

МИНОБРНАУКИ РОССИИ

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«САРАТОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ
Н.Г.ЧЕРНЫШЕВСКОГО»

Кафедра радиотехники и электродинамики
наименование кафедры

**Динамика распространения локализованной кольцевой нелинейной
волны в углеродных нанотрубках типа "кресло"**

АВТОРЕФЕРАТ МАГИСТЕРСКОЙ РАБОТЫ

Студентки 2 курса 2233 группы

направления 03.04.03 «Радиофизика»

код и наименование направления

института физики

наименование института

Хохловой Марии Алексеевны

фамилия, имя, отчество

Научный руководитель

к.ф.-м.н., доцент

должность, уч. степень, уч. звание

дата, подпись

В.В. Шунаев

инициалы, фамилия

Зав. кафедрой:

д.ф.-м.н., профессор

должность, уч. степень, уч. звание

дата, подпись

О.Е. Глухова

инициалы, фамилия

Саратов 2022 г.

В двумерных атомных решетках возмущения с высокой энергией распространяются в виде локализованных волн – солитонов, бризеров, краудионов и т.д [1,2]. Если вдоль оси распространения волны элементы решетки распределены эквидистантно, как например, в треугольной решетке, то волна движется естественным образом [3-6]. Однако в решетках, атомы которых распределены неравномерно, как например в графене, быстрее происходит рассеяние энергии в невозмущенные ряды, и волны затухают быстрее [7,8]. Неисследованным является распространение кольцевых волн в углеродных нанотрубках, в которых начальное возмущение прикладывается ко всем торцевым атомам.

Целью работы является исследование динамики распространения локализованной солитонной кольцевой волны в углеродных нанотрубках типа «кресло» в зависимости от начальной скорости, заданных на торцевых атомах трубки и от радиуса трубки.

Объектами исследования являются углеродные нанотрубки (8,8), (9,9), (10,10).

Основным методом исследования является метод молекулярной динамики, в рамках которого сила, действующая на каждый атом, вычисляется через потенциал SCC DFTB [9].

Рассмотрим атомистическую модель УНТ (9,9) длиной 120 Å. Зададим начальную скорость равную 80 Å/пс на каждом концевом атоме зигзагообразного торца перпендикулярно трубке и запустим молекулярную динамику длиной 0.3 пс.

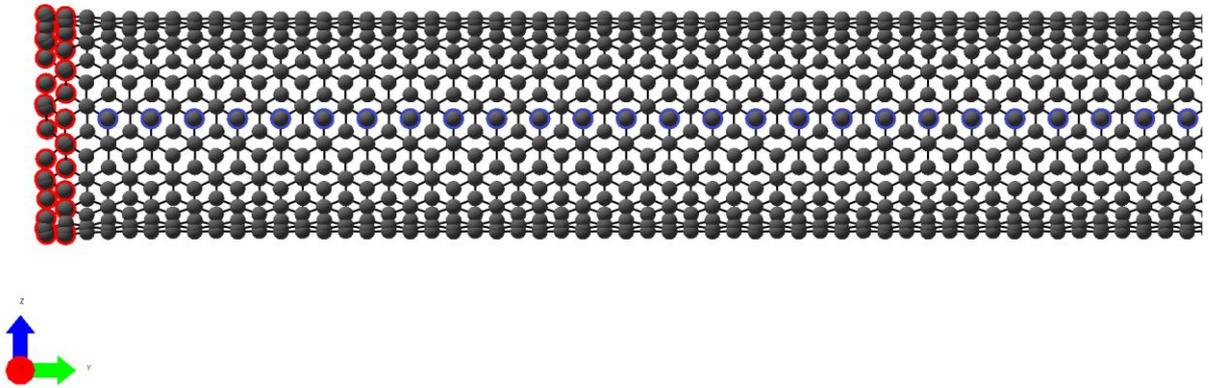
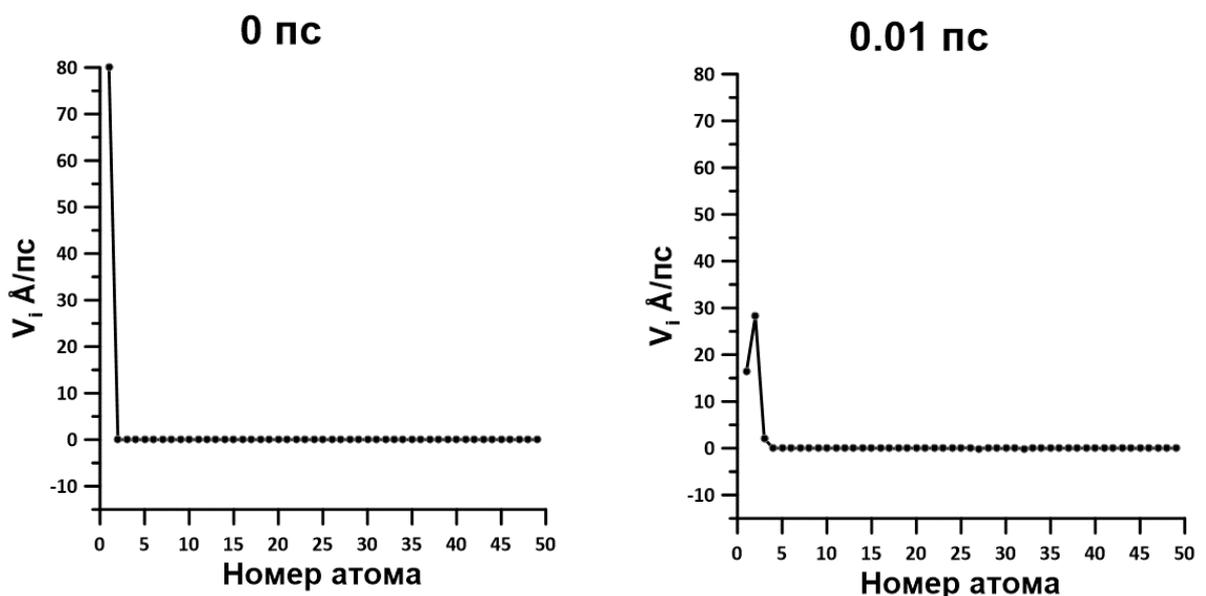


Рис. 1. Схематическое изображение фрагмента исследуемой нанотрубки (9,9). Солитонная кольцевая волна возбуждается за счет начальных импульсов, получаемых торцевыми атомами (выделены красным) и направленных вдоль оси x трубки. Скорости атомов в каждый момент времени фиксируются у ряда атомов, отмеченных синими окружностями.

