



**ТОМСКИЙ
ПОЛИТЕХ**

На правах рукописи

Семёнов Александр Сергеевич

**ПРОСТРАНСТВЕННО ЛОКАЛИЗОВАННЫЕ
И ДЕЛОКАЛИЗОВАННЫЕ КОЛЕБАНИЯ
НЕЛИНЕЙНЫХ РЕШЕТОК**

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

1.3.8 – Физика конденсированного состояния

Томск – 2022

Работа выполнена в Политехническом институте (филиале) ФГАОУ ВО «Северо-Восточный федеральный университет им. М.К. Аммосова» в г. Мирном

Научный консультант:

Дмитриев Сергей Владимирович
доктор физико-математических наук, профессор,
Институт физики молекул и кристаллов, Уфимский
федеральный исследовательский центр Российской
академии наук, руководитель группы.

Официальные оппоненты:

Зольников Константин Петрович
доктор физико-математических наук, профессор,
ФГБУН «Институт физики прочности и
материаловедения СО РАН», главный научный сотрудник

Катин Константин Петрович
доктор физико-математических наук, доцент,
Отделение нанотехнологий в электронике, спинтронике и
фотонике офиса образовательных программ, ФГАОУ ВО
«Национальный исследовательский ядерный университет
«МИФИ», профессор

Плотников Владимир Александрович
доктор физико-математических наук, профессор,
Институт цифровых технологий, электроники и физики,
ФГБОУ ВО «Алтайский государственный университет»,
заведующий кафедрой общей и экспериментальной
физики

Защита состоится «05» апреля 2023 г. в 14:00 часов на заседании диссертационного совета ДС.ТПУ.03 Национального исследовательского Томского политехнического университета по адресу: 634028, г. Томск, пр. Ленина, 2а, строение 4, аудитория 245.

С диссертацией можно ознакомиться в научно-технической библиотеке Томского политехнического университета по адресу: г. Томск, ул. Белинского, 55 и на сайте <https://portal.tpu.ru/council/indcouncils/6053/worklist>.

Автореферат разослан «__» _____ 20__ г.

Ученый секретарь
диссертационного совета ДС.ТПУ.03,
доктор технических наук



Гынгазов С.А.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность работы. Дискретные системы с периодически расположенными в пространстве взаимодействующими частицами принято называть решетками. Природа сил связи между частицами может быть различной, но при значительных отклонениях частиц от их равновесных положений, как правило, начинает проявляться нелинейная природа их взаимодействия. Например, в кристаллических решетках атомы совершают тепловые колебания, амплитуда которых растет с температурой, приводя к проявлению таких нелинейных эффектов, как тепловое расширение, зависимость теплоемкости и констант упругости от температуры и т.п. Нелинейная динамика решеток призвана разбираться со всеми сложными процессами и явлениями, вызванными свободными или вынужденными колебаниями частиц.

С повышением температуры и при наличии внешних воздействий происходит образование и движение дефектов кристаллической структуры, фазовые переходы, например, плавление, при котором теряется дальний порядок в расположении атомов. Однако настоящая диссертационная работа в большей степени фокусируется на изучении нелинейных колебаний идеальных решеток, лишенных топологических дефектов. Тем не менее, в последней главе будут рассмотрены вопросы динамики решеток с дефектами.

Отправной точкой наших исследований всегда является анализ спектра малоамплитудных колебаний частиц, который проводится для линеаризованных уравнений движения атомов, справедливых для малых смещений частиц из положений равновесия. Для решения этой задачи существуют хорошо разработанная теория, алгоритмы и численные методы.

Что касается нелинейных уравнений движения частиц, для их решения не существует общих методов и, на первый взгляд, задача кажется неразрешимой. Тем удивительнее оказывается факт наличия достаточно общих физических явлений, наблюдаемых в решетках различной размерности и с различными законами межчастичных взаимодействий. Данная работа имеет своей целью описание подобных универсальных явлений.

Фундаментальным свойством решеток является наличие трансляционной симметрии и преобразований точечной симметрии (повороты в пространстве, отражение от плоскости, инверсия), приводящих к совмещению узлов решетки. Оказывается, что знания только группы точечных преобразований симметрии достаточно для вывода семейств точных решений уравнений движения частиц. Теоретико-групповые представления, направленные на решения этой задачи, были разработаны Чечиным и Сахненко [1-3]. Развитая ими теория бушей нелинейных нормальных мод позволяет находить коротковолновые

колебательные моды, являющиеся точными решениями динамических уравнений, причем, поскольку для их нахождения используется лишь симметрия решетки, данные решения существуют вне зависимости от типа межчастичных взаимодействий и для любых амплитуд колебаний.

В данной работе такие симметрично-обусловленные точные решения, полученные Чечиным с соавторами, будут называться делокализованными нелинейными колебательными модами (ДНКМ). В оригинальных работах они назывались бушами нелинейных нормальных мод. Отметим, что свойства ДНКМ существенно зависят от используемых межчастичных потенциалов, и в предлагаемой работе они будут изучаться для решеток разной размерности. В частности, будут рассчитаны амплитудно-частотные характеристики ДНКМ. В силу нелинейности колебаний большой амплитуды, частота ДНКМ зависит от амплитуды и с её ростом может удаляться от фоновонного спектра решетки или выходить из него.

В пределе малых амплитуд ДНКМ превращаются в стоячие фоновонные волны. Если же амплитуда ДНКМ превышает определенное критическое значение, проявляется новое универсальное явление - модуляционная неустойчивость, развитие которой разрушает ДНКМ и её энергия передается другим колебательным модам. Наиболее интересно происходит развитие модуляционной неустойчивости для ДНКМ, частоты которых с ростом амплитуды отщепляются от границ фоновонного спектра решетки и лежат вне его. В этом случае невозможна передача энергии ДНКМ непосредственно другим фоновонным модам и наблюдается пространственная локализация энергии на хаотических дискретных бризерах (ДБ). Это явление было впервые описано Бурлаковым и Киселевым [4] и позже изучалось многими авторами [5-13]. Поскольку физическая причина возникновения хаотических ДБ состоит в невозможности передачи энергии неустойчивой ДНКМ фоновонным модам из-за того, что частота ДНКМ не принадлежит фоновонному спектру, их возникновение есть явление универсальное, не зависящее от размерности решетки и типа межчастичных взаимодействий. В настоящей работе модуляционная неустойчивость ДНКМ с образованием хаотических ДБ будет изучаться с целью анализа влияния ДБ на макроскопические свойства решеток.

Напомним, что ДБ - это локализованная в пространстве колебательная мода большой амплитуды в бездефектной нелинейной решетке. Впервые ДБ были описаны Долговым [14] в 1986 году и двумя годами позже переоткрыты Сиверсом и Такено [15]. То есть они были известны до того, как их спонтанное зарождение наблюдали Бурлаков и Киселев [4]. Работа Долгова [14] не была замечена научным сообществом, зато публикация [15] породила лавину исследований по ДБ, подытоженных в ряде обзоров [16-18].

Было установлено, что для существования ДБ необходимо выполнение двух условий: среда должна быть дискретной и обладать нелинейностью нужного типа (жесткой при отсутствии запрещенной зоны в фоновом спектре и мягкой или жесткой в противном случае) [16, 17]. Таким образом, ДБ являются вездесущими объектами в нелинейных решетках. Они были идентифицированы в различных кристаллах методом молекулярной динамики [19-24], а также в экспериментальных исследованиях [25, 26].

По-прежнему важным остается вопрос поиска новых типов ДБ в нелинейных решетках. Знание ДНКМ и их амплитудно-частотных характеристик позволяет предложить систематический подход к получению ДБ путем наложения локализирующих функций на ДНКМ с частотами вне спектра фоновых колебаний. Продуктивность и перспективность данного подхода будет продемонстрирована в данной работе.

Одним из важных вопросов является поиск движущихся ДБ [27], поскольку он связан с переносом энергии в решетке [28]. Точные движущиеся бризерные решения периодичны во времени со сдвигом на один или несколько шагов решетки [29-33]. Было показано, что движущиеся ДБ существуют в металлах [34] и двумерных модельных решетках [35].

Необходимо сделать важную оговорку относительно ДБ, получаемых и исследуемых в данной работе. В строгом смысле слова, ДБ - это коллективная локализованная колебательная мода, где все частицы осциллируют на одной частоте. В отсутствие возмущений и проявления неустойчивости колебаний ДБ имеют неограниченное время жизни. Существование таких точных колебательных решений в одномерных решетках (цепочках) было доказано в классических работах [15, 36-42]. Однако в данной работе вместо ДБ рассматриваются квази-бризеры с достаточно большим, но конечным временем жизни, спектр колебания которых помимо основной частоты может иметь дополнительные гармоники. Концепция квази-бризеров была разработана Чечиным с соавторами [43], где была предложена мера близости квази-бризера к идеализированной монохроматической колебательной моде.

В настоящее время сомнений в существовании ДБ в кристаллах с различным типом химических связей уже не осталось. На повестку дня вышел вопрос о влиянии ДБ на свойства кристаллов [44], и появились экспериментальные свидетельства о влиянии ДБ на их макроскопические свойства [45-47]. Однако до настоящего времени этот вопрос остается слабо изученным и в настоящем диссертационном исследовании ему будет уделено значительное внимание.

Все вышесказанное позволяет утверждать, что изучение ДНКМ и ДБ в их взаимосвязи, а также оценка их влияния на макроскопические свойства

нелинейных решеток (включая кристаллы) является **актуальной и важной** проблемой.

Целью данной работы является описание свойств делокализованных нелинейных колебательных мод и пространственно локализованных колебаний (дискретных бризеров), анализ взаимосвязи между ними и их влияния на макроскопические свойства модельных нелинейных решеток и кристаллов с использованием методов компьютерного моделирования.

Для достижения поставленной цели необходимо было решить следующие **задачи**:

- Рассчитать свойства ДНКМ в двумерных и трехмерных нелинейных решетках, включая кристаллы, например, их амплитудно-частотные характеристики, энергетические характеристики, наводимые ими механические напряжения и изменения констант упругости.

- Изучить влияние локального потенциала на свойства ДНКМ нелинейных решеток.

- Продемонстрировать возможность построения новых типов ДБ в двумерных и трехмерных нелинейных решетках, включая кристаллы, путем наложения локализирующих функций на ДНКМ с частотами вне фонованного спектра.

- Исследовать возможность существования движущихся ДБ в ГПУ металлах.

- Рассчитать макроскопические характеристики нелинейных решеток в ходе развития модуляционной неустойчивости ДНКМ с образованием и последующим исчезновением долгоживущих хаотических ДБ. В результате сравнения макроскопических характеристик решеток с хаотическими ДБ и в тепловом равновесии можно будет сделать вывод о влиянии ДБ на свойства решеток.

- Изучить взаимодействие движущегося ДБ с вакансией в модельной двумерной решетке Морзе.

- Разработать модель двумерной решетки, проявляющей бистабильность, с целью предложить возможное объяснение механизма формирования темных треков в кристалле слюды мусковита.

Основные положения, выносимые на защиту:

- Для всех исследованных двумерных и трехмерных решеток с парными и многочастичными потенциалами взаимодействия были изучены свойства ДНКМ и найдены ДНКМ с частотами выше фонованного спектра. Такие ДНКМ, как правило, порождают хаотические ДБ в результате развития модуляционной неустойчивости.

