На правах рукописи

Семёнова Мария Николаевна

Свойства делокализованных нелинейных колебательных мод треугольной решетки Морзе и графена

Специальность

01.04.07 – Физика конденсированного состояния

Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Уфа 2021

Работа выполнена в Политехническом институте (филиале) Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Северо-Восточный федеральный университет им. М.К. Аммосова» и Федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова»

Научный руководитель:	**Корзникова Елена Александровна,** доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем сверхпластичности металлов Российской академии наук (ИПСМ РАН), г.Уфа
Официальные оппоненты:	**Косевич Юрий Арнольдович,** доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник лаборатории физики и механики полимеров, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Федеральный исследовательский центр химической физики имени Н.Н. Семенова Российской академии наук, г. Москва
	Шепелев Игорь Александрович, кандидат физико-математических наук, ассистент кафедры радиофизики и нелинейной динамики физического факультета, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Саратовский национальный исследовательский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского», г. Саратов
Ведущая организация:	Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Башкирский государственный университет», г. Уфа

Защита состоится «03» июня 2021 г. в 16:00 часов на заседании диссертационного совета Д 002.080.03 при Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте проблем сверхпластичности металлов Российской академии наук по адресу: 450001, г. Уфа, ул. Ст. Халтурина, 39.

Отзывы на автореферат в 2-х экземплярах, заверенные печатью, просим выслать по адресу: 450001, г. Уфа, ул. Ст. Халтурина 39, ученому секретарю диссертационного совета.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на официальном сайте ИПСМ РАН по адресу: http://www.imsp.ru/

Автореферат разослан «__» ______ 2021 г.

Ученый секретарь диссертационного совета Д 002.080.03, кандидат технических наук Саркеева А.А.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Краткий обзор предметной области и актуальность проблемы.

Одним из важных разделов физики кристаллов является изучение колебаний кристаллической решетки, поскольку они определяют такие важные свойства, как теплопроводность, теплоемкость, тепловое расширение и многие другие. Силы межатомных взаимодействий нелинейны, и их линеаризация возможна только для малых отклонений атомов от положений равновесия, менее 1 % от межатомного расстояния. С ростом температуры или интенсивности внешних воздействий на кристаллы, растут амплитуды колебаний атомов, что приводит к необходимости учета ангармоничности межатомных взаимодействий. Теория гармонических колебаний кристаллической решетки хорошо развита [1], но, с другой стороны, общих аналитических методов для нахождения точных решений нелинейных уравнений движения атомов не существует. Однако некоторые точные решения могут быть построены на основе анализа точечной симметрии решетки. Такой подход был разработан Чечиным с соавторами в [2] и применен для нахождения нелинейных колебательных мод отдельной молекулы SF_6 [3], нелинейной LC-цепочки [4], треугольной решетки [5] и графена [6]. Метод заключается в анализе симметрии исследуемой динамической системы и в нахождении колебательных мод, продиктованных симметрией, которые существуют для любых амплитуд колебаний и независимо от типа взаимодействия между элементами системы. Для кристаллов, имеющих трансляционную симметрию, такие моды оказываются делокализованными и периодическими по пространственным координатам. Описание динамики таких мод может быть сведено к системе N связанных обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка, где N – число компонентов рассматриваемой делокализованной нелинейной колебательной моды (ДНКМ). В работе [5], используя аппарат теории групп, строго доказано, что треугольная решетка поддерживает четыре однокомпонентных ($N = 1$) и 14 двухкомпонентных ($N = 2$) ДНКМ с колебаниями в плоскости решетки. В работе [6] установлено, что двумерная гексагональная решетка (это решетка графена) поддерживает четыре однокомпонентных ($N = 1$), двенадцать двухкомпонентных ($N = 2$) и только одну трехкомпонентную ($N = 3$) ДНКМ с атомными колебаниями в плоскости листа графена.

Недавно было продемонстрировано, что ДНКМ имеют тесную связь с пространственно-локализованными нелинейными колебательными модами, известными как дискретные бризеры [7]. В частности, было показано, что дискретные бризеры могут быть получены путем наложения локализующей функции на ДНКМ при условии, что ее частота лежит вне фононного спектра решетки. Дискретные бризеры могут также возникать спонтанно из ДНКМ, имеющих частоту вне фононного спектра, в результате развития модуляционной неустойчивости ДНКМ.

Наряду с экспериментальными методами изучения нелинейной динамики кристаллической решетки, широко используются эффективные методы компьютерного моделирования, такие как первопринципное моделирование и метод молекулярной динамики. Первый из этих методов моделирования более точен, поскольку он учитывает электронную структуру вещества, но для его реализации нужны значительные компьютерные ресурсы. В данной работе предпочтение отдано более экономичному методу молекулярной динамики, который позволил решить все поставленные задачи.

Из вышесказанного следует, что молекулярно-динамическое изучение свойств ДНКМ в двумерных кристаллах является очень ***важной и актуальной*** проблемой физики твердого тела.

В данном исследовании рассматриваются две двумерные кристаллические решетки, а именно, треугольная решетка с одним атомом в примитивной трансляционной ячейке, с векторами трансляции (0, a) и (a/2, $a3^{1/2}/2$), где a – межатомное расстояние, а также гексагональная решетка с теми же векторами трансляции, но с примитивной ячейкой, содержащей два атома с межатомным расстоянием равным $a/3^{1/2}$ (см. рис. 1). Для треугольной решетки используется парный межатомный потенциал Морзе, а для гексагональной решетки – межатомный потенциал sp^2 углерода, разработанный Савиным [19]. Это многочастичный потенциал, широко используемый для описания ковалентных химических соединений.

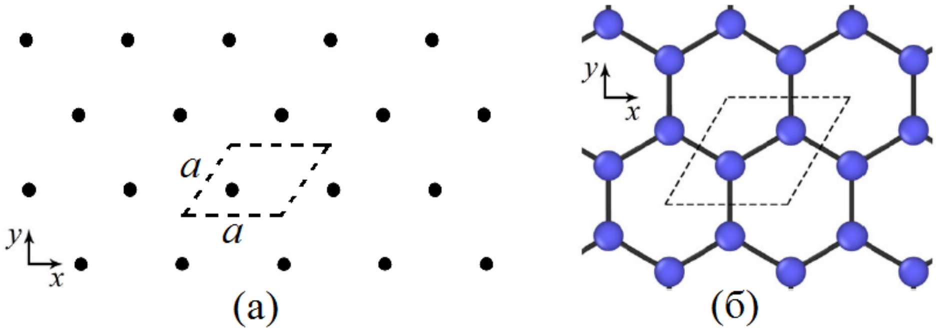


Рис. 1. Структура (а) двумерного плотноупакованного кристалла с треугольной решеткой и (б) гексагональная решетка графена с направлением зигзаг (кресло) вдоль оси x (y). Примитивные трансляционные ячейки в форме ромба со стороной a показаны пунктирными линиями.

Треугольная решетка интересна потому, что уже на протяжении десятилетий она используется в качестве модельного кристалла для изучения различных локализованных возбуждений. Отметим, что атомная плоскость (111) ГЦК кристалла, как и базисная плоскость ГПУ кристалла также представляет собой треугольную решетку и эти атомные плоскости могут поддерживать существование некоторых ДНКМ [20].

