ISSN 1992-6502 (Print) Вестник УГАТУ ISSN 2225-2789 (Online)
2023. Т. 27, № 4 (102). С. 50–58 http://journal.ugatu.su

УДК 359

Влияние ансамблей дискретных бризеров на теплоемкость нелинейных одномерных кристаллов

А.Ю. Моркина[1,2], Ю.В. Бебихов[3], Ж.Г. Рахматуллина[2], М.Н. Семенова[2,3], С.В. Дмитриев[4]

alinamorkina@yandex.ru

[1] ФГБОУ ВО «Уфимский университет науки и технологий», г. Уфа, Россия
[2] Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, г. Уфа, Россия
[3] Северо-Восточный федеральный университет, Политехнический институт (филиал), г. Мирный, Россия
[4] Институт физики молекул и кристаллов, УФИЦ РАН, г. Уфа, Россия

Поступила в редакцию 02.11.2023

Аннотация. Изучению процессов зарождения дефектов кристаллической решетки посвящено огромное количество работ в связи с тем, что этот процесс является первопричиной изменения комплекса свойств материала. Покидание атомом состояния равновесия всегда происходит через преодоление потенциальных барьеров путем перехода из динамического дефекта в топологический. Примеры динамических дефектов – флуктуации и дискретные бризеры. Экспериментальные и молекулярно-динамические исследования подтвердили, что дискретные бризеры (ДБ) могут возбуждаться в различных кристаллических решетках и при взаимодействии с точечными дефектами они могут снижать потенциальный барьер их миграции. В данной работе моделируется нелинейный одномерный кристалл с частицами, взаимодействие которых описывается линейным межчастичным и нелинейным локальным потенциалом. В кристалл с жестким или мягким типом нелинейности вводились ДБ в количестве от 1 до 7 и с амплитудой колебаний от 0,5 до 3 условных единиц. Было установлено, что количество ДБ в ансамбле не влияет на изменение теплоемкости, но при этом выявлена зависимость теплоемкости от задаваемой амплитуды колебаний ДБ. В случае мягкого (жесткого) типа нелинейности значение теплоемкости увеличивается (уменьшается) с ростом амплитуды колебаний.

Ключевые слова: дискретные бризеры, локальный потенциал, молекулярная динамика, теплоемкость.

ВВЕДЕНИЕ

Свойства материалов всегда были важны, так как именно они определяют такие характеристики, как прочность, пластичность и многие другие. Правильный выбор свойств материала имеет важное значение для проектирования изделий и производственных процессов. В свою очередь, на свойства материалов значительно влияют дефекты кристаллической решетки, например, они могут ухудшать электропроводность или нарушать симметрию кристалла. Поэтому важно понимать механизмы зарождения дефектов и их миграции из положения равновесия путем преодоления потенциального барьера миграции атомов. Одним из механизмов реализации этого процесса является появление дискретных бризеров – ангармонических колебаний, локализующих энергию.

Дискретными бризерами (ДБ) называются локализованные в пространстве и периодические во времени колебательные моды в бездефектных нелинейных решетках [1]. В ряде работ была показана возможность существования ДБ в кристаллах [2-4], что привело к всплеску научного интереса к изучению ДБ и их свойств в кристаллах различного типа. В настоящее время концепция ДБ все чаще привлекается для объяснения различных физических эффектов в твердых телах.

В случае рассеяния ДБ на таких дефектах, как вакансии и дислокации, происходят локализованные атомные возбуждения, интенсивность и время релаксации которых зависят от дефектной структуры и кинетической энергии бризера, что, в свою очередь, может привести к передаче энергии ДБ дефектам, вызывая такие явления, как массоперенос и электропластичность [5, 6].

ДБ не излучают свою энергию в виде малоамплитудных колебаний (фононов), поскольку их частоты лежат вне спектра фононных колебаний кристалла [7]. Поэтому при исследовании ДБ следует обратить внимание на следующие нюансы – структуру фононного спектра изучаемого кристалла (наличие/отсутствие щели в фононном спектре) и каким образом частота ДБ может выйти из фононного спектра кристалла. В простых структурах, таких как чистые металлы, щель в фононном спектре отсутствует, что допускает наличие ДБ только с частотами выше фононного спектра кристалла [8]. С другой стороны, кристаллы со сложной структурой могут иметь щель в фононном спектре, в этом случае возможно появление щелевых ДБ, то есть, ДБ с частотами колебаний в щели фононного спектра. Стоит отметить, что частоты ДБ выходят из фононного спектра из-за наличия ангармонизмов межатомных сил, приводящих к зависимости частоты колебаний атомов от амплитуды. ДБ может демонстрировать два типа нелинейности – жесткий и мягкий, при которых частота моды соответственно увеличивается или уменьшается с ростом амплитуды [9]. Это схематически показано на рис. 1.