- Добавление локального потенциала треугольной β -ФПУ решетке приводит к появлению новой ДНКМ с синхронным движением всех частиц, и открывает возможность существования щелевых ДБ если локальный потенциал имеет мягкий тип нелинейности.

- Наложение локализирующих функций на ДНКМ с частотами вне фононного спектра является продуктивным подходом к поиску новых типов ДБ в нелинейных решетках.

- ГПУ металлы Ве и Zr поддерживают существование движущихся ДБ.

- Все изученные ДНКМ двумерной решетки Морзе и графена оказались устойчивыми для амплитуд меньше порогового значения.

- ДБ с жестким типом нелинейности в двумерной β -ФПУ решетке понижают отношение полной энергии к кинетической, снижают давление в решетке и константы упругости.

- Движущийся ДБ при взаимодействии с вакансией в модельной двумерной решетке Морзе снижает потенциальный барьер миграции вакансии.

- Возможным объяснением механизма формирования темных треков в кристалле слюды мусковита является распространение волн переключения в бистабильном монослое ионов калия. Выделение энергии при движении волны переключения способствует её безостановочному распространению на макроскопические расстояния. Структура позади волны переключения отличается от исходной и может способствовать образованию магнетита, окрашивающего новую фазу в темный цвет.

Научная новизна работы состоит в следующем:

1. Впервые были рассчитаны свойства ДНКМ в треугольной и квадратной решетках с частицами, взаимодействующими посредством потенциала β -ФПУ, а также в трехмерной ГЦК решетке с потенциалом Морзе. В зависимости от амплитуды ДНКМ определены амплитудно-частотные и энергетические характеристики ДНКМ, механические напряжения в решетке и константы упругости решеток.

2. Показано, что добавление локального потенциала треугольной β -ФПУ решетке влияет на динамику поддерживаемых ею ДНКМ, приводит к появлению новой ДНКМ с синхронным движением всех частиц, и открывает возможность существования щелевых ДБ в случае, когда локальный потенциал имеет мягкий тип нелинейности.

3. Впервые продемонстрирована возможность построения новых типов ДБ в треугольной β -ФПУ решетке и в ОЦК металлах Nb и V, путем наложения локализирующих функций на ДНКМ с частотами вне фононного спектра.

4. Впервые показана возможность существования движущихся ДБ в ГПУ металлах Ве и Zr.

5. Для двумерной решетки Морзе и для графена определены предельные амплитуды ДНКМ, выше которых они неустойчивы, и описано развитие неустойчивости ДНКМ в графене с учетом колебаний в плоскости и поперечных колебаний атомов углерода. Установлено, что в одной из четырех однокомпонентных ДНКМ за развитие неустойчивости отвечают поперечные колебания, а в трех других - колебания в плоскости.

6. Впервые для двумерной β -ФПУ решетки рассчитаны макроскопические характеристики (кинетическая и потенциальная энергии, механические напряжения и константы упругости) в ходе развития модуляционной неустойчивости ДНКМ с образованием и последующим исчезновением долгоживущих хаотических ДБ. Сделан вывод о том, что ДБ с жестким типом нелинейности повышают отношение кинетической энергии к потенциальной, снижают давление в решетке и константы упругости.

7. На примере модельной двумерной решетки Морзе впервые показано, что движущийся ДБ при взаимодействии с вакансией снижает потенциальный барьер её миграции.

8. Разработана модель двумерной решетки, допускающей сосуществование двух фаз, отличающихся свойствами дислокаций несоответствия, на основании которой было предложено возможное объяснение механизма формирования темных треков в кристалле слюды мусковита.

Научная и практическая значимость работы состоит в демонстрации для ряда двумерных и трехмерных нелинейных решеток тесной связи между ДНКМ и ДБ (ранее эта связь была показана для решеток меньшей размерности). Хаотические ДБ могут возникать в результате развития модуляционной неустойчивости ДНКМ с частотами вне фононного спектра, кроме того, ДБ могут быть получены путем наложения локализирующих функций на ДНКМ с частотами вне фононного спектра. Последний факт позволил получить ряд новых ДБ в треугольной β -ФПУ решетке и в ОЦК металлах Nb и V.

Высокая степень достоверности полученных результатов обеспечивается: применением строгих математических методов решения линеаризованных уравнений движения при определении спектров малоамплитудных колебаний решеток; применением высокоточного симплектического метода численного интегрирования нелинейных уравнений движения частиц (метод Штормера шестого порядка [48]); оценкой влияния временного шага интегрирования и размера расчетной ячейки на получаемые результаты; использованием при анализе динамики решеток металлов хорошо апробированных многочастичных межатомных потенциалов [49, 50],

построенных по методу погруженного атома. При моделировании динамики решетки графена использовались потенциалы Савина [51], учитывающие энергию валентных связей, валентных углов и двугранных углов. Представленные результаты не противоречат законам физики и результатам, полученным другими авторами.

Работа велась при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований № 18-32-00171 мол_а (2018-2020 гг., руководитель); гранта Российского научного фонда № 18-72-00006 (2018-2020 гг., руководитель); гранта Российского научного фонда № 21-12-00275 (2021-2023 гг., основной исполнитель); гранта Российского научного фонда № 22-22-00810 (2022-2023 гг., руководитель).

Апробация работы. Основные результаты настоящей диссертационной работы докладывались на следующих отечественных и международных научных конференциях, семинарах и симпозиумах: Всероссийской научно-практической конференции молодых ученых, аспирантов и студентов «Современное состояние и проблемы естественных наук» (Юрга, 2014 г.); Межрегиональной школы-конференции «Теоретические и экспериментальные исследования в конденсированных средах» (Уфа, 2014 г.); Международном симпозиуме по нелинейной теории и ее приложениям «NOLTA2014» (Люцерн, Швейцария, 2014 г.); XI Российской ежегодной конференции молодых научных сотрудников и аспирантов «Физико-химия и технология неорганических материалов» (Москва, 2014 г.); Открытой школы-конференции стран СНГ «Ультрамелкозернистые и наноструктурные материалы» (Уфа, 2014 г.); Международной школы-конференции студентов, аспирантов и молодых учёных «Физика молекул и кристаллов» (Уфа, 2014 г.); II Всероссийской конференции «Нелинейные и резонансные явления в конденсированных средах» (Уфа, 2014 г.); XV Международной школы-семинара «Эволюция дефектных структур в конденсированных средах» (Барнаул, 2018 г.); Открытой школы-конференции стран СНГ «Ультрамелкозернистые и наноструктурные материалы» (Уфа, 2018 г.); VI Российско-Казахстанской молодежной научно-технической конференции «Новые материалы и технологии» (Барнаул, 2018 г.); XII Международной конференции по хаотическому моделированию и симуляции «СНАOS 2019» (Ханья, Греция, 2019 г.); XLVII Международной летней школе-конференции «Актуальные проблемы механики» (Санкт-Петербург, 2019 г.); XII Всероссийском съезде по фундаментальным проблемам теоретической и прикладной механики «Механика деформируемого твердого тела» (Уфа, 2019 г.); IX Международной конференции по математическому моделированию, посвященной 75-летию Владимира Николаевича Врагова (Якутск, 2020 г.); Открытой школы-конференции стран СНГ «Ультрамелкозернистые и

наноструктурные материалы» (Уфа, 2020 г.); Международной научной конференции «Комплексный анализ, математическая физика и нелинейные уравнения» (оз. Банное, 2021 г.); XXII Зимней школе по механике сплошных сред (Пермь, 2021 г.); Всероссийской научно-практической конференции с международным участием «Актуальные вопросы теплофизики, энергетики и гидрогазодинамики в условиях Арктики» (Якутск, 2021 г.); XI Международном онлайн-симпозиуме по материалам во внешних полях (Новокузнецк, 2022 г.); XI Всероссийской научно-практической конференции студентов, аспирантов и молодых ученых «Молодежь и научно-технический прогресс в современном мире» (Мирный, 2022 г.); V Международной конференция с элементами научной школы для молодежи «Новые материалы и технологии в условиях Арктики» (Якутск, 2022 г.).

Личный вклад автора работы. Автор принимал активное участие в постановке решаемых задач, в написании численных алгоритмов и компьютерных программ, проведении расчетов, анализе полученных результатов, подготовке рукописей статей и представлении результатов исследований на научных форумах.

Публикации. Основные результаты по теме диссертации изложены в 32 печатных изданиях, индексируемых в международных базах данных Web of Science и Scopus, в 13 статьях в журналах, рекомендованных ВАК и не входящих в международные базы данных, 18 публикаций в журналах РИНЦ и сборниках трудов конференций, имеется 2 свидетельства о регистрации программ для ЭВМ. Итого, общий список трудов автора по теме диссертации включает 65 наименований. Список приведен в конце автореферата.

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, шести глав и заключения. Полный объем диссертации составляет 302 страницы с 119 рисунками и 7 таблицами. Список литературы содержит 253 наименования.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обосновывается, что изучение ДНКМ и ДБ в их взаимосвязи, а также оценка их влияния на макроскопические свойства нелинейных решеток (включая кристаллы) является актуальной и важной проблемой. Исходя из этого, формулируются цель и задачи исследования. Перечислены основные положения, выносимые на защиту, обозначены научная новизна и научная и практическая значимость работы, обоснована высокая степень достоверности представленных результатов. В разделе "благодарности" перечислены гранты, при финансовой поддержке которых велась работа. Перечислены научные форумы, на которых проводилась апробация работы. Описаны личный вклад автора работы, публикации по теме исследования и структура и объем работы.

Глава 1. Нелинейная динамика решеток: достижения и открытые проблемы.

В первой главе представлен понятийный аппарат и обзор исследований по нелинейной динамике решеток, описаны основные открытия, сделанные в этой области за последние несколько десятилетий, очерчен передовой край исследований и открытые проблемы.

Описаны типы нелинейных колебаний решеток, такие как: фоновые волновые пакеты большой амплитуды, колебания, локализованные на дефектах, ДНКМ и ДБ.

Квинтэссенцией многих классических работ по локализованным колебаниям нелинейных решеток стало обоснование следующей "формулы": дискретность + нелинейность = локализация энергии [16, 17]. Для того чтобы группа частиц могла совершать колебания, не отдавая свою колебательную энергию решетке, необходимо, чтобы колебания частиц совершались на частоте, лежащей вне фонового спектра малоамплитудных колебаний решетки. В этом случае колеблющиеся частицы не будут резонировать с фононами, последние не будут возбуждаться и уносить энергию в решетку. Пространственно локализованные колебания в отсутствие дефектов возможны в дискретных системах (решетках), поскольку спектр их фононных колебаний ограничен, и при наличии нелинейности, которая обеспечивает зависимость частоты колебаний от амплитуды и выход частоты локализованных колебаний из фонового спектра с увеличением амплитуды колебаний.