Потенциал Морзе был взят как классический парный потенциал, использовавшийся до нас в огромном числе работ по изучению нелинейной динамики кристаллической решетки. Графен выбран потому, что в силу уникального сочетания его физических и механических свойств (рекордно высокие прочность и жесткость, высокая тепло- и электропроводность, химическая стабильность и др.) [21], он имеет высокий потенциал применения в нанотехнологиях [22, 23].

Таким образом, ***целью*** данной диссертационной работы является анализ устойчивости нелинейных делокализованных колебательных мод в двумерных кристаллических решетках, а также изучение влияния этих мод на физические свойства решеток на основе молекулярно-динамических расчетов.

Для достижения указанной цели решались следующие задачи:

1. Формулировка молекулярно-динамических моделей двумерных кристаллов, включая треугольную решетку с потенциалом Морзе и графен, описываемый хорошо апробированными межатомными потенциалами для изучения свойств ДНКМ, поддерживаемых данными решетками.

2. Расчет плотностей фононных состояний исследуемых двумерных кристаллов.

3. Исследование динамики, устойчивости и свойств восьми однокомпонентных ДНКМ в двумерном кристалле с потенциалом взаимодействия Морзе.

4. Исследование динамики, устойчивости и свойств четырех однокомпонентных, двенадцати двухкомпонентных и единственной трехкомпонентной ДНКМ в кристалле графена, описываемого межатомными потенциалами Савина.

5. Изучение механизма генерации второй гармоники при возбуждении двухкомпонентных и трехкомпонентной ДНКМ в графене.

Научная новизна данной работы состоит в следующем:

1. Впервые методом молекулярной динамики показано, что для точных решений уравнений движения атомов в нелинейных двумерных решетках в виде ДНКМ существует интервал амплитуд, в пределах которого они устойчивы.

2. Впервые раскрыт механизм генерации второй гармоники при возбуждении в решетках двухкомпонентных и трехкомпонентных ДНКМ.

3. Впервые показано, что некоторые двухкомпонентные ДНКМ в графене могут приводить к возникновению аномального отрицательного давления при использовании периодических граничных условий с неизменной формой расчетной ячейки.

Практическая ценность работы заключается в расширении наших представлений о нелинейной динамике двумерных решеток. Исследованы свойства семейства точных решений в виде ДНКМ, остановлены границы их устойчивости и показана возможность генерации второй гармоники и отрицательного давления.

Метод исследования – это метод молекулярной динамики и расчет фононных спектров решеток на основе решения соответствующей спектральной задачи для линеаризованных уравнений движения атомов.

На защиту выносятся следующие положения:

1. В треугольной решетке Морзе и в решетке графена имеются симметричные и несимметричные однокомпонентные ДНКМ. В первом случае середина прямолинейных траекторий атомов совпадает с решеточными положениями, а в последнем – не совпадает.

2. В треугольной решетке Морзе только лишь одна однокомпонентная и одна двухкомпонентная ДНКМ имеют частоту выше фононного спектра решетки

для всех амплитуд колебаний. Такие моды порождают дискретные бризеры в результате их модуляционной неустойчивости, либо дискретные бризеры можно получить путем наложения на ДНКМ локализующей функции с должным образом выбранными параметрами.

3. Ни одна из исследованных ДНКМ в графене с потенциалом Савина не имеет частоту выше фононного спектра решетки для всех амплитуд колебаний. Следовательно, графен с потенциалом Савина, вероятнее всего, не поддерживает долгоживущих дискретных бризеров.

4. Как в треугольной решетке Морзе, так и в гексагональной решетке графена имеются ДНКМ как сохраняющие упругую изотропию решетки, так и разрушающие ее. В первом случае ДНКМ создают в решетке напряжения с равными нормальными компонентами, $\sigma_{xx} = \sigma_{yy}$, а во втором – $\sigma_{xx} \neq \sigma_{yy}$.

5. Как правило, ДНКМ создают в решетке отрицательные (сжимающие) напряжения при использовании периодических граничных условий с постоянной формой расчетной ячейки. Однако в графене имеются две изотропные двухкомпонентные ДНКМ, создающие аномальное отрицательное давление за счет наличия в структуре ДНКМ вращающихся углеродных гексагонов.

6. Показано, что для двухкомпонентных и трехкомпонентной ДНКМ в обеих исследованных решетках можно подобрать амплитуды компонент рассматриваемой моды так, что колебания становятся периодическими.

7. Все двухкомпонентные ДНКМ в треугольной решетке, а также все двухкомпонентные и единственная трехкомпонентная ДНКМ в графене приводят к генерации второй гармоники. Удвоенная частота некоторых мод может существенно (почти вдвое) превышать максимальную частоту фононного спектра решетки.

8. Для всех ДНКМ, как в треугольной решетке Морзе, так и в гексагональной решетке графена, существует критическое значение амплитуды, ниже которого моды устойчивы.

Апробация работы. При выполнении квалификационной работы были получены результаты, которые были представлены и обсуждены на V Открытой школе-конференции стран СНГ «Ультрамелкозернистые и наноструктурные материалы» (г. Уфа, 1–5 октября 2018 г.), VI Российско-Казахстанской молодежной научно-технической конференции «Новые материалы и технологии (г. Барнаул, 5–12 ноября 2018 г.), Международной научной конференции «Комплексный анализ, математическая физика и нелинейные уравнения» (оз. Банное, 18–22 марта 2019 г.), XXI Зимней школе по механике сплошных сред (г. Пермь, 2019 г.), V Межрегиональной школе-конференции студентов, аспирантов и молодых ученых-физиков (г. Уфа, 15–17 апреля 2019 г.), «12th Chaotic Modeling and Simulation International Conference» (г. Ханья, Греция, 18–22 июня 2019 г.), «The fourth International Symposium on Atomistic and Multiscale Modeling of Mechanics and Multiphysics» (г. Эрланген, Германия, 5–8 августа 2019 г.).

Публикации. Результаты исследований опубликованы в 13 печатных работах, из них 7 статей в журналах из списка ВАК, 5 работы в журналах, индексируемых в Web of Science и Scopus, одна из них в журнале квартиля Q2.

Личный вклад автора. Большинство численных результатов, вошедших в диссертацию, были получены лично автором. Автор принимал непосредственное участие в разработке компьютерных моделей, постановке задач моделирования, обсуждении полученных результатов, подготовке публикаций и докладов на научных конференциях.

Структура и объем работы. Диссертация включает введение, четыре главы, основные результаты и выводы, список литературы из 122 наименований. Работа занимает 108 страниц машинописного текста, содержит 3 таблицы, 37 рисунков.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснована актуальность исследования ДНКМ, сформулирована цель и описаны задачи исследования, утверждения, касающиеся научной новизны и практической значимости диссертационной работы, а также представлены основные положения, выносимые на защиту.

В первой главе описана изучаемая проблема, приведен обзор работ по нелинейной динамике кристаллической решетки, включающий исследования делокализованных и пространственно-локализованных нелинейных колебательных мод. Описаны методы исследования нелинейных колебаний кристаллов, включая экспериментальные методы и методы компьютерного моделирования. Несколько подробнее описан метод молекулярной динамики, который используется в данной работе. В конце главы отмечены открытые проблемы и сформулированы основные цели и задачи диссертационного исследования.

