0)]}, \quad (2)$$

где параметр A определяет амплитуду ДБ, параметр B определяет амплитуду смещений центров колебаний атомов, параметры β и γ задают степень пространственной локализации ДБ, а x_0 – его начальное положение.

В работе [20] подробно рассмотрены характеристики таких бризеров для ряда ГЦК металлов и сплавов, в том числе, для Cu и Au. Выявлено максимальное время их существования в рассмотренных моделях в зависимости от начальных условий возбуждения. В данной работе мы проводим расчет и анализ статистических характеристик квази-бризеров как в моноатомных кристаллах, на примере Cu и Au, так и в соединении CuAu.

В CuAu квази-бризер возбуждался иным способом. Для создания начального профиля ДБ использовалась функция Гаусса (3), адаптированная для условий кристалла

$$f(x) = A_0 e^{-\frac{x^2}{2C^2}}, \quad (3)$$

где A_0 задает начальную амплитуду центральных атомов дискретного бризера, x – относительная координата пары атомов в ряду, параметр C определяет степень пространственной локализации дискретного бризера. Варьируя значение A_0 и C подбираем профиль дискретного бризера, тем самым задавая начальные отклонения из положения равновесия атомам, входящим в бризер. Физические характеристики квази-бризеров в таком сплаве изучены нами в работе [8]. Далее будут рассчитаны и проанализированы статистические характеристики ДБ в моноатомных кристаллах Cu и Au, а также ДБ в CuAu, возбужденного на атомах подрешетки меди.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЯ

Основными статистическими характеристиками квази-бризера являются среднеквадратическое отклонение $\eta(t_k)$ (рис. 3) и среднее значение частоты $\bar{\omega}$ колебаний атомов, где t_k – время существования квази-бризера:

$$\eta(t_k) = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (\omega_i(t_k) - \bar{\omega}(t_k))^2}{N(N-1)}}. \quad (4)$$

$$\bar{\omega}(t_k) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \omega_i(t_k). \quad (5)$$

Время существования рассматриваемых квази-бризеров разбивалось на пять равных частей. Таким образом, получали пять точек для анализа статистических характеристик бризеров (рис. 3). То есть имела выборка из пяти элементов – частот квази-бризеров, табл. 1.

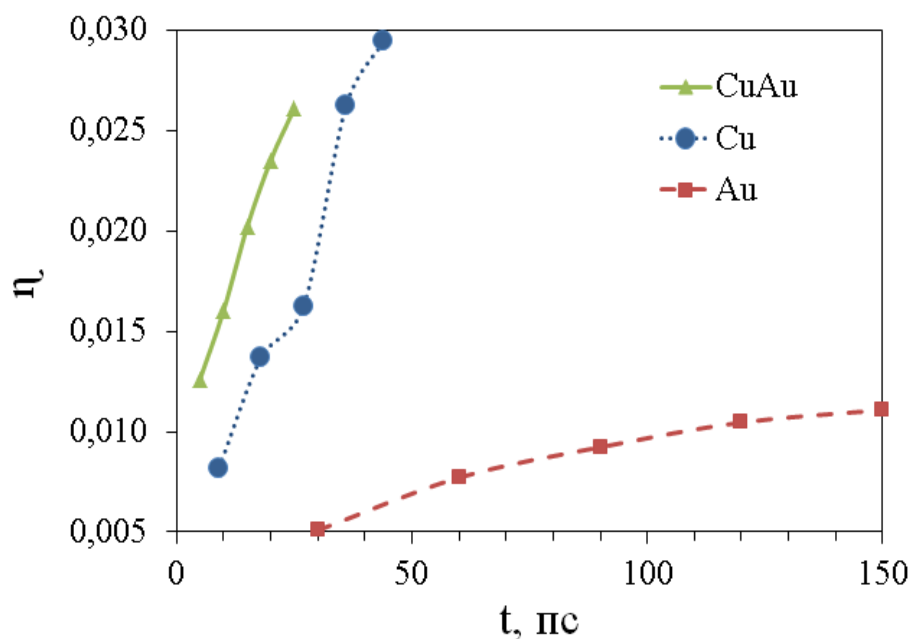


Рис. 3. Зависимость среднеквадратического отклонения частот колебания атомов квази-бризеров от времени их существования для CuAu, Cu, Au

