

Національна академія наук України
Міністерство освіти і науки України
Національний університет «Полтавська політехніка імені Юрія Кондратюка»
Національний транспортний університет
Білоруський державний технологічний університет
Київський національний університет імені Тараса Шевченка
Національний університет оборони України ім. І. Черняховського
Харківський національний університет радіоелектроніки
Національний університет "Чернігівська політехніка"
Черкаський державний технологічний університет

МАТЕРІАЛИ

**П'ятої всеукраїнської
науково-технічної конференції**

***Комп'ютерна математика
в науці, інженерії та освіті***

(CMSEE-2020),

***присвяченої 90-річчю
Національного університету
«Полтавська політехніка імені Юрія Кондратюка»***

27 листопада 2020 року

Полтава
2020

5. *Kalmykov V., Vishnevskiy V., Masol D. Approximation of the Experimental Curves by Piecewise Smooth Functions. ICAICTSEE – 2015: proceedings of the 5th International Conf. on Application of Information and Communication Technology and Statistics in Economy and Education (Sofia, Bulgaria, November 13 – 14, 2015). Sofia, 2015. P. 322 – 330.*

УДК 004.94:534.16

МОДЕЛЮВАННЯ КООПЕРАТИВНИХ ЕФЕКТІВ У ДВОВИМІРНИХ НАНОСИСТЕМАХ

Зайка С.О., старший викладач, **Лобурець А.Т.**, к.ф.-м.н., доцент
*Національний університет
«Полтавська політехніка імені Юрія Кондратюка», м. Полтава
anatollob@gmail.com*

Серед нелінійних явищ у твердому тілі особливий інтерес викликають кооперативні ефекти. Вони тісно пов'язані з явищами самоорганізації на атомному рівні. Одним з найбільш цікавих і важливих для практичного застосування об'єктів нелінійної фізики є хвилі солітонного типу (відокремлені хвилі) [1, 2]. Останнім часом зростає інтерес до дискретних нелінійних систем, в яких можливе існування динамічних солітонів. Прикладом динамічного солітону можуть служити дискретні брізери (ДБ) – локалізовані в просторі і періодичні за часом високоамплітудні збурення, які можуть існувати лише в нелінійних дискретних структурах з трансляційною симетрією [3]. Солітонні хвилі, як в континуальних, так і в дискретних фізичних системах, можуть переносити енергію, імпульс, масу, електричний і топологічний заряд, інші фізичні величини, а також інформацію.

Виявлення дискретних брізерів у кристалах є складною фізичною задачею з використанням непрямих експериментальних даних. Істотно доповнюють дослідницький арсенал методи комп'ютерного моделювання. Переважна кількість робіт присвячених чисельному моделюванню ДБ, виконана в рамках методу молекулярної динаміки [2]. Основним недоліком використання традиційних методів молекулярної динаміки є те, що результати такого моделювання можуть сильно залежати від вибору феноменологічного потенціалу взаємодії між частинками системи. Дослідження солітонних явищ у конденсованих середовищах пов'язано з рядом труднощів. В першу чергу це пов'язано з проблемою безпосереднього спостереження процесів, що відбуваються всередині тіла. Крім того, такі явища, як рух краудіонів, коливання нелінійної локалізованої моди або рекомбінація вакансій і міжвузловинних атомів відбуваються з дуже високою швидкістю, що робить вивчення цих процесів в натурному експерименті практично неможливим. В цій ситуації дуже ефективним виявився метод комп'ютерного моделювання, який зараз набув

широкого визнання рядом з експериментальними та теоретичними методами. З його допомогою на атомному рівні можна ефективно досліджувати не лише надзвичайно швидкі процеси, але і більш тривалі за часом. Цей метод ми використали для дослідження швидкоплинних процесів у субмоношарових адсорбованих плівках. Для вирішення наших задач він має ряд переваг у порівнянні з іншими. Кінематика атомів тут описуються за допомогою рівнянь Ньютона. Це дозволяє найбільш реалістично моделювати різні процеси в ідеальних кристалічних структурах та реальних, які містять різні дефекти. У теоретичних роботах, як правило, розглядаються ланцюжки атомів у наближенні, яке враховує взаємодію лише найближчих частинок. Але ж часто в кристалах сили міжатомної взаємодії можуть бути далекодіючими. Наприклад, адсорбовані атоми лужних чи лужноземельних елементів на гранях (110) та (112) вольфраму і молібдену утворюють за певних умов довгоперіодні структури.

Метою нашої роботи було дослідження динамічних процесів у адсорбованій плівці літію на грані (112) монокристалу вольфраму при температурах, нижчих за температуру плавлення і покриття літію $\theta = 0,25$. Це відповідає структурі $p(1 \times 4)$, яка є квазіодновимірною. Вона утворюється ланцюжками літію, що орієнтовані перпендикулярно до напрямку [111] кристалу вольфраму. Хоча в своїй роботі ми послуговувалися методом молекулярної динаміки, але в його основу було покладено такі потенціали міжатомної взаємодії, параметри яких дозволяють відтворити цілий ряд експериментальних даних. Перш за все, це структура двовимірного кристала і параметри решітки $p(1 \times 4)$, енергія взаємодії та константи пружності. У двовимірному кристалі літію спонтанно виникають горизонтально розташовані локальні утворення, які ми вважаємо нерухомими бризерами. Цікавим є той факт, що ці зміни в будові двовимірного кристалу одночасно виникають у декількох сусідніх ланцюжках, що свідчить про їхню взаємну пов'язаність, хоча віддаль між ланцюжками дорівнює чотирьом значенням сталої кристалічної ґратки підкладки, тобто, ці збурення виникають завдяки далекодіючій взаємодії атомів через електронний газ підкладки (Фріделевські осциляції). При наближенні температури до точки плавлення двовимірного кристалу ймовірність виникнення згаданих збурень швидко зростає.

Література

1. Браун О.М. Модель Френкеля-Конторовой. Концепції, методи, приложения / О.М. Браун, Ю.С. Кившарь. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2008. – 536 с.
2. Infeld E. *Nonlinear Waves, Solitons and Chaos* / E. Infeld, G. Rowlands. – Cambridge: Cambridge University Press, 2000. – 423 p.
3. Дмитриев С.В. Дискретные бризеры в кристаллах / С.В. Дмитриев, Е.А. Корзникова, Ю.А. Баимова, М.Г. Веларде // УФН. – 2016. – Т.186, №5. – С. 471–488.