Распределение продольной скорости атомов v_i в одном продольном ряду нанотрубки в различные моменты времени представлены на Рис. 2. Можно заметить, что уже через 0.05 пс образуется пик скорости, который сохраняется при дальнейшем распространении волны. Из Рис. 2 следует, что возбуждающаяся локализованная волна может быть классифицирована как сверхзвуковой солитон, поскольку никакие другие возмущения впереди нее не наблюдаются.



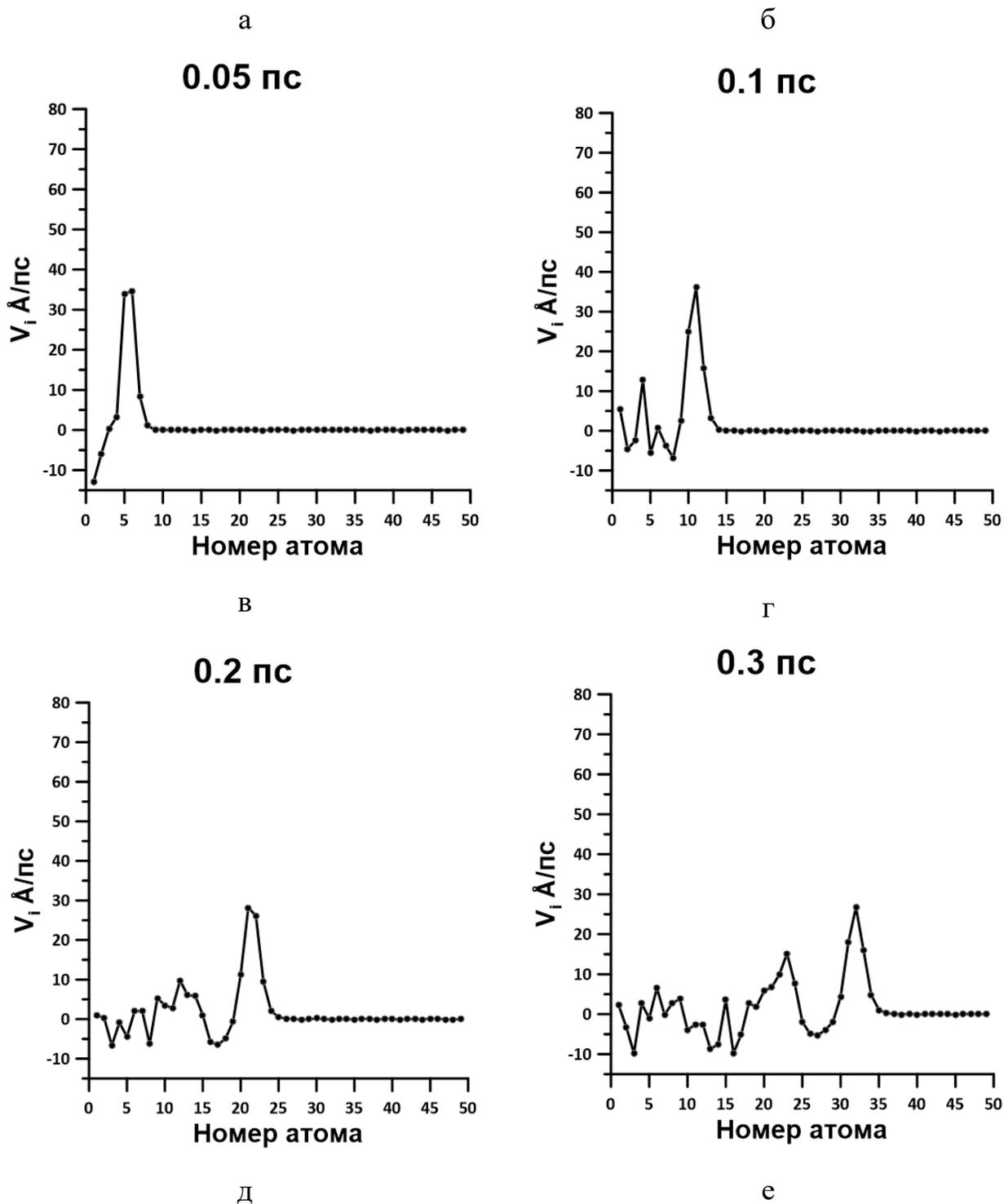


Рис. 2. Распределение продольной скорости атомов v_i в одном продольном ряде нанотрубки в различные моменты времени при начальной скорости торцевых атомов $v_0 = 80$ Å/пс.

Для проверки данной гипотезы используем как образец для задания начальных условий состояние $v_0 = 80$ Å/пс, $t = 0.2$ пс. На рис. 3 есть максимум скорости при $n = 21$, для $n < 19$ и $n > 24$ скорости полагаем равными нулю, а отклонения от равновесных значений считаем равными как

у $n = 19$. Солитон образуется сжатием трубки слева от солитона, то есть трубка слева от солитона находится в равновесном состоянии, но все частицы сдвинуты от своих равновесных положений, чтобы образовать компрессию в области солитона.