Во второй главе диссертации изучены свойства всех восьми однокомпонентных ДНКМ треугольной решетки. Молекулярно-динамические расчеты велись с использованием оригинальной программы, написанной на алгоритмическом языке С++. Использовалась расчетная ячейка, содержащая 12×12 трансляционных ячеек, то есть 144 атома. Тестовые расчеты с ячейкой 24×24 трансляционных ячеек дали практически идентичные результаты. Накладывались периодические граничные условия вдоль обоих координатных направлений.

Межатомные взаимодействия описывались потенциалом Морзе

$$U(r) = D(e^{-2\alpha(r-r_m)} - 2e^{-\alpha(r-r_m)}), \qquad (1)$$

где r – расстояние между парой атомов; D, α, r_m – параметры потенциала. Функция $U(r)$ имеет минимум при $r = r_m$, энергия разрыва связи равна D, а параметр α определяет жесткость межатомной связи. Без потери общности можно положить $r_m = 1$ и $D = 1$, выбрав соответствующие единицы измерения расстояния и энергии. Остается один существенный параметр потенциала, α, влияющий на относительную жесткость кристалла. Массу атомов можно положить единичной, выбрав соответствующим образом единицу измерения времени. Единственному свободному параметру потенциала присваивалось значение $\alpha = 5$, которое дает жесткость решетки типичную для реальных кристаллов. Радиус обрезки потенциала выбирался равным 5. При этом равновесное межатомное расстояние составило $a = 0{,}9881329$.

Использовался NVE ансамбль (неизменное число частиц, постоянный объем и энергия системы). Уравнения движения атомов интегрировались с помощью численной схемы Штормера, имеющей шестой порядок точности с шагом по времени $\tau = 0{,}001$ единиц времени.

На рис. 2 показаны начальные условия, используемые для инициирования восьми однокомпонентных ДНКМ треугольной решетки, где стрелками указаны начальные смещения атомов из своих положений равновесия. Длина всех векторов смещений одинакова и равна A_0. Начальные скорости всех атомов были нулевыми. Пунктиром выделены трансляционные ячейки мод. Только у мод 1 и 6 все атомы колеблются, во всех других модах есть неподвижные атомы. Отметим, что величина A_0 определяет амплитуду колебания ДНКМ, но не всегда амплитуда равна A_0, по причине, раскрытой на рис. 3 (а), где для всех восьми мод показаны перемещения движущихся атомов как функции времени для случая $A_0 = 0{,}1$. Видно, что колебания ДНКМ 1, 2, 4 и 5 симметричны, в том смысле, что максимальные положительные и отрицательные значения перемещений равны. Для других мод они не равны и поэтому амплитуда колебаний A, рассчитанная как максимальное перемещение минус минимальное пополам, отличается от A_0. На рис. 3 (б) показана зависимость A от A_0.

На рис. 4 (а) приведены амплитудно-частотные характеристики (АЧХ) всех ДНКМ. Начальное смещение атомов A_0, а не амплитуда колебаний выбрано в качестве абсциссы. Из рисунка видно, что снижение частоты с ростом амплитуды отмечается только у мод 1 и 6 при небольших амплитудах (мягкий тип нелинейности). У остальных мод тип нелинейности жесткий, то есть частота возрастает с амплитудой. Горизонтальная пунктирная линия на рис. 4 (а) дает верхнюю границу фононного спектра решетки. Только мода 5 имеет АЧХ целиком выше фононного спектра. Частоты остальных мод при малых амплитудах лежат в фононном спектре. Эта информация важна для предсказания возможных типов дискретных бризеров в треугольной решетке Морзе. Вероятнее всего, существование бризеров, полученных путем наложения локализующей функции на ДНКМ 5, хотя теоретически возможны бризеры, основанные на модах 2, 3 и 7, частоты которых выходят из спектра при больших амплитудах колебаний.

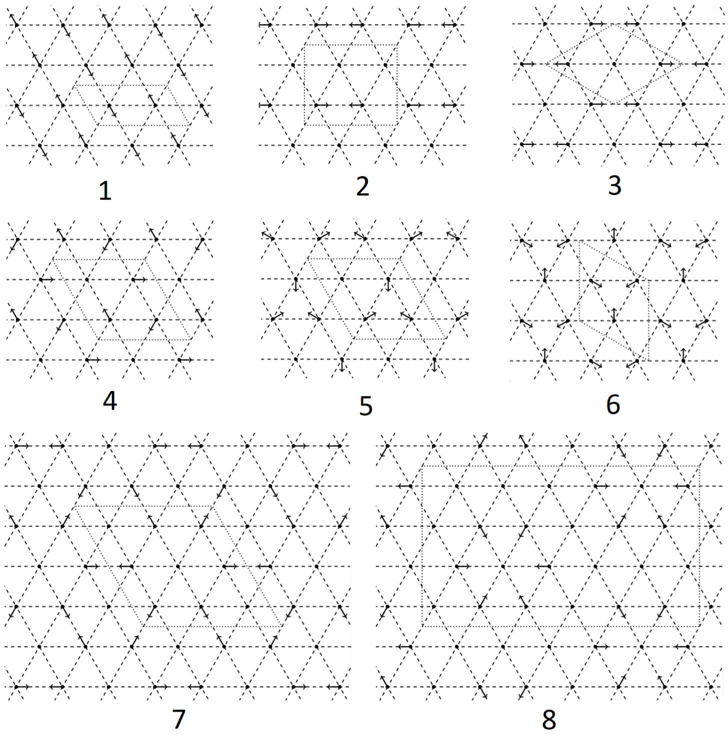
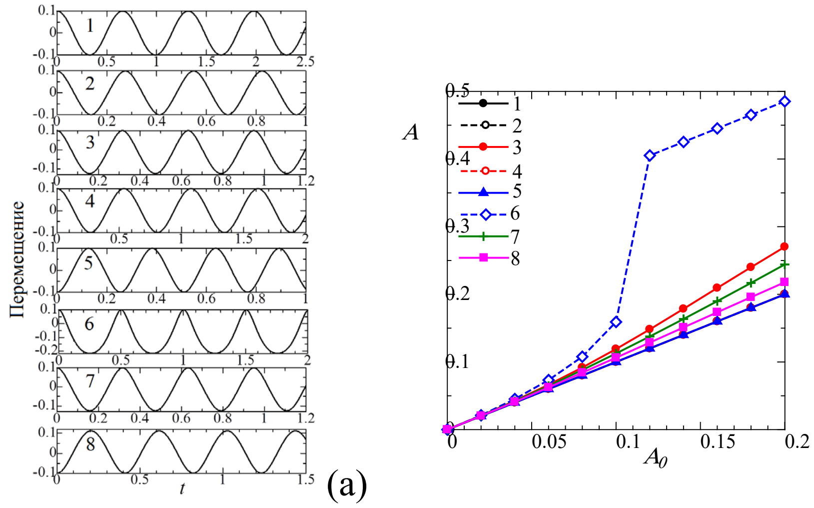