Таблица 1

Выборка частот квази-бризера

Модель	ω_1 , ТГц	ω_2 , ТГц	ω_3 , ТГц	ω_4 , ТГц	ω_5 , ТГц
CuAu	5,72229	5,60811	5,39909	5,39343	5,30990
Cu	8,18301	7,87534	7,72063	7,42053	7,33631
Au	3,56532	3,51414	3,48136	3,42447	3,37433

Далее производилось построение статистического ряда абсолютных частот по данной выборке, т.е. последовательность пар чисел (ω_1^*, n_1^*) , (ω_2^*, n_2^*) , ..., (ω_m^*, n_m^*) , где ω_k^* – центр k -го интервала группировки и n_1^* – число элементов выборки, попавших в k -й интервал. Числа n_k^* ($k = 1, \dots, m$) называются абсолютными частотами. Находим минимальный и максимальный элемент выборки, они соответствуют крайним значениям для каждой модели в табл. 1. Находим длину интервала группировки по формуле:

$$h = (\omega_{\max} - \omega_{\min})/m. \quad (6)$$

Находим правые границы интервалов группировки:

$$\omega_k = \omega_{\min} + kh \quad (k = 1, \dots, 5). \quad (7)$$

Находим центры ω_k^* интервалов группировки по формуле:

$$\omega_k^* = \omega_k - h/2 \quad (k = 1, \dots, 5). \quad (8)$$

Для каждого интервала группировки (ω_{k-1}, ω_k) находим число n_k^* элементов выборки, попавших в этот интервал. Важно чтобы каждый элемент выборки был отнесен к одному и только к одному интервалу, а если значение элемента попадает на границу интервала, то будем относить его к интервалу с младшим номером. Минимальный элемент всегда относим к первому интервалу, максимальный к последнему. Полученные результаты приведем в табл. 2.

Таблица 2

Вспомогательная таблица статистических данных

Модель	Номер интервала, k	Центр интервала ω_k^* , ТГц	Границы интервала, ТГц
CuAu	1	5,35114	5,30990...5,39238
	2	5,43361	5,39238...5,47485
	3	5,51609	5,47485...5,55733
	4	5,59857	5,55733...5,63981
	5	5,68105	5,63981...5,72229
Cu	1	7,42098	7,33631...7,50565
	2	7,59032	7,50565...7,67499
	3	7,75966	7,67499...7,84433
	4	7,92900	7,84433...8,01367
	5	8,09834	8,01367...8,18301
Au	1	3,39343	3,37433...3,41253
	2	3,43162	3,41253...3,45072
	3	3,46982	3,45072...3,48892
	4	3,50802	3,48892...3,52712
	5	3,54622	3,52712...3,56532

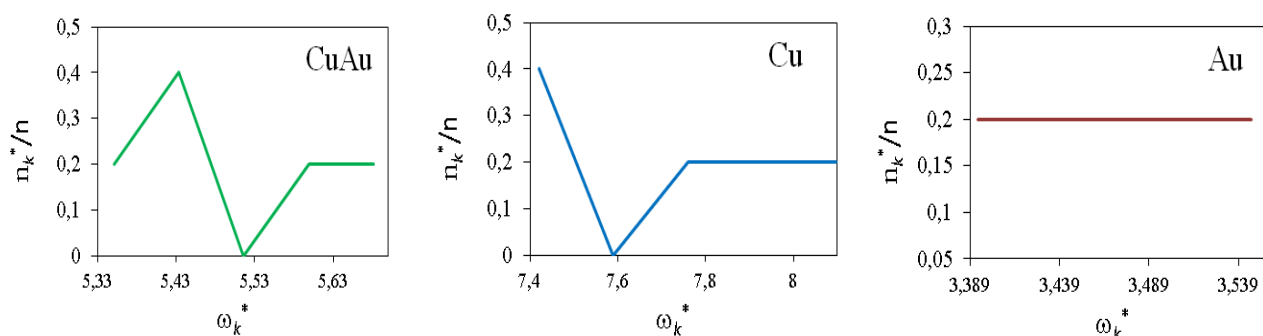
Строим группированный статистический ряд относительных частот, представляющий собой последовательность пар чисел $(\omega_1^*, n_1^*/n)$, $(\omega_2^*, n_2^*/n)$, ..., $(\omega_m^*, n_m^*/n)$, где n_k^*/n – относительные частоты и n – объем выборки (табл. 3).