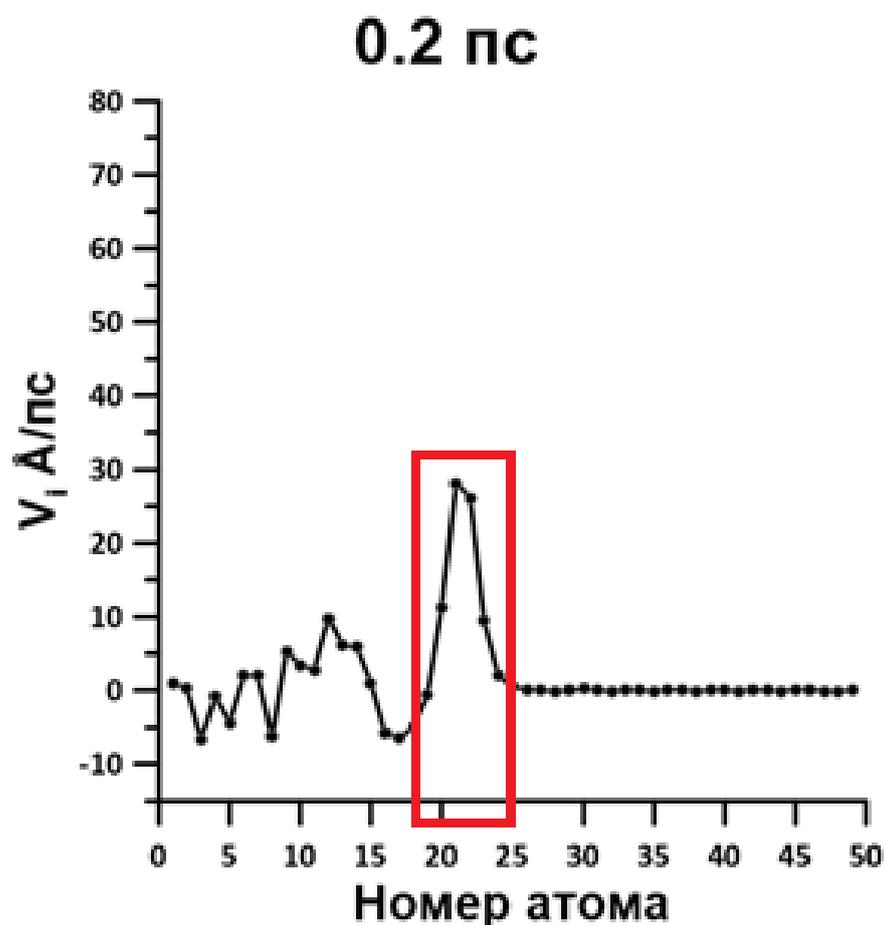
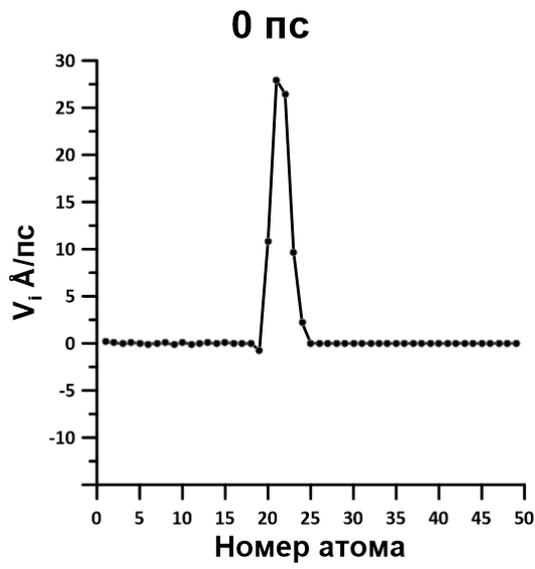
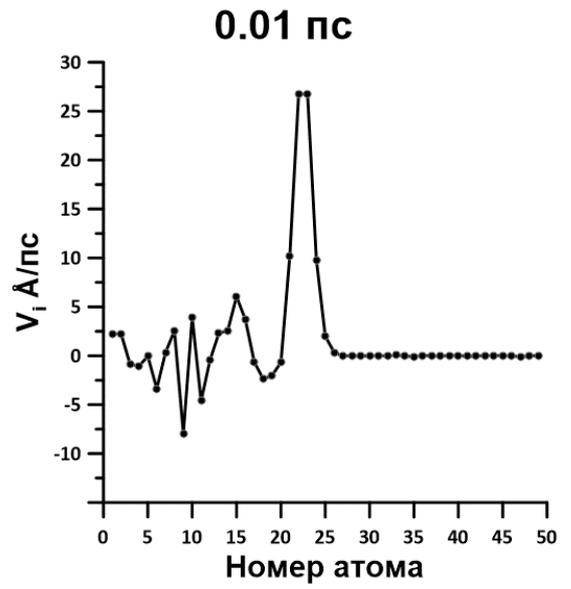


Рис. 3. График в момент времени 0.2 пс с заданной начальной скоростью 80 Å /пс, когда отчетливо сформировался солитон (выделен красным прямоугольником).

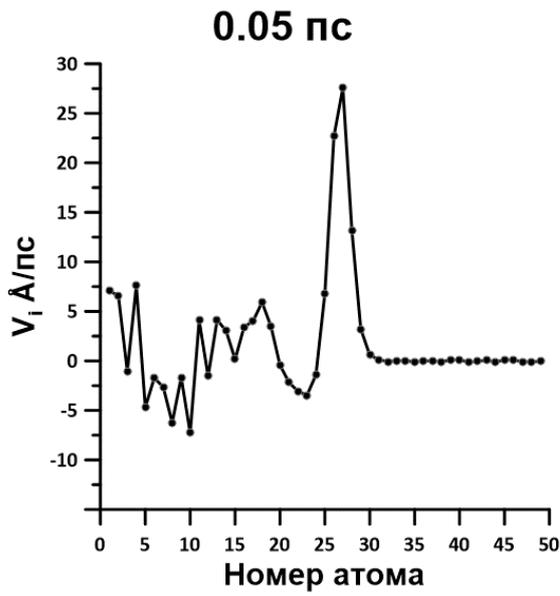
Запустив молекулярную динамику с состояния системы, указанного на Рис. 4а , отследим изменения скорости распространения солитона от номера атома в ряду. Можно заметить (Рис. 4), что возмущения решетки слева от солитона маленькие, а провал, расположенный прямо сзади основного пика, можно считать частью солитона.