Очевидно, что ДБ с мягким типом нелинейности возможны только в кристаллах со щелью в фононном спектре. В этом случае частота ДБ отщепляется от верхнего края щели и, уменьшаясь с ростом амплитуды, входит в щель фононного спектра. Частоты щелевых ДБ с жестким типом нелинейности отходят от нижней границы щели фононного спектра и растут с увеличением амплитуды ДБ [10].

В кристаллах со сплошным спектром возможно наличие ДБ только с жестким типом нелинейности, когда частота ДБ растет с амплитудой, отделяясь от верхнего края фононного спектра [11].

В случае, когда частота типа мягкой нелинейности уменьшается с ростом амплитуды, тип жесткой нелинейности характеризуется ростом частоты с увеличением амплитуды ДБ [12, 13]. Обычно ДБ с мягким типом нелинейности существуют в двухатомных кристаллах с заметной разницей в атомных массах и имеют частоту внутри запрещенной зоны фононов. Этот тип бризера обычно локализуется на одном легком атоме и его очень легко возбудить, просто введя начальную скорость или начальное смещение для атома [14]. По этой причине такие типы ДБ широко исследовались во многих биатомных системах и хорошо изучены в литературе [15-17].

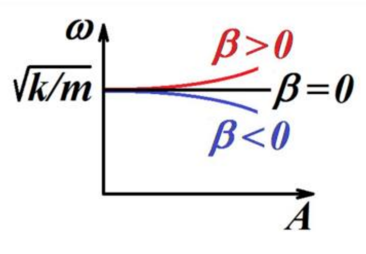


Рис. 1. Диаграмма соответствия типа нелинейности (жесткий или мягкий)

в зависимости от коэффициента β.

Ожидается, что ДБ с жестким типом нелинейности и частотой выше спектра будут существовать в одноатомных кристаллах с бесщелевой полосой. До недавнего времени считалось, что в реальных кристаллах межатомные взаимодействия имеют тенденцию проявлять мягкий тип нелинейности, и ДБ может существовать только в пределах промежутка в фононном спектре кристалла. Однако возможность существования ДБ с жестким типом нелинейности и частотами выше фононного спектра была продемонстрирована с помощью моделирования молекулярной динамики для Ni и Nb [18-19]. Позднее возможность существования ДБ с частотами выше фононного спектра кристалла была подтверждена для случая двумерного (2D) одноатомного кристалла с межатомным потенциалом Морзе [20].

Очень важно понять, как ДБ влияют на макроскопические свойства кристаллов. В экспериментальных исследованиях установлена связь аномалий теплового расширения [21] и теплоемкости [22] α-урана при высоких температурах с возбуждением ДБ. ДБ могут быть ответственны за турбулентную динамику [23].

Цель данной работы – изучение влияние ансамблей ДБ с одинаковой и разной амплитудой колебаний на теплоемкость одномерного нелинейного кристалла с мягким и жестким типом нелинейности.

ДЕТАЛИ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Данное исследование проводилось при помощи метода молекулярной динамики (МД), который используют как эффективный инструмент анализа различных аспектов трансформации структуры кристаллических решеток в результате внешних воздействий, в том числе при изучении дефектов краудионного типа [24, 25], устойчивости к нагреву нанокристаллов, армированных углеродными нанотрубками [26], анализе деформационно-индуцированных фазовых переходов [27], и многих других. Данный метод позволяет определять эволюцию ансамбля атомов при помощи интегрирования уравнений их движения. Траектории атомов и молекул в этом методе определяются путем численного решения уравнений движения Ньютона для системы взаимодействующих частиц, где силы между частицами и их потенциальные энергии рассчитываются с использованием межатомных потенциалов или силовых полей молекулярной механики.