ДБ были открыты Долговым [5] и спустя два года переоткрыты независимо Сиверсом и Такено [6]. Оказалось, что ДБ могут двигаться по решетке, перенося энергию [27, 28]. В решетках с различной структурой фонового спектра и с различным типом нелинейности возможны ДБ

различных типов. Если спектр сплошной, то возможны только ДБ с частотой выше спектра, для чего решетка должна обладать жестким типом нелинейности, чтобы частота ДБ с ростом амплитуды удалялась от верхнего края спектра. При наличии щели в фонном спектре, кроме ДБ с частотой выше спектра появляется возможность существования щелевых ДБ, как с жестким, так и с мягким типом нелинейности [19, 20]. Наличие локального потенциала создаёт запрещенную полосу в спектре и открывает возможность существования ДБ с частотой ниже фонной полосы при условии, что локальный потенциал имеет мягкий тип нелинейности. Размерность решетки может играть существенную роль в определении условий существования ДБ [18]. Обсуждается наличие тесной связи между ДБ [16-18] и ДНКМ [1-3].

Описаны результаты экспериментальных исследований нелинейной динамики модельных и кристаллических решеток. Для изучения ДБ создаются рукотворные периодические системы, поддерживающие их существование. Например, ДБ изучались экспериментально в массиве микромеханических кантелеверов, массиве сверхпроводящих Джозефсоновских контактов, электрических цепях, состоящих из цепочки колебательных контуров, цепочек, собранных из грузов и пружин, цепочек связанных маятников, цепочек взаимодействующих упругих элементов, имитирующих поведение гранулированных сред [18].

ДБ имеют частоты колебаний вне фонного спектра. Поэтому для их экспериментального обнаружения применяют методы спектроскопии с целью измерения колебательных спектров атомов кристаллов [25, 26, 45-47]. Основная идея состоит в том, что ДБ - нелинейные объекты, концентрация которых должна расти с температурой. Поэтому, если при повышении температуры вне области фонных колебаний появляются дополнительные пики плотности фонных состояний, то их можно объяснить возбуждением ДБ.

Следует, однако, отметить, что наблюдение ДБ в кристаллах является непростой задачей, поскольку спектры колебаний помимо информации о ДБ несут также информацию о тепловых колебаниях и колебаниях, локализованных на дефектах, которые могут перекрывать сигнал от ДБ. Прямое же наблюдение ДБ, по-видимому, лежит за пределами возможности современной техники, поскольку они имеют наноскопический размер и время жизни, по разным оценкам, от 10 до 1000 периодов атомных колебаний.

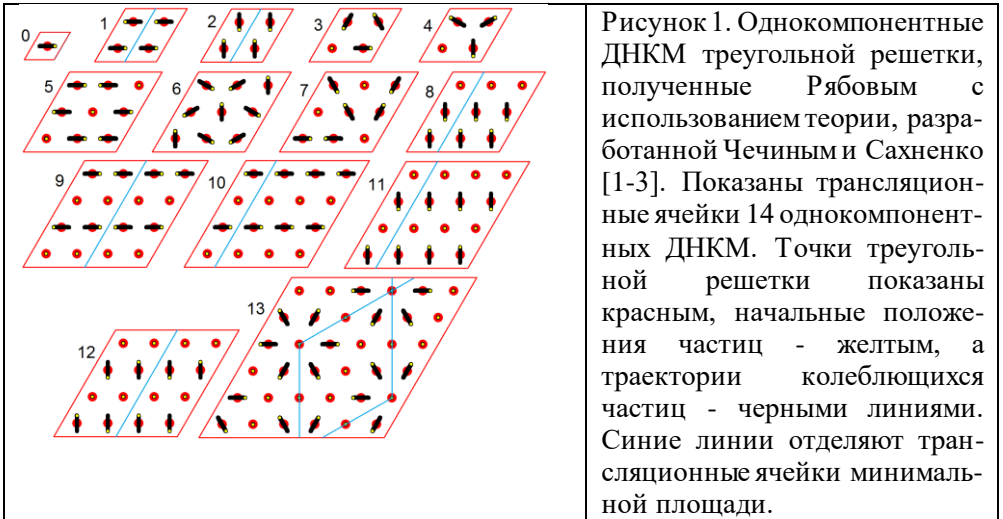
Наиболее перспективным направлением, по-видимому, является изучение влияния ДБ на макроскопические свойства кристаллов, которые могут быть измерены экспериментально [44]. Учитывая свойства ДБ и их нелинейную природу, можно ожидать их влияния на такие свойства как теплопроводность, теплоемкость, тепловое расширение, константы упругости. В настоящее время

эта задача и другие задачи по изучению свойств ДБ решается методами компьютерного моделирования [4-10, 19-24].

Обзор литературы позволил обосновать актуальность темы диссертации, сформулировать цели и задачи исследования.

Глава 2. ДНКМ двумерных решеток.

В разделе 2.1.1 описаны однокомпонентные ДНКМ треугольной решетки (см. рисунок 1), полученные Рябовым с использованием теории, разработанной Чечиным и Сахненко [1-3]. К ним добавлена очевидная ДНКМ 0, в которой все частицы движутся синхронно, и которая существует только при наличии локального потенциала. Исследовано влияние локального потенциала на динамику ДНКМ треугольной решетки.



Потенциальная энергия связи между двумя ближайшими частицами треугольной решетки определяется потенциалом β -ФПУ

$$\varphi(r) = (k/2)(r-h)^2 + (\beta/4)(r-h)^4, \quad (1)$$

где r – текущая длина связи, h – равновесная длина связи, k – коэффициент линейной жесткости пружины, β – коэффициент при нелинейном слагаемом. Параметры потенциала: $h=1$, $k=1$, $\beta=10$. Масса частиц $m=1$.

Каждая частица взаимодействует с локальным ангармоническим потенциалом

$$U(\xi) = (P/2)\xi^2 + (Q/4)\xi^4 + (S/4)\xi^6, \quad (2)$$

где ξ - расстояние от атома до его позиции в решетке, а значения параметров равны $P = 1$, $Q = \pm 1/6$ и $S = 1/120$. Для положительного Q потенциал жесткий, а для отрицательного Q - мягкий для не очень больших смещений частиц. Если смещения очень велики, член шестого порядка становится доминирующим, и потенциал превращается в жесткий даже при отрицательных Q .



Рисунок 2. Синхронизированные двухкомпонентные ДНКМ треугольной решетки, описанные в работе D. S. Ryabov et al. Nonlinear Dyn. 102, 2793 (2020). Для каждой из 21 ДНКМ показаны трансляционные ячейки. Точки треугольной решетки отмечены красным, начальные положения атомов - желтым, а траектории колеблющихся частиц - черными линиями.

Можно сделать следующий вывод по влиянию локального потенциала на динамику ДНКМ и возможность существования дискретных бризеров. При наличии локального потенциала любого типа в решетке появляется дополнительная ДНКМ, обозначенная цифрой 0 на рисунке 1. При отсутствии локального потенциала эта мода трансформируется в движение решетки как жесткого целого. Частота ДНКМ 0 отщепляется от нижнего края фононного спектра и растет (убывает) в случае, когда локальный потенциал имеет жесткий (мягкий) тип нелинейности. Следовательно, при мягком типе нелинейности локального потенциала частота ДНКМ 0 входит в щель ниже фононного

спектра и появляется возможность существования дискретного бризера, основанного на этой моде.

В разделе 2.1.3 представлены синхронизированные двухкомпонентные ДНКМ треугольной решетки (см. рисунок 2). Исследованы амплитудно-частотные характеристики однокомпонентных и двухкомпонентных ДНКМ и показано, что однокомпонентные ДНКМ 2 и 4, а также двухкомпонентная ДНКМ γ_2 имеют частоты выше фононного спектра решетки.

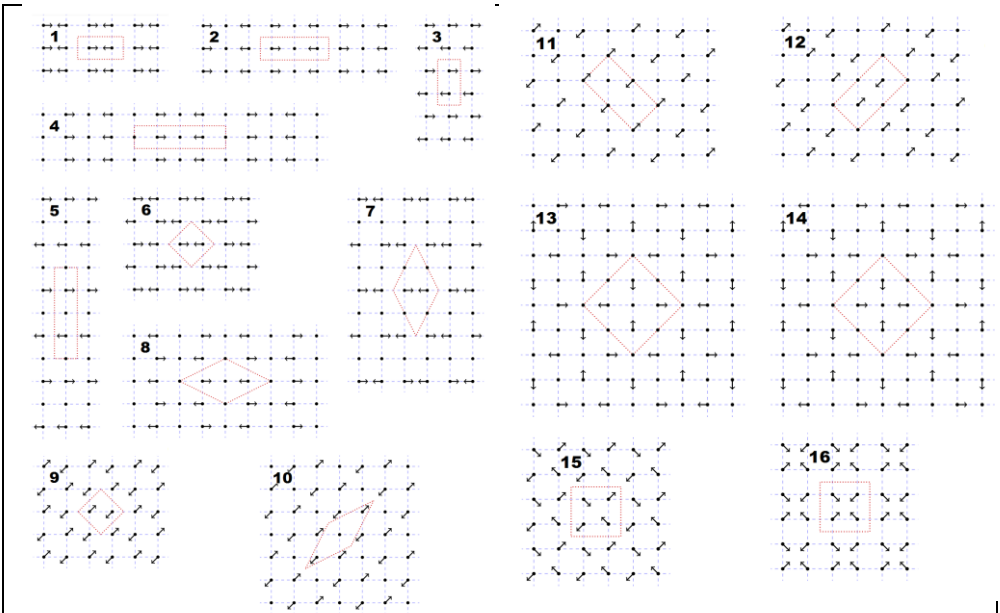
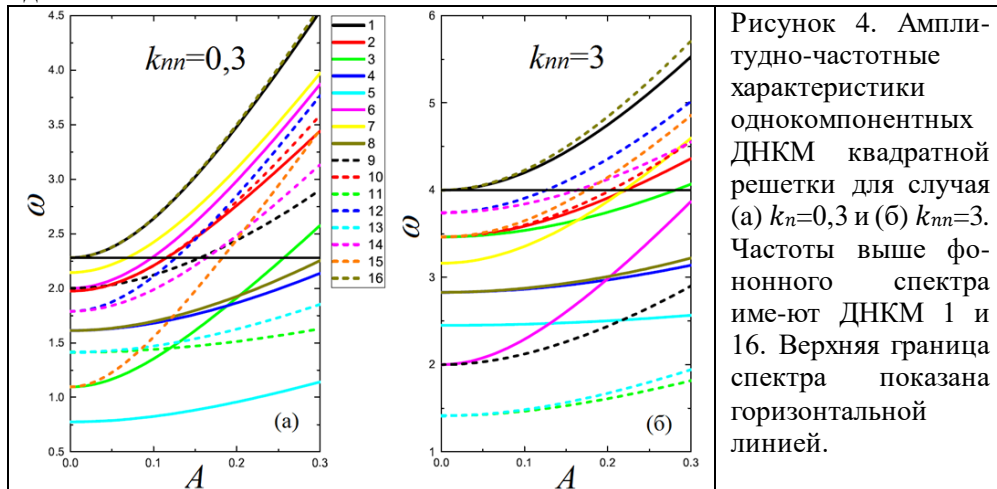


Рисунок 3. Однокомпонентные ДНКМ квадратной решетки, полученные Рябовым с использованием теории, разработанной в работах [1-3]. Все векторы смещения имеют одинаковую длину A , что является амплитудой ДНКМ. Трансляционные ячейки начальных смещений частиц показаны пунктиром.

