

## Дискретные бризеры с жестким и мягким типом нелинейности в одномерной цепочке с дальнедействующим морзевским взаимодействием

А. С. Семенов<sup>1†</sup>, Е. А. Корзникова<sup>2‡</sup>, С. В. Дмитриев<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Мирнинский политехнический институт (филиал) Северо-Восточного федерального университета, ул. Тихонова 5/1, 678175, Мирный, Россия

<sup>2</sup>Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, ул. Степана Халтурина 39, 450001, Уфа, Россия

<sup>†</sup>sash-alex@yandex.ru, <sup>‡</sup>elena.a.korznikova@gmail.com

В последнее время в области изучения дискретных бризеров наблюдается переход от теоретических исследований, связанных с доказательством их существования в упрощенных нелинейных системах, к поиску долгоживущих бризеров в реальных объектах, например, в кристаллических решетках. Изучение дискретных бризеров в различных физических системах требует учета различных факторов. Атомы в кристалле обычно взаимодействуют не только с ближайшими соседями, ввиду чего важным представляется учет дальнедействующих межатомных взаимодействий. При наличии последних, не представляется возможным использовать потенциалы в виде разложения в ряд Тейлора до третьей или четвертой степени, как это делалось в подавляющем большинстве теоретических работ. В данной работе обсуждаются различные виды дискретных бризеров (точнее квазibriзеров), которые могут быть возбуждены в одномерных моно- и биатомных решетках с дальнедействующим морзевским взаимодействием и синусоидальным локальным потенциалом. Данная модель описывает на качественном уровне дискретные бризеры в чистых металлах и упорядоченных сплавах.

**Ключевые слова:** молекулярная динамика, потенциал Морзе, дискретные бризеры, одномерные решетки

## Discrete breathers with hard and soft type of nonlinearity in 1D Morse lattices with long-range interactions

A. S. Semenov<sup>1</sup>, E. A. Korznikova<sup>2</sup>, S. V. Dmitriev<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Mirny Polytechnic Institute (branch) of North-Eastern Federal University, st. Tikhonov 5/1, 678175, Mirny, Russia

<sup>2</sup>Institute for Metals Superplasticity Problems RAS, 39 Khalturin St., 450001, Ufa, Russia

Recently the focus of studies on discrete breathers has arguably shifted from the mathematical proof of their existence in simplified nonlinear lattices towards the search for the long-lived quasi-breathers in real systems, e.g., in crystal lattices. In each particular field, different factors should be taken into account. Atoms in crystals typically interact not only with the nearest neighbors and thus, the effect of long-range interatomic forces is an important issue. When the long-range forces are involved, the tails of the interatomic potentials contribute essentially to the dynamics of the system and in these circumstances one cannot use truncated Taylor expansions of the potentials such as cubic or quartic. In this work we discuss various discrete breathers (more precisely, quasi-breathers) that can be excited in 1D monatomic and diatomic Morse lattices with long-range interactions and sinusoidal on-site potential. This model describes at a qualitative level discrete breathers in pure metals and ordered alloys.

**Keywords:** molecular dynamics, Morse potential, discrete breathers, 1D lattices

### Введение

В работах [1,2] имеющиеся к тому времени знания о нелинейной динамике решетки были дополнены новой концепцией высокоамплитудных локализованных

колебательных мод, существующих в отсутствии решеточных дефектов. Подобные моды были названы дискретными бризерами (ДБ) или внутренними локализованными модами. Согласно ряду экспериментальных исследований, ДБ могут существовать в различных ви-

дах физических систем, включая оптические, механические, электрические, атомные и др. [3].

В классических работах по изучению ДБ рассматривались модельные дискретные системы низкой размерности с простейшими видами ангармонизмов в межчастичных взаимодействиях [1–3] и были развиты аналитические и полуаналитические методы построения бризерных решений, изучены их основные свойства. В настоящее время растет число работ по исследованию ДБ в различных кристаллических материалах [4–15], что требует существенного уточнения рассматриваемых моделей.