Таблица 3

Группированный статистический ряд относительных частот

CuAu	ω_k^* , ТГц	5,35114	5,43361	5,51609	5,59857	5,68105
	n_k^*/n	0,20000	0,40000	0,00000	0,20000	0,20000
Cu	ω_k^* , ТГц	7,42098	7,59032	7,75966	7,92900	8,09834
	n_k^*/n	0,40000	0,00000	0,20000	0,20000	0,20000
Au	ω_k^* , ТГц	3,39343	3,43162	3,46982	3,50802	3,54622
	n_k^*/n	0,20000	0,20000	0,20000	0,20000	0,20000

На основе табл. 3 построим полигоны относительных частот для каждой из моделей кристалла (рис. 4).

Рис. 4. Полигоны относительных частот дискретных брэггов в CuAu, Cu, Au, ω_k^* в ТГц

Для полноты статистической картины характеристик квази-брэггов произведем оценку математического ожидания и дисперсии, а также построим эмпирические функции распределения.

Оценка математического ожидания (выборочное среднее) не сгруппированной выборки вычислим по формуле:

$$M^* = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \omega_k. \quad (9)$$

Оценка дисперсии, не сгруппированной выборки осуществим по формуле:

$$D^* = \frac{1}{n-1} \sum_{k=1}^n (\omega_k - M^*)^2. \quad (10)$$

Для рассматриваемых нами моделей получили значения, приведенные в табл. 4.

Таблица 4

Математическое ожидание и дисперсия для модельных кристаллов

Модель	M^*	D^*
CuAu	5,486563	0,029469
Cu	7,707168	0,118647
Au	3,471924	0,005593

Для наглядности построим эмпирические функции распределения $F(\omega)$ (рис. 5).