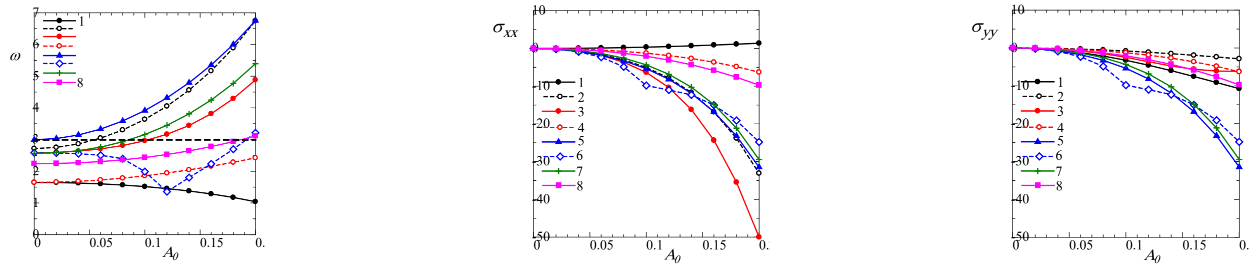
Рис. 2. Восемь однокомпонентных ДНКМ треугольной решетки [6]. Трансляционные ячейки мод показаны пунктиром. Стрелками показаны атомные смещения, использовавшиеся для задания начальных условий. Длина всех векторов смещений одинакова и равна A_0.

Напряжения σ_{xx} и σ_{yy}, как функции A_0 показаны на рис. 4 (б и в) соответственно. Отметим, что для всех ДНКМ сдвиговые напряжения равны нулю. Из данных, приведенных на рис. 4 (б и в), можно видеть, что ДНКМ 1, 2 и 3 нарушают упругую изотропию треугольной решетки, поскольку для них σ_{xx} не равно σ_{yy}. Остальные ДНКМ сохраняют изотропию, поскольку для них $\sigma_{xx} = \sigma_{yy}$. Все моды создают отрицательные (сжимающие) напряжения, кроме σ_{xx} для ДНКМ 1. Однако σ_{yy} для ДНКМ 1 отрицательно и имеет большее абсолютное значение, чем σ_{xx}, это означает, что все моды создают положительное давление p в кристалле, так как $p = -(\sigma_{xx} + \sigma_{yy})/2$.



(а) (б)

Рис. 3. (а) Перемещения движущихся атомов в зависимости от времени для ДНКМ 1-8. Во всех случаях здесь бралось начальное смещение $A_0 = 0{,}1$. Частоты мод различаются, поэтому масштаб по оси времени для разных мод разный. Для мод с несимметричными колебаниями атомов (ДНКМ 3, 6, 7 и 8) различается также и масштаб по оси ординат. (б) Зависимость амплитуды ДНКМ A от начального смещения атомов A_0 для всех восьми ДНКМ. Видно, что $A = A_0$ для симметричных ДНКМ 1, 2, 4 и 5 и $A > A_0$ для несимметричных ДНКМ 3, 6, 7 и 8.



(а) (б) (в)

Рис. 4. (а) Зависимость частоты колебаний ДНКМ от A_0 для восьми изученных мод. Верхняя граница фононного спектра кристалла показана горизонтальной пунктирной линией. (б, в) Зависимость напряжений σ_{xx} и σ_{yy} соответственно, возникающих в кристалле в результате запуска ДНКМ от начального смещения атомов A_0 для всех восьми ДНКМ.

Была изучена устойчивость однокомпонентных ДНКМ и показано, что для всех восьми мод существует пороговое значение A_0, ниже которого они устойчивы.

Итак, в главе методом молекулярной динамики проанализированы однокомпонентные ДНКМ двумерной треугольной решетки с морзевским взаимодействием. Для всех восьми мод посчитаны зависимости амплитуды, частоты, энергии и внутренних напряжений как функции начальных смещений атомов. Показано, что только мода 5 имеет АЧХ выше фононного спектра и, значит, она наиболее перспективна для построения дискретного бризера путем наложения локализующей функции. При больших амплитудах частоты мод 2, 3 и 7 также оказываются выше фононного спектра и, теоретически, они также могут породить бризеры достаточно большой амплитуды. Только моды 1 и 6 имеют мягкий тип нелинейности (для моды 6 это справедливо для достаточно малых амплитуд колебаний). ДНКМ 1, 2 и 3 нарушают упругую изотропию треугольной решетки, а остальные сохраняют ее. Все ДНКМ создают положительное давление в решетке. Для всех восьми мод существует пороговое значение начального смещения атомов A_0, ниже которого они устойчивы.

В третьей главе рассматриваются одно- двух- и трехкомпонентные ДНКМ в решетке графена. Структура графена показана на рис. 1 (б). Расчетная ячейка содержала 12×12 примитивных ячеек (288 атомов углерода). Дальнейшее увеличение расчетной ячейки не приводило к изменению результатов. Периодические граничные условия накладывались вдоль направлений x и y. Использовался NVE ансамбль. Уравнения движения атомов интегрировались методом Штормера шестого порядка с шагом интегрирования 0,1 фс.

Сначала представим результаты анализа устойчивости четырех однокомпонентных ДНКМ, которые представлены на рис. 5 и пронумерованы римскими цифрами I, II, III и IV. В отличие от треугольной решетки, рассмотренной во второй главе, атомы углерода в решетке графена имеют три степени свободы, включая компоненту перемещения перпендикулярно плоскости листа. Поэтому интересно проанализировать, какие из степеней свободы ответственны за развитие неустойчивости ДНКМ в графене. После начальных смещений атомов в соответствии с выбранной модой, вводились случайные отклонения атомов на малую величину, 10^{-13} Å. На рис. 6 (а–г) для четырех ДНКМ показано, как с течением времени происходит отклонение атомных колебаний от начальных прямолинейных траекторий. Показаны максимальные по всем атомам расстояния от начальных атомных траекторий в плоскости xy, $|\Delta xy|$ (черные линии) и в направлении z $|\Delta z|$ (красные линии). Начальные смещения атомов: A = 0,06 Å для мод I, II и III и A = 0,04 Å для моды IV. Можно видеть, что для мод I, III и IV удаление от плоскости практически не происходит, в то время как отклонения в плоскости от начальных траекторий растут экспоненциально во времени (обратим внимание на использование логарифмической шкалы для ординаты) до значения порядка 0,01 Å. Заметим, что для ДНКМ II (см. рис. 6 (б)) ситуация прямо противоположная, здесь отклонения в плоскости остаются небольшими, но отклонения от плоскости растут во времени экспоненциально. Однако, когда $|\Delta z|$ достигает значения порядка 10^{-5} Å, отклонения в плоскости также начинают расти экспоненциально и даже быстрее, чем $|\Delta z|$.