В данной работе проведено исследование эффекта дальнедействующих взаимодействий Морзе и наличия периодического локального потенциала на существование дискретных бризеров в одномерных моно- и биатомных цепочках.

## Описание модели

Рассматривается одномерная цепочка атомов схематически представленная на рис.1а. Каждая трансляционная ячейка длины  $2h$  содержит два атома, имеющих различные массы  $m$  и  $M \geq m$ . Межатомное расстояние равно  $h$ . Ячейки пронумерованы индексом  $n$ . Смещения легких и тяжелых атомов от положений равновесия обозначены  $x_n$  и  $X_n$ , соответственно. Каждый атом взаимодействует с  $K$  ближайшими соседями посредством потенциала Морзе и испытывает действие синусоидального потенциала с периодом  $h$  и высотой  $A$ . Динамика цепи описывается следующим Гамильтонианом

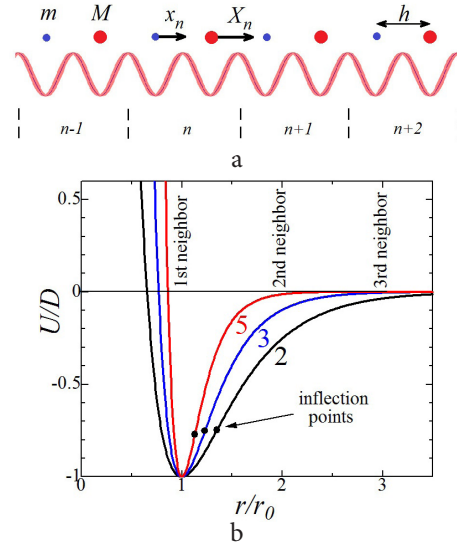
$$H = \sum_n \left\{ \frac{m}{2} \dot{x}_n^2 + \frac{M}{2} \dot{X}_n^2 - A \cos\left(\frac{2\pi x_n}{h}\right) - A \cos\left(\frac{2\pi X_n}{h}\right) \right\} + \sum_{k=1}^K U[kh + \xi_{n+[(k-1)/2]} - x_n] + \sum_{k=1}^K U[kh + \chi_{n+[(k-1)/2]} - X_n], \quad (1)$$

Первые два слагаемых в фигурных скобках представляют кинетическую энергию цепи, третье и четвертое – вклад потенциальной энергии, обусловленный присутствием локального синусоидального потенциала. Последние два слагаемых гамильтониана отвечают за потенциальную энергию межатомных взаимодействий. Здесь  $[x]$  означает округление (например,  $[1/2]=1$ ,  $[2]=2$ ),  $\xi_i = X_i(x_i)$  и  $\chi_i = X_i(x_i)$  для четных (нечетных)  $k$ , а  $U(r)$  – потенциал Морзе, определяемый выражением

$$U(r) = D \exp[-2\alpha(r - r_0)] - 2D \exp[-\alpha(r - r_0)], \quad (2)$$

где  $D$ ,  $\alpha$  и  $r_0$  являются параметрами, а  $r$  – расстояние между двумя взаимодействующими атомами.

Функция (2) показана на рис.1б для  $\alpha=2, 3$  и 5. Энергия представлена в единицах  $D$ , а межатомное расстояние отнесено к величине  $r_0$ . Потенциал имеет минимум в точке  $r=r_0$ , а глубина минимума (энергия связи) равна  $D$ . Определим  $a$  как равновесное межатомное расстояние в морзевской цепи, т.е. расстояние, соответствующее минимуму потенциальной энергии в отсутствии действия



**Рис. 1.** Схематическое изображение одномерной цепи, содержащей два типа атомов в поле локального синусоидального потенциала с периодом  $h$ . Каждая трансляционная ячейка длины  $2h$  содержит два атома имеющие массы  $m$  и  $M \geq m$ . Ячейки пронумерованы индексом  $n$ . Смещения легких и тяжелых атомов от положений равновесия обозначены  $x_n$  и  $X_n$ , соответственно. Каждый атом взаимодействует с  $K$  ближайшими соседями посредством потенциала Морзе и находится в поле локального синусоидального потенциала с периодом  $h$  и высотой  $A$ . (b) Вид потенциала Морзе для  $\alpha=2, 3$  и 5.