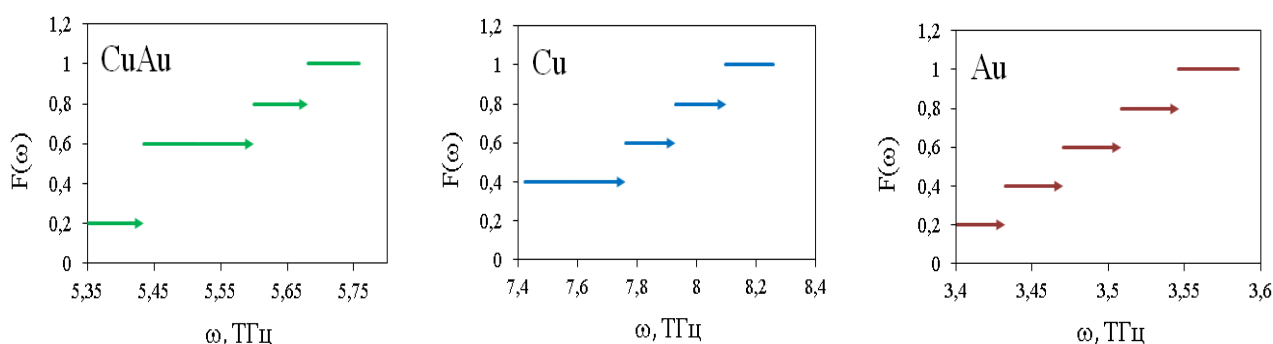


Рис. 5. Эмпирические функции распределения для CuAu, Cu, Au

Полученные статистические данные показывают процесс рассеяния энергии бризерами на всем интервале их времени существования. Разрушение квази-бризеров происходит в тот момент, когда среднеквадратическое отклонение превышает разность между средней частотой бризера и ближайшей границей фононного спектра кристалла. При этом данный процесс может быть не равномерным, что обуславливается в первую очередь свойствами кристаллов, а также методом возбуждения бризеров. Наиболее продолжительное время существования квази-бризера было в кристалле Au, при этом процесс рассеяния энергии происходил равномерно в течении всего периода его существования. В кристаллах Cu и CuAu основная доля энергии рассеивалась на начальных периодах существования бризера, что вероятно обусловлено начальными условиями возбуждения данных объектов.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе методом молекулярной динамики с применением статистического подхода рассмотрены квази-бризеры в биатомном ГЦТ кристалле CuAu и в моноатомных ГЦК кристаллах Cu и Au. Для всех кристаллов рассчитаны плотности фононных состояний. Для возбуждения квази-бризеров применялись два разных подхода, базирующихся на разных функциях смещения атомов из положения равновесия. Рассчитаны все основные статистические характеристики частот квази-бризеров: среднеквадратическое отклонение

частот атомов, средние частоты квази-бризера, полигоны относительных частот, математическое ожидание, дисперсия и эмпирические функции распределения. Установлено, что среднеквадратическое отклонение частот колебаний атомов квази-бризеров, то есть степень их квазибризерности, растет с течением времени (рис. 3), а средняя частота их колебаний падает, приближаясь к верхней границе фононного спектра (табл. 1). Квази-бризеры разрушаются, когда среднеквадратическое отклонение частот колебаний превышает разность между средней частотой бризера и ближайшей границей фононного спектра кристалла. Полученные статистические данные позволяют описать процесс деградации ДБ с течением времени. Важным является тот факт, что описанные подходы позволяют установить, что квази-бризеры, имеющие меньшее время существования, рассеивают энергию на начальных этапах периода наблюдения, что обуславливается как методом возбуждения бризеров, так и свойствами модельных кристаллов.

Исследование выполнено при финансовых поддержках:

- РФФИ и Алтайского края в рамках научного проекта № 18-42-220002 *р_а* (А.М. Ерёмин и П.В. Захаров);
- Министерства образования и науки базовой части государственного задания, проект № 3.4820.2017/БЧ (М.Д. Старостенков);
- РНФ, грант № 16-12-10175 (С.В. Дмитриев).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Flach S., Gorbach A. V. Discrete breathers: advances in theory and applications // *Physics Reports*, 2008, vol. 467, iss. 1-3, pp. 1-116.
2. Sato M., Sievers A. J. Direct observation of the discrete character of intrinsic localized modes in an antiferromagnet // *Nature*, 2004, vol. 432, pp. 486-488.
3. Fleischer J. W., Carmon T., Segev M., Efremidis N. K., Christodoulides D. N. Observation of discrete solitons in optically induced real time waveguide arrays // *Physical Review Letters*, 2003, vol. 90, iss. 2, pp. 023902-4.
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 // *Physical Review B*, 2009, vol. 79, pp. 134304.
5. Sato M., Hubbard B. E., Sievers A. J., Ilic B., Czaplewski D. A., Craighead H. G. Observation of locked intrinsic localized vibrational modes in a micromechanical oscillator array // *Physical Review Letters*, 2003, vol. 90, iss. 4, pp. 044102-4.
6. 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.
7. Захаров П. В., Старостенков М. Д., Ерёмин А. М., Корзникова Е. А., Дмитриев С. В. Возбуждение щелевых дискретных бризеров в кристалле состава A_3B потоком частиц // *Физика твердого тела*. 2017. Т. 59, № 2. С. 217-222. <http://dx.doi.org/10.21883/FTT.2017.02.44037.281>
8. 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. <https://doi.org/10.22226/2410-3535-2016-4-294-299>
9. 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, vol. 98, pp. 88-92.
10. Старостенков М. Д., Захаров П. В., Ерёмин А. М. Изучение посредством двумерной модели возможности существования нелинейных локализованных колебаний на границе биметалла Pt-Al // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2011. Т. 8, № 4. С. 40-44.
11. Medvedev N. N., Starostenkov M. D., Zakharov P. V., Dmitriev S. V. Exciting discrete breathers of two types in a computer 3D model of Pt_3Al crystal // *Technical Physics Letters*, 2015, vol. 41, no. 10, pp. 994-997.
12. Terentyev D. A., Dubinko A. V., Dubinko V. I., Dmitriev S. V., Zhurkin E. E., Sorokin M. V. Interaction of discrete breathers with primary lattice defects in BCC Fe // *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2015, vol. 23, no. 8, pp. 085007-13.
13. Hizhnyakov V., Klopov M., Shelkan A. Transverse intrinsic localized modes in monatomic chain and in graphene // *Physics Letters A*, 2016, vol. 380, no. 9-10, pp. 1075-1081.
14. Кистанов А. А., Семенов А. С., Мурзаев Р. Т., Дмитриев С. В. Неподвижные и движущиеся дискретные бризеры в ГПУ металле Co // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2014. Т. 11, № 3. С. 322-326.

