

**Manifestation of instability in clusters of high-amplitude excitations  
crystal lattice of composition A3B**

**Проявление неустойчивости в кластерах высокоамплитудных возбуждений  
кристаллической решетки состава A3B**

*I. S. Lutsenko<sup>1</sup>, P. V. Zakharov<sup>2a</sup>, Yu. R. Sharapova<sup>3b</sup>, M. D. Starostenkov<sup>1</sup>  
И. С. Луценко<sup>1</sup>, П. В. Захаров<sup>2a</sup>, Ю. Р. Шаранова<sup>3b</sup>, М. Д. Старостенков<sup>1</sup>*

<sup>1</sup> Polzunov Altai State Technical University, Prosp. Lenina 46, Barnaul, 656038, Russia

<sup>2</sup> Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, Polytechnicheskaya str. 29, St. Petersburg, 195251, Russia

<sup>3</sup> Sibintek Internet company LLC, Zagorodnoye road 1, Moscow, 117152, Russia

<sup>a</sup> zakharovpvl@rambler.ru, <sup>b</sup> SharapovaYuR@sibintek.ru

<sup>1</sup> Алтайский государственный технический университет им. И. И. Ползунова, Россия, 656038, Барнаул, пр. Ленина, 46

<sup>2</sup> Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Россия, 195251, Санкт-Петербург, ул. Политехническая, 29

<sup>3</sup> ООО Интернет Кампания Сибинтек, Россия, 117152, Москва, Загородное шоссе, 1

<sup>a</sup> zakharovpvl@rambler.ru, <sup>b</sup> SharapovaYuR@sibintek.ru

#### ABSTRACT

Currently, various processes associated with the operation and production of materials are increasingly associated with the presence of the crystal lattice in a state far from equilibrium. In this case, the processes of localization of the energy present in the material in such cases are of particular importance. In some cases, the localization of all energy in the lattice can occur on one or several particles, which in turn increases the probability of the formation of a topological defect that can affect the properties of materials. In this vein, the effects of self-organization are among the most promising for the study of phenomena. Objects such as discrete breathers and their clusters represent a large scope for research in this aspect. In this work, a molecular dynamics study of the process of self-organization in the system is carried out. Clusters of breathers obtained by removing the atoms of the light sublattice in a Pt<sub>3</sub>Al crystal from equilibrium are considered. Numerical characteristics are obtained for various initial states of the simulation. The data obtained may indicate that the transfer of energy from some breathers to others leads not so much to a decrease in their number as to an increase in the life of a part of the oscillations. There is a kind of replenishment of some at the expense of others, which is a manifestation of the self-organization of the system of nonlinear oscillators. Anomalies in the distribution of atomic vibration amplitudes are revealed, indicating the possibility of the formation of unstable discrete excitations along different crystallographic directions. The evolution of the system can lead to dynamic clustering (distribution) of high-amplitude excitations for concentrations of more than 25% of excited atoms. The results obtained can be useful in studying the interaction of solitons.

#### KEYWORDS

Molecular dynamics; nonlinear interactions; localization; discrete breathers.

#### АННОТАЦИЯ

В настоящее время различные процессы, связанные с эксплуатацией и производством материалов, все чаще ассоциированы с нахождением кристаллической решетки в далеком от равновесия состоянии. При этом особое значение приобретают процессы локализации энергии, присутствующей в материале в таких случаях. В ряде случаев локализация всей энергии в решетке может происходить на одной или нескольких частицах, что в свою очередь повышает вероятность образования топологического дефекта, способного влиять на свойства материалов. В этом ключе эффекты самоорганизации являются одними из наиболее перспективных для изучения явлений. Большой простор для исследований в данном аспекте представляют такие объекты, как дискретные бризеры и их кластеры. В данной работе проведено молекулярно-динамическое исследование процесса самоорганизации в системе. Рассматриваются кластеры бризеров, полученные выведением из равновесия атомов легкой под-

решетки в кристалле Pt<sub>3</sub>Al. Получены численные характеристики для различных начальных состояний симуляции. Полученные данные могут свидетельствовать о том, что передача энергии от одних бризеров к другим ведет не столько к уменьшению их количества, сколько к увеличению жизни части колебаний. Происходит своеобразная подпитка одних за счет других, что является проявлением самоорганизации системы нелинейных осцилляторов. Выявлены аномалии в распределении амплитуд колебаний атомов, указывающие на возможность образования нестабильных дискретных возбуждений по различным кристаллографическим направлениям. Эволюция системы может привести к динамической кластеризации (распределению) высокоамплитудных возбуждений для концентраций более 25% возбужденных атомов. Полученные результаты могут быть полезны при исследованиях взаимодействия солитонов.

#### КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА

Молекулярная динамика; нелинейные взаимодействия; локализация; дискретные бризеры.

### Введение

Среди всего разнообразия явлений в физике твердого тела, значимое место занимает явление самоорганизации вещества на атомном уровне. Качественное развитие в данном направлении способно дать существенный толчок как в фундаментальном понимании процессов, так и в прикладных аспектах науки. Самоорганизация невозможна без движения частиц, которое, в свою очередь, тесно связано с колебаниями. Одними из хорошо изученных объектов являются дискретные бризеры (ДБ), представляющие собой локализованные высокоамплитудные колебания частиц.

В связи с самоорганизацией важным является вопрос самопроизвольного зарождения в кристаллах подобных объектов. В литературе приводятся различные способы генерации колебаний, сходных с ДБ. В работах [1–3] рассмотрено зарождение бризеров под действием излучения и тепловых флуктуаций. В [4] демонстрируется иная причина для образования ДБ – Ян-Теллеровское искажение решетки. При искажении квазимолекул возникает значительная нелинейность, вызывающая, в свою очередь, локализованные колебания нескольких частиц. Авторами замечено, что данная структура обладает значительным временем жизни, причем солитон сохраняется даже при распаде исходной квазимолекулы.

Движущиеся ДБ, являясь крайне интересными для изучения объектами, также и довольно сложны для исследования из-за трудности их генерации и отслеживания. Одновременно с этим многие работы связаны с кластерами бризеров, которые могут порождать и движущиеся решения. В твердых телах существует большой массив данных для

кластеров ДБ в двумерных углеводородах [5–9]. Работа [5] демонстрирует зарождение и жизнь кластеров бризеров в графене. Показано, что зарождению бризеров способствует однородная деформация, которая добавляет в фононный спектр щель. В нормальном состоянии кластер стабилен и передачи энергии между бризерами не происходит, однако при некоторых соотношениях амплитуд колебаний частиц внутри кластеров все-таки начинается энергообмен. Существуют работы, посвященные и другим углеродным веществам. ДБ обнаружены в графене, являющимся полностью гидрогенизированным водородом. В данном веществе сохраняется возможность существования кластеров бризеров. В работе [6] авторы указывают на подобную с графеном ситуацию, причем взаимодействие бризеров происходит только при отрицательной фазе начальных колебаний, как для равных, так и для различающихся амплитуд. Стоит отметить, что взаимодействие бризеров может происходить даже при отсутствии «прямого» контакта между колеблющимися частицами, а именно, в графене наилучшим условием для энергообмена является расположение колеблющихся атомов водорода по разные стороны от плоскости графенового листа [9].

В объемных кристаллах также возможно существование кластеров ДБ, так в работе [10] показано их существование в кристалле NaCl. В данном случае кластер бризеров локализуется на одном атомном ряду и состоит из атомов, колеблющихся в противофазе. Большой интерес представляет феномен самозарождения колебаний на атомах, изначально не состоящих в кластере. Колебания при этом сонаправлены с исходными.

Также кластеры ДБ могут формироваться и в не кубических решетках. Авторами [11] демонстрируется возможность существования подобных явлений в решетке алмаза. Для запуска кластера в данном случае также производилось смещение атомов в противоположные стороны вдоль направления валентной связи. Таким образом формировалось ядро кластера. В течении жизни такой системы происходило перераспределение энергии между ДБ. Так в системах двойных бризеров происходит квазипериодический обмен энергией, обусловленный фазовой расстройкой между частицами. Иная картина происходит в тройном бризере, там имеет место явление усиления двух ДБ за счет третьего, из-за чего система становится двойной.

### 1. Модель и методика эксперимента

Моделирование производилось методом молекулярной динамики при помощи программного пакета LAMMPS. Для описания взаимодействия был использован хорошо зарекомендовавший себя потенциал, полученный методом погруженного атома (EAM). Для наилучшего соответствия модели реальному кристаллу были использованы периодические граничные условия по всем осям.