Рассмотрим одномерную цепочку из 1000 частиц с массой m, гамильтониан которой определяется как

$$H = K + P = \sum_n \frac{m\dot{u}_n^2}{2} + \sum_n \left[\frac{s}{2}(u_{n+1} - u_n)^2 + U(u_n)\right], \tag{1}$$

где K – кинетическая энергия, P – потенциальная энергия, u_n – это смещение n-й частицы из ее положения в равновесном состоянии и $\dot{u}_n$ – скорость смещения n-й частицы (точка над буквой означает производную по времени). Частицы связаны со своими ближайшими соседями упругими линейными связями с жесткостью s. В качестве нелинейного локального потенциала мы принимаем

$$U(\xi) = k\xi^2 + \alpha\xi^4 + \beta\xi^6 \tag{2}$$

где k – коэффициент перед гармоническим членом, а коэффициенты α и β определяют вклады от членов четвертого и шестого порядка соответственно. Без потери общности мы полагаем m = 1, s = 1, а для локального потенциала возьмем k = 1/2, α = ± 1/24, и β = 1/720.

Отметим, что при $\alpha > 0$ у нас имеется локальный потенциал с ангармонизмом жесткого типа, а при $\alpha < 0$ локальный потенциал обладает ангармонизмом мягкого типа при не очень больших амплитудах колебаний. С другой стороны, для очень больших амплитуд колебаний, когда член шестого порядка доминирует, даже при $\alpha < 0$ система демонстрирует ангармонизм жесткого типа, но этот случай здесь не рассматривается.

Уравнение движения, которое вытекает из гамильтониана:

$$m\ddot{u}_n = s(u_{n-1} - 2u_n + u_{n+1}) - 2ku_n - 4\alpha {u_n}^3 - 6\beta {u_n}^5 \tag{3}$$

Эти уравнения интегрируются численно с использованием метода Штормера шестого порядка с шагом по времени $\tau = 10^{-3}$. В случае колебаний малой амплитуды нелинейными членами можно пренебречь, а решениями линеаризационного уравнения являются нормальные моды

$$u_n \sim exp\left[i(qn - \omega_q t)\right] \quad (4)$$

с волновым числом q и частотой ω_q. Эти моды подчиняются следующему дисперсионному соотношению:

$$\omega_q^2 = \frac{2}{m}[k + s(1 - cosq)] \quad (5)$$

Рассматриваемая цепочка поддерживает бегущие волны (фононы) с малой амплитудой с частотами в пределах от $\omega_{\min} = 1$ для $q = 0$ до $\omega_{\max} = \sqrt{5} \approx 2{,}236$ для $q = \pi$.

В случае ангармонизма жесткого типа (α = 1/24) в цепочке из N = 1000 частиц в момент времени t = 0 возбуждается мода с волновым числом на границе зоны Бриллюэна (q = π) и амплитудой A

$$u_n = Asin(\pi n - \omega_{max} t) \quad (6)$$

Для цепочки с ангармонизмом мягкого типа (α = −1/24) возбуждается мода с волновым числом в Г-точке зоны Бриллюэна ($q = 0$) и амплитудой A

$$u_n = Asin(\omega_{min} t) \quad (7)$$

Если амплитуда возбуждаемых мод не слишком мала, они являются модуляционно неустойчивыми. Первоначально энергия равномерно распределяется между всеми частицами. Развитие неустойчивости приводит к локализации энергии, которую можно отслеживать, вычисляя параметр локализации

$$L = \frac{\sum e_n^2}{\left(\sum e_n\right)^2} \quad (8)$$

где $e_n = \frac{m\dot{u}_n^2}{2} + \frac{s}{4}(u_n - u_{n-1})^2 + U(u_n)$ – это энергия n-й частицы.

В качестве меры температуры будет использоваться усредненная кинетическая энергия на атом:

$$K = \frac{1}{N}\sum_n \frac{m\dot{u}_n^2}{2} \quad (9)$$

Фактически температура одномерной решетки равна $T = 2\overline{K}/k_B$, где $k_B = 8.617 \times 10^{-5}\ eVK^{-1}$ – постоянная Больцмана. Теплоемкость всей цепи определяется следующим образом:

$$C = \lim_{\Delta T \to \infty} \frac{\Delta H}{\Delta T} \quad (10)$$

где ΔH – доля энергии, передаваемой системе, и ΔT – соответствующее увеличение температуры. Удельная теплоемкость определяется как теплоемкость на единицу массы в расчете на частицу. Поскольку в этом исследовании используются периодические граничные условия и тепловое расширение цепи не допускается, мы оцениваем удельную теплоемкость при постоянном объеме. Проблема с использованием этого определения теплоемкости заключается в том, что наше моделирование выполняется при постоянной полной энергии H. Поэтому в наших расчетах удельная теплоемкость цепи при постоянном объеме характеризуется отношением:

$$c_V = \frac{\overline{H}}{\overline{K}} \quad (11)$$

где $\overline{H}$ и $\overline{K}$ – полная энергия и кинетическая энергия цепи на атом соответственно. В линейных системах прирост полной энергии равномерно распределяется между кинетической и потенциальной энергиями, так что $\overline{H} = 2\overline{K}$ и $c_V = 2$. В то время как в нелинейных системах кинетическая и потенциальная энергии могут быть разными, и c_V может отклоняться от этого значения.