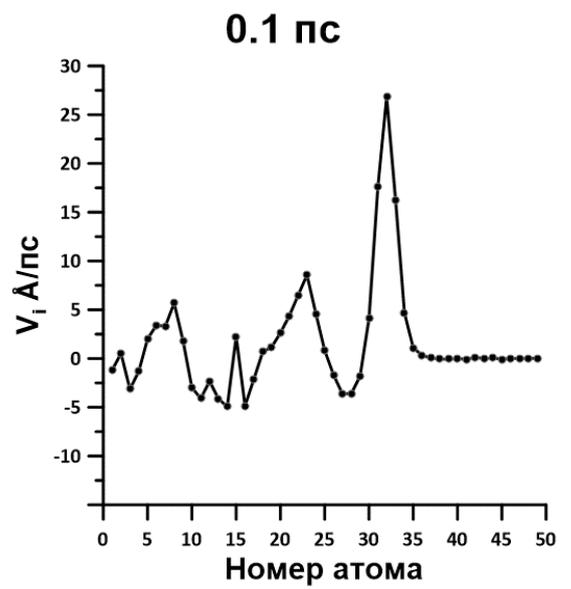
а



б



в



г

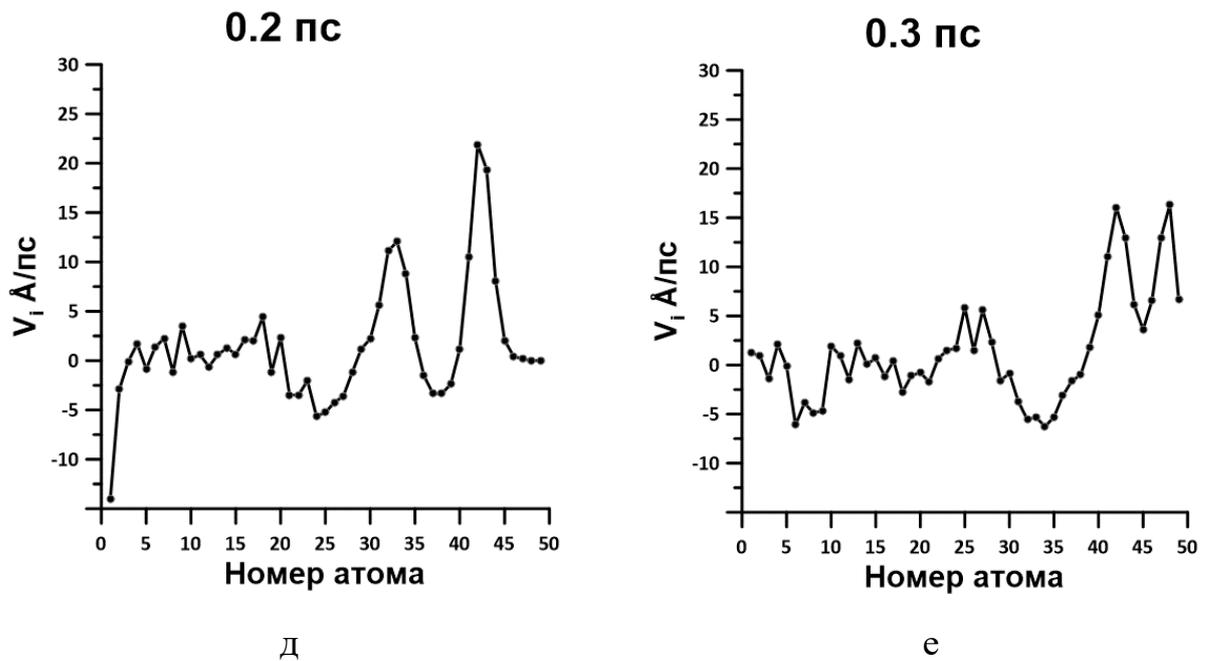
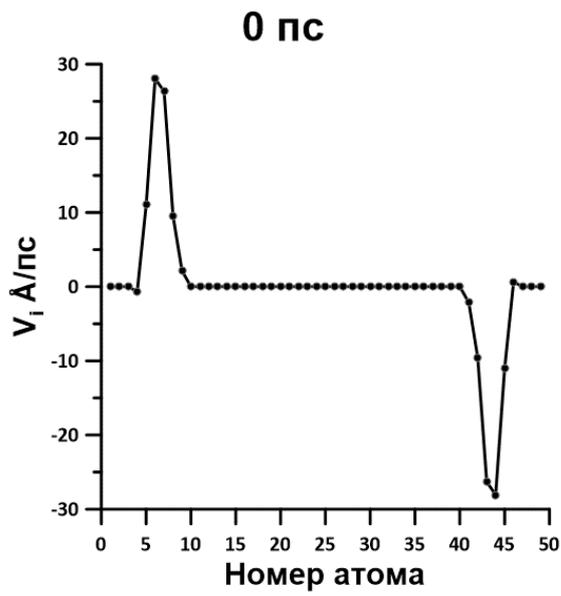
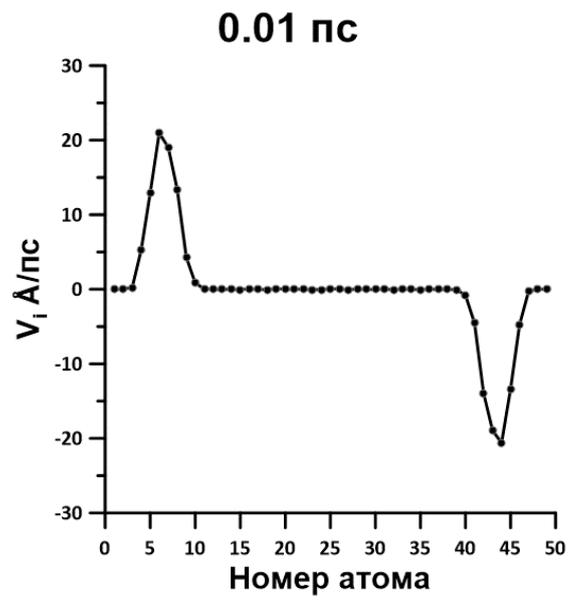


Рис. 4. Графики изменения скорости распространения солитона от номера атома в ряду. Солитон распространяется равномерно, сохраняя свою начальную максимальную скорость практически на всем промежутке времени. Возмущения сзади солитона незначительны.