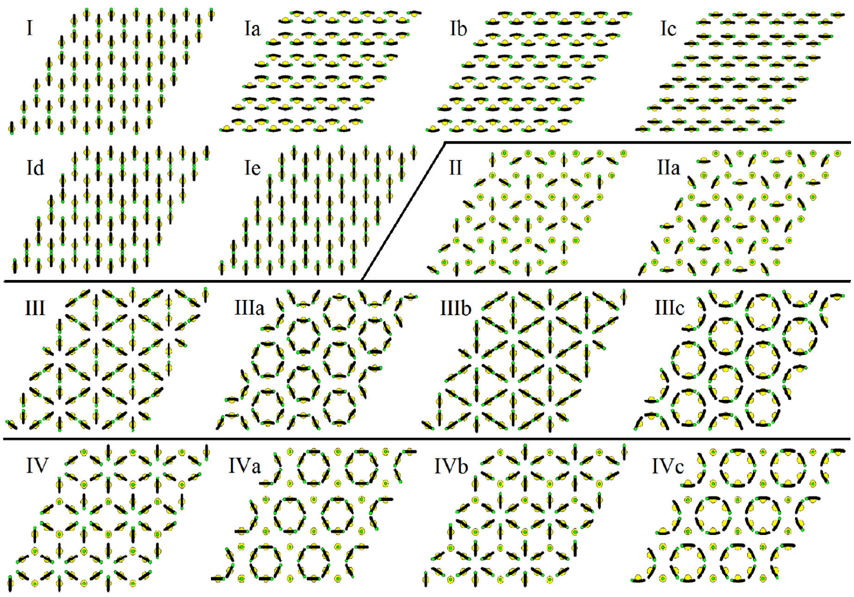


Рис. 5. Однокомпонентные и двухкомпонентные ДНКМ, поддерживаемые гексагональной решеткой графена [6]. Желтые кружки показывают точки невозмущенной гексагональной решетки. Траектории атомов показаны черными линиями. Маленькие зеленые точки показывают атомные позиции в то время, когда они находятся на максимальном расстоянии от точек решетки. ДНКМ I, II, III и IV являются однокомпонентными, а все другие – двухкомпонентными. Колебательные моды I*a*–I*e* включают моду I. Аналогично, мода II*a* включает моду II, моды III*a*–III*c* включают моду III, а моды IV*a*–IV*c* включают моду IV.

Экспоненциальный во времени рост отклонений перемещений от начальных траекторий характеризуется критическими экспонентами a_{xy} и a_z, которые находятся из наклонов прямых пунктирных линий на рис. 6 (а–г). Критические экспоненты были рассчитаны нами как функции начальных отклонений атомов A и представлены на рис. 6 (а'–г'). Экстраполяция этих кривых позволила установить при каком значении A критические экспоненты обращаются в ноль, то есть ДНКМ становятся устойчивыми при меньших значениях начальных амплитуд. Как видно из графиков, критические значения начальных амплитуд имеют порядок величины 0,01 Å.

Особое поведение ДНКМ II было объяснено тем, что для нее лишь половина атомов движется, а другая половина неподвижна. Эти неподвижные атомы производят стабилизирующий эффект для колебаний в плоскости, но не для колебаний из плоскости листа.

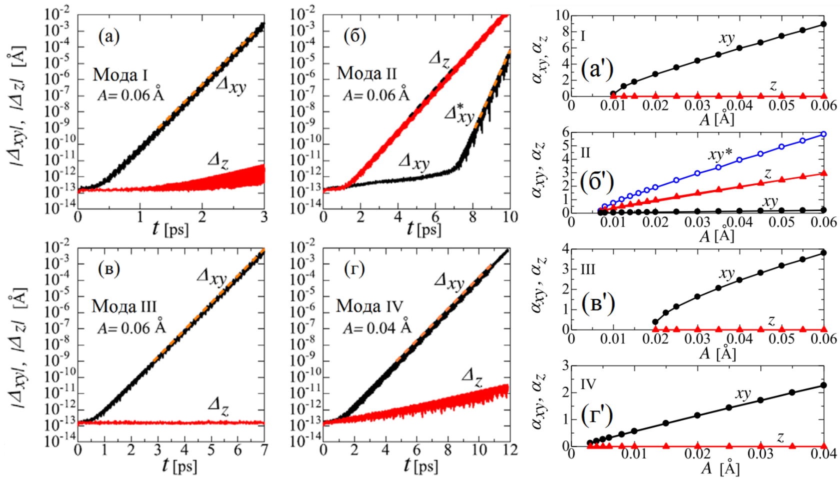


Рис. 6. (а–г) Развитие неустойчивости однокомпонентных ДНКМ: показаны максимальные по всем атомам расстояния от начальных атомных траекторий в плоскости *xy*, $|\Delta xy|$ (черные линии) и в направлении *z* $|\Delta z|$ (красные линии). Отметим логарифмический масштаб для ординат. Прямые пунктирные линии позволяют определить критические экспоненты α_{xy} и α_z, характеризующие скорость развития неустойчивости в плоскости и из плоскости соответственно. (*а'–г'*) критические экспоненты как функции начальных отклонений атомов.

Далее анализировались свойства двухкомпонентных ДНКМ, которые представлены на рис. 5 и пронумерованы римскими цифрами с добавлением латинских букв. Такая нумерация оправдана тем, что двухкомпонентные ДНКМ I*a*–I*e* включают однокомпонентную моду I. Аналогично, мода II*a* включает моду II, моды III*a*–III*c* включают моду III, а моды IV*a*–IV*c* включают моду IV.

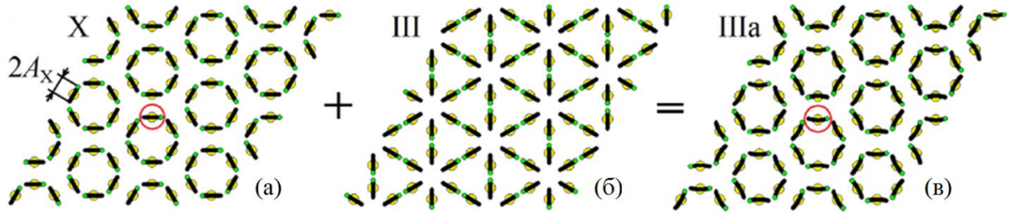


Рис. 7. (а) Гипотетическая колебательная мода X амплитуды A_X. Смещения атома, отмеченного окружностью, показаны на рис. 8 (а), как функции времени. (б) Однокомпонентная ДНКМ III. (в) Двухкомпонентная ДНКМ III*a*, полученная суперпозицией мод X и ДНКМ III с амплитудами A_X = 0,3 Å и A_{III} = 0,065 Å. Смещения атома, отмеченного окружностью, показаны на рис. 8 (б), как функции времени.

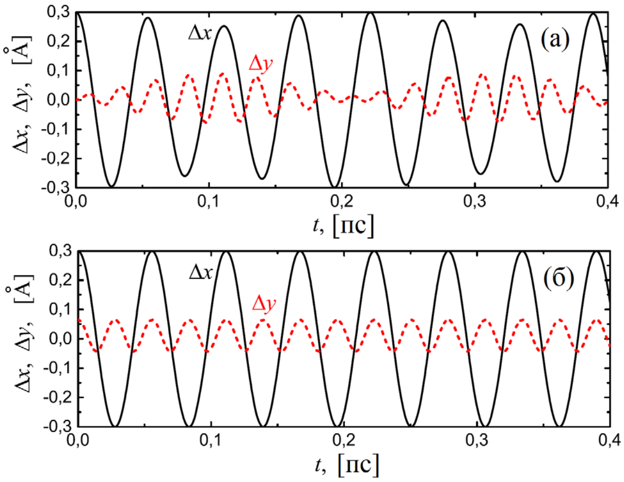


Рис. 8. (а) Смещения атома, обведенного на рис. 7 (а), как функции времени для гипотетической моды X, возбужденной с начальной амплитудой A_X = 0,3 Å. (*б*) Смещения атома, обведенного на рис. 7 (в), как функции времени для ДНКМ III*a*, возбужденной с амплитудами A_X = 0,3 Å и A_{III} = 0,065 Å.