ДБ возбуждался при помощи задания следующих начальных условий:

$$u_n(0) = \frac{A}{\cosh(\theta n)}, \quad \dot{u}_n(0) = 0\,. \tag{12}$$

Для моделирования ДБ выбирались параметры начальных условий, представленные в табл. 1. По выбранной амплитуде A находился параметр локализации ДБ Θ, при котором наблюдалось минимальное излучение энергии дискретным бризером. Для такого ДБ затем определялась частота его колебания ω.

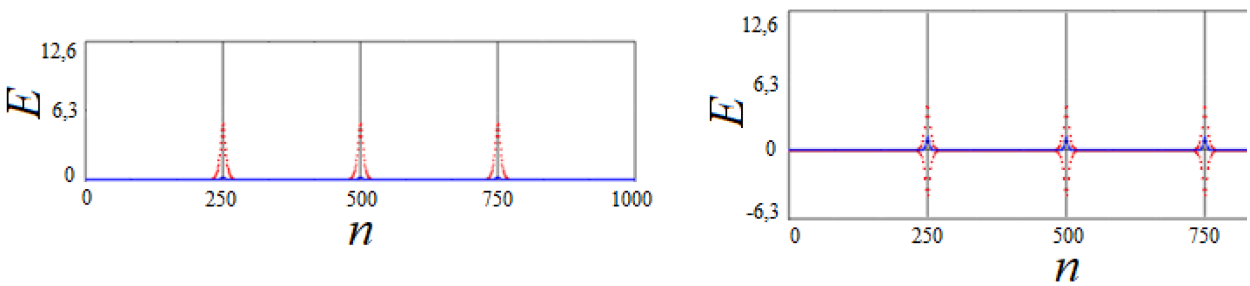
Таблица 1

Значения расходов топлива и воздуха на различных режимах работы двигателя АЛ-31Ф

Мягкий тип нелинейности			Жесткий тип нелинейности		
A	θ	ω	A	θ	ω
0,5	0,125	0,992	0,5	0,126	2,240
0,75	0,186	0,983	0,75	0,190	2,244
1	0,246	0,969	1	0,257	2,250
1,25	0,305	0,952	1,25	0,326	2,259
1,5	0,361	0,932	1,5	0,398	2,270
1,75	0,414	0,908	1,75	0,475	2,283
2	0,464	0,882	2	0,560	2,299
2,25	0,511	0,854	2,25	0,658	2,318
2,5	0,551	0,824	2,5	0,783	2,339
2,75	0,585	0,793	2,75	0,933	2,369
3	0,613	0,764	3	1,097	2,403

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЯ

На рис. 2 представлен пример моделирования цепочки атомов с ансамблями ДБ одинаковой амплитуды, расположенными на одинаковом расстоянии друг от друга. Здесь и далее E – это условная единица энергии, а n – номер атома в нелинейной цепочке.



а) *б)*

Рис. 2. Пример модели цепочки атомов, содержащей ансамбль из 3 ДБ с амплитудой, равной 1:
а) мягкий ангармонизм, б) жесткий ангармонизм.
Красные точки показывают перемещения частиц, а синие – их энергии.

На рис. 3 представлены графики зависимости теплоемкости от амплитуды для ансамбля ДБ с мягким и жестким типом нелинейности. Были посчитаны теплоемкости для систем, содержащих от 1 до 7 ДБ. Можно заметить, что в случае системы, содержащей ДБ с мягким ангармонизмом, теплоемкость увеличивается. Это происходит из-за того, что при увеличении амплитуды частота колебаний наоборот уменьшается, вследствие чего уменьшается и скорость частиц. Это приводит к уменьшению кинетической энергии, находящейся в знаменателе, вследствие чего теплоемкость увеличивается. Противоположная ситуация наблюдается в случае ДБ с жестким типом нелинейности – с увеличением амплитуды растет и частота колебаний, что приводит к увеличению кинетической энергии, и, как результат, уменьшается теплоемкость.

