

# Плотность высокоэнергетических атомов в кристалле со структурой NaCl в зависимости от температуры

Кистанов А.А.<sup>†</sup>, Дмитриев С.В.

<sup>†</sup>andrei.kistanov.ufa@gmail.com

Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, ул. Халтурина 39, 450001 Уфа

## Temperature dependence of high-energy atoms density in the crystal with NaCl structure

A.A. Kistanov, S.V. Dmitriev

Institute for Metals Superplasticity Problems RAS, Khalturin St. 39, 450001 Ufa

Методом молекулярной динамики для кристаллов со структурой NaCl, с равной и сильно отличающейся массой анионов и катионов, рассчитана плотность высокоэнергетических атомов для различных температур. Показано, что в кристалле с равной массой анионов и катионов в исследованном интервале температур, отсутствует заметное изменение плотности высокоэнергетических атомов. При значительной разнице масс компонент наблюдается увеличение времени жизни высокоэнергетических атомов с увеличением температуры. Данное изменение объясняется возможностью спонтанного возбуждения щелевых дискретных бризеров в состоянии теплового равновесия в данном кристалле.

**Ключевые слова:** дискретный бризер, фононный спектр, тепловое равновесие.

Density of high-energy atoms was calculated at different temperatures for the crystals with NaCl structure with equal and considerably different atomic masses of anions and cations. It was demonstrated that in the crystal with equal masses of anions and cations the density of high-energy atoms is almost constant within the studied temperature range. In the crystal with considerably different masses of anions and cations the density of high-energy atoms increases with increase in temperature. This can be explained by spontaneous excitation of gap discrete breathers in this crystal at thermal equilibrium.

**Keywords:** discrete breather, phonon spectrum, thermal equilibrium.

### 1. Введение

В последнее время в различных областях физики возрастает интерес к изучению дискретных бризеров (ДБ) - локализованных в пространстве колебательных мод большой амплитуды в бездефектной решетке [1-4]. Существование ДБ обеспечивается ангармонизмом межатомных сил, приводящим к зависимости частоты колебаний атомов от амплитуды. Для мягкого типа нелинейности частота моды уменьшается с ростом амплитуды, а для жесткого - увеличивается. При мягком типе нелинейности частота моды, уменьшаясь с ростом амплитуды, может входить в щель фононного спектра, если таковая имеется, а при жестком типе нелинейности она, увеличиваясь, может оказаться выше фононного спектра. И в том и в другом случае колебательная мода (т.е. ДБ) при нулевой температуре перестает излучать

энергию в виде малоамплитудных колебаний и теоретически может существовать вечно [5]. При конечных температурах в состоянии теплового равновесия ДБ имеют конечное время жизни, возникая и исчезая спонтанно, причем, для двумерных модельных кристаллов методом молекулярной динамики было показано, что время жизни спонтанно возникших ДБ растет с ростом температуры [6,7].

ДБ играют важную роль в разнообразных приложениях, в том числе, в физике конденсированного состояния [8-15], в материаловедении [4] и в изучении свойств наноразмерных полиморфов углерода [16-20].

В работе [21] щелевые ДБ были найдены экспериментально в кристалле NaI в состоянии термодинамического равновесия при температуре 555 К. Возможность их существования в этом кристалле при нулевой тем-

пературе была доказана ранее методом молекулярной динамики [22]. Данное исследование было продолжено в работе [8], где был изучен механизм возбуждения ДБ в кристалле по механизму модуляционной неустойчивости коротковолновых фононных мод достаточно большой амплитуды.

В данной работе, продолжающей исследования, опубликованные в [7,10,15], мы показываем изменение плотности высокоэнергетических атомов с ростом температуры для кристалла со структурой NaCl, имеющего значительную разницу атомных весов анионов и катионов.

## 2. Описание модели

Рассматривается модель кристалла со структурой NaCl, составленная из двух ГЦК-решеток с параметром решетки  $a$ , в узлах одной из них располагаются анионы, а другой - катионы (рис. 1). Решетки сдвинуты относительно друг друга на вектор  $(a/2, 0, 0)$ . Каждый из атомов имеет шесть соседей противоположного типа, находящихся на вершинах правильного октаэдра. Каждая кубическая трансляционная ячейка состоит из четырех анионов и четырех катионов.