Покажем, как связаны однокомпонентные и двухкомпонентные ДНКМ на примере однокомпонентной моды III и двухкомпонентной моды III*a* (расположены в третьем ряду на рис. 5). Для этого сначала возбудим в графене колебательную моду в соответствии с шаблоном начальных смещений, показанным на рис. 7 (а), и назовем ее модой X. Здесь каждый атом смещается на вектор, имеющий длину A_X = 0,3 Å, которая является амплитудой моды. Для атома, обведенного на рис. 7 (а), вычислим компоненты вектора его смещения как функции времени, $\Delta x(t)$ и $\Delta y(t)$, и построим их на рис. 8 (а). Можно видеть, что в дополнение к основной компоненте колебаний $\Delta x(t)$ появляется небольшая компонента $\Delta y(t)$ и что колебания не являются периодическими. Из теоретического рассмотрения [6] следует, что возбуждение моды X неизбежно возбуждает дополнительно ДНКМ III. Возбудив суперпозицию мод X и ДНКМ III с амплитудами A_X = 0,3 Å и A_{III} = 0,065 Å, получим периодическую во времени двухкомпонентную ДНКМ III*a* (см. рис. 8 (б)). Величина A_{III} была подобрана для выбранного значения A_X так, чтобы получить периодические во времени колебания. Зависимость A_{III} от $A = A_X$ для ДНКМ III*a* представлена на рис. 9 (а). Видно, что $A_{III} \sim A^2$.

Таким образом, для возбуждения двухкомпонентных мод необходимо суммировать начальные смещения атомов двух мод. А именно, шаблоны I*a*–I*e* суммируются с шаблоном I с целью возбуждения мод I*a*–I*e*. Аналогично, шаблон II*a* суммируется с шаблоном II; шаблоны III*a*–III*c* суммируются с шаблоном III; и шаблоны IV*a*–IV*c* суммируются с шаблоном IV. Амплитуды двух суммируемых мод следует выбирать так, чтобы происходило периодическое движение, как показано на рис. 8 (б) для мод III и III*a*.

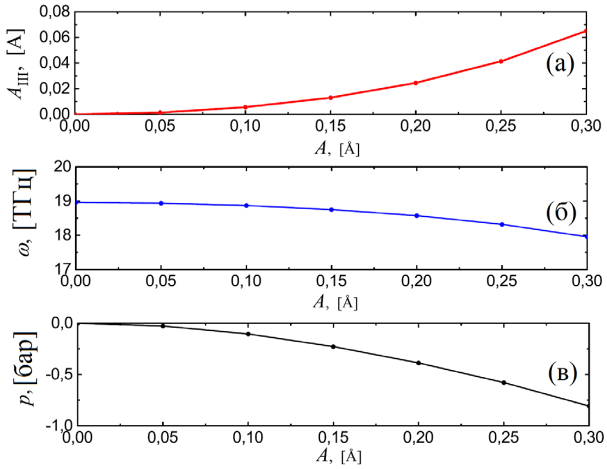


Рис. 9. Характеристики ДНКМ III*a* как функции амплитуды основной моды: (а) амплитуда дополнительной ДНКМ III, (б) частота, (в) давление.

Частота основной моды ω вычисляется из рис. 8 (б) для основного колебания $\Delta x(t)$. Для ДНКМ III*a* частота показана как функция A на рис. 9 (б). Давление p, как функция A показано на рис. 9 (в).

Из рис. 6 (в) видно, что ДНКМ III*a* создает отрицательное давление, и аналогичный результат был получен для ДНКМ IV*a*, в то время как все остальные ДНКМ создают положительное давление. ДНКМ III*a* и IV*a* создают отрицательное давление из-за особой картины смещения атомов, в обоих этих случаях можно видеть вращение шестиугольников углерода (см. рис. 5). Вращающиеся шестиугольники в модах III*a* и IV*a* создают натяжение валентных связей между шестиугольниками, что приводит к отрицательному давлению.

Четвертая глава посвящена изучению механизма генерации второй гармоники при запуске в листе графена любой из двухкомпонентных или трехкомпонентной ДНКМ.

Возвращаясь к рис. 8 (б), отметим, что $\Delta x(t)$ колеблется с частотой ω = 18 ТГц, в то время как $\Delta y(t)$ колеблется с частотой 2ω = 36 ТГц. В этом проявляется эффект генерации второй гармоники. Как говорилось выше, любая двухкомпонентная ДНКМ включает в себя однокомпонентную ДНКМ с правильно выбранной амплитудой для достижения периодического движения. В графене дополнительная однокомпонентная ДНКМ всегда имеет частоту в два раза большую, чем частота основной колебательной моды. Таким образом, любая двухкомпонентная ДНКМ генерирует вторую гармонику. В некоторых случаях вторая гармоника может иметь частоты значительно выше максимальной частоты фононов. Например, ДНКМ I*a* с основной амплитудой 0,15 Å и основной частотой ω = 46,3 ТГц имеет амплитуду ДНКМ I $A_{\mathrm{I}} = -0{,}0164$ Å и частоту ω = 92,6 ТГц, что почти в два раза больше максимальной частоты фононов, составляющей около 48 ТГц. Таким образом, ДНКМ являются естественными колебательными модами решетки графена и существование естественных колебаний на частотах, значительно превышающих максимальную фононную частоту, является, на наш взгляд, интересным фактом. Генерация второй гармоники является нелинейным эффектом, поскольку амплитуда второй гармоники быстро (квадратично) уменьшается с уменьшением амплитуды основной моды (см. рис. 9 (а)).

Также была изучена трехкомпонентная ДНКМ, которая получается суммированием трех мод, представленных на рис. 10 (а–в). На рис. 10 (г, д) показаны колебания основной и двух дополнительных компонент соответственно, как функции перемещений от времени. Амплитуда основной компоненты равна 0,1 Å, а амплитуды дополнительных компонент выбраны так, чтобы движение было периодическим. Отметим генерацию второй гармоники, выражающуюся в том, что дополнительные компоненты колеблются на частоте вдвое выше, чем основная компонента. На рис. 10 (е–з) как функции амплитуды основной компоненты даны частота основной компоненты, энергия на атом и компоненты напряжений. Видно, что частота уменьшается с амплитудой, то есть трехкомпонентная ДНКМ имеет мягкий тип нелинейности. Энергия ДНКМ квадратично растет с амплитудой. Обе компоненты напряжений отрицательны, поэтому давление в системе положительное. Различие между двумя компонентами напряжений указывает на то, что возбуждение трехкомпонентной ДНКМ разрушает упругую изотропию графена.

