

**MODULATION OF OSCILLATIONS OF NONLINEAR MODES  
ON THE CYLINDRICAL SURFACE OF  $A_3B$  CRYSTAL***Anton Ivanovich Cherednichenko<sup>1</sup>, Pavel Vasilyevich Zakharov<sup>2a</sup>*<sup>1</sup> Shukshin Altai State University for Humanities and Pedagogy, Vladimir Korolenko str. 53, Biysk, 659333, Russia<sup>2</sup> Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, Polytechnicheskaya str. 29, St. Petersburg, 195251, Russia<sup>a</sup> zakharovpvl@rambler.ru**ABSTRACT**

The work is devoted to the study of the nature of oscillations of nonlinear localized modes near the surface of a crystal with cylindrical symmetry. The topology of the surface has a significant effect on such oscillations. The properties of the oscillatory system were studied based on the position of discrete breathers and quasi-breathers. This allows you to compare characteristics with fluctuations in volume, highlight common features and differences. A model of an  $A_3B$  crystal with an  $L1_2$  superstructure and interaction parameters for  $Pt_3Al$  was considered. The size of the model was 18825 atoms, the radius of the cylinder was about 10 lattice parameters. Interatomic interactions were specified by the EAM potential. The nonlinearity of the bonds is most pronounced near the crystal surface; as a result of insignificant deviations from the equilibrium position, localized modes can be excited. Their properties depend on the position of the excited atoms on the crystal surface. The article considers two such variants of the arrangement of excited atoms. It is shown that the oscillations are of a complex nature. And the modulating component depends on the initial excitation conditions. The frequencies of localized surface modes and modulation frequencies were calculated for a wide range of initial amplitudes. Functional dependencies are selected to describe wave envelopes.

**KEYWORDS**

Nonlinear mode; surface; discrete breather; intermetallic compound; molecular dynamics.

**МОДУЛЯЦИЯ КОЛЕБАНИЙ НЕЛИНЕЙНЫХ МОД НА ЦИЛИНДРИЧЕСКОЙ  
ПОВЕРХНОСТИ КРИСТАЛЛА СОСТАВА  $A_3B$** *Антон Иванович Чередниченко<sup>1</sup>, Павел Васильевич Захаров<sup>2a</sup>*<sup>1</sup> Алтайский государственный гуманитарно-педагогический университет им. В. М. Шукшина, Россия, 659333, Бийск, ул. Владимира Короленко, 53<sup>2</sup> Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Россия, 195251, Санкт-Петербург, ул. Политехническая, 29<sup>a</sup> zakharovpvl@rambler.ru

## АННОТАЦИЯ

Работа посвящена исследованию характера колебаний нелинейных локализованных мод вблизи поверхности кристалла с цилиндрической симметрией. Топология поверхности оказывает существенное влияние на такого рода колебания. Свойства колебательной системы изучались, исходя из позиции дискретных бризеров и квази-бризеров. Это позволяет сравнить характеристики с колебаниями в объеме, выделить общие черты и различия. Рассматривалась модель кристалла состава  $A_3B$  со сверхструктурой  $L1_2$ , с параметрами взаимодействия для  $Pt_3Al$ . Размер модели составил 18825 атомов, радиус цилиндра был порядка 10 параметров решетки. Межатомные взаимодействия задавались ЕАМ-потенциалом. Нелинейность связей наиболее ярко проявляется вблизи поверхности кристалла, в результате незначительных отклонений из положения равновесия возможно возбуждение локализованных мод. Их свойства зависят от положения возбужденных атомов на поверхности кристалла. Рассмотрены два таких варианта расположения возбужденных атомов. Показано, что колебания носят сложный характер. И модулирующая составляющая зависит от начальных условий возбуждения. Были рассчитаны частоты локализованных поверхностных мод и частоты модуляции для широкого диапазона начальных амплитуд. Подобраны функциональные зависимости для описания огибающих волны.

## КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА

Нелинейная мода; поверхность; дискретный бризер; интерметаллид; молекулярная динамика.