Раздел 2.2 посвящен анализу однокомпонентных ДНКМ квадратной решетки, полученных Рябовым с использованием теоретико-группового подхода [1-3] (см. рисунок 3). Взаимодействия в решетке описываются потенциалом β -ФПУ (1) для ближайших и вторых соседей. Коэффициент линейной жесткости для связи между ближайшими соседями, без потери общности, взят равным единице ($k_n=1$), а для вторых соседей рассмотрены

различные значения коэффициента линейной жесткости ($k_{nn}=0,3, 1$ и 3). Коэффициент при нелинейном слагаемом для ближайших и вторых соседей принят равным $\beta=10$. Масса частиц $m=1$.

Для решетки аналитически рассчитаны дисперсионные кривые, найдена максимальная частота фононного спектра. Для некоторых ДНКМ, в качестве примера, выполнены аналитические расчеты: выписан гамильтониан с одной степенью свободы, соответствующее уравнение движения и получена зависимость частоты от амплитуды с учетом кубической нелинейности. Показано, что аналитические результаты прекрасно согласуются с численными данными.



Зависимости частоты ДНКМ от амплитуды показаны на рисунке 4, для (а) $k_n = 0,3$ и (б) $k_{nn} = 3$. Горизонтальная прямая показывает верхнюю границу фононного спектра. Отметим, что частоты колебаний ожидаемо растут с увеличением параметра k_{nn} . Только ДНКМ 1 и 16 имеют частоты выше фононного спектра во всем диапазоне амплитуд колебаний для рассмотренных параметров модели. Остальные ДНКМ при малых амплитудах имеют частоты внутри фононного спектра. Для выбранных значений параметров, все ДНКМ показывают жесткий тип нелинейности, то есть рост частоты с амплитудой. Самую низкую частоту могут иметь различные ДНКМ в зависимости от параметра k_{nn} . Так, при $k_{nn} = 0.3$ это ДНКМ 5, а при $k_{nn} = 3$ это ДНКМ 11.

Для всех мод, как функции амплитуды рассчитаны осредненные за период колебания кинетическая и потенциальная энергии, компоненты напряжений и константы упругости. По полученным данным удалось

установить, что все перечисленные макроскопические свойства решетки коррелируют с частотами ДНКМ: если частота ДНКМ медленно (быстро) растет с амплитудой, то и макроскопические свойства решетки слабо (сильно) от неё зависят.

В разделе 2.3 методом молекулярной динамики изучена устойчивость однокомпонентных ДНКМ решетки графена, моделируемого с использованием потенциалов Савина [51]. Были рассчитаны показатели критических экспонент, характеризующие скорость развития неустойчивости мод как в плоскости листа графена, α_{xy} , так и перпендикулярно ей, α_z . Установлено, что показатели критических экспонент уменьшаются с уменьшением амплитуды ДНКМ A почти линейно при относительно больших A и быстрее при уменьшении A . Они обращаются в нуль при некотором значении A^* , ниже которого ДНКМ устойчивы.

В разделе 2.4 проведен анализ трехкомпонентной ДНКМ в графене с использованием метода молекулярной динамики и межатомного потенциала Савина [51]. Установлено, что в соответствии с предсказаниями, основанными на теоретико-групповых представлениях [1-3], запуск корневой колебательной моды приводит к возбуждению двух однокомпонентных ДНКМ, при этом другие колебательные моды не возбуждаются. Показано, что подбором амплитуд трех компонент рассматриваемой ДНКМ можно добиться синхронизации компонент, т.е. периодичности колебаний.

Глава 3. ДБ двумерных решеток.

В главе изучены хаотические ДБ, спонтанно возникающие в результате модуляционной неустойчивости ДНКМ с частотами выше фононного спектра, а также ДБ, получаемые наложением локализирующих функций на такие ДНКМ. Рассмотрены движущиеся ДБ в треугольной решетке.

Раздел 3.1 посвящен изучению хаотических ДБ треугольной β -ФПУ решетки с потенциалом (1). Как было установлено в главе 2, существует три ДНКМ треугольной решетки с частотами выше фононного спектра, это однокомпонентные ДНКМ 2 и 4 (см. рисунок 1), а также двухкомпонентная ДНКМ γ_2 (см. рисунок 2).

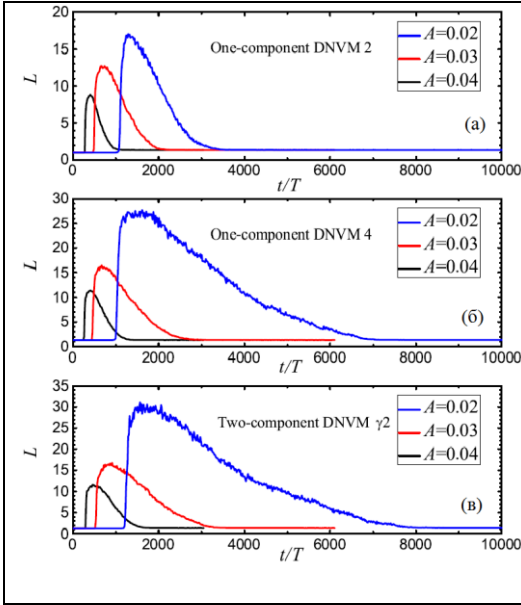


Рисунок 5. Изменение параметра локализации от времени. Время нормировано на период колебаний фоновой моды с самой высокой частотой. Показаны кривые для (а) ДНКМ 2, (б) ДНКМ 4 и (в) ДНКМ $\gamma 2$. Синие, красные и черные линии соответствуют амплитудам ДНКМ: $A = 0,02, 0,03$ и $0,04$.

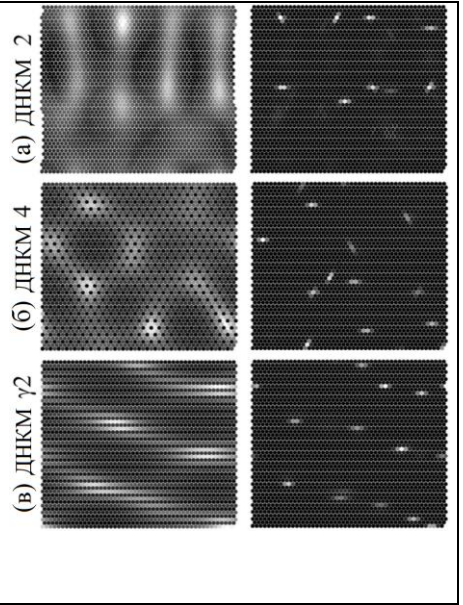


Рисунок 6. Распределение энергии по решетке, показывающее развитие модуляционной неустойчивости (а) ДНКМ 2, (б) ДНКМ 4 и (в) ДНКМ $\gamma 2$. Результат получен для $A=0,03$. Слева (справа) показано распределение энергии в решетке в момент, когда $L=0, 8L_{\max}$ ($L=L_{\max}$). Черный (белый) цвет соответствует минимальной (максимальной) энергии.

Для изучения эволюции локализации энергии в решетке будем следить за изменением параметра локализации,

$$L = N \frac{\sum_{n=1}^N e_n^2}{\left(\sum_{n=1}^N e_n\right)^2}, \quad (3)$$

где e_n – это полная энергия одной частицы, осредненная за период колебания ДНКМ и суммирование ведется по всем N частицам в расчетной ячейке.

Отметим, что если вся энергия локализована на одной частице, то имеем $L=N$. При равном распределении энергии по всем частицам имеем $L=1$.

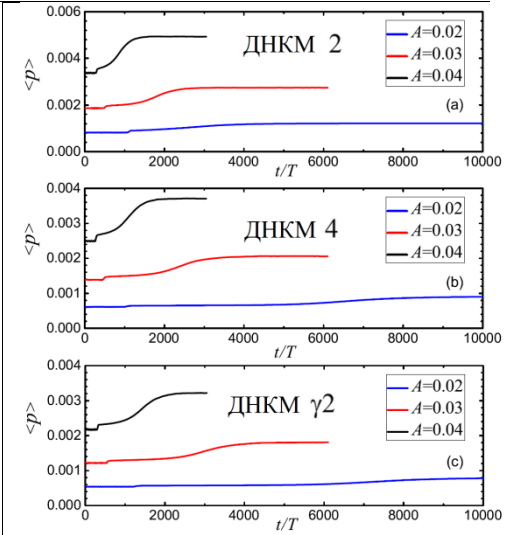
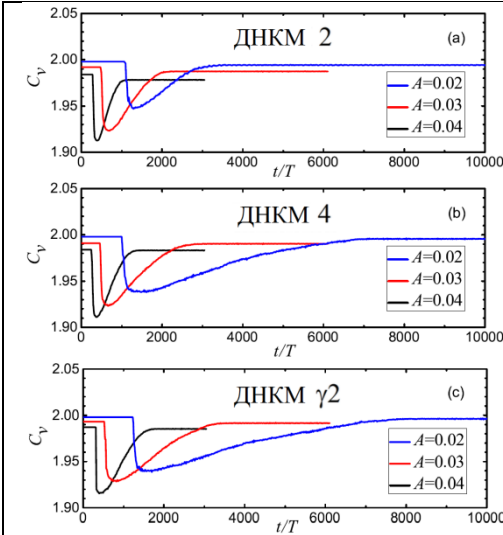


Рисунок 7. Зависимость теплоемкости от времени для (а) ДНКМ 2, (б) ДНКМ 4 и (с) ДНКМ $\gamma 2$. Синим, красным и черным цветом показаны результаты для $A= 0,02, 0,03$ и $0,04$ соответственно. Отметим, что теплоемкость в наших расчетах характеризуется отношением полной энергии системы к кинетической энергии.

Рисунок 8. Усредненное по периоду колебаний давление как функция времени для (а) ДНКМ 2, (б) ДНКМ 4 и (с) ДНКМ $\gamma 2$. Синим, красным и черным цветом показаны результаты для $A=0,02, 0,03$ и $0,04$ соответственно. Давление рассчитывалось следующим образом: $\langle p \rangle = (\sigma_{xx} + \sigma_{yy})/2$.

Как и ожидалось, все три рассматриваемые ДНКМ разрушаются с образованием ДБ, о чем свидетельствует резкий рост параметра локализации энергии, см. рисунок 5. ДБ существуют в системе довольно долгое время, медленно излучая энергию и в итоге система приходит к тепловому равновесию. На рисунке 6 показано распределение энергии по расчетной ячейке в начальный момент локализации (слева) и в момент максимальной локализации (справа) для всех трех ДНКМ. Светлые участки – энергия максимальна, тёмные – минимальна. Несмотря на имеющиеся отличия на

начальной стадии локализации энергии, итог одинаковый – в системе формируются хаотические ДБ.

Интересно проследить эволюцию макроскопических характеристик решетки во время перехода от режима с ДБ к тепловому равновесию. На рисунках 7 и 8 показано изменение во времени величины $C_V = H/K$ и $\langle p \rangle = (\sigma_{xx} + \sigma_{yy})/2$. Первая представляет собой отношение полной энергии системы к кинетической и характеризует теплоемкость решетки при постоянном объеме, а вторая есть давление в решетке, осредненное за период колебания ДНКМ. Видна четкая корреляция этих макроскопических величин с изменением параметра локализации, показанного на рисунке 5. Когда L максимально, C_V и $\langle p \rangle$ минимально. Отметим, что падение давления при постоянном объеме говорит об отрицательном вкладе ДБ в тепловое расширение решетки. Аналогичные результаты были получены и для жесткости решетки, определяемой как $C = (C_{11} + C_{22})/2$.