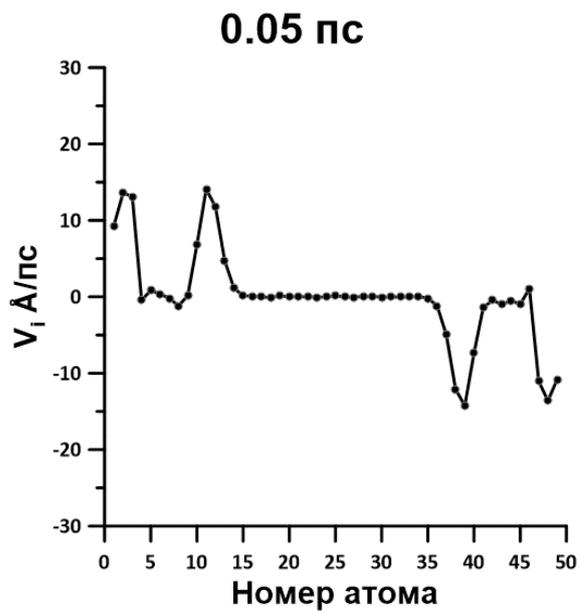
Рассмотрим встречу двух таких же солитонов, запускаемых с противоположных концов трубки. Для второго солитона возьмем зеркальное возбуждение, направленное справа налево. Расчеты проведем в течение, примерно, того же времени.



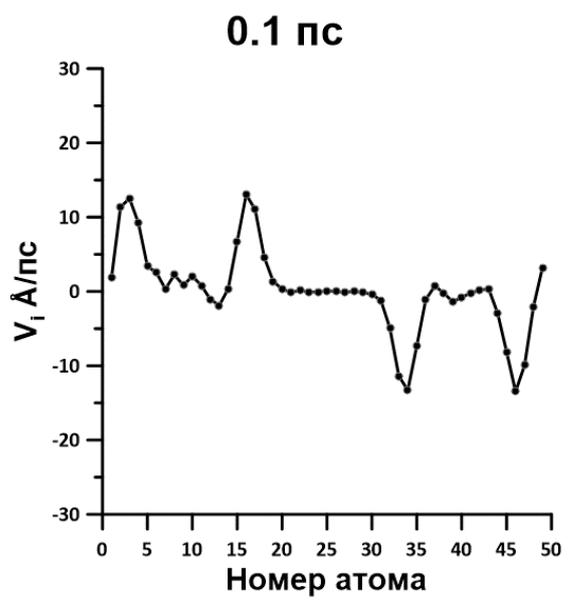
а



б



в



г

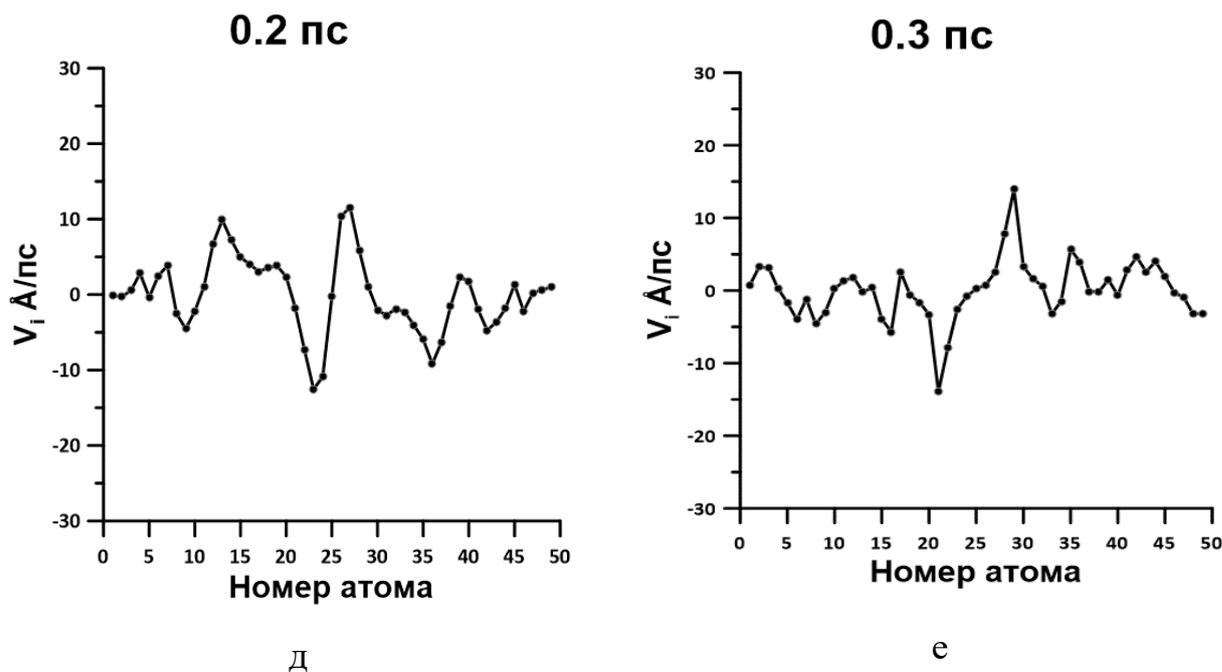


Рис. 5. Графики изменения скорости распространения двух направленных навстречу друг к другу симметричных солитонов. Симметрия распределения скорости атомов сохраняется на всем протяжении времени, даже после соударения солитонов.

Полученные графики (Рис. 5), во-первых, несомненно, подтверждают, что рассматриваемые локализованные волны – солитонного типа. Они проходят друг через друга при встрече, практически не изменяясь. Поэтому начальный солитон можно использовать без опасения, что сзади него сразу будет образовываться мощный хвост. Во-вторых, что очень существенно, обнаруженный солитон включает возмущения поперечных компонентов скорости и координат. Поверхность трубки становится слегка "рифленной".

Теперь оценим зависимость скорости кольцевого солитона в нанотрубке от величины скорости частиц торцевого слоя в начальный момент времени. Для этого проведем опыты, где начальная скорость на торцевых атомах УНТ (9,9) равна 20, 40, 60 и 100 Å /пс.