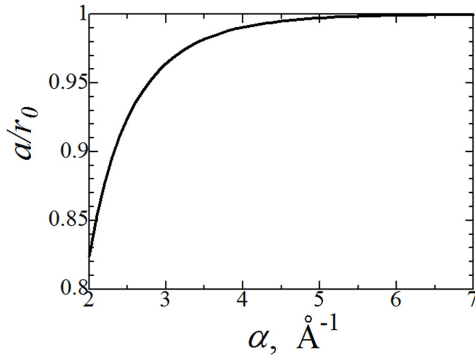
**Fig.1.** (a) Schematic plot of the 1D diatomic chain in the sinusoidal on-site potential having period  $h$ . Each translational cell of length  $2h$  contains two atoms having, generally speaking, different masses  $m$  and  $M \geq m$ . The cells are numbered by the index  $n$ . Displacements of the light and heavy atoms from the equilibrium positions are denoted as  $x_n$  and  $X_n$ , respectively. Each atom interacts with  $K$  nearest neighbors via Morse potential and with the sinusoidal on-site potential of period  $h$  and height  $A$ . (b) Morse interatomic potentials (2) for  $\alpha = 2, 3$ , and 5.

локального потенциала ( $A=0$ ). Только в случае взаимодействия ближайших соседних атомов ( $K=1$ ) имеет место соотношение  $a=r_0$ , во всех прочих случаях ( $K>1$ )  $a<r_0$ . Отметим, что межатомное расстояние  $h$  может не совпадать с  $a$  ввиду возможности однородной упругой деформации решетки.

Параметр  $\alpha$  в (2) определяет жесткость межатомной связи. При  $\alpha>5$  потенциал Морзе является по сути короткодействующим ввиду того, что вклад второго и последующих соседей значительно меньше  $D$ .

Для последующего обсуждения важно отметить, что потенциал Морзе имеет точку перегиба, как показано на рис.1б. Жесткость потенциала  $d^2U/dr^2$  является положительной (отрицательной) слева (справа) от точки перегиба. Другими словами, потенциал Морзе на близких расстояниях характеризуется жестким типом нелинейности, а на больших – мягким.

На рис.2 показано относительное межатомное расстояние  $a/r_0$  в морзевской цепи в отсутствии действия локального потенциала ( $A=0$ ) как функция  $\alpha$  для  $K \rightarrow \infty$ . Этот результат не зависит от  $D$  ввиду того, что только последние два слагаемых в (1) учитываются при расче-



**Рис. 2.** Безразмерное равновесное расстояние между атомами в цепи Морзе в отсутствии локального потенциала ( $A=0$ ) как функция  $\alpha$  при  $K \rightarrow \infty$ . Отметим, что в случае взаимодействий ближайших соседей ( $K=1$ ) имеем  $a/r_0(\alpha) \approx 1$ .

**Fig. 2.** The dimensionless equilibrium distance between atoms in the Morse chain in the absence of the on-site potential ( $A=0$ ) as the function of  $\alpha$  for  $K \rightarrow \infty$ . Note that for the nearest-neighbor interactions ( $K=1$ ) one has  $a/r_0(\alpha) \approx 1$ .

те энергии минимизации, а  $D$  является лишь множителем  $H$ . В соответствии с вышесказанным, для  $\alpha > 5$  имеем  $a/r_0 \approx 1$  и эффект дальнедействующих взаимодействий становится очень слабым. Оценка порогового значения  $\alpha$  изменяется в случае решеток более высокой размерности ввиду того, что расстояние до ближайшего соседа становится меньше чем  $2a$ . Например, в случае двумерной треугольной решетки с межатомным расстоянием  $a$  второй соседний атом находится на расстоянии  $\sqrt{3}a$ , в случае трехмерной ГЦК решетки он расположен уже на расстоянии  $\sqrt{2}a$ .