### Введение

В физике твердого тела отдельное место занимает изучение колебаний кристаллической решетки, в частности локализованные колебательные моды. В целом динамика периодических структур изучена хорошо, в том числе и при наличии дефектов, как точечных, так и протяженных. Однако остается ряд вопросов, связанных с ролью нелинейности атомных связей в локализации колебаний отдельных атомов и их групп. А также взаимодействие различных видов нелинейных мод со строго локализованными объектами, например, дискретными бризерами (ДБ), которые, в свою очередь, представляют собой локализованные высокоамплитудные колебания бездефектной решетки в объеме кристалла [1–3]. Следует делать оговорку относительно таких объектов в реальных моделях и экспериментах. В силу невозможности идеальной настройки начальных условий необходимо говорить о квази-бризерах [4] или квази-бризерных модах при наличии дисторсии решетки [5].

Передача энергии от поверхности материала в его объем может осуществляться по-

средством различных механизмов. Это могут быть ударные волны или классические упругие деформации решетки. Также существуют и более специфические механизмы, присутствующие некоторым системам. Например, эффект супратрансмиссии, заключающийся в передаче энергии на частотах вне спектра кристалла при достижении определенной амплитуды внешнего воздействия [6–9]. Во всех этих процессах в первую очередь участвуют поверхностные и приповерхностные слои атомов. Последующее развитие возмущения в кристаллической решетке во многом обусловлено поведением атомов на поверхности.

В данной работе рассматривается кристалл стехиометрии  $A_3B$  со сверхструктурой  $L1_2$ , с параметрами взаимодействия для  $Pt_3Al$ . Он хорошо изучен нами на предмет наличия различных видов локализованных возмущений в объеме кристалла. Речь идет о дискретных бризерах мягкого и жесткого типа нелинейности, уединенных волнах и нелинейных модах вблизи дефектов. В работе [10] было обращено внимание на возбуждение ДБ вдоль поверхности кристаллов и некоторые другие частные случаи.

Таким образом, крайне важно изучение поведения атомов вблизи поверхности. Здесь нами обнаружен эффект модуляции колебаний нелинейных мод легких атомов Al на цилиндрической поверхности кристалла в зависимости от их начальной амплитуды. Такой эффект исследуется впервые и может представлять существенный теоретический интерес для развития представлений о возбуждении локализованных поверхностных мод, а также природу дискретных бризеров. При этом сами ДБ могут выступать в роли очагов неустойчивости и приводить к существенным изменениям системы [11, 12], либо возникать за счет флуктуаций в различных колебательных системах [13].

### 1. Модель и методика эксперимента

Моделирование колебаний поверхностных атомов осуществлялось методом молекулярной динамики при помощи программного пакета LAMMPS. Межатомные взаимодействия были заданы EAM-потенциалом [14]. Такого рода потенциал удовлетворительно описывает свойства поверхностей металлов в отличие от парных потенциалов.

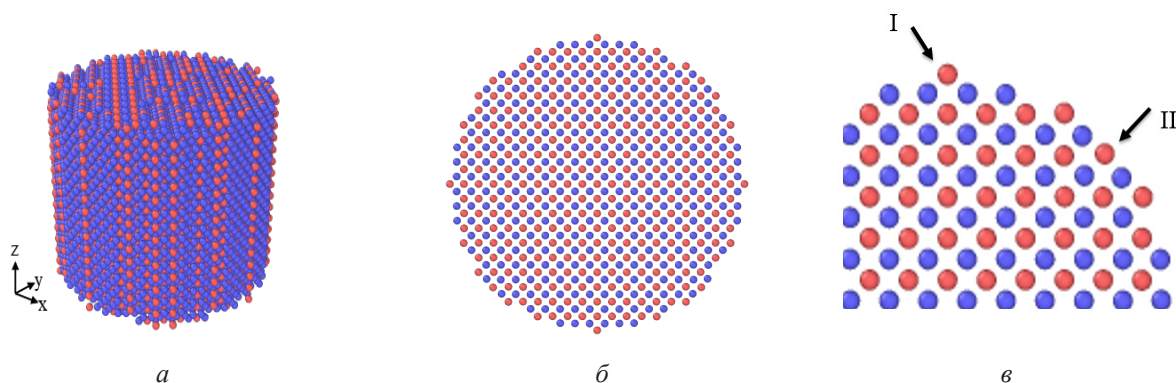
При создании модели использовалась единица измерения равная параметру кристаллической решетки сплава Pt и Al  $a = 3,876 \text{ \AA}$ . Модель кристалла  $Pt_3Al$  имеет форму цилиндра с радиусом  $10a$  и состоит из 18825 атомов (рис. 1, а). Атомы алюминия, находящиеся на поверхности кристалла в различных конфигурациях (рис. 1, б), выво-

дидись из равновесия перпендикулярно оси цилиндра с начальными амплитудами от 0,2 до 1  $\text{\AA}$ ; рассмотрены два варианта расположения атомов Al (рис. 1, в). Таким образом возбуждались нелинейные колебательные моды.