Рассмотрим максимальную скорость частиц в нанотрубке при различной начальной скорости частиц торцевого слоя. Из графика видно, что длительность переходного процесса равна примерно 0.025 пс, что следует из

зависимости максимальной по ансамблю скорости частиц от времени (Рис. б). Из графика видно, что к этому времени устанавливаются максимальные значения скорости частиц, примерно в два раза меньше, чем начальные скорости и которые потом почти не изменяется в течение оставшегося времени исследования. Заметно, что чем выше скорость начального возмущения, тем выше установившаяся скорость исследуемого солитона.

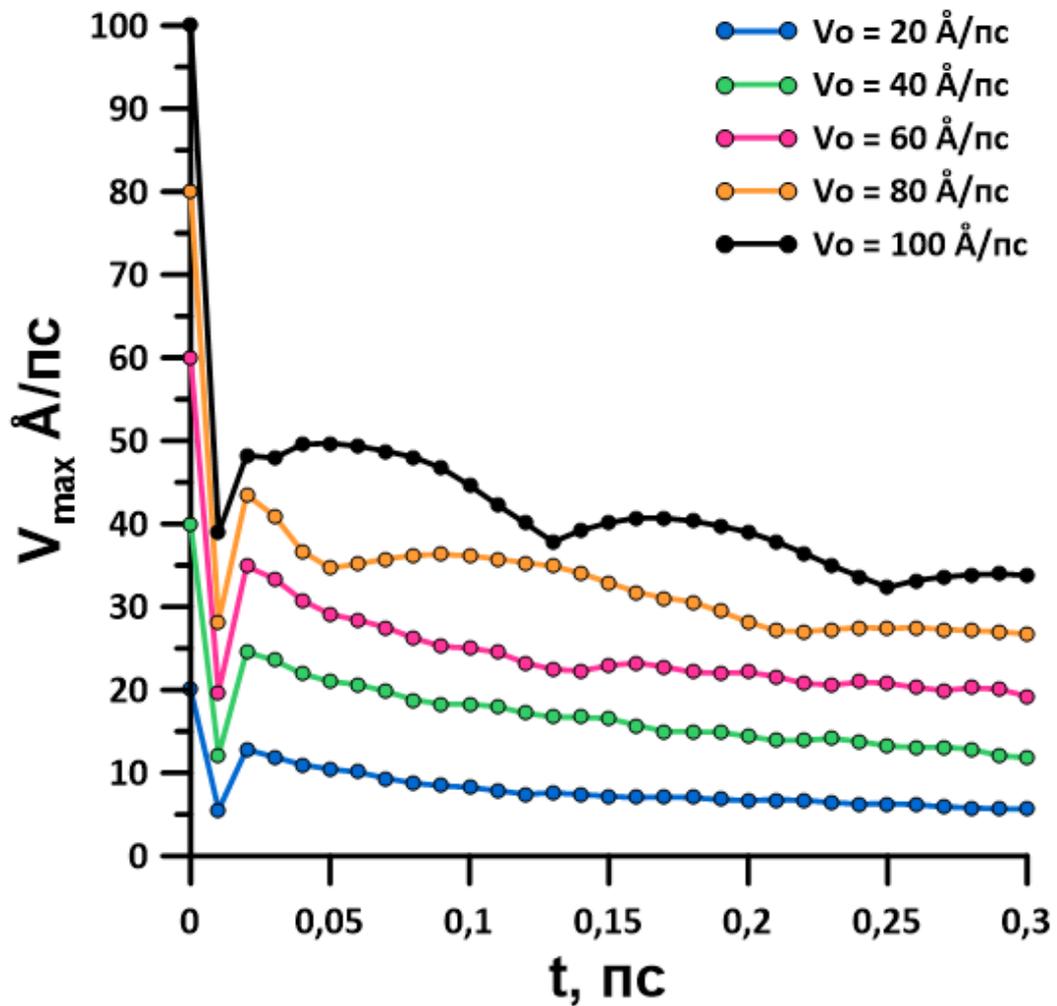


Рис. 6. Зависимость скорости кольцевого солитона в нанотрубке от величины скорости частиц торцевого слоя в начальный момент времени.

Также рассмотрим зависимость скорости кольцевого солитона в нанотрубке от величины скорости частиц торцевого слоя в начальный момент времени.