Приходим к выводу, что ДБ снижают теплоемкость, тепловое расширение и жесткость решетки с жестким типом нелинейности.

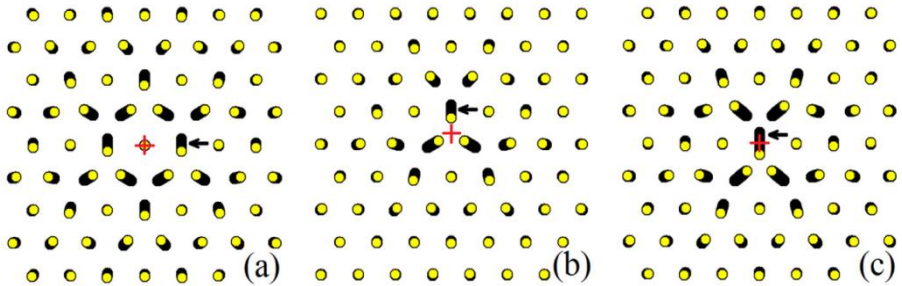


Рисунок 9. Три ДБ, полученных наложением локализирующей функции на ДНКМ 4. Разница состоит в выборе центра локализации, на (a) это неподвижная частица, на (b) точка, равноудалённая от трех колеблющихся частиц, и на (c) – колеблющаяся частица.

В разделе 3.2 получены новые ДБ, основанные на ДНКМ треугольной решетки с частотами выше фононного спектра. ДБ получались путем наложения на ДНКМ локализирующих функций.

На рисунке 9 показаны три ДБ, полученных наложением на ДНКМ 4 локализирующей функции вида

$$A_{ij} = \frac{A}{\cosh(\beta |\mathbf{r}_{ij} - \mathbf{r}_0|)}, \quad (4)$$

где A – это амплитуда в центре локализации, A_{ij} – амплитуда частицы с радиус-вектором \mathbf{r}_{ij} , \mathbf{r}_0 – центр локализации ДБ. Параметр β определяет степень локализации ДБ, он подбирается для заданной амплитуды A из условия максимального времени жизни ДБ. Разница между тремя ДБ, изображенными на рисунке 9, состоит в выборе центра локализации, на (а) это неподвижная частица, на (б) точка, равноудалённая от трех колеблющихся частиц, и на (с) – колеблющаяся частица.

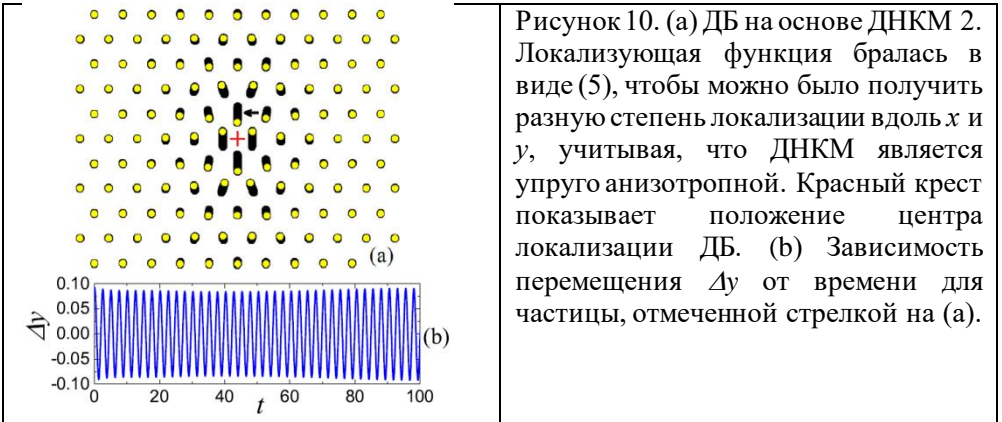


Рисунок 10. (а) ДБ на основе ДНКМ 2. Локализирующая функция бралась в виде (5), чтобы можно было получить разную степень локализации вдоль x и y , учитывая, что ДНКМ является упруго анизотропной. Красный крест показывает положение центра локализации ДБ. (б) Зависимость перемещения Δy от времени для частицы, отмеченной стрелкой на (а).

На рисунке 10 показан ДБ, полученный наложением на ДНКМ 2 локализирующей функции вида

$$A_{ij} = \frac{A}{\cosh(\beta_x |x_{ij} - x_0|) \cosh(\beta_y |y_{ij} - y_0|)}, \quad (5)$$

где β – степень локализации.

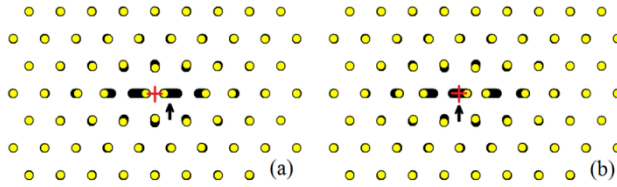


Рисунок 11. Два ДБ на основе ДНКМ γ_2 . Центр локализации (показан красным крестом) выбран (а) между колеблющимися атомами, (б) на колеблющемся атоме.

На рисунке 11 представлены два ДБ, полученные наложением локализирующей функции (5) на ДНКМ γ_2 . Центр локализации расположен (а) между колеблющимися атомами, (б) на колеблющемся атоме.

Можно заключить, что наложение локализирующих функций на ДНКМ с частотами вне фононного спектра является эффективным способом построения ДБ в решетках.

Глава 4. ДНКМ трехмерных решеток.

Раздел 4.1 посвящен изучению влияния жесткости межатомных связей на свойства ДНКМ в ГЦК решетке Морзе. Классический парный потенциал Морзе имеет вид

$$\varphi(r) = D(e^{-2\alpha(r-\xi)} - 2e^{-\alpha(r-\xi)}), \quad (3)$$

здесь φ – энергия взаимодействия двух атомов на расстоянии r и D , ξ , α – параметры потенциала, определяющие энергию разрыва связи, равновесное межатомное расстояние и жесткость связи. Для массы частицы мы полагаем $m=1$, используя соответствующую единицу измерения времени. Выбрав подходящие единицы для энергии и расстояния, можно положить $D=1$ и $\xi=1$ соответственно. Влияние параметра α на свойства ДНКМ будет подробно проанализировано ниже. Будем рассматривать два значения: $\alpha=4$ и 7 .

На рисунке 12 показаны начальные смещения частиц, используемые для возбуждения ДНКМ ГЦК решетки от 1 до 12 соответственно. Все частицы имеют нулевую начальную скорость. Смещения показаны в плоскостях, параллельных плоскости x, y , с координатой z , указанной на каждой панели. Все ненулевые векторы смещения имеют одинаковую длину A . Смещения Δx и Δy показаны на плоскости x, y стрелками, а Δz – точками (положительное значение), крестиком (отрицательное значение) или пустыми кружками (ноль).

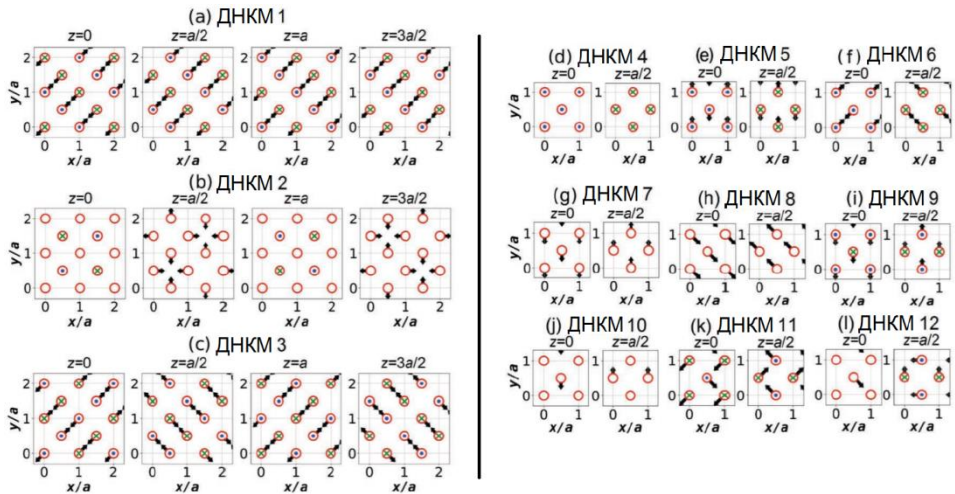


Рисунок 12. Однокомпонентные ДНКМ ГЦК решетки, полученные Щербининым с использованием теоретико-группового подхода, разработанного Чечиным и Сахненко. Всего существует 12 однокомпонентных ДНКМ.

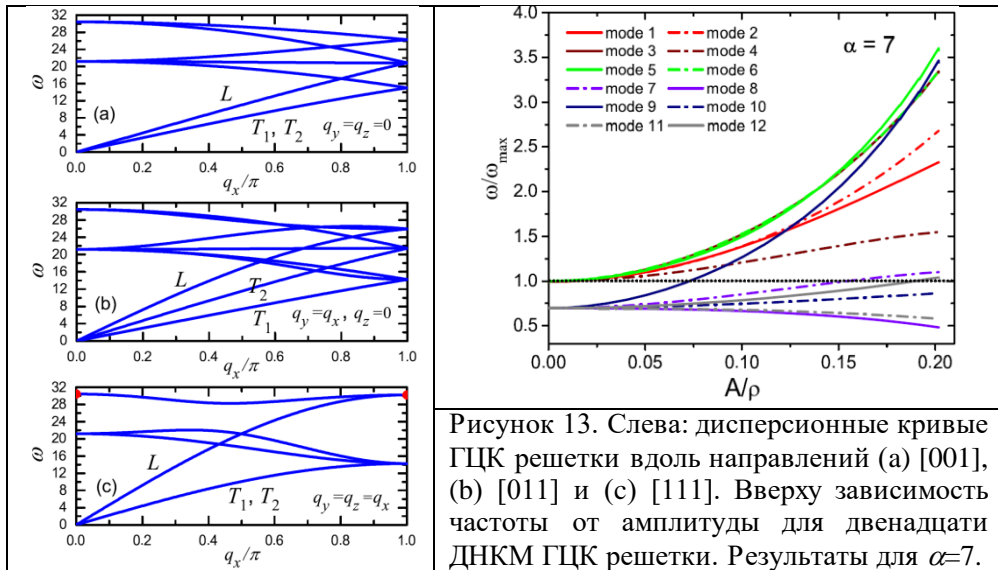


Рисунок 13. Слева: дисперсионные кривые ГЦК решетки вдоль направлений (a) [001], (b) [011] и (c) [111]. Вверху зависимость частоты от амплитуды для двенадцати ДНКМ ГЦК решетки. Результаты для $\alpha=7$.

На рисунке 13 слева построены дисперсионные кривые ГЦК решетки Морзе с параметром жесткости $\alpha=7$. Вверху даны амплитудно-частотные характеристики двенадцати однокомпонентных ДНКМ ГЦК решетки. Частоты ДНКМ отнесены к максимальной частоте фононного спектра. Для разных значений параметра α максимальная частота фононов может достигаться в разных точках первой зоны Бриллюэна, см. Таблицу 1.

Таблица 1. Максимальные частоты фононов в двух точках первой зоны Бриллюэна и равновесные межатомные расстояния ρ для различных значений параметра жесткости потенциала Морзе α .