Визуализация процессов осуществлялась посредством программного комплекса OVITO [15].

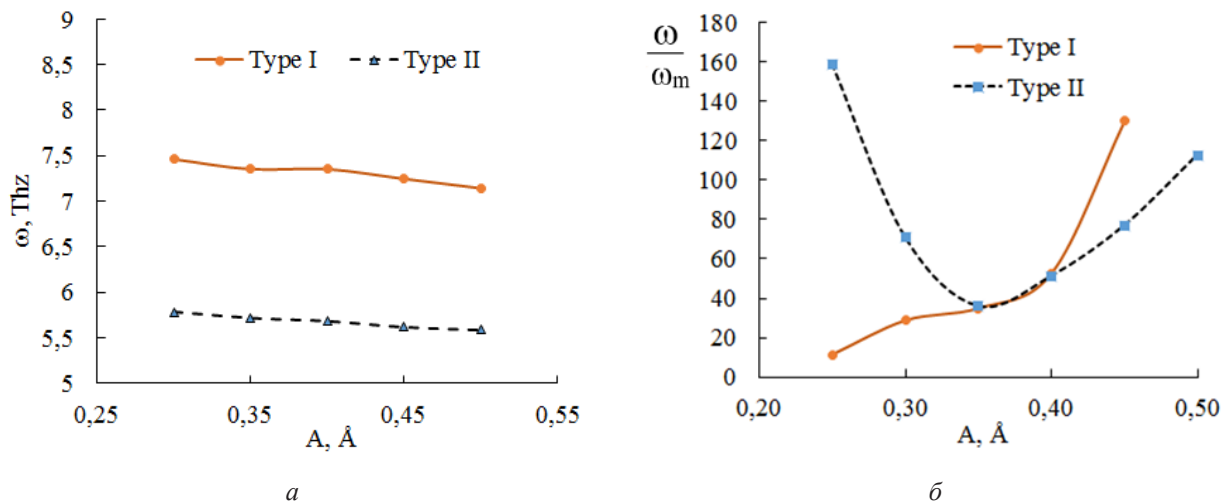
### 2. Результаты и обсуждение

Одной из основных характеристик локализованных мод является частотно-амплитудная зависимость. Она позволяет судить о типе нелинейности, связывает начальные отклонения с установившейся частотой, тем самым позволяя оценить энергетические характеристики воздействия для возбуждения таких колебаний. Нами получены такие зависимости на рис. 2, а. Более сильная связь для второго типа положения атома Al на поверхности приводит к погружению частоты ближе к оптической ветви спектра, но в то же время не передавая энергию в кристалл ввиду смещения центра колебания атома от поверхности. Первый же тип расположения атома Al имеет меньшую связь с кристаллом и как следствие более высокие частоты. Это наглядно демонстрирует влияние рельефа поверхности на характеристики таких колебаний. Отметим, что тенденция уменьшения частоты с увеличением амплитуды характерна для обоих рассмотренных конфигураций атомов, что свидетельствует о мягком типе нелинейности в данном случае.



**Рис. 1.** Модель кристалла  $Pt_3Al$ :  
а – трехмерный вид; б – поперечный срез; в – две рассмотренные конфигурации атомов

**Fig. 1.** Model of a  $Pt_3Al$  crystal:  
а – three-dimensional view; б – cross section; в – two atomic configurations considered