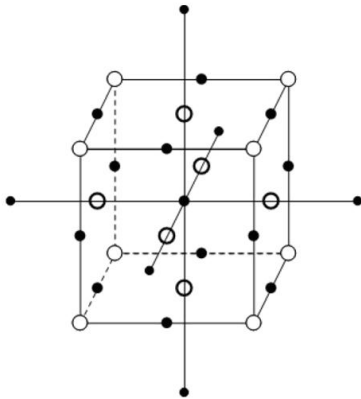


Рис. 1. Кристалл со структурой NaCl. Анионы (катионы) показаны светлыми (темными) символами.

Взаимодействие атомов описывается парными потенциалами, учитывающими кулоновские взаимодействия, борн-маеровское отталкивание и дисперсионное взаимодействие. Параметры потенциалов представлены в работе [10].

Равновесный параметр решетки равен  $a = 6.25 \text{ \AA}$ . В работе рассмотрено два значения соотношения массы анионов к массе катионов, 10 и 1. Для этого масса катиона принималась равной 10 г/моль, а для массы анионов бралось два значения, 100 г/моль и 10 г/моль, соответственно. Расчетная ячейка с наложенными периодическими граничными условиями содержала  $N = 8 \times 8 \times 8$  ячеек периодичности кристалла, при этом общее число атомов в расчетной ячейке составляло 4096.

При задании начальных условий ставилась задача получить кристалл в тепловом равновесии, которое характеризуется равномерным распределением энергии кристалла по всем колебательным модам. Для этого суммировались все  $N$  фононных мод дискретного спектра колебаний

рассматриваемой ячейки периодичности кристалла с амплитудами, обеспечивающими равные энергии всех колебательных мод и дающими в сумме требуемую общую энергию. Данный способ задания начальных условий не учитывает влияния ангармонизмов, которые, вообще говоря, нарушают принцип суперпозиции колебательных мод. Поэтому перед анализом тепловых флуктуаций кристалл подвергался термализации в течении 100 ps.

Было учтено тепловое расширение кристалла так, чтобы при любой выбранной температуре компоненты макроскопических напряжений равнялись нулю.

Температура кристалла в дальнейшем будет представлена средней кинетической энергией  $E$ , приходящейся на один атом. Связь температуры с энергией выражается как

$$T = \frac{2E}{3k_B}, \quad (1)$$

где  $k_B = 8.617 \times 10^{-5} \text{ eV K}^{-1}$  - постоянная Больцмана. Плотность высокоэнергетических атомов была рассмотрена для набора энергий  $E = \{0.0, 0.02, 0.04, 0.08\} \text{ eV}$ , соответствующих следующим температурам:  $T = \{0, 155, 310, 620\} \text{ K}$ .

Высокоэнергетическим считался атом, кинетическая энергия которого, осредненная за примерно три периода колебаний, превосходила среднюю кинетическую энергию атомов в кристалле в  $e \approx 2.7$  раз.

Методика расчета фононных спектров при нулевой и конечных температурах для рассматриваемого кристалла изложена в работе [15].

## 3. Ранее полученные результаты

В целях замкнутости изложения приведем необходимые сведения о щелевых дискретных брызгах в кристаллах со структурой NaCl, основываясь на полученных ранее результатах [15].

В ходе исследования влияния ДБ на плотность фононных состояний при конечных температурах в кристалле со структурой NaCl, для соотношений масс анионов и катионов равным 1 и 10, можно сделать следующие выводы:

1. При соотношении массы аниона к массе катиона равного 1, в исследованном интервале температур, щель в фононном спектре кристалла NaCl отсутствует. Вследствие этого, возбуждение щелевых ДБ в данной структу-

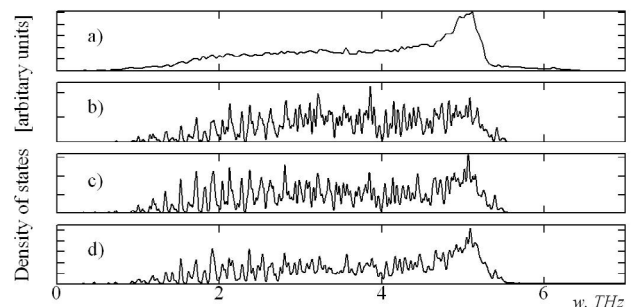


Рис. 2. Плотность фононных состояний кристалла для отношения масс компонент равного 1 при температурах: (a)  $T=0.0 \text{ K}$ , (b)  $T=155 \text{ K}$ , (c)  $T=310 \text{ K}$ , (d)  $T=620 \text{ K}$ .