α	ω_{\max} В ТОЧКЕ	ω_{\max} В ТОЧКЕ	$\rho = a/\sqrt{2}$
	$q_x = q_y = q_z = 0$	$q_x = q_y = q_z = \pi$	
4	26.16	26.62	0.9014073
5	25.81	25.75	0.9611802
6	27.68	27.48	0.9824828
7	30.43	30.22	0.9914215

По мере увеличения амплитуды некоторые ДНКМ демонстрируют ангармонизм жесткого типа, то есть увеличение частоты с амплитудой, в то время как другие моды демонстрируют ангармонизм мягкого типа, когда частота уменьшается с амплитудой. Некоторые моды показывают увеличение частоты с амплитудой при умеренных амплитудах и смягчение при более высоких амплитудах.

Установлено, что только три ДНКМ имеют частоты выше фононной полосы для любой амплитуды ДНКМ и эти моды различны для разных значений параметра жесткости потенциала Морзе α . В частности, для $\alpha=4$ ДНКМ 1, 2 и 3 имеют частоты выше фононной полосы, а для $\alpha \geq 5$ это верно для ДНКМ 4, 5 и 6. Однако разница между частотами этих мод при малых амплитудах очень мала, как показано в таблице 1. Этот результат имеет большое значение при анализе возможных типов ДБ в ГЦК кристаллах. Как было показано выше на примере треугольной решетки, различные типы ДБ могут быть получены путем наложения функций локализации на ДНКМ, которые имеют частоту вне фононной полосы. Полученные результаты показывают, что в ГЦК кристаллах с относительно мягкими межатомными связями ДБ могут быть получены с использованием ДНКМ 1, 2 и 3, в то время как для кристаллов с жесткими связями ДБ могут быть получены с использованием ДНКМ 4, 5 и 6. Поскольку разница между частотами ДНКМ 1, 2, 3 и ДНКМ 4, 5, 6 при малых амплитудах очень мала, можно ожидать, что все

шесть ДНКМ могут создавать ДБ с не слишком малыми амплитудами, но это предположение должно быть проанализировано в будущих исследованиях.

В работе для всех двенадцати ДНКМ ГЦК решетки рассчитаны средние за период колебания значения кинетической и потенциальной энергии, компоненты тензора напряжений и константы жесткости. Симметрия ДНКМ определяет количество неравных компонентов напряжения и взаимосвязь между различными константами жесткости.

В разделе 4.2 изучены некоторые ДНКМ ОЦК решетки, изображенные на рисунке 14. ДНКМ возбуждались в ванадии и ниобии заданием начальных перемещений атомов в соответствии с данными паттернами перемещений при нулевых начальных скоростях атомов. Молекулярно-динамические расчеты проводились с использованием пакета LAMMPS и многочастичных межатомных потенциалов, построенных по методу погруженного атома.

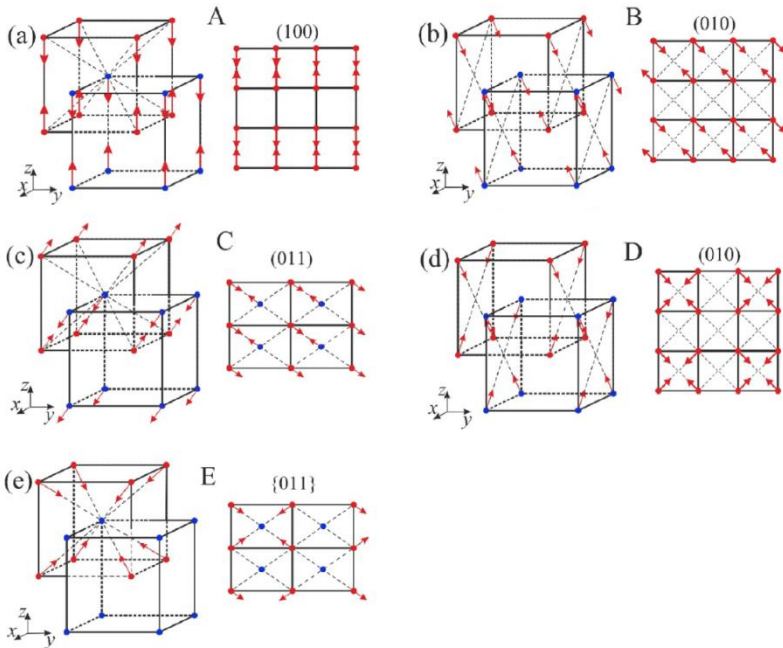


Рисунок 14. Пять однокомпонентных ДНКМ ОЦК решетки, полученные Лобзенко.

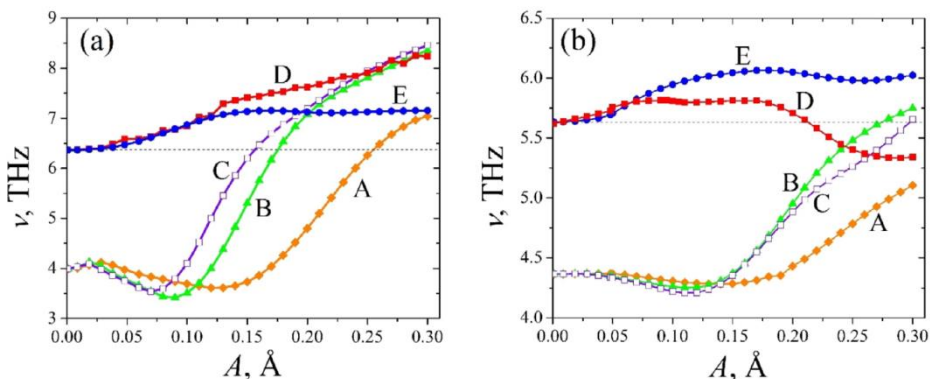


Рисунок 15. Амплитудно-частотные зависимости для пяти однокомпонентных ДНКМ ОЦК металлов (а) ванадия и (б) циркония.

На рисунке 15 показана частота как функция амплитуды для пяти ДНКМ ОЦК решетки для (а) V и (б) Nb. Горизонтальные пунктирные линии показывают верхний край фононного спектра металлов. Расчеты проводились методом молекулярной динамики с использованием межатомных потенциалов погруженного атома. Видно, что моды D и E имеют частоты выше фононного спектра, верхняя граница которого показана горизонтальной линией. Следовательно, эти ДНКМ способны породить ДБ.

Глава 5. ДБ трехмерных решеток.

Движущиеся ДБ в ГПУ металлах бериллии и цирконии рассмотрены в разделе 5.1 с использованием программного пакета LAMMPS и многочастичных межатомных потенциалов. Найдены зависимости частоты ДБ от его амплитуды. Частота колебания ДБ в бериллии значительно выше, чем в цирконии, поскольку атомы бериллии намного легче атомов циркония. Максимальная скорость движения ДБ в Be составила 35 Å/пс (3.5 км/с), а в Zr 10 Å/пс (1.0 км/с). Интересно сопоставить эти скорости со скоростями звука: максимальная скорость ДБ в бериллии (цирконии) составляет 27% (22%) от скорости звука.

Раздел 5.2 посвящен получению ДБ в ОЦК металлах путем наложения локализирующих функций сферической симметрии на ДНКМ, представленные на рисунке 14. Амплитудно-частотные характеристики ДБ показаны на рисунке 16 для (а) ванадия и (б) ниобия. Горизонтальные линии показывают верхние границы фононных спектров металлов.

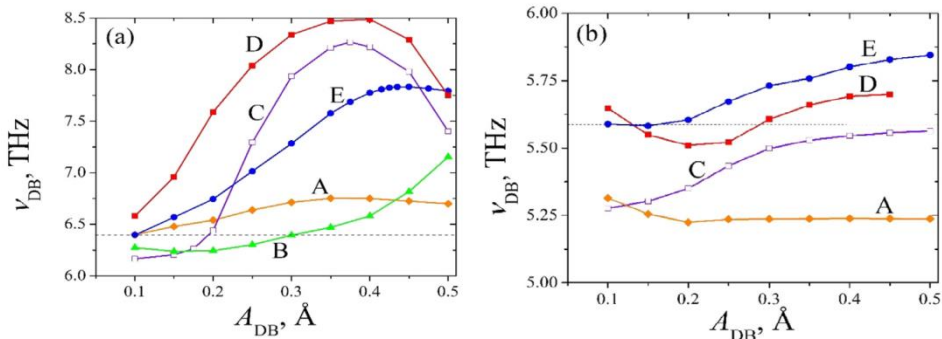


Рисунок 16. Амплитудно-частотные зависимости для ДБ в (а) ванадии и (б) ниобии, полученные наложением локализирующих функций на ДНКМ, показанные на рисунке 14.

Таблица 2. Параметры ДБ с максимальным временем жизни в V и Nb на основе пяти исследованных ДНКМ: амплитуда ДБ A , частота ДБ ν и максимальное время жизни t_{\max} .

ДНКМ	A (Å)		ν (ТГц)		t_{\max} (пс)	
	V	Nb	V	Nb	V	Nb
A	0.3	0.25	6.71	5.44	235	1.5
B	0.5	0.5	6.81	5.02	14	0.15
C	0.25	0.4	7.29	5.57	270	2.5
D	0.25	0.15	8.04	5.64	58	2.5
E	0.25	0.2	7.01	5.65	26	4.1

В таблице 2 приведены параметры ДБ с максимальным временем жизни в V и Nb. Видно, что ДБ в ванадии имеют значительно большее время жизни – десятки и сотни пикосекунд, в то время как максимальное время жизни ДБ в ниобии – 4 пикосекунды, оно наблюдается для ДНКМ E, что не удивительно, поскольку эта ДНКМ имеет максимальную частоту. Примечательный факт состоит в том, что ДБ в ванадии, основанный на моде C, имеет большое время жизни, несмотря на то, что частота данной моды при малых амплитудах лежит в спектре и выходит из него только при достаточно больших амплитудах.

Раздел 5.3 рассматривает перенос энергии дискретными бризерами в ионном кристалле со структурой NaCl. При изучении взаимодействия двух пар близко расположенных ДБ было показано, что возможен обмен энергией между ДБ, и, кроме того, ДБ может блуждать по кристаллу, переходя с одного атома

на другой. Таким образом, выявлен новый механизм транспорта энергии, осуществляемый путем возбуждения новых ДБ за счет энергии существующих ДБ.

Глава 6. Решетки с топологическими дефектами.

Молекулярно-динамическое моделирование, проведенное в разделе 6.1 для треугольных решеток Морзе и Борна-Майера, показало, что профиль отталкивательной части межатомного потенциала и значение потенциала на расстоянии, равном половине межатомного расстояния сильно влияют на длину пробега сверхзвуковых 1- и 2-краудионов. Объяснение этого результата простое: самофокусирующиеся столкновения в решетке Борна-Майера имеют место при более высоких скоростях столкновений и, следовательно, при более высоких энергиях краудионов, чем в решетке Морзе. Краудионы с большей энергией способны преодолевать большие расстояния в режиме самофокусирующего распространения. Исследование также показало, что 2-краудионы имеют в 2-2,5 раза большую длину пробега, чем 1-краудионы с той же начальной энергией. Это объясняется тем, что 2-краудионы с одинаковой энергией имеют меньшие скорости столкновений между атомами, что благоприятствует самофокусирующемуся распространению 2-краудионов.