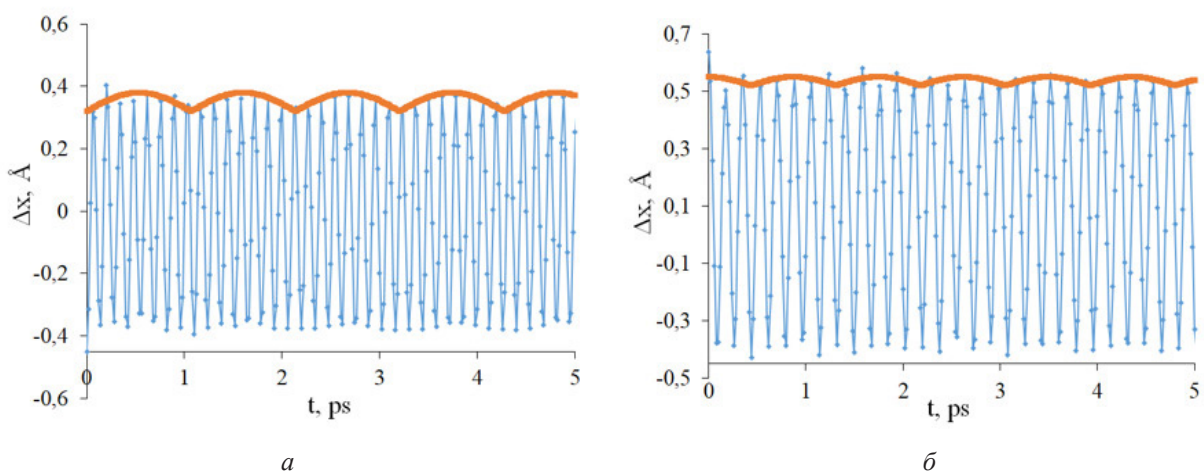


**Рис. 2.** Частотно-амплитудные характеристики для двух конфигураций атомов Al: *a* – собственная зависимость частоты от амплитуды; *б* – отношение частоты нелинейной локализованной моды  $\omega$  к частоте модуляции  $\omega_m$

**Fig. 2.** Frequency-amplitude characteristics for two configurations of Al atoms: *a* – intrinsic dependence of frequency on amplitude; *б* – ratio of the frequency of the nonlinear localized mode  $\omega$  to the modulation frequency  $\omega_m$

Как было сказано выше, колебания носили сложный характер. Кроме непосредственно колебания самого атома Al, периодически смещался и центр его колебаний, т.е. можно говорить о модуляции колебаний (рис. 3). При величине начальной амплитуды в диапазоне 0,3–0,55 Å эффект модуляции проявляется явно. При всех других амплитудах модуляция не прослеживается.

Частота модуляции проявляла себя по-разному для различных конфигураций. Зависимость отношения частоты локализованной моды к частоте модуляции приведены на рис. 2, б. Примечательным является изменение зависимости для конфигурации type II. Видимо, это связано со смещением центра колебаний с ростом начальной амплитуды, что приводит к смене характера зависимости.



**Рис. 3.** Проявление модуляции колебаний при начальной амплитуде 0,45 Å с обозначением огибающих: *a* – для конфигурации type I; *б* – для конфигурации type II

**Fig. 3.** Manifestation of oscillation modulation at an initial amplitude of 0.45 Å s designation of envelopes: *a* – for type I configuration; *б* – for type II configuration

**Таблица 1.** Функциональные зависимости огибающих**Table 1.** Functional dependencies of envelopes

Конфигурация атома Al/ Al atom configuration	Начальная амплитуда A, Å/ Initial amplitude A, Å	Огибающая функция/ Envelope function
type I	0,45	$0,03 \cos 3,6t  + 0,52$
type I	0,50	$0,02 \sin 2,6t  + 0,57$
type I	0,55	$0,04 \sin 2,6t  + 0,61$
type II	0,35	$0,02 \sin 5,6t  + 0,265$
type II	0,40	$0,03 \sin 4,4t  + 0,3$
type II	0,45	$0,06 \sin 2,94t  + 0,32$
type II	0,50	$0,04 \cos 1,27t  + 0,38$

Для математического описания модуляции были подобраны характерные огибающие к зависимости смещения  $\Delta x$  от времени (рис. 3). Для обеих конфигураций они приведены в табл. 1.

Полученные результаты кроме качественного описания, позволяют оценить и численные характеристики колебаний. Так, по функциям из табл. 1 можно говорить о средней амплитуде колебаний атома и о характеристиках модуляции.

### Заключение

В данной работе методом молекулярной динамики проведено исследование колебаний атомов Al, расположенных на цилиндрической поверхности кристалла Pt<sub>3</sub>Al. Рассчитана зависимость частоты от амплитуды, установлено, что для двух рассмотренных конфигураций она соответствует мягкому типу нелинейности. Показано, что такие колебания имеют сложный характер, проявляющийся в смещении центра колебаний атома относительно поверхности кристалла. Это можно трактовать как модулированные колебания. В качестве описания модуляции приведены математические функции, описывающие огибающие зависимости координаты атома Al от времени. Так же рассчитаны частоты таких смещений и приведена зависимость отношения основной частоты к модулирующей.