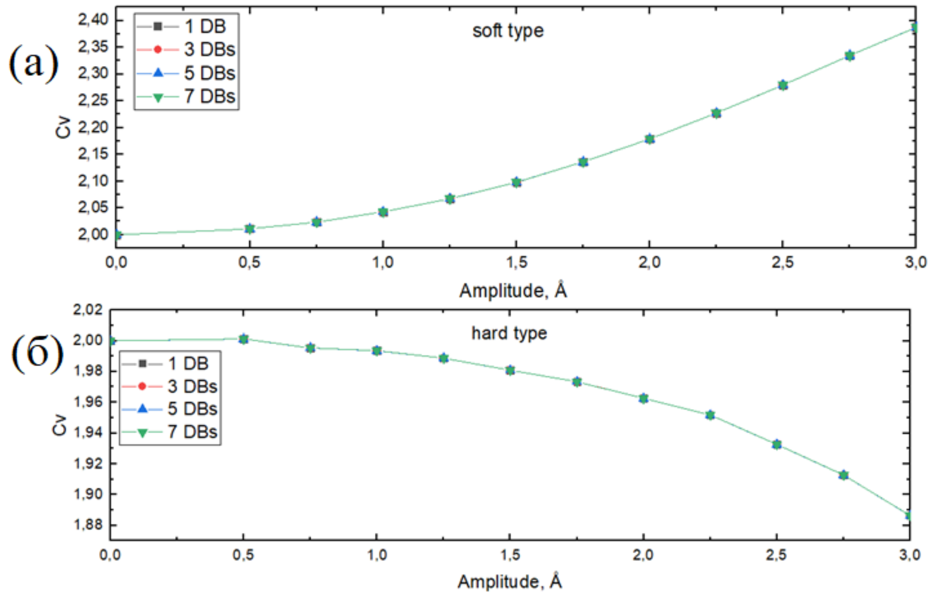


Рис. 3. Зависимость теплоемкости от амплитуды для ансамбля дискретных бризеров: *а)* мягкий ангармонизм, *б)* жесткий ангармонизм.

Также из графиков видно, что изменение количества ДБ с одинаковой частотой никак не влияет на изменение теплоемкости. Поэтому в табл. 2 представлены общие значения теплоемкости для систем.

Таблица 2

Значения теплоемкости, полной энергии и кинетической энергии системы с возбужденными ДБ в цепочках с мягким и жестким типом нелинейности

A	0,5	0,75	1	1,25	1,5	1,75	2	2,25	2,5	2,75	3	0,5
$C_{v\,м}$	2,01	2,0	2,0	2,1	2,1	2,1	2,1	2,2	2,3	2,3	2,4	2,01
$\overline{H}_{м}$	1,9	2,9	3,9	4,9	5,8	6,7	7,5	8,3	9,2	10,0	10,9	1,9
$\overline{K}_{м}$	0,9	1,5	1,9	2,3	2,8	3,1	3,5	3,7	4,1	4,3	4,6	0,9
$C_{v\,ж}$	2,0	1,9	1,9	1,9	1,9	1,9	1,9	1,9	1,9	1,9	1,9	2,0
$\overline{H}_{ж}$	9,9	14,9	19,6	24,2	28,7	32,9	36,7	39,8	41,6	42,5	43,5	9,9
$\overline{K}_{ж}$	4,9	7,5	9,8	12,2	14,5	16,7	18,7	20,4	21,5	22,2	23,0	4,9

Далее мы решили выяснить, как влияет на теплоемкость системы ансамбль ДБ с разной амплитудой. Пример такой системы представлен на рис. 4.