В разделе 6.2 методом молекулярной динамики исследовано влияние скорости движущегося ДБ на результат его взаимодействия с вакансией. Установлено, что ДБ, движущиеся со скоростями ниже определенного порога, испытывают упругое отталкивание от вакансии, а ДБ со скоростями выше этого порога рассеиваются на вакансии. Длительность взаимодействия ДБ с вакансией во всех случаях составляет порядка 100 периодов колебаний ДБ. Анализ расстояния между атомами, создающими потенциальный барьер миграции вакансии, при взаимодействии ДБ с вакансией показал, что эта величина возрастает в случае упругого отталкивания и колеблется вокруг равновесного значения в случае рассеяния ДБ. В обоих случаях активационный барьер для миграции вакансий эффективно снижается. Однако это уменьшение оказывается более значимым в случае отталкивания ДБ от вакансии, то есть при относительно медленном набегании ДБ на вакансию.

Раздел 6.3 рассматривает треугольную решетку с локальным потенциалом, разработанную с целью объяснения природы темных треков в кристаллах слюды [см. рисунок 17(а)]. В 1967 году Майк Расселл обратил внимание на треки в кристаллах слюды, видимые невооруженным глазом. В слюде жесткие силикатные слои соединены монослоями калия, которые создают треугольную двумерную решетку [см. рисунок 17(б)]. Наша двумерная модель слюды рассматривает треугольную решетку калия с морзевским взаимодействием. Этот слой находится в локальном потенциале, созданном

слоями силиката [см. рисунок 17(в)]. Шаг локального потенциала b несоизмерим шаг двумерной решетки Морзе. В результате система демонстрирует бистабильность. Если изменять глубину локального потенциала γ , то наблюдаются два фазовых перехода первого рода, со скачком потенциальной энергии системы [см. рисунок 17(г)].

Анализ показал, что в темных треках наблюдается повышенная концентрация атомов железа. Для объяснения треков рассматривались различные локализованные возбуждения: космические частицы высокой энергии, краудины, дискретные бризеры и другие. Наша идея состоит в том, что атомы железа концентрируются за счет диффузии там, где реализуется другая структура кристалла.

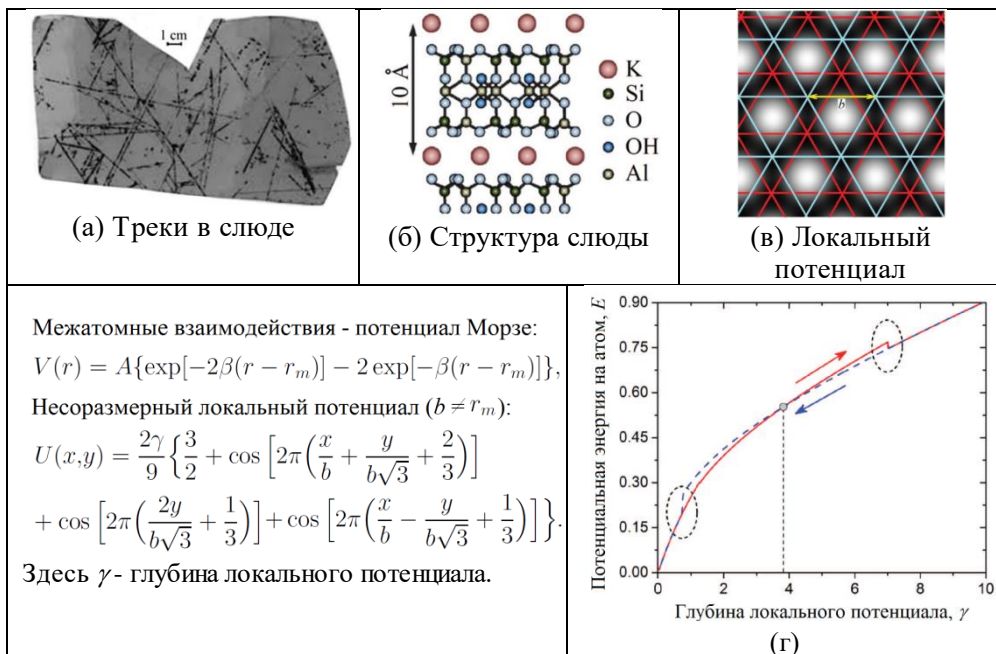


Рисунок 17. (а) Треки в кристалле слюды. (б) Атомная структура слюды. (в) Локальный потенциал. Черный (белый) цвет соответствует минимуму (максимуму) энергии. (г) Зависимость энергии модели от глубины локального потенциала.

Ввиду отличия шагов решетки двумерного кристалла и локального потенциала возникает сетка дислокаций несоответствия на которой атомы окрашены в черный цвет. Различные фазы отличаются структурой сетки

дислокаций несоответствия. При малых γ дислокации пересекаются [см. рисунок 18(а)] а при больших не пересекаются [см. рисунок 18(б)]. Нами было показано, что при низких температурах домены этих фаз сосуществуют, а при повышенных температурах происходит фазовый переход, когда площадь фазы с более низкой энергией растет за счет уменьшения площади другой фазы.

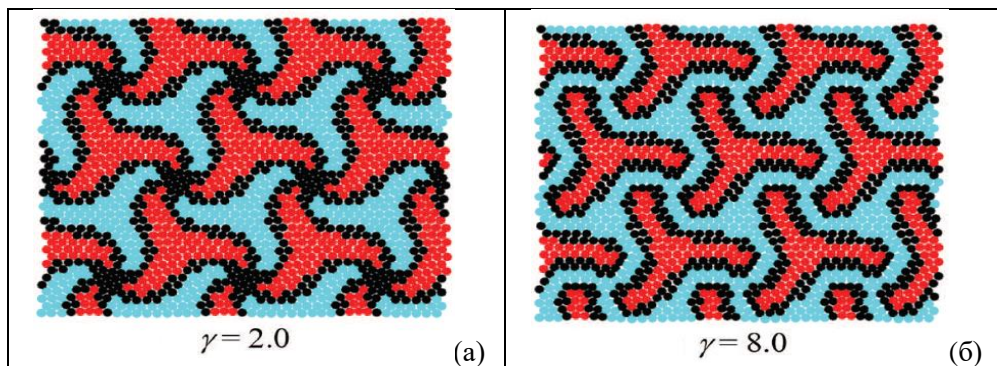


Рисунок 18. Структура дислокаций несоответствия при различных значениях глубины локального потенциала γ . Атомы, окрашенные в черный цвет, группируются вдоль линий дислокаций, они максимально удалены от минимумов локального потенциала. (а) Дислокации пересекаются. (б) Дислокации не пересекаются.

На основании полученных результатов был предложен механизм образования треков в кристаллах слюды. Предполагается, что моноатомный слой калия находится в бистабильном состоянии с повышенной энергией. Внешнее воздействие любой природы может инициировать фазовый переход в состояние с более низкой энергией. Морфология новой низкоэнергетической фазы определяется ее упругой энергией, и она может проявляться в виде относительно узкой полосы, которая, однако, имеет макроскопическую ширину порядка долей миллиметра. Эта новая фаза возникает из-за движения диссипативного солитона (волны переключения). Его распространение сопровождается выделением энергии и связано с переходом системы в более низкое энергетическое состояние. Такое преобразование не ограничено в пространстве, и волна переключения может распространяться на макроскопические расстояния. Новая фаза может стать центром диффузионного поглощения атомов железа, что со временем снизит прозрачность трансформированной области, и в слюде появится макроскопический трек, видимый невооруженным глазом.

Основные результаты и выводы:

1. Для квадратной решетки с потенциалом -ФПУ, для ГЦК решетки Морзе, а также для ОЦК металлов Nb и V с многочастичными ЕАМ потенциалами взаимодействия были изучены свойства ДНКМ и выявлены ДНКМ с частотами выше фононного спектра. Такие ДНКМ, как правило, порождают хаотические ДБ в результате развития модуляционной неустойчивости.
2. Добавление локального потенциала треугольной -ФПУ решетке приводит к появлению новой ДНКМ с синхронным движением всех частиц, и открывает возможность существования щелевых ДБ если локальный потенциал имеет мягкий тип нелинейности, поскольку в этом случае частота ДНКМ лежит ниже фононного спектра.
3. Наложение локализирующих функций на ДНКМ с частотами вне фононного спектра является продуктивным подходом к поиску новых типов ДБ в нелинейных решетках. Таким образом были найдены новые типы ДБ в треугольной решетке с потенциалом -ФПУ и в ОЦК металлах Nb и V.
4. Показана возможность существования движущихся ДБ в ГПУ металлах Be и Zr. ДБ в бериллии имеют существенно более высокую частоту, что объясняется существенно меньшей массой атома бериллия по сравнению с массой атома циркония. Максимальная скорость движения ДБ в бериллии (цирконии) составляет 27% (22%) от скорости продольного звука.
5. Все изученные ДНКМ треугольной решетки Морзе и гексагональной решетки графена оказались устойчивыми для амплитуд меньше порогового значения. Пороговые амплитуды составляют порядка 1% от межатомного расстояния.
6. ДБ с жестким типом нелинейности в треугольной -ФПУ решетке повышают отношение кинетической энергии к потенциальной, снижают давление в решетке и константы упругости.
7. Движущийся ДБ при взаимодействии с вакансией в модельной двумерной решетке Морзе снижает потенциальный барьер миграции вакансии. Если скорость движения ДБ меньше пороговой, наблюдается практически упругий отскок ДБ от вакансии, в противном случае ДБ разрушается, натолкнувшись на вакансию. Наиболее сильное снижение порога миграции вакансии наблюдается для случая, когда ДБ упруго отражается от вакансии.
8. Возможным объяснением механизма формирования темных треков в кристалле слюды мусковита является распространение волн переключения в бистабильном монослое ионов калия. Выделение энергии при движении волны переключения способствует её безостановочному распространению на макроскопические расстояния. Структура позади волны переключения отличается от исходной и может способствовать образованию магнетита, окрашивающего новую фазу в темный цвет.

Цитированная литература:

1. Sakhnenko V. P., Chechin G. M. Symmetrical selection rules in nonlinear dynamics of atomic systems. *Phys. Dokl.* **38**, 219 (1993).
2. Sakhnenko V. P., Chechin G. M. Bushes of modes and normal modes for nonlinear dynamical systems with discrete symmetry. *Phys. Dokl.* **39**, 625 (1994).
3. Chechin G. M., Sakhnenko V. P. Interactions between normal modes in nonlinear dynamical systems with discrete symmetry. Exact results. *Physica D* **117**, 43 (1998).
4. Burlakov V. M., Kiselev, S. Molecular-dynamics simulation of the decay kinetics of uniform excitation of an anharmonic 1D chain. *Sov. Phys. JETP* **72**, 854 (1991).
5. Mirnov V. V., Lichtenberg A. J., Guclu H. Chaotic breather formation, coalescence, and evolution to energy equipartition in an oscillatory chain. *Physica D* **157**, 251 (2001).
6. Ullmann K., Lichtenberg A. J., Corso G. Energy equipartition starting from high-frequency modes in the Fermi-Pasta-Ulam β oscillator chain. *Phys. Rev. E* **61**, 2471 (2000).
7. Kosevich Yu. A., Lepri S. Modulational instability and energy localization in anharmonic lattices at finite energy density. *Phys. Rev. B* **61**, 299 (2000).
8. Cretegny T., Dauxois T., Ruffo S., Torcini A. Localization and equipartition of energy in the β -FPU chain: Chaotic breathers. *Physica D* **121**, 109 (1998).
9. Tang B., Deng K. Discrete breathers and modulational instability in a discrete ϕ^4 nonlinear lattice with next-nearest-neighbor couplings. *Physica D* **88**, 2417 (2017).
10. Korznikova E. A., Bachurin D. V., Fomin S. Yu., Chetverikov A. P., Dmitriev S. V. Instability of vibrational modes in hexagonal lattice. *Eur. Phys. J. B* **90**, 23 (2017).
11. Kavitha L., Mohamadou A., Parasuraman E., Gopi D., Akila N., Prabhu A. Modulational instability and nano-scale energy localization in ferromagnetic spin chain with higher order dispersive interactions. *J. Magn. Magn. Mat.* **404**, 91 (2016).
12. Kavitha L., Parasuraman E., Gopi D., Prabhu A., Vicencio R. A. Nonlinear nano-scale localized breather modes in a discrete weak ferromagnetic spin lattice. *J. Magn. Magn. Mat.* year **401**, 394 (2016).
13. Ikeda K., Doi Y., Feng B.-F., Kawahara T. Chaotic breathers of two types in a two-dimensional Morse lattice with an on-site harmonic potential. *Physica D* **225**, 184 (2007).