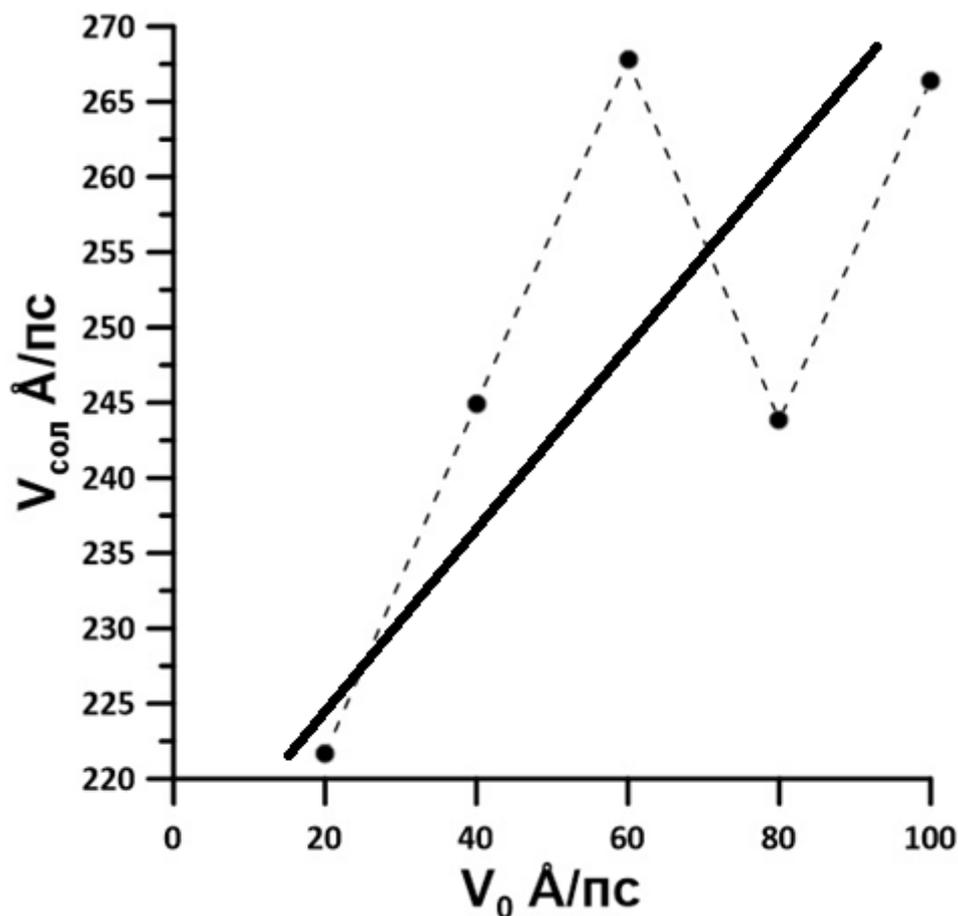


Рис. 7. Зависимость скорости кольцевого солитона в нанотрубке от величины скорости частиц торцевого слоя в начальный момент времени. Точками показаны значения скорости, рассчитанные на интервале времени (0.1 – 0.2) пс, штриховой линией зависимость скорости солитона при различных значениях начальной скорости, сплошной – аппроксимирующая линия.

Скорость солитона оценивалась на основе среднего расстояния, прошедшего солитоном на интервале времени 0.1 пс – 0.2 пс, при этом координата солитона ассоциировалась с максимумом в распределении скорости частиц. Поскольку это распределение является дискретной функцией, то точность определения скорости была не очень высокой из-за того, что пройденное за время 0.1 пс расстояние составляло не более 26.8 Å, а

шаг дискретизации составлял один гексагон. Из Рис. 7 видно, что с увеличением энергии начального возбуждения происходит увеличение скорости солитона до значений 245 и 270 Å/пс, что примерно в 1.22-1.35 раз превышает скорость звука в УНТ (200 Å/пс)

Теперь дадим оценку зависимости скорости кольцевого солитона в нанотрубке от размера радиуса УНТ. Для этого проведем опыты с УНТ (8,8), (9,9) и (10,10) Начальную скорость на торцевых атомах возьмем равной 80 Å/пс.

Рассмотрим максимальную скорость частиц в нанотрубке при различных радиусах УНТ.

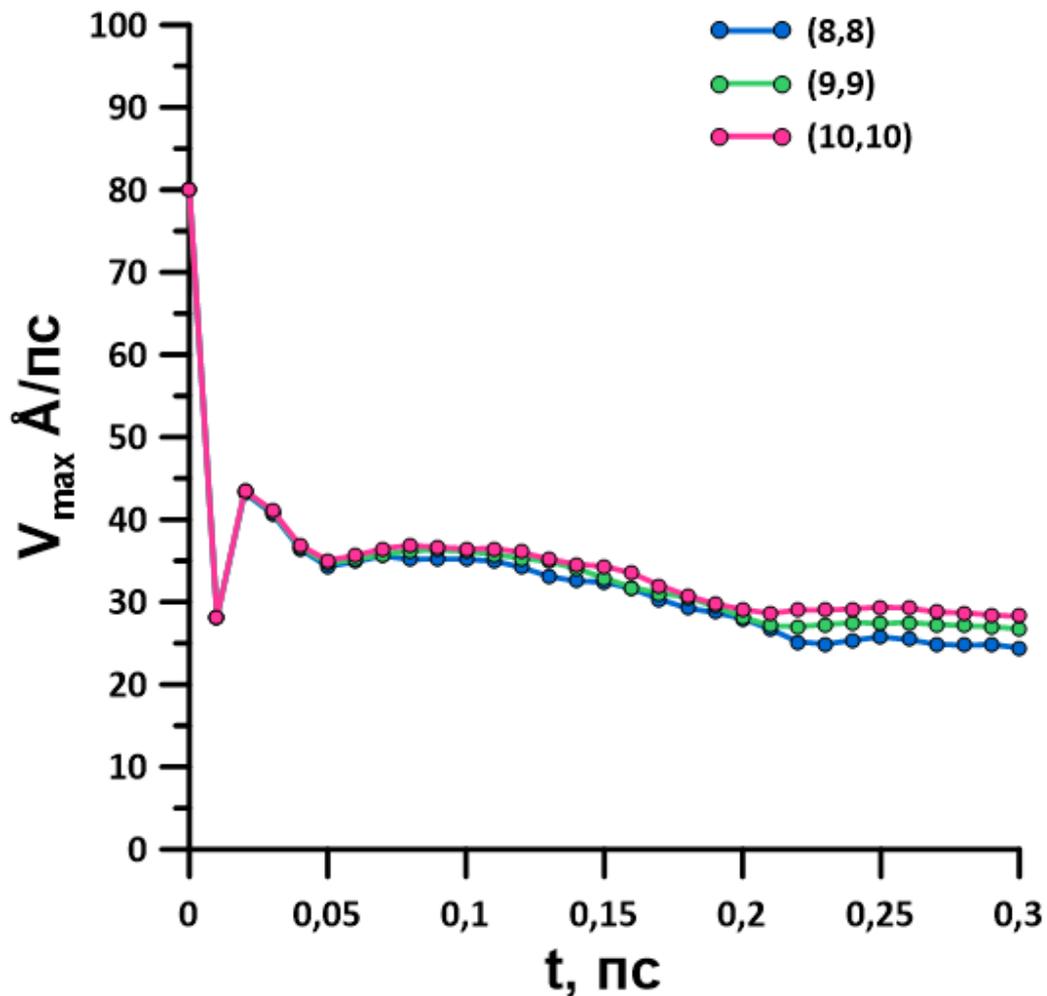


Рис. 8. Зависимость скорости кольцевого солитона в нанотрубках различных диаметров (начальная скорость $v_0 = 80$ Å/пс).