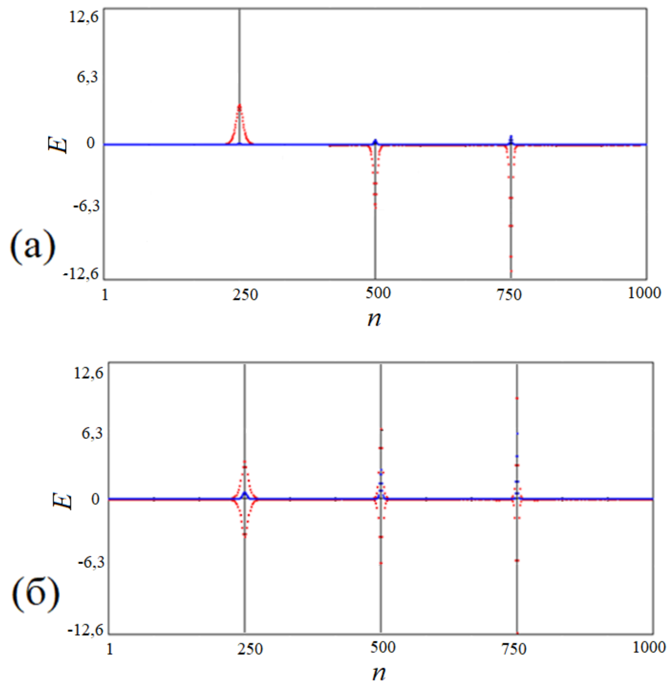


Рис. 4. Цепочка атомов, содержащая ансамбль из трех ДБ с амплитудами 0,75, 1,5 и 2,25: *а)* мягкий ангармонизм, *б)* жесткий ангармонизм.

В этих случаях были получены значения теплоемкости, не совпадающие с полученными ранее, а именно, для системы с мягким ангармонизмом теплоемкость равна 2.13, а с жестким – 1.97.

Путем расчетов была выведена формула, позволяющая рассчитать теплоемкость такой системы без моделирования, используя уже рассчитанные значения, представленные в табл. 2:

$$C_v = \frac{\sum_i \overline{H}_i}{\sum_i \overline{K}_i} \tag{13}$$

где $\overline{H}_i$ и $\overline{K}_i$ – полная энергия и кинетическая энергия дискретных бризеров.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

По результатам проделанной работы можно сделать следующие выводы:

Как и предполагалось, ДБ в цепочке влияют на ее макроскопические свойства, в частности, в данном исследовании анализировалась теплоемкость. В случае ДБ с жестким ангармонизмом ДБ уменьшают теплоемкость. В обратном же случае существование ДБ с мягким типом нелинейности увеличивает теплоемкость. Это объясняется тем, что при локализации ДБ с жестким типом нелинейности увеличивается частота колебаний (уменьшается в случае ДБ с мягким ангармонизмом) при увеличении амплитуды колебаний, что приводит к увеличению кинетической энергии за счет уменьшения потенциальной энергии.

Было выяснено, что количество ДБ с одинаковой амплитудой никак не влияет на теплоемкость системы. Если ДБ в системе имеют разные значения амплитуд, теплоемкость равна отношению сумме полных энергий к сумме кинетических энергий.

Полученный результат является важным в ключе того, что линейная цепочка с наложенным ангармоничеким потенциалом представляет собой эффективную модель реального кристалла, поведение динамических дефектов в котором и влияние на свойства на качественном уровне аналогично реальному кристаллу. Влияние же таких дефектов на реальные свойства кристаллов может стать способом косвенной оценки их концентрации, что, в свою очередь, может увеличить предиктивную силу моделей преодоления потенциальных барьеров и связанной с этим эволюции дефектной структуры.

В дальнейших работах планируется выяснить концентрацию ДБ и их типы в тепловом равновесии, а также их время жизни.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания на оказание государственных услуг ФГБОУ ВО «УУНиТ» (соглашение № 075-03-2023-119/1) «Молодежная научно-исследовательская лаборатория НОЦ «Металлы и сплавы при экстремальных воздействиях». Для Бебихова Ю.В. работа была поддержана грантом Российского научного фонда № 22-22-00810.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Dolgov, A.S.:** On localization of oscillations in nonlinear crystal structure. Sov. Phys. Solid State 28, 907 (1986).

2. **Sievers, A.J., Takeno, S.:** Intrinsic localized modes in anharmonic crystals. Phys. Rev. Lett. 61, 970 (1988).

3. **Page, J.B.:** Asymptotic solutions for localized vibrational modes in strongly anharmonic periodic systems. Phys. Rev. B 41, 7835 (1990).

4. **Flach, S., Willis, C.R.:** Discrete breathers. Phys. Rep. 295, 181 (1998).

5. **Flach, S., Gorbach, A.V.:** Discrete breathers — Advances in theory and applications. Phys. Rep. 467, 1 (2008).

6. **Terentyev D., Dubinko A., Dubinko V.I., Dmitriev S.V., Zhurkin E.E., Sorokin M.V.:** Interaction of discrete breathers with primary lattice defects in bcc Fe. Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 23 085007 (2015).