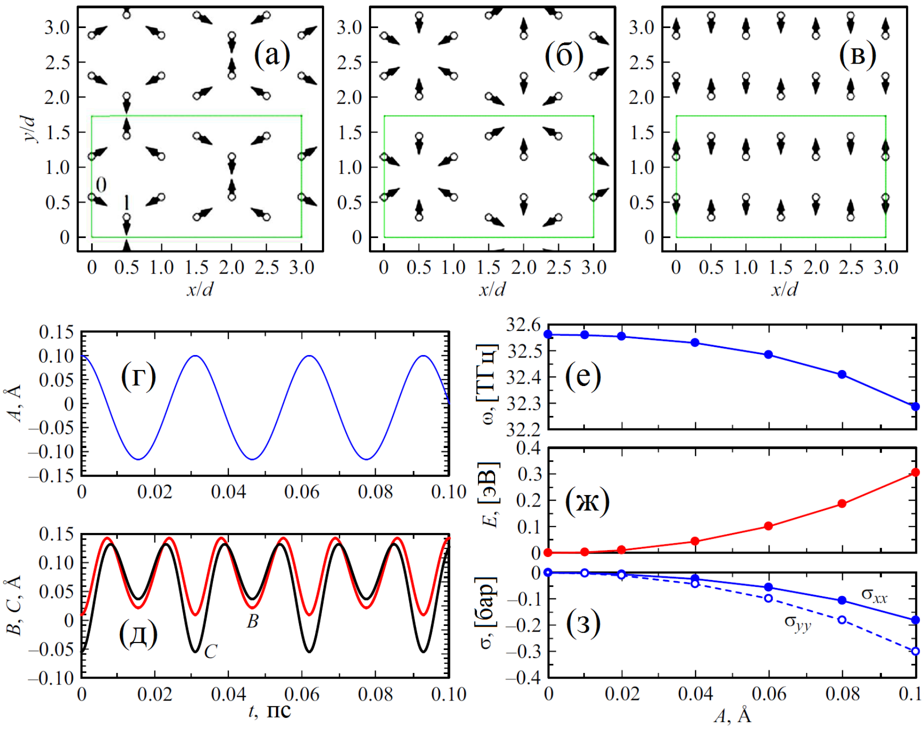


Рис. 10. (а–в) Три составляющие трехкомпонентной ДНКМ. Координаты x и y нормированы на величину $d = a/3^{1/2}$. (г) Колебания основной компоненты с амплитудой 0,1 Å. (д) Колебания двух дополнительных компонент. (е–з) Частота основной компоненты, энергия на атом и компоненты напряжений соответственно, как функции амплитуды основной компоненты.

Таким образом, показано, что все двухкомпонентные и трехкомпонентная ДНКМ генерируют в графене вторую гармонику, и для некоторых ДНКМ частота второй гармоники может лежать значительно выше максимальной частоты фононного спектра. Две из двухкомпонентных ДНКМ создают в листе графена отрицательное давление, что связано с наличием вращающихся шестиугольников углерода в картине атомных колебаний.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

– Методом молекулярной динамики для двумерной треугольной решетки с потенциалами Морзе и для графена исследована устойчивость ДНКМ, а также рассчитаны характеристики ДНКМ, такие как частота, энергия и механические напряжения в зависимости от амплитуды.

– Показано, что все исследованные ДНКМ устойчивы при достаточно малых значениях амплитуд и становятся неустойчивы при превышении некоторого порогового значения амплитуд, индивидуального для каждой ДНКМ.

– Среди восьми однокомпонентных ДНКМ в треугольной решетке Морзе имеется одна, частота которой целиком лежит выше фононного спектра и еще три, частоты которых выходят выше спектра при достаточно больших амплитудах. Данные ДНКМ являются перспективными для получения на их основе дискретных бризеров путем наложения локализующих функций.

– Все двухкомпонентные и трехкомпонентная ДНКМ генерируют в графене вторую гармонику, и для некоторых ДНКМ частота второй гармоники может лежать значительно выше максимальной частоты фононного спектра. Генерация второй гармоники является нелинейным эффектом, поскольку амплитуда второй гармоники квадратично уменьшается с уменьшением амплитуды основной моды.

– Две из двухкомпонентных ДНКМ создают в листе графена отрицательное давление, что связано с наличием вращающихся шестиугольников углерода в картине атомных колебаний.

Литература

1. Борн, М. Динамическая теория кристаллических решеток / М. Борн, Х. Кунь. – М. : Издательство иностранной литературы, 1958. – 488 с.

2. Chechin, G. M. Interactions between normal modes in nonlinear dynamical systems with discrete symmetry. Exact results / G. M. Chechin, V. P. Sakhnenko // Physica D. – 1998. – Vol. 117. – P. 43-76.

3. Chechin, G. M. Nonlinear normal mode interactions in the SF_6 molecule studied with the aid of density functional theory / G. M. Chechin, D. S. Ryabov, S. A. Shcherbinin // Physical Review E. – 2015. – Vol. 92, N 1. – P. 21-35.

4. Chechin, G. M. Delocalized periodic vibrations in nonlinear LC and LCR electrical chains / G. M. Chechin, S. A. Shcherbinin // Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation. – 2015. – Vol. 22. – P. 244-262.

5. Abdullina, D. U. Stability of in-plane delocalized vibrational modes in triangular Morse lattice / D. U. Abdullina, M. N. Semenova, A. S. Semenov, D. S. Ryabov, G. M. Chechin, E. A. Korznikova, J. A. Baimova, S. V. Dmitriev // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. – 2018. – Vol. 447, N. 012060.

6. Chechin, G. M. Nonlinear vibrational modes in graphene: group-theoretical results / G. M. Chechin, D. S. Ryabov, S. A. Shcherbinin // Letters on Materials. – 2016. – Vol. 6, N 1. – P. 9-15.

7. Dolgov, A. S. The localization of vibrations in a nonlinear crystalline structure / A. S. Dolgov // Soviet Physics of Solid State. – 1986. – Vol. 28. – P. 907-909.

8. Sievers, A. J. Intrinsic localized modes in anharmonic crystals / A. J. Sievers, S. Takeno // Physical Review Letters. – 1988. – Vol. 61. – P. 970.

9. Flach, S. Discrete breathers. Advances in theory and applications / S. Flach, A. V. Gorbach // Physics Reports. – 2008. – Vol. 467. – P. 116.

10. Medvedev, N. N. Energy localization on the Al sublattice of Pt_3Al with L12 order / N. N. Medvedev, M. D. Starostenkov, M. E. Manley // Journal of Applied Physics. – 2013. – Vol. 114. – P. 120.

11. Дмитриев, С. В. Дискретные бризеры в кристаллах / С. В. Дмитриев, Е. А. Корзникова, Ю. А. Баимова, М. Г. Веларде // Успехи физических наук. – 2016. – Т. 186, № 5. – С. 471–488.

12. Кистанов, А. А.Почему существуют дискретные бризеры в двумерных и трехмерных моноатомных кристаллах Морзе? / А. А. Кистанов, Е. А. Корзникова, К. С. Сергеев, Д. А. Шепелев, А. Р. Давлетшин, Д. И. Бокий, С. В. Дмитриев // Письма о материалах. – 2016. – Т. 6, № 3. – С. 221–226.

13. Korznikova, E. A. Highly symmetric discrete breather in a two-dimensional Morse crystal / E. A. Korznikova, S. Fomin, E. Soboleva, S. V. Dmitriev // JETP Letters. – 2016. – Vol. 103. – P. 277-281.

14. Barani, E. Transverse discrete breathers in unstrained grapheme / E. Barani, I. P. Lobzenko, E. A. Korznikova, E. Soboleva, S. V. Dmitriev, K. Zhou, A. Marjaneh // European Physical Journal B. – 2017. – Vol. 90. – P. 38.