Следующим шагом будет введение безразмерных переменных перемещений, времени и энергии

$$\tilde{x} = \frac{x_n}{r_0}, \quad \tilde{X} = \frac{X_n}{r_0}, \quad \tilde{t} = \frac{t}{r_0} \sqrt{\frac{D}{m}}, \quad \tilde{H} = \frac{H}{D} \quad (3)$$

и следующих обозначений

$$\tilde{\alpha} = \alpha r_0, \quad \tilde{h} = \frac{h}{r_0}, \quad \mu = \frac{M}{m}, \quad \tilde{A} = \frac{A}{D} \quad (4)$$

С учетом (3) и (4) выражения (1) и (2) могут быть переписаны в безразмерной форме (все тильды опущены)

$$H = \sum_n \left\{ \frac{1}{2} \dot{x}_n^2 + \frac{\mu}{2} \dot{X}_n^2 - A \cos\left(\frac{2\pi x_n}{h}\right) - A \cos\left(\frac{2\pi X_n}{h}\right) \right\} + \sum_{k=1}^K U[kh + \xi_{n+[k-1]/2} - x_n] + \sum_{k=1}^K U[kh + \chi_{n+[k-1]/2} - X_n], \quad (5)$$

$$U(r) = \exp[-2\alpha(r-1)] - 2\exp[-\alpha(r-1)] \quad (6)$$

Можно отметить, что потенциал Морзе в рассматриваемой модели имеет лишь один существенный параметр  $\alpha$ . Модель также включает соотношение атомных

масс  $\mu$ , высоту локального потенциала  $A$ , и межатомное расстояние  $h$ . Для выбранного  $\alpha$  наиболее оптимальным выбором  $h$  представляется значение  $h=a(\alpha)$ , как показано на рис.2., когда цепь свободна от внешней нагрузки. В случае  $h < a$  ( $h > a$ ) цепь находится под действием растягивающей (сжимающей) нагрузки.

В данной работе рассмотрены следующие значения параметров модели (5), (6):  $D=1$ ,  $r_0=1$ ,  $\alpha=5$  и  $A=4$ .

Начальные условия для неподвижного ДБ с жестким типом нелинейности задавались следующим образом

$$x_n^0 = T_n + S_n, \quad \dot{x}_n^0 = 0, \quad (7)$$

где  $x_n^0$ ,  $\dot{x}_n^0$  - компоненты векторов начальных перемещений и начальных скоростей  $n$ -ого атома выбранного плотноупакованного ряда кристалла. Все остальные атомы кристалла имели нулевые начальные перемещения и начальные скорости. Функции  $T_n$  и  $S_n$  в (7) описывают амплитуды колебания и смещения центров колебания атомов, соответственно. Иными словами,  $T_n = (x_{n,max} - x_{n,min})/2$ ,  $S_n = (x_{n,max} + x_{n,min})/2$ , где  $x_{n,max}$  и  $x_{n,min}$  - это максимальное и минимальное значение (квази)периодической функции  $x_n(t)$ , описывающей движение  $n$ -го атома. Данные функции имели вид