7. **Dmitriev, S.V., Korznikova, E.A., Baimova, J.A., Velarde, M.G.:** Discrete breathers in crystals. Phys. Usp. 59, 446 (2016).

8. **Cuevas J., English L. Q., Kevrekidis P. G., and Anderson M.:** Discrete Breathers in a Forced-Damped Array of Coupled Pendula: Modeling, Computation, and Experiment. Phys. Rev. Lett. 102, 224101 (2009).

9. Watanabe Y., Nishida T., Doi Y., Sugimoto N.: Experimental demonstration of excitation and propagation of intrinsic localized modes in a mass–spring chain. Phys. Lett. A. 382, 1957 (2018).

10. Vorotnikov K., Starosvetsky Y., Theocharis G., Kevrekidis P.G.: Wave propagation in a strongly nonlinear locally resonant granular crystal. Physica D. 365, 27 (2018).

11. Chong C., Porter M.A., Kevrekidis P.G., Daraio C.: Nonlinear coherent structures in granular crystals. J. Phys.: Condens. Matter. 29, 413003 (2017).

12. Zhang Y., McFarland D.M., Vakakis A.F.: Propagating discrete breathers in forced one-dimensional granular networks: theory and experiment. Granular Matter. 19, 59 (2017).

13. Liu L., James G., Kevrekidis P., Vainchtein A.: Breathers in a locally resonant granular chain with precompression. Physica D. 331, 27 (2016).

14. Liu L., James G., Kevrekidis P., Vainchtein A.: Strongly nonlinear waves in locally resonant granular chains. Nonlinearity. 29, 3496 (2016).

15. Jayaprakash K.R., Starosvetsky Y., Vakakis A.F., Peeters M., Kerschen G.: Nonlinear normal modes and band zones in granular chains with no pre-compression. Nonlinear Dynam. 63, 359 (2011).

16. Boechler N., Theocharis G., Job S., Kevrekidis P.G., Porter M.A., Daraio C.: Discrete Breathers in One-Dimensional Diatomic Granular Crystals. Phys. Rev. Lett. 104, 244302 (2010).

17. Theocharis G., Boechler N., Kevrekidis P.G., Job S., Porter M.A., Daraio C.: Discrete Breathers in One-Dimensional Diatomic Granular Crystals. Phys. Rev. E 82, 056604 (2010).

18. Korznikova, E.A., Morkina, A.Y., Singh, M. et al.: Effect of discrete breathers on macroscopic properties of the Fermi-Pasta-Ulam chain. Eur. Phys. J. B, 93, 123 (2020).

19. Singh, M., Morkina, A.Y., Korznikova, E.A. et al.: Effect of Discrete Breathers on the Specific Heat of a Nonlinear Chain. J Nonlinear Sci. 31, 12 (2021).

20. Sato M., Hubbard B.E., Sievers A.J., Ilic B., Craighead H.G.: Management of localized energy in discrete nonlinear transmission lines. Europhys. Lett. 66, 318 (2004).

21. Stearrett R., English L.Q.: Experimental generation of intrinsic localized modes in a discrete electrical transmission line. J. Phys. D: Appl. Phys. 40, 5394 (2007).

22. Gomez-Rojas A., Halevi P.: Discrete breathers in an electric lattice with an impurity: Birth, interaction, and death. Phys. Rev. E. 97, 022225 (2018).

23. Palmero F., English L.Q., Chen X.-L., Li W.: Experimental and numerical observation of dark and bright breathers in the band gap of a diatomic electrical lattice. J. Cuevas Maraver, P.G. Kevrekidis, Phys. Rev. E 99, 032206 (2019).

24. Shelepev I.A., Bayazitov A.M., Korznikova E.A: Modeling of supersonic crowdion clusters in FCC lattice: Effect of the interatomic potential. Journal of Micromechanics and Molecular Physics, 10(1), 2050019 (2021).

25. Kolesnikov I.D., Shepelev I.A. Excitation and propagation of 1-crowdion in bcc niobium lattice. Materials Technologies Design, 4, 5–10 (2022).

26. Yankovskaya U.I., Zakharov P.V. Heat resistance of a Pt crystal reinforced with CNT's. Materials Technologies Design, 3, 64–67 (2021).

27. Chen H-Y, Tsou N-T. The Analysis of Thermal-Induced Phase Transformation and Microstructural Evolution in Ni-Ti Based Shape Memory Alloys by Molecular Dynamics. Materials Technologies Design, 120, 319–332 (2019).