15. Мурзаев Р. Т., Корзникова Е. А., Бокий Д. И., Фомин С. Ю., Дмитриев С. В. Свойства неподвижных дискретных бризеров в альфа-уране // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2015. Т. 12, № 3. С. 324-330.
16. Murzaev R. T., Babicheva R. I., Zhou K., Korznikova E. A., Fomin S. Yu., Dubinko V. I., Dmitriev S. V. Discrete breathers in alpha-uranium // *The European Physical Journal B*, 2016, vol. 89, no. 7, pp. 168-6.
17. Chechin G. M., Dzhelauhova G. S., and Mehonoshina E. A. Quasibreathers as a generalization of the concept of discrete breathers // *Physical Review E*, 2006, vol. 74, pp. 36608.
18. LAMMPS Molecular Dynamics Simulator. URL: <http://lammmps.sandia.gov/> (дата обращения 14.06.2018).
19. Zhou X. W., Johnson R. A., and Wadley H. N. G. Misfit-energy-increasing dislocations in vapor-deposited CoFe/NiFe multilayers // *Physical Review B*, 2004, vol. 69, iss. 14, pp. 144113.
20. Захаров П. В., Дмитриев С. В., Старостенков М. Д., Ерёмин А. М., Корзникова Е. А. Стационарные квазибризеры в монокристаллических металлах с ГЦК-структурой // *Журнал экспериментальной и теоретической физики*. 2017. Т. 152, № 5(11). С. 1073-1080.
21. Кистанов А. А., Мурзаев Р. Т., Дмитриев С. В., Дубинко В. И., Хижняков В. В. Движущиеся дискретные бризеры в монокристаллическом двумерном кристалле // *Письма в журнал экспериментальной и теоретической физики*. 2014. Т. 99, № 6. С. 403-408.

STATISTICAL APPROACH TO DISCRETE BREATHERS IN MONOATOMIC FCC AND BIATOMIC FCT CRYSTALS

¹Eremin A. M., ¹Zakharov P. V., ²Starostenkov M. D., ³Dmitriev S. V.

¹ Shukshin Altai State Humanities Pedagogical University, Biysk, Russia

² Polzunov Altai State Technical University, Barnaul, Russia

³ Institute for Metals Superplasticity Problems of the Russian Academy of Sciences, Ufa, Russia