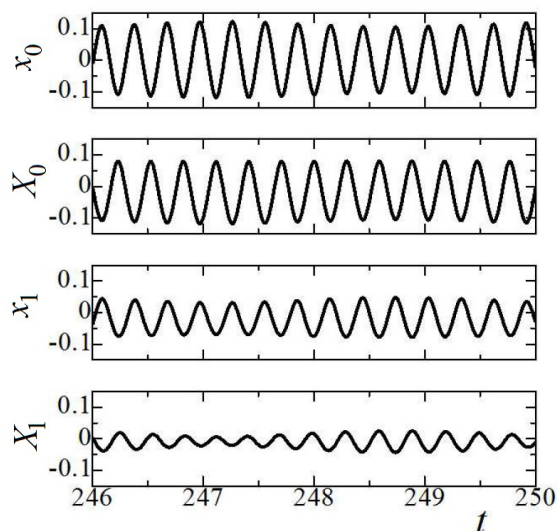
$$T_n = \frac{(-1)^n A}{\cosh[\beta(n-x_0)]}, \quad S_n = \frac{-B(n-x_0)}{\cosh[\gamma(n-x_0)]}, \quad (8)$$

где параметр  $A$  определяет амплитуду ДБ, параметр  $B$  определяет амплитуду смещений центров колебаний атомов, параметры  $\beta=\gamma$  задают степень пространственной локализации ДБ, а  $x_0$  - его начальное положение. При  $x_0=0$  имеем ДБ центрированный на атоме, а при  $x_0=1/2$  посередине между двумя соседними атомами.

## Результаты и выводы

Отметим, что модель близкая к (1), (2) рассматривалась ранее в работе [16] с тем отличием, что в ней отсутствовал локальный потенциал и учитывались морзевские взаимодействия только между ближайшими атомами. Авторы работы [16] показали, что рассмотренная ими модель не поддерживает ДБ с жестким типом нелинейности. Им удалось возбудить лишь щелевые ДБ с мягким типом нелинейности в *биатомной* цепочке. Представляется интересным найти условия возбуждения ДБ с жестким типом нелинейности.

Покажем, что введение периодического локального потенциала позволяет возбудить в *моноатомной* цепочке ДБ с жестким типом нелинейности. На рис.3 показан пример неподвижного ДБ, возбужденного в моноатомной цепочке атомов, взаимодействие которых описывается потенциалом Морзе (2) с параметрами  $D=1$ ,  $r_0=1$  и  $\alpha=5$  в присутствии локального потенциала высотой  $A=4$ . ДБ локализован на двух атомах,  $x_0$ ,  $X_0$ , которые колеблются с одинаковой амплитудой в противофазе. Можно отметить высокую степень локализации ДБ, которая проявляется в значительном снижении амплитуд второго (примерно в 2 раза) и третьего атомов, соседствующих с центром ДБ. В рассмотренном временном интервале



**Рис. 3.** Смещения центрального атома ДБ  $x_0$ , и его трех ближайших соседей (см. рис.1а) как функция времени. ДБ был возбужден в монокристаллической ( $m=M$ ) цепи атомов (1), взаимодействие которых описывается потенциалом Морзе (2) с параметрами  $D=1$ ,  $r_0=1$  и  $\alpha=5$  в присутствии локального периодического потенциала высотой  $A=4$ .

**Fig. 3.** Displacements of the central atom of the DB,  $x_0$ , and its three neighbors (see Fig.1a) as the functions of time. The DB is excited in the monoatomic ( $m=M$ ) chain (1) with the parameters  $D=1$ ,  $r_0=1$  and  $\alpha=5$  in (2) and the height of the on-site potential  $A=4$ .

амплитуда ДБ остаётся постоянной, т.е. он практически не излучает энергию.

Исследования зависимости амплитуды рассмотренного ДБ от его частоты показали, что он обладает жестким типом нелинейности, что характерно для бризеров в кристаллах с морзевским взаимодействием, лежащим выше спектра [17].

Таким образом, в работе рассмотрена одномерная биатомная цепочка атомов, взаимодействие которых описывается дальнедействующим потенциалом Морзе в присутствии локального периодического потенциала. Показано, что рассматриваемая модель допускает существование ДБ не только с мягким типом нелинейности, как описано в [16], но и с жестким типом нелинейности.

*Благодарности.* Работа К.Е.А. поддержана грантом президента РФ МК-5283.2015.2. С.В.Д. благодарит за поддержку грант РФФИ 14-13-00982.