ОБ АВТОРАХ

МОРКИНА Алина Юрьевна, аспирант Института проблем сверхпластичности металлов РАН, младший научный сотрудник НИЛ «Металлы и сплавы при экстремальных воздействиях», ассистент кафедры «Материаловедение и физика металлов», Уфимский университет науки и технологий.

БЕБИХОВ Юрий Владимирович, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры электроэнергетики и автоматизации промышленного производства Политехнического института в г. Мирном (филиал Северо-Восточного федерального университета).

РАХМАТУЛЛИНА Жанна Геннадьевна, кандидат физико-математических наук, младший научный сотрудник Института проблем сверхпластичности металлов РАН.

СЕМЕНОВА Мария Николаевна, кандидат физико-математических наук, младший научный сотрудник Института проблем сверхпластичности металлов РАН, доцент кафедры фундаментальной и прикладной математики Политехнического института в г. Мирном (филиал Северо-Восточного федерального университета).

ДМИТРИЕВ Сергей Владимирович, доктор физико-математических наук, профессор, зав. лабораторией «Нелинейная динамика молекул и кристаллов» Института физики молекул и кристаллов Уфимского федерального исследовательского центра РАН.

METADATA

Title: Effect of discrete breather ensembles on the heat capacity of nonlinear one-dimensional crystals.

Authors: A.Y. Morkina[1,2], Y.V. Bebikhov[2], Z.G. Rakhmatullina[3], M.N. Semenova[4], S.V. Dmitriev[5]

Affiliation:

[1,3,4]Ufa University of Science and Technology

[2]Mirny Polytechnic Institute (branch) of North-Eastern Federal University

[4]Institute for Problems of Superplasticity of Metals RAS

[5]Ufa Federal Research Center RAS

Email: alinamorkina@yandex.ru

Language: Russian.

Source: Vestnik UGATU (scientific journal of Ufa University of Science and Technology), vol. 27, no. 4 (102), pp. 50-58, 2023. ISSN 2225-2789 (Online), ISSN 1992-6502 (Print).

Abstract: There are numerous works studying the processes of generation of crystal lattice defects due to the fact that this process is the root cause of a change in a set of properties of a material. An atom's abandonment of the equilibrium state always takes place by overcoming potential barriers through a transition from a dynamic defect to a topological one. Examples of dynamic defects are fluctuations and discrete breathers. Experimental and molecular dynamics studies have confirmed that discrete breathers (DBs) can be excited in various crystal lattices, and when interacting with point defects, they can reduce the potential barrier to their migration. In this work, we model a nonlinear one-dimensional crystal with particles whose interaction is described by a linear interparticle and nonlinear local potential. DBs in quantities from 1 to 7 and with an oscillation amplitude from 0.5 to 3 were introduced into a crystal with a hard or soft type of nonlinearity. It was found that the number of DBs in the ensemble does not affect the change in heat capacity, but a dependence of the heat capacity on the specified amplitude of the DB oscillation was revealed. In the case of a soft (hard) type of nonlinearity, the value of the heat capacity increases (decreases) with increasing oscillation amplitude.

Key words: discrete breathers, local potential, molecular dynamics, heat capacity

About authors:

MORKINA, Alina Yurievna, postgraduate student at the Institute of Metal Superplasticity Problems of the Russian Academy of Sciences, junior researcher at the Research Laboratory "Metals and Alloys under Extreme Impacts", Assistant Professor at the Department of Materials Science and Physics of Metals, Russia.

BEBIKHOV, Yuri Vladimirovich, Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor at the Mirny Polytechnic Institute (branch) of North-Eastern Federal University, Russia.

RAKHMATULLINA, Zhanna Gennadievna, Candidate of Physical and Mathematical Sciences, junior researcher at the Institute for Problems of Superplasticity of Metals RAS, Russia.

SEMENOVA, Maria Nikolaevna, Candidate of Physical and Mathematical Sciences, junior researcher at the Institute for Problems of Superplasticity of Metals RAS, Associate Professor at the Mirny Polytechnic Institute (branch) of North-Eastern Federal University, Russia.

DMITRIEV, Sergey Vladimirovich, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Head of the Laboratory "Nonlinear Dynamics of Molecules and Crystals" of the Institute of Molecule and Crystal Physics, Ufa Federal Research Center RAS, Russia.