SUMMARY. By the method of molecular dynamics the statistical characteristics of quasi-breathers with a hard type of nonlinearity are calculated and analyzed in monoatomic fcc metals Cu and Au, as well as in the biatomic fct crystal CuAu. The investigated models consisted of bulk crystals containing 10^5 to 10^5 particles interacting via a potential obtained by the embedded atom method (EAM - potential). The simulation was carried out using the molecular dynamics package LAMMPS Molecular Dynamics Simulator. The following statistical characteristics and dependencies were calculated for the quasi-breathers: a grouped statistical series of absolute and relative frequencies, a polygon of absolute and relative frequencies, a histogram of relative frequencies, an empirical distribution function, an estimate of the mathematical expectation and variance of the original sample. The densities of phonon states are calculated for all crystals. Two different approaches are used to excite quasi-breathers, based on different functions of displacements of atoms from the equilibrium position. The calculated statistical data show the process of energy dissipation by the breezers over the entire time interval of their existence. Statistics allow to understand the causes of the destruction of breathers and more fully describe the process of their dissipation of energy. The destruction of quasi-breathers occurs at a time when the root-mean-square deviation exceeds the difference between the average frequency of the breather and the nearest boundary of the phonon spectrum of the crystal. However, this process may not be uniform. This is due primarily to the properties of the crystals, as well as the method of exciting the breathers. The existence of a quasi-breather for the longest time was in Au crystal, and the process of energy dissipation occurred evenly throughout the entire period of its existence. In Cu and CuAu crystals, the main part of the energy was scattered at the initial periods of the breather existence, which is due to the initial excitation conditions of these objects.

KEYWORDS: crystal, quasi-breather, discrete breather, nonlinear dynamics, soliton, molecular dynamics.

REFERENCES

1. Flach S., Gorbach A. V. Discrete breathers: advances in theory and applications. *Physics Reports*, 2008, vol. 467, iss. 1-3, pp. 1-116. <http://dx.doi.org/10.1016/j.physrep.2008.05.002>
2. Sato M., Sievers A. J. Direct observation of the discrete character of intrinsic localized modes in an antiferromagnet. *Nature*, 2004, vol. 432, pp. 486-488. <https://doi.org/10.1038/nature03038>
3. Fleischer J. W., Carmon T., Segev M., Efremidis N. K., Christodoulides D. N. Observation of discrete solitons in optically induced real time waveguide arrays. *Physical Review Letters*, 2003, vol. 90, iss. 2, pp. 023902-4. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.90.023902>
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. *Physical Review B*, 2009, vol. 79, pp. 134304. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.79.134304>