*Acknowledgements.* K.E.A. is grateful for financial support from the President Grant of young scientists (grant № МК-5283.2015.2). S.V.D. thanks for the support the Russian Scientific Foundation (grant № 14-13-00982).

## Литература / References

1. A. S. Dolgov. Sov. Phys. Solid State **28**, 907—909 (1986).
2. A. Sievers, S. Takeno. Phys. Rev. Lett. **61**, 970—973 (1988).
3. S. Flach, A. V. Gorbach. Phys. Rep. **467** (1), 1—116 (2008).
4. R. T. Murzaev, A. A. Kistanov, V. I. Dubinko, D. A. Terentyev, S. V. Dmitriev. Computational Materials Science **98**, 88—92 (2015).
5. E. A. Korznikova, J. A. Baimova, S. V. Dmitriev. Europhys. Lett. **102**, 60004—1—60004—5 (2013).
6. E. A. Korznikova, A. V. Savin, Yu. A. Baimova, S. V. Dmitriev, R. R. Mulyukov. JETP Lett. **96**, 222—226 (2012).
7. N. N. Medvedev, M. D. Starostenkov, M. E. Manley. J. Appl. Phys. **114** (21), 213506—1—213506—4. (2013).
8. N. N. Medvedev, M. D. Starostenkov, P. V. Zakharov, A. V. Markidonov. Letters on Materials. **3** (1), 34—37 (2013). (in Russian) [Н. Н. Медведев, М. Д. Старостенков, П. В. Захаров, А. В. Маркидонов. Письма о материалах. **3** (1), 34—37 (2013).]
9. P. V. Zakharov, M. D. Starostenkov, A. M. Eremin, A. V. Markidonov. Fundamentalnie Problemi Sovremennogo Materialovedeniya. **11** (2), 260—265 (2014). (in Russian) [П. В. Захаров, М. Д. Старостенков, А. М. Еремин, А. В. Маркидонов. Фундаментальные проблемы современного материаловедения. **11** (2), 260—265 (2014).]
10. P. V. Zakharov, M. D. Starostenkov, N. N. Medvedev, A. M. Eremin, A. V. Markidonov. Fundamentalnie Problemi Sovremennogo Materialovedeniya. **11** (3), 388—393 (2014). (in Russian) [П. В. Захаров, М. Д. Старостенков, Н. Н. Медведев, А. М. Еремин, А. В. Маркидонов. Фундаментальные проблемы современного материаловедения. **11** (3), 388—393 (2014).]
11. N. N. Medvedev, M. D. Starostenkov, P. V. Zakharov, O. V. Pozidaeva. Technical Physics Letters. **37** (2), 98—101 (2011).
12. A. A. Kistanov, E. A. Korznikova, S. Yu. Fomin, K. Zhou, S. V. Dmitriev. Letters on Materials. **4** (4), 315—318 (2014).
13. A. A. Kistanov, S. V. Dmitriev. Letters on materials. **2** (3), 143—146 (2012). (in Russian) [А. А. Кистанов, С. В. Дмитриев. Письма о материалах. **2** (3), 143—146 (2012).]
14. V. I. Dubinko, A. V. Dubinko, S. V. Dmitriev. Letters on Materials. **3** (3), 239—247 (2013). (in Russian) [В. И. Дубинко, А. В. Дубинко, С. В. Дмитриев. Письма о материалах. **3** (3), 239—247 (2013).]
15. S. V. Dmitriev. Letters on Materials. **1** (2), 78—83 (2011). (in Russian) [С. В. Дмитриев. Письма о материалах. **1** (2), 78—83 (2011).]
16. A. J. Sievers, M. Sato, J. B. Page, T. Rossler. Phys. Rev. **B 88**, 104305—1—104305—7 (2013).
17. A. A. Kistanov, S. V. Dmitriev, A. S. Semenov, V. I. Dubinko, D. A. Terentev. Technical Physics Letters. **40** (8), 657—661 (2014).