### Благодарности / Acknowledgments

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, грант

№ 21-12-00275. Часть результатов была получена с использованием вычислительных ресурсов суперкомпьютерного центра Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.

The work was supported by the Russian Science Foundation (grant No. 21-12-00275). Some of the results were obtained using the computing resources of the supercomputer center of Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Flach S., Gorbach A. Discrete breathers – Advances in theory and applications // Physics Reports. 2008. V. 467, Iss. 1–3. P. 1–116. DOI: 10.1016/j.physrep.2008.05.002.
2. Discrete breathers in crystals / S. V. Dmitriev et al. // Advances in the physical sciences. 2016. V. 186, No. 5. P. 471–488. DOI: 10.3367/UFNr.2016.02.037729.
3. Пространственно локализованные колебания в слабоустойчивых состояниях металлических систем / Р. Т. Мурзаев [и др.] // Известия высших учебных заведений. Физика. 2021. Т. 64, № 2 (758). С. 91–99. DOI: 10.17223/00213411/64/2/91.
4. Chechin G. M., Dzhelauhova G. S., Mehonoshina E. A. Quasibreathers as a generalization of the concept of discrete breathers // Physical Review. E. 2006. V. 74, Iss. 3. Article number 036608. DOI: 10.1103/PhysRevE.74.036608.
5. Захаров П. В., Ерёмин А. М., Старостенков М. Д. Влияние межузельных атомов на квази-бризерные моды в кристалле стехиометрии A<sub>3</sub>B с морзевским взаимодействием // Химическая физика и мезоскопия. 2016. Т. 18, № 1. С. 114–121.
6. Geniet F., Leon J. Energy transmission in the forbidden band gap of a nonlinear chain // Physical

Review Letters. 2002. V. 89, No. 13. Article number 134102. DOI: 10.1103/PhysRevLett.89.134102.

7. Waves transmission and amplification in an al model of microtubules / F. T. Ndjomatchoua et al. // Chaos. 2016. V. 26 (5). Article number 053111. DOI: 10.1063/1.4952573.

8. Захаров П. В., Дмитриев С. В., Корзникова Е. А. Молекулярно-динамический анализ транспорта энергии в кристалле Pt<sub>3</sub>Al при воздействии в запрещенной зоне спектра // Письма о материалах. 2021. Т. 11, № 3. С. 338–344. DOI: 10.22226/2410-3535-2021-3-338-344.

9. Нелинейная супратрансмиссия в кристалле Pt<sub>3</sub>Al при интенсивном внешнем воздействии / Черденченко А. И. [и др.] // Компьютерные исследования и моделирование. 2019. Т. 11, № 1. С. 109–117. DOI: 10.20537/2076-7633-2019-11-1-109-117.

10. Surface discrete breathers in Pt<sub>3</sub>Al intermetallic alloy / P. V. Zakharov et al. // Surface Science. 2019. V. 679. P. 1–5. DOI: S0039602818304382.

11. Modulational instability and discrete breathers in a nonlinear helicoidal lattice model / J. Ding et al. // Communications in Nonlinear Science and Numerical

Simulation. 2018. V. 59. P. 349–358. DOI: 10.1016/j.cnsns.2017.11.017.

12. Flach S., Miroschnichenko A., Fistul M. Wave scattering by discrete breathers // Chaos (Woodbury, N.Y.). 2003. V. 13, Iss. 2. P. 596–609. DOI: 10.1063/1.1561627.

13. Chaotic discrete breathers and their effect on macroscopic properties of triangular lattice / A. Upadhyaya et al. // Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation. 2022. V. 112. Article number 106541. DOI:10.1016/j.cnsns.2022.106541.

14. Zhou X. W., Johnson R. A., Wadley H. N. G. Misfit-energy-increasing dislocations in vapor-deposited CoFe/NiFe multilayers // Physical Review. 2004. V. 69, Iss. 14. Article number 144113. DOI: 10.1103/PhysRevB.69.144113.

15. Stukowski A. Visualization and Analysis of Atomistic Simulation Data with OVITO – the Open Visualization Tool // Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering. 2010. V. 18, No. 1. Article number 015012. DOI:10.1088/0965-0393/18/1/015012.