5. Sato M., Hubbard B. E., Sievers A. J., Ilic B., Czaplewski D. A., Craighead H. G. Observation of locked intrinsic localized vibrational modes in a micromechanical oscillator array. *Physical Review Letters*, 2003, vol. 90, iss. 4, p. 044102-4. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.90.044102>
6. Dmitriev S. V., Korznikova E. A., Baimova Y. A., Velarde M. G. Discrete breathers in crystals. *Physics-Uspokhi*, 2016, vol. 59, no. 5, pp. 446-461. <https://doi.org/10.3367/UFNr.2016.02.037729>
7. 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, vol. 59, no. 2, pp. 223-228. <https://doi.org/10.1134/S1063783417020342>
8. Zakharov P. V., Starostenkov M. D., Dmitriev S. V., Eremin A. M., Cherednichenko A. I. Diskretnye brizery v kristalle CuAu [Discrete breathers in the crystal CuAu]. *Pis'ma o materialakh* [Letters on Materials], 2016, vol. 6, no. 4, pp. 294-299.
9. 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, vol. 98, pp. 88-92. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2014.10.061>
10. Starostenkov M. D., Zakharov P. V., Eremin A. M. Izuchenie posredstvom dvumernoy modeli vozmozhnosti sushchestvovaniya nelineynykh lokalizovannykh kolebaniy na granitse bimetalla Pt-Al [Study of the possibility of the existence of nonlinear localized oscillations at the boundary of the Pt-Al bimetal by means of a two-dimensional model]. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya* [Basic Problems of Material Science» (BPMS)], 2011, vol. 8, no. 4, pp. 40-44.
11. Medvedev N. N., Starostenkov M. D., Zakharov P. V., Dmitriev S. V. Exciting discrete breathers of two types in a computer 3D model of Pt_3Al crystal. *Technical Physics Letters*, 2015, vol. 41, no. 10, pp. 994-997. <https://doi.org/10.1134/S1063785015100259>
12. Terentyev D. A., Dubinko A. V., Dubinko V. I., Dmitriev S. V., Zhurkin E. E., Sorokin M. V. Interaction of discrete breathers with primary lattice defects in BCC Fe. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2015, vol. 23, no. 8, pp. 085007-13. <https://doi.org/10.1088/0965-0393/23/8/085007>
13. Hizhnyakov V., Klopov M., Shelkan A. Transverse intrinsic localized modes in monatomic chain and in grapheme. *Physics Letters A*, 2016, vol. 380, no. 9-10, pp. 1075-1081. <https://doi.org/10.1016/j.physleta.2016.01.011>
14. Kistanov A. A., Semenov A. S., Murzaev R. T., Dmitriev S. V. Nepodvizhnye i dvizhushchiesya diskretnye brizery v GPU metalle Co [Standing and moving discrete breathers in pure hcp metal Co]. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya* [Basic Problems of Material Science (BPMS)], 2014, vol. 11, no. 3, pp. 322-326.
15. Murzaev R. T., Korznikova E. A., Boki D. I., Fomin S. Yu., Dmitriev S. V. Svoystva nepodvizhnykh diskretnykh brizerov v α -f-urane [Properties of immobile discrete breathers in α -uranium]. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya* [Basic Problems of Material Science (BPMS)], 2015, vol. 12, no. 3, pp. 324-330.
16. Murzaev R. T., Babicheva R. I., Zhou K., Korznikova E. A., Fomin S. Yu., Dubinko V. I., Dmitriev S. V. Discrete breathers in α -uranium. *The European Physical Journal B*, 2016, vol. 89, no. 7, pp. 168-6. <https://doi.org/10.1140/epjb/e2016-70142-3>
17. Chechin G. M., Dzhelauhova G. S., and Mehonoshina E. A. Quasibreathers as a generalization of the concept of discrete breathers. *Physical Review E*, 2006, vol. 74, pp. 36608. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.74.036608>
18. LAMMPS Molecular Dynamics Simulator. URL: <http://lammps.sandia.gov/> (accessed June 14, 2018).
19. Zhou X. W., Johnson R. A., and Wadley H. N. G. Misfit-energy-increasing dislocations in vapor-deposited CoFe/NiFe multilayers. *Physical Review B*, 2004, vol. 69, iss. 14, pp. 144113. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.69.144113>
20. Zakharov P. V., Dmitriev S. V., Starostenkov M. D., Eremin A. M., Korznikova E. A. Stationary quasi-breathers in monatomic FCC metals. *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 2017, vol. 125, no. 5, pp. 913-919. <https://doi.org/10.1134/S1063776117100181>
21. Kistanov A. A., Murzaev R. T., Dmitriev S. V., Dubinko V. I., Khizhnyakov V. V. Moving discrete breathers in a monoatomic two-dimensional crystal. *Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters (JETP Letters)*, 2014, vol. 99, no. 6, pp. 353-357. <https://doi.org/10.1134/S0021364014060083>

Ерёмин Александр Михайлович, кандидат физико-математических наук, доцент, доцент кафедры математики, физики, информатики АГППУ им. В.М. Шукина, тел. (3854) 33-74-38, e-mail: eam77@yandex.ru

Захаров Павел Васильевич, кандидат физико-математических наук, доцент, доцент кафедры математики, физики, информатики АГППУ им. В.М. Шукина, тел. (3854) 33-74-38, e-mail: zakharovpvl@rambler.ru

Старostenkov Михаил Дмитриевич, доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой физики АлтГТУ им. И.И. Ползунова, тел. (3852) 29-08-52, e-mail: genphys@mail.ru

Дмитриев Сергей Владимирович, доктор физико-математических наук, профессор, заведующий лабораторией «Нелинейные явления и дефектные структуры в кристаллах» ИПСМ РАН, тел. (347) 223-64-07, e-mail: dmitriev.sergey.v@gmail.com