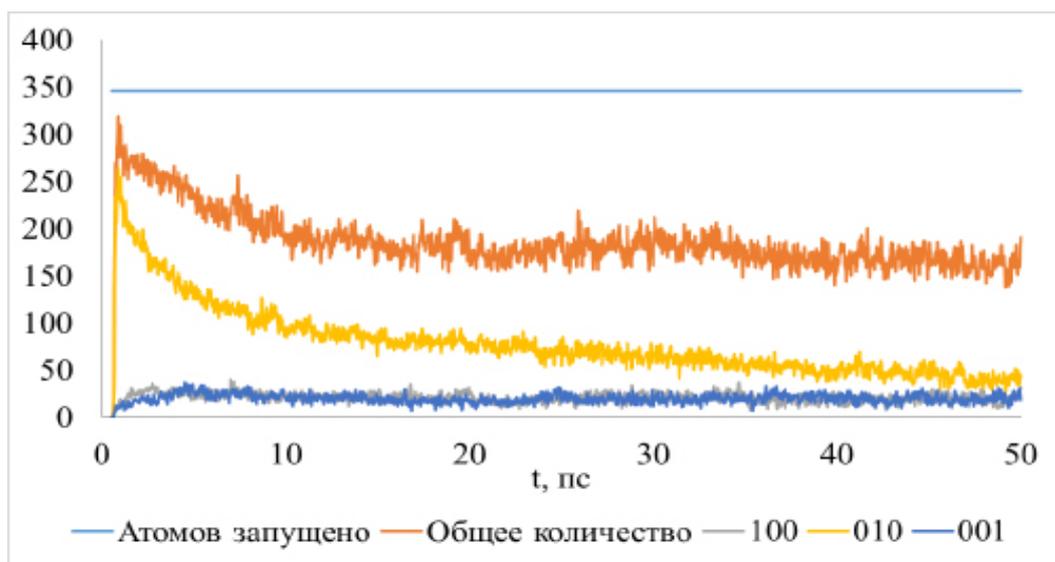
Модель представляет собой кристалл  $Pt_3Al$ , состоящий из 6912 атомов. В рамках задачи часть атомов алюминия выводилась из положения равновесия на  $0,7 \text{ \AA}$  вдоль направления  $010$ . Атомы для смещения составляли от 1 до 36% от числа всех атомов алюминия, так наибольшее количество отклоненных атомов составило 419, а наименьшее – 15. При этом половина из них отклонялась в направлении  $010$ , а другие в направлении  $0\bar{1}0$ . Таким образом формировалось два массива ДБ, находящихся в противофазе. Для корректного анализа из экспериментальных групп были исключены граничные слои атомов, что позволило избежать обнаружения ложных ДБ из-за перемещения атомов с одной стороны кристалла на другую, вызванных периодическими граничными условиями.

Для анализа использовалось программное обеспечение, рассчитывающее амплитуду, период и частоту колебаний всех атомов

по модельным данным. При подсчете, ДБ признавался любой атом, амплитуда колебаний которого превышала  $0,35 \text{ \AA}$ . Отдельно рассчитывались компоненты амплитуды по координатным осям, что позволило судить о количестве ДБ, совершающих колебания вдоль направлений, отличных от стартового. При этом наблюдается отличие в количестве бризеров, колеблющихся вдоль основных направлений от общего количества бризеров, что происходит из-за колебаний атомов с высокой амплитудой вдоль таких направлений как  $110$ ,  $011$  и более сложных, учесть которые не представляется возможным из-за огромного количества вариантов. Однако доля подобных колебаний достаточно невелика.

### 2. Результаты и обсуждение

Все бризеры инициировались отклонениями атомов вдоль направления  $010$ , однако в процессе жизни часть бризеров меняла полярность колебаний. Так на рис. 1 представлено распределение количества дискретных бризеров вдоль основных кристаллографических направлений для начальной концентрации возбуждений 30%. При данной концентрации ярко проявляется явление перехода части колебаний к новому направлению, практически отсутствующее при малых концентрациях бризеров. Отдельно следует отметить, что часть колебаний происходит по направлениям, отличным от основных, чем обусловлена разница в общем количестве бризеров и их сумме по  $100$ ,  $010$ ,  $001$ . Изменение полярности при этом имеет общий вид и для направления  $100$  и для  $001$ . Для запуска подобных изменений требуется наличие вокруг атома бризеров, энергия которых будет использована для перестройки, то есть имеет место рассеивание части энергии на этот процесс. Стоит упомянуть, что смена полярности колебаний одного атома способна влиять и на атомы, находящиеся по соседству вдоль нового направления колебаний, так в ряде случаев зарождаются колебания группы с ярко выраженным бризером в центре и колеблющимися с меньшей амплитудой по краям частицами.