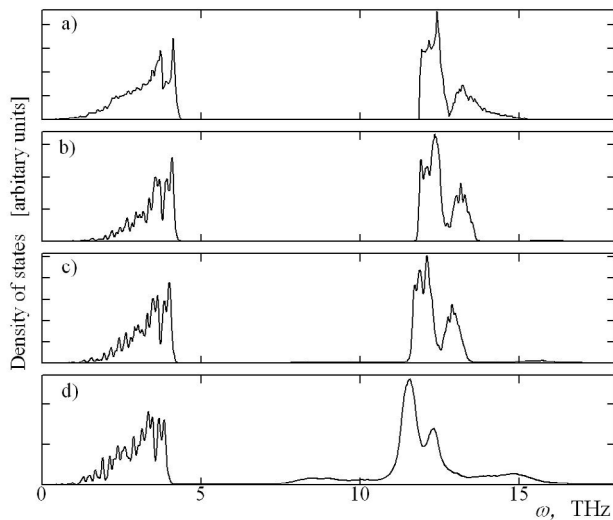


Рис. 3. То же, что и на рис. 2, но для отношения масс компонент равного 10.

ре невозможно. Возбуждение ДБ выше фонованного спектра так же не наблюдается (рис. 2,a-d).

2. При соотношении массы аниона к массе катиона равного 10 имеется широкая щель в фонованном спектре кристалла. При достаточно высоких температурах наблюдается появление двух дополнительных пиков плотности фонованного состояния, один из них расположен в щели фонованного спектра, а другой лежит выше фонованного спектра (рис. 3,a-d). Следует полагать, что в данном случае речь идет о росте концентрации и времени жизни, как щелевых ДБ с мягким типом нелинейности, так и ДБ, лежащих выше фонованного спектра и демонстрирующих жесткий тип нелинейности.

#### 4. Результаты моделирования

При массе аниона равной массе катиона, в рассматриваемом кристалле со структурой NaCl, отсутствует заметное влияние температуры на плотность высокоэнергетических атомов, поэтому мы не приводим соответствующие данные.

На рис. 4. представлены плотности высокоэнергетических атомов кристалла,  $p$ , в зависимости от времени их жизни,  $L$ , при различных температурах для кристалла с отношением массы анионов к массе катионов равным 10. Отметим, что для оси ординат выбран логарифмический масштаб. Зависимость  $p(L)$  в полулогарифмических координатах убывает линейно с ростом  $L$ , что свидетельствует об экспоненциальном уменьшении плотности высокоэнергетических атомов с ростом времени жизни атома в высокоэнергетическом состоянии.

Изменение наклона зависимостей  $p(L)$  говорит о том, что с ростом температуры кристалла увеличивается время жизни высокоэнергетических атомов и их плотность. Такая зависимость плотности и времени жизни высокоэнергетических атомов от температуры свидетельствует о спонтанном возбуждении в кристалле ДБ, имеющих частоты в щели фонованного спектра и выше фонованного спектра, появляющихся только при повышении температуры (см. рис. 3), что согласуется с нелинейной природой ДБ.

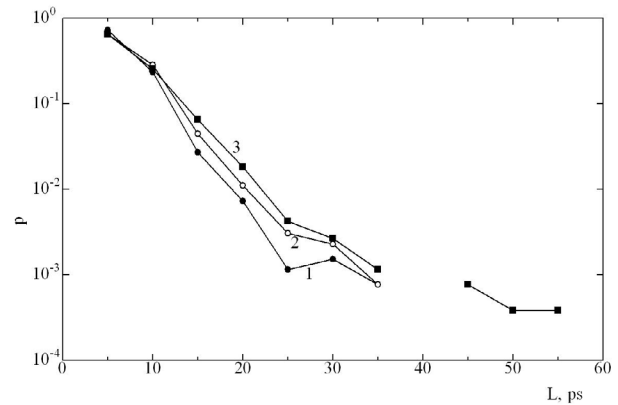


Рис. 4. Плотность высокоэнергетических атомов кристалла как функция времени жизни атома в высокоэнергетическом состоянии для кристалла с отношением масс компонент равным 10 при температурах: (1)  $T=155$  K, (2)  $T=310$  K, (3)  $T=620$  K.

#### 5. Заключение

В ходе исследования влияния ДБ на плотность высокоэнергетических атомов при конечных температурах в кристалле со структурой NaCl, для соотношений масс анионов и катионов 1 и 10, можно сделать следующие выводы:

1. При соотношении массы аниона к массе катиона равного 1, в исследованном интервале температур, отсутствует заметное изменение плотности высокоэнергетических атомов.