Длительность переходного процесса на данном графике также примерно равна 0.025 пс, к этому времени устанавливается максимальное значение скорости частиц, которое потом почти не изменяется в течение оставшегося времени исследования. Очевидно, что от размера радиуса УНТ скорость исследуемого солитона практически не зависит. Лишь после 0.2 пс можно заметить, что чем меньше радиус УНТ, тем меньше становится скорость солитона, но данные показатели практически минимальны.

Также составим график зависимости скорости кольцевого солитона в нанотрубке от размера радиуса УНТ.

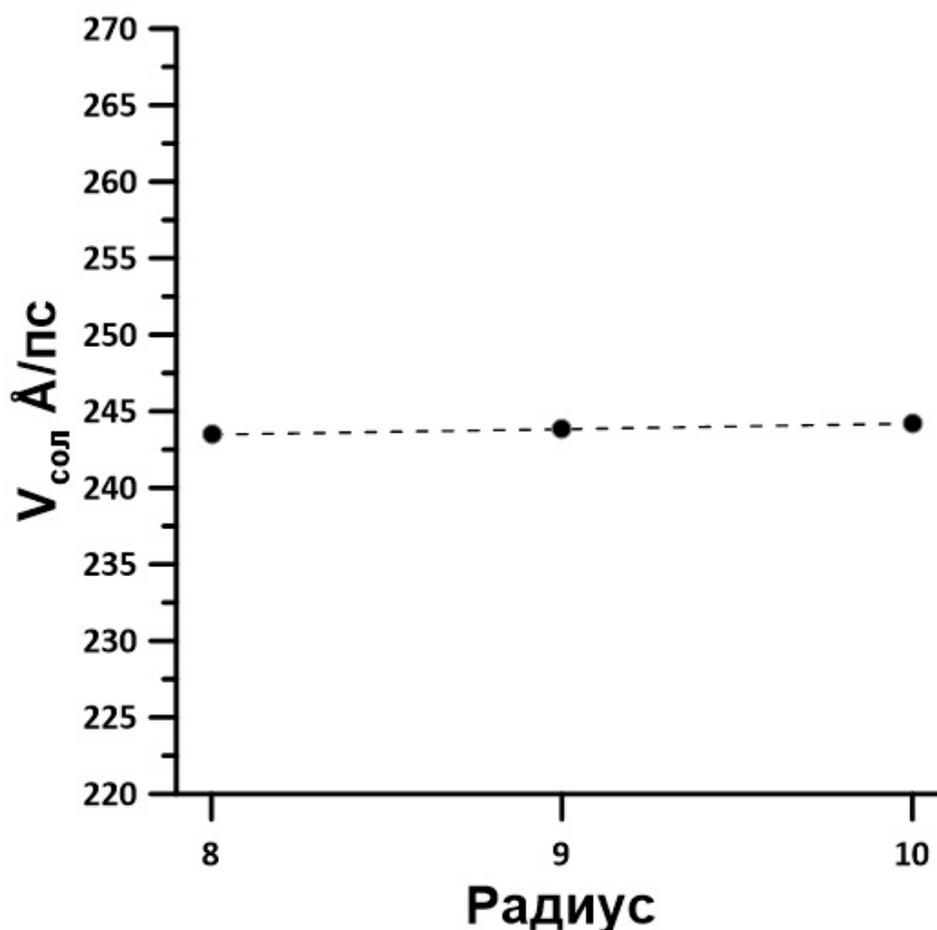


Рис. 9. Зависимость скорости кольцевого солитона в нанотрубке от величины радиуса УНТ. Точками показаны значения скорости, рассчитанные на интервале времени (0.1 – 0.2) пс, штриховой линией показана зависимость скорости солитона при различных значениях радиуса.

Скорость солитона оценивалась на основе среднего расстояния, прошедшего солитоном на интервале времени 0.1 пс – 0.2 пс, при этом координата солитона ассоциировалась с максимумом в распределении скорости частиц. Показано, что скорость солитона практически не меняется с увеличением радиуса УНТ (изменение скорости не превышает 0.4 Å/пс). В целом можно предположить отсутствие взаимосвязи между скоростью кольцевого солитона в нанотрубке и величиной радиуса УНТ. Данный вопрос требует отдельного рассмотрения для более точного определения этой зависимости – необходимо рассмотреть трубки других радиусов, а также рассмотреть процессы с другими начальными скоростями на торцевых атомах.

Выводы

- В рамках метода MD/DFTB была рассмотрена динамика распространения локализованной кольцевой нелинейной волны в углеродных нанотрубках типа "кресло"
- Однозначно показано, что рассматриваемые локализованные волны – солитонного типа. Показано, что чем выше скорость начального возмущения, тем выше установившаяся скорость исследуемого солитона.
- Установлено, что при высокой энергии начального возбуждения в период времени 0.1-0.2 пс солитон движется со скоростью в диапазоне 245 –270 Å/пс, что примерно в 1.22-1.35 раз превышает скорость звука в УНТ (200 Å/пс)
- Показано, что скорость солитона практически не меняется с увеличением радиуса УНТ

Список используемой литературы

1. M. Toda, *Theory of Nonlinear Lattices* (Springer, Berlin, 1989)
2. A.J. Sievers, S. Takeno, Phys. Rev. Lett. **61**, 970 (1988)
3. P.G. Kevrekidis, B.A. Malomed, Yu.B. Gaididei, Phys. Rev. E **66**, 016609 (2002)
4. A.P. Chetverikov, W. Ebeling, M.G. Velarde. Phys. D. **240**, 1954 (2011)
5. С.В.Дмитриев, Е.А.Корзникова, А.П.Четвериков, ЖЭТФ. **153(3)**, 417 (2018)
6. A.P. Chetverikov, S.V. Dmitriev, W. Ebeling, et al., Materials Physics and Mechanics **35**, 16 (2018)
7. J.L. Marin, J.C. Eilbeck, F.M. Russell, Phys. Lett. A **248**, 225 (1998)
8. I.A. Shepelev, A.P.Chetverikov, S.V.Dmitriev, et al., Comput. Mater. Sci. **177**, 109549 (2020)
9. M. Elstner, D. Porezag, G. Jungnickel, et al., Phys. Rev. B **58**, 7260 (1998)