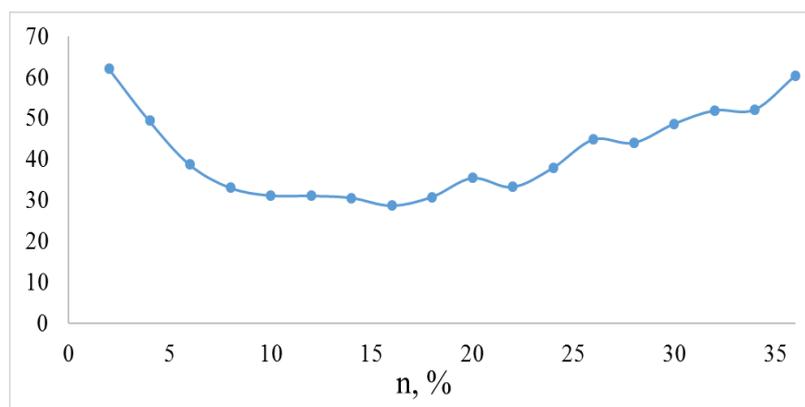


**Рис. 1.** Зависимость количества дискретных бризеров вдоль кристаллографических направлений от времени

**Fig. 1.** Dependence of the number of discrete breathers along crystallographic directions from time to time

На рис. 2 можно наблюдать зависимость количества бризеров от исходной концентрации. Данные взяты для времени в 40 пс, когда количество бризеров сводится к некоторому стабильному состоянию. На данном графике ось абсцисс – концентрации атомов, а ось ординат – доля в процентах бризеров от исходного числа атомов. Полученные данные

могут свидетельствовать о том, что передача энергии от одних бризеров к другим ведет не столько к уменьшению их количества, сколько к увеличению жизни части колебаний. Происходит своеобразная подпитка одних за счет других, что является проявлением самоорганизации системы нелинейных осцилляторов.



**Рис. 2.** Доля дискретных бризеров от количества возбужденных атомов для различных стартовых концентраций

**Fig. 2.** Fraction of discrete breathers of the number of excited atoms for different starting concentrations

### Заключение

В работе методом молекулярной динамики произведено исследование высокоамплитудных колебаний атомов легкой подрешетки в кристалле Pt<sub>3</sub>Al в широком количественном диапазоне. Выявлены аномалии в распределении амплитуд колебаний атомов, указывающие на возможность образования нестабильных дискретных возбуждений по различным кристаллографическим направлениям.

Эволюция системы может привести к динамической кластеризации (распределению) высокоамплитудных возбуждений для концентраций более 25% возбужденных атомов.

### Благодарности

*Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 21-12-00275.*

*The work was supported by the Russian Science Foundation (grant No. 21-12-00275).*

### Список литературы

1. Dubinko V. I., Selyshchev P. A., Archilla J. F. R. Reaction-rate theory with account of the crystal anharmonicity // *Phys. Rev. E*. 2011. V. 83, No. 4. Article number 041124. DOI: 10.1103/PhysRevE.83.041124.
2. Dubinko V. I., Piazza F. On the role of disorder in catalysis driven by discrete breathers // *Letters on Materials*. 2014. V. 4, Iss. 4. P. 273–278. DOI: 10.22226/2410-3535-2014-4-273-278.
3. Dubinko V. I., Dubinko A. V. Modification of reaction rates under irradiation of crystalline solids: contribution from intrinsic localized modes // *Nuclear Inst. and Methods in Physics Research*, B. 2013. V. 303. P. 133–135. DOI: 10.1016/j.nimb.2012.10.014.
4. Slow relaxation, confinement, and solitons / L. S. Schulman et al. // *Phys. Rev. Lett.* 2002. V. 88, Iss. 22. Article number 224101. DOI: 10.1103/PhysRevLett.88.224101.
5. Baimova J. A., Dmitriev S. V., Zhou K. Discrete breather clusters in strained graphene // *Europhysics Letters*. 2012. V. 100, No. 3. Article number 36005. DOI: 10.1209/0295-5075/100/36005.
6. Graphane: discrete breathers for dehydrogenation / E. Korznikova et al. // *Materials Physics and Mechanics*. 2018. V. 35, Iss. 1. P. 71–79. DOI: 10.18720/MPM.3512018\_10.
7. Baimova J. Large systems of discrete breathers in graphene // *Letters on Materials*. 2016. V. 6, Iss. 1. P. 31–33. DOI: 10.22226/2410-3535-2016-1-31-33.
8. Baimova J., Lobzenko I. P., Dmitriev S. V. Clusters of discrete breathers in carbon and hydrocarbon nanostructures // *Materials Science Forum*. 2016. V. 845. P. 255–258. DOI: 10.4028/www.scientific.net/MSF.845.255.
9. Baimova J., Dmitriev S. Energy exchange between the discrete breathers in graphene // *Russian Physics Journal*. 2015. V. 58, No. 6. P. 785–790. DOI: 10.1007/s11182-015-0569-7.
10. Semenov A. S., Bebikhov Y. V., Kistanov A. A. Simulation of energy transport in crystal with NaCl structure assisted by discrete breathers // *Letters on Materials*. 2017. V. 7, Iss. 2. P. 77–80. DOI: 10.22226/2410-3535-2017-2-77-80.
11. Localized vibrational modes in diamond / R. Murzaev et al. // *Physics Letters A*. 2017. V. 381, Iss. 11. P. 1003–1008. DOI: 10.1016/j.physleta.2017.01.014.