2. При соотношении массы аниона к массе катиона равного 10, при достаточно высоких температурах наблюдается увеличение, как времени жизни,  $L$ , отдельных высокоэнергетических атомов, так и плотность высокоэнергетических атомов,  $p$ , (см. рис. 4). Из этого можно сделать вывод, что в данном случае речь идет о росте концентрации и времени жизни ДБ, что также отражается в виде появления новых пиков на плотности фонованного состояния при повышении температуры, один из которых лежит в щели, а другой выше фонованного спектра (см. рис. 3).

*Работа была поддержана грантом РФФИ 11-08-97057-р\_поволжье\_а и грантом РФФИ 10-08-90012-Бел\_а.*

#### Литература

1. S. Flach, A.V. Gorbach. Phys. Rep. **467**, 1 (2008).
2. S.V. Dmitriev. Letters on Materials **1**(2), 78 (2011) (in Russian). [С.В. Дмитриев. Письма о материалах **1**(2), 78 (2011)].
3. D.K. Campbell, S. Flach, Yu.S. Kivshar. Phys. Today **57**, 43 (2004).
4. M.E. Manley. Acta Mater. **58**, 2926 (2010).
5. T. Shimada, D. Shirasaki, T. Kitamura. Phys. Rev. **B81**, 035401 (2010).
6. M. Eleftheriou, S. Flach. Physica D **202**, 142 (2005).
7. L.Z. Khadeeva, S.V. Dmitriev Phys. Rev. **B84**, 144304 (2011).
8. A.R. Bishop, A. Bussmann-Holder, S. Kamba, M. Maglione. Phys. Rev. **B81**, 064106 (2010).
9. S.V. Dmitriev, A.A. Sukhorukov, A.I. Pshenichnyuk, L.Z.

- Khadeeva, A.M. Iskandarov, Yu.S. Kivshar. Phys. Rev. B **80**, 094302 (2009).
10. L.Z. Khadeeva, S.V. Dmitriev. Phys. Rev. B **81**, 214306 (2010).
11. S.V. Dmitriev, N.N. Medvedev, R.R. Mulyukov, O.V. Pozhidaeva, A.I. Potekaev, M.D. Starostenkov, Russian Physics Journal **51**, 858 (2008) [Дмитриев С.В., Медведев Н.Н., Мулюков Р.Р., Пожидаева О.В., Потеекаев А.И., Старостенков М.Д. Изв. вузов. Физика. **51**(8), 73 (2008)].
12. N.N. Medvedev, M.D. Starostenkov, P.V. Zaharov, O.V. Pozhidaeva. JETP Lett. **37**, 7 (2011). [Н.Н. Медведев, М.Д. Старостенков, П.В. Захаров, О.В. Пожидаева. Письма в ЖТФ. **37**, 7 (2011)].
13. S.V. Dmitriev, L.Z. Khadeeva, Phys. Solid State. **53**, 1425 (2011) [Дмитриев С.В., Хадеева Л.З. ФТТ, **53**(7), 1353 (2011)].
14. S.V. Dmitriev, L.Z. Khadeeva. Izvestiya vuzov. Prikladnaya nelineinaya dinamika. **18**(6), 85 (2010) (in Russian) [Дмитриев С.В., Хадеева Л.З. Известия вузов. Прикладная нелинейная динамика. **18**(6), 85 (2010)].
15. A.A. Kistanov, S.V. Dmitriev. Phys. Solid State. **54**(8), 1345 (2012) [А.А. Кистанов, С.В. Дмитриев. ФТТ. **54**(8), 1345 (2012)].
16. T. Shimada, D. Shirasaki, T. Kitamura. Phys. Rev. B **81**, 035401 (2010).
17. Y. Kinoshita, Y. Yamayose, Y. Doi, A. Nakatani, T. Kitamura. Phys. Rev. B **77**, 024307 (2008).
18. Y. Doi, A. Nakatani. Procedia Engineering **10**, 3393 (2011).
19. A.V. Savin, Yu.S. Kivshar. EPL **89**, 46001 (2010).
20. S.V. Dmitriev, L.Z. Khadeeva, Yu.S. Kivshar. JETP Lett. **94**, 580 (2011) [Л.З. Хадеева, С.В. Дмитриев, Ю.С. Кившарь. Письма в ЖЭТФ **94**, 580 (2011)].
21. M.E. Manley, A.J. Sievers, J.W. Lynn, S.A. Kiselev, N.I. Agladze, Y. Chen, A. Llobet, A. Alatas. Phys. Rev. B **79**, 134304 (2009).
22. S.A. Kiselev, A.J. Sievers. Phys. Rev. B **55**, 5755 (1997).