15. Burlakov, V. M. Localized excitations of uniform anharmonic lattices / V. M. Burlakov, S. A. Kiselev, V. I. Rupasov // JETP Letters. – 1990. – Vol. 51. – P. 544.

16. Cretegny, T. Localization and equipartition of energy in the β-FPU chain: Chaotic breathers / T. Cretegny, T. Dauxois, S. Ruffo, A. Torcini // Physica D. – 1998. – Vol. 121. – P. 109-126.

17. Khadeeva, L. Z. Discrete breathers in crystals with NaCl / L. Z. Khadeeva, S. V. Dmitriev // Physical Review B. – 2010. – Vol. 81. – P. 214306.

18. Dmitriev, S. V. Auxeticity from nonlinear vibrational modes / S. V. Dmitriev, E. A. Korznikova, D. I. Bokij, K. Zhou // Physica Status Solidi (B): Basic Research. – 2016. – Vol. 253. – P. 1310-1317.

19. Savin, A. V. Suppression of thermal conductivity in graphene nanoribbons with rough edges / A. V. Savin, Y. S. Kivshar, B. Hu // Physical Review B. – 2010. – Vol. 82. – P. 195422.

20. Bachurina, O. V. Plane and plane-radial discrete breathers in fcc metals / O. V. Bachurina // Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering. – 2019. – Vol. 27, N. 055001.

21. Geim, A. K. The Rise of Graphene / A. K. Geim, K. S. Novoselov // Nature Materials. – 2007. – Vol. 6. – P. 183-191.

22. Akinwande, D. A review on mechanics and mechanical properties of 2D materials – Graphene and beyond / D. Akinwande // Extreme Mechanics Letters. – 2017. – Vol. 13. – P. 42-77.

23. Bao, Q. Graphene photonics, plasmonics, and broadband optoelectronic devices / Q. Bao, K. P. Loh // ACS Nano. – 2012. – Vol. 6. – P. 3677–3694.

Список публикаций автора по теме диссертации

Публикации в изданиях, рекомендованных ВАК РФ и из баз данных Scopus и Web of Science:

1. Семёнова, М. Н. Некоторые характеристики одномерных делокализованных нелинейных колебательных мод треугольной решетки с морзевским взаимодействием / М. Н. Семёнова, А. С. Семёнов, Ю. В. Бебихов, Д. С. Рябов, Г. М. Чечин, Ж. Г. Рахматуллина, Е. А. Корзникова, С. В. Дмитриев // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2018. – Т. 15, № 2. – С. 257–264. DOI: 10.25712/ASTU.1811-1416.2018.02.014.

2. Semenova, M. N. Two-dimensional discrete breathers in hcp titanium / O. V. Bachurina, R. T. Murzaev, M. N. Semenova, A. S. Semenov, D. S. Ryabov, G. M. Chechin, E. A. Korznikova, S. V. Dmitriev // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. – 2018. – Vol. 447, N. 012033. DOI: 10.1088/1757-899X/447/1/012033.

3. Semenova, M. N. Stability of in-plane delocalized vibrational modes in triangular Morse lattice / D. U. Abdullina, M. N. Semenova, A. S. Semenov, D. S. Ryabov, G. M. Chechin, E. A. Korznikova, J. A. Baimova, S. V. Dmitriev // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. – 2018. – Vol. 447, N. 012060. DOI: 10.1088/1757-899X/447/1/012060.

4. Семёнова, М. Н. Динамика трехкомпонентной делокализованной нелинейной колебательной моды в графене / С. А. Щербинин, М. Н. Семёнова, А. С. Семёнов, Е. А. Корзникова, Г. М. Чечин, С. В. Дмитриев // Физика твердого тела. – 2019. – Т. 61, № 11. – С. 2163–2168. DOI: 10.21883/FTT.2019.11.48423.444.

5. Semenova, M. N. Stability of delocalized nonlinear vibrational modes in graphene lattice / D. U. Abdullina, M. N. Semenova, A. S. Semenov, E. A. Korznikova, S. V. Dmitriev // The European Physical Journal B. – 2019. – Vol. 92, N 11. – P. 249. DOI: 10.1140/epjb/e2019-100436-y.

6. Семёнова, М. Н. Некоторые физические свойства делокализованных нелинейных колебательных мод в графене / М. Н. Семёнова, А. С. Семёнов, С. В. Дмитриев // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2019. – Т. 16, № 4. – С. 501–510. DOI: 10.25712/ASTU.1811-1416.2019.04.011.

Публикации в сборниках трудов конференций:

7. Семёнова, М. Н. Некоторые характеристики одномерных делокализованных нелинейных колебательных мод треугольной решетки с морзевским взаимодействием / М. Н. Семёнова, А. С. Семёнов, Д. С. Рябов, Г. М. Чечин, Е. А. Корзникова, С. В. Дмитриев // Ультрамелкозернистые и наноструктурные материалы: сборник тезисов докладов Открытой школы-конференции стран СНГ (1-5 октября 2018 г.). – Уфа, 2018. – С. 220.

8. Семёнова, М. Н. Генерация второй гармоники в двухкомпонентных делокализованных нелинейных колебательных модах треугольной решетки / М. Н. Семёнова, А. С. Семёнов, Д. С. Рябов, Г. М. Чечин, С. В. Дмитриев // Ультрамелкозернистые и наноструктурные материалы: сборник тезисов докладов Открытой школы-конференции стран СНГ (1-5 октября 2018 г.). – Уфа, 2018. – С. 221.

9. Семёнова, М. Н. Устойчивость делокализованной нелинейной моды в решетке графена в присутствии нормальных возмущений / М. Н. Семёнова, Д. У. Абдуллина, А. С. Семёнов, Е. А. Корзникова, С. В. Дмитриев // Новые материалы и технологии: сборник научных статей VI Российско-Казахстанской молодежной научно-технической конференции (13 декабря 2018 г.). – Барнаул, 2018. – С. 141–148.

10. Семёнова, М. Н. Возбуждение кинков в цепочке Клейна-Гордона при ударе в конец цепочки молекулой / М. Н. Семёнова, Е. А. Шарапов, Е. А. Корзникова, С. В. Дмитриев // Комплексный анализ, математическая физика и нелинейные уравнения: сборник тезисов Международной научной конференции (18-22 марта 2019 г.). – Уфа, 2019. – С. 69–70.

11. Семёнова, М. Н. Нелинейная динамика делокализованных мод в двумерных решетках / Е. А. Шарапов, М. Н. Семёнова // Теоретические и экспериментальные исследования нелинейных процессов в конденсированных средах: материалы V Межрегиональной школы-конференции студентов, аспирантов и молодых ученых-физиков (15-17 апреля 2019 г.). – Уфа, 2019. – С. 6.

12. Semenova, M. N. Nonlinear spatially localized vibrational modes in metals / E. A. Korznikova, R. T. Murzaev, S. V. Dmitriev, O. V. Bachurina, A. S. Semenov, M. N. Semenova // CHAOS 2019: Book of Abstracts of the 12th Chaotic Modeling and Simulation International Conference (18-22 June, 2019). – Chania, Crete, Greece, 2019. – P. 130.