14. Dolgov A. S. On localization of oscillations in nonlinear crystal structure. *Sov. Phys. Solid State* 28, 907 (1986).
15. Sievers A. J., Takeno S. Intrinsic localized modes in anharmonic crystals. *Phys. Rev. Lett.* 61, 970 (1988).
16. Flach S., Willis C. R. Discrete breathers. *Phys. Rep.* 295, 181 (1998).
17. Flach S., Gorbach A. V. Discrete breathers - Advances in theory and applications. 467, 1 (2008).
18. Dmitriev S. V., Korznikova E. A., Baimova J. A., Velarde M. G. Discrete breathers in crystals. *Phys. Usp.* 59, 446 (2016).
19. Kiselev S. A., Sievers A. J. Generation of intrinsic vibrational gap modes in three-dimensional ionic crystals. *Phys. Rev. B* 55, 5755 (1997).
20. Khadeeva L. Z., Dmitriev, S. V. Discrete breathers in crystals with NaCl structure. *Phys. Rev. B* 81, 214306 (2010).
21. Voulgarakis N. K., Hadjisavvas G., Kelires P. C., Tsironis G. P. Computational investigation of intrinsic localization in crystalline Si. *Phys. Rev. B* 69, 113201 (2004).
22. Murzaev R. T., Bachurin D. V., Korznikova E. A., Dmitriev S. V. Localized vibrational modes in diamond *Phys. Lett. A* 381, 1003 (2017).
23. Murzaev R. T., Babicheva R. I., Zhou K., Korznikova E. A., Fomin S. Y., Dubinko V. I., Dmitriev S. V. Discrete breathers in alpha-uranium. *Eur. Phys. J. B* 89, 168 (2016).
24. Barani E., Lobzenko I. P., Korznikova E. A., Soboleva E. G., Dmitriev S. V., Zhou K., Marjaneh A. M. Transverse discrete breathers in unstrained graphene. *Eur. Phys. J. B* 90, 38 (2017).
25. Manley M. E., Sievers A. J., Lynn J. W. et al. Intrinsic localized modes observed in the high-temperature vibrational spectrum of NaI. *Phys. Rev. B* 79, 134304 (2009).
26. Manley M. E., Abernathy D. L., Agladze N. I. et al. Symmetry-breaking dynamical pattern and localization observed in the equilibrium vibrational spectrum of NaI. *Sci. Rep.* 1, 4 (2011).
27. Flach S., Kladko K. Moving discrete breathers? *Physica D* 127, 61 (1999).
28. Kopidakis G., Aubry S., Tsironis G. P. Targeted energy transfer through discrete breathers in nonlinear systems. *Phys. Rev. Lett.* 87, 165501 (2001).
29. Aubry S., Cretegny T. Mobility and reactivity of discrete breathers. *Physica D* 119, 34 (1998).
30. Archilla J. F. R., Doi Y., Kimura M. Pterobreaters in a model for a layered crystal with realistic potentials: Exact moving breathers in a moving frame. *Phys. Rev. E* 100, 022206 (2019).

31. Yoshimura K., Doi Y. Moving discrete breathers in a nonlinear lattice: Resonance and stability. *Wave Motion* 45, 83 (2007).
32. Doi Y., Yoshimura K. Construction of nonlinear lattice with potential symmetry for smooth propagation of discrete breather. *Nonlinearity* 33, 5142 (2020).
33. Doi Y., Yoshimura K. Symmetric potential lattice and smooth propagation of tail-free discrete breathers. *Phys. Rev. Lett.* 117, 014101 (2016).
34. Haas M., Hizhnyakov V., Shelkan A., Klopov M., Sievers A. J. Prediction of high-frequency intrinsic localized modes in Ni and Nb. *Phys. Rev. B* 84, 144303 (2011).
35. Kistanov A. A., Murzaev R. T., Dmitriev S. V., Dubinko V. I., Khizhnyakov V. V. Moving discrete breathers in a monoatomic two-dimensional crystal. *JETP Lett.* 99, 353 (2014).
36. Page J. B. Asymptotic solutions for localized vibrational modes in strongly anharmonic periodic systems. *Phys. Rev. B* 41, 7835 (1990).
37. MacKay R. S., Aubry S. Proof of existence of breathers for time-reversible or Hamiltonian networks of weakly coupled oscillators. *Nonlinearity* 7, 1623 (1994).
38. Bambusi D. Exponential stability of breathers in Hamiltonian networks of weakly coupled oscillators. *Nonlinearity* 9, 433 (1996).
39. Yoshimura K. Stability of discrete breathers in nonlinear Klein-Gordon type lattices with pure anharmonic couplings. *J. Math. Phys.* 53, 102701 (2012).
40. Livi R., Spicci M., MacKay R. S. Breathers on a diatomic FPU chain. *Nonlinearity* 10, 1421 (1997).
41. Alfimov G. L., Brazhnyi V. A., Konotop V. V. On classification of intrinsic localized modes for the discrete nonlinear Schrodinger equation. *Physica D* 194, 127 (2004).
42. Yoshimura K. Existence and stability of localized modes in one-dimensional nonlinear lattices. *AIP Conf. Proc.* 1474, 59 (2012).
43. Chechin G. M., Dzhelauhova G. S., Mehonoshina E. A. Quasibreathers as a generalization of the concept of discrete breathers. *Phys. Rev. E* 74, 036608 (2006).
44. Manley M. E. Impact of intrinsic localized modes of atomic motion on materials properties. *Acta Mater.* 58, 2926 (2010).
45. Manley M. E., Yethiraj M., Sinn H. et al. Formation of a new dynamical mode in α -uranium observed by inelastic X-ray and neutron scattering. *Phys. Rev. Lett.* 96, 125501 (2006).
46. Manley M. E., Yethiraj M., Sinn H. et al. Intrinsically localized vibrations and the mechanical properties of alpha-uranium. *J. Alloy. Compd.* 444, 129 (2007).

47. Mihaila B., Opeil C. P., Drymiotis F. R. et al. Pinning frequencies of the collective modes in alpha-uranium. *Phys. Rev. Lett.* 96, 076401 (2006).
48. Бахвалов Н. С. Численные методы (анализ, алгебра, обыкновенные дифференциальные уравнения), М.: Наука, 1975, 632 с.
49. Mendeleev M. I., Han S., Son W., Ackland G. J., Srolovitz D. J. Simulation of the interaction between Fe impurities and point defects in V. *Phys. Rev. B* 76, 214105 (2007).
50. Fellingner M.R., Park H., Wilkins J. W. Simulation of the interaction between Fe impurities and point defects in V. *Phys. Rev. B* 81, 144119 (2010).
51. Savin A. V., Kivshar Y. S., Hu B. Suppression of thermal conductivity in graphene nanoribbons with rough edges. *Phys. Rev. B* 82, 195422 (2010).

Список публикаций автора по теме диссертации в изданиях, рекомендованных ВАК РФ:

1) Публикации из международных баз данных Scopus и/или Web of Science

1. Morkina A.Y., Bachurin D.V., Dmitriev S.V., Semenov A.S., Korznikova E.A. Modulational Instability of Delocalized Modes in fcc Copper (2022) *Materials*, 15 (16), статья № 5597.
2. Kosarev I.V., Dmitriev S.V., Semenov A.S., Korznikova E.A. Stability of Strained Stanene Compared to That of Graphene (2022) *Materials*, 15 (17), статья № 5900.
3. Babicheva R.I., Semenov A.S., Shcherbinin S.A., Korznikova E.A., Kudreyko A.A., Vivegananthan P., Zhou K., Dmitriev S.V. Effect of the stiffness of interparticle bonds on properties of delocalized nonlinear vibrational modes in an fcc lattice (2022) *Physical Review E*, 105, статья № 064204.
4. Semenov, A., Semenova, M., Bebikhov, Y., Yakushev, I. Mathematical modeling of physical processes in metals and ordered alloys (2022) *Smart Innovation, Systems and Technologies*, 247, pp. 437-449.
5. Morkina A.Y., Semenov A.S., Korznikova E.A. Nonlinear motion-induced anisotropy in FCC Cu (2022) *AIP Conference Proceedings*, 2533, статья № 020023.
6. Galiakhmetova L., Semenov A. Delocalized nonlinear vibrational modes in Fermi-Pasta-Ulam triangular lattice with an on-site potential (2022) *AIP Conference Proceedings*, 2533, статья № 020028.

7. Semenov, A.S., Semenova, M.N., Bebikhov, Y.V., Zakharov, P.V., Korznikova, E.A. Simulating Nonlinear Dynamics of a 3D Crystal Lattice of Metals (2021) Journal of Physics: Conference Series, 2131(3), статья № 032092.

8. Poletaev, G.M., Bebikhov, Yu.V., Semenov, A.S., Rakitin, R.Yu. Molecular dynamics study of the influence of supercooling temperature and orientation of the crystallization front on its velocity in silver (2021) Journal of Physics: Conference Series, 2131(4), статья № 042053.

9. Poletaev, G.M., Bebikhov, Yu.V., Semenov, A.S., Starostenkov, M.D. Self-diffusion in melts of Ni-Al and Ti-Al systems: molecular dynamics study (2021) Letters on Materials, 11 (4), pp. 438-441.

10. Murzaev, R.T., Semenov, A.S., Potekaev, A.I., Starostenkov, M.D., Zakharov, P.V., Kulagina, V.V., Dmitriev, S.V. Spatially localized oscillations in low-stability states of metal systems (2021) Russian Physics Journal, 64 (2), pp. 293-301. (Мурзаев Р.Т., Семёнов А.С., Потекаев А.И., Старостенков М.Д., Захаров П.В., Кулагина В.В., Дмитриев С.В. Пространственно локализованные колебания в слабоустойчивых состояниях металлических систем // Известия высших учебных заведений. Физика. 2021. Т. 64. № 2 (758). С. 91-99.).

11. Babicheva, R.I., Semenov, A.S., Soboleva, E.G., Kudreyko, A.A., Zhou, K., Dmitriev, S.V. Discrete breathers in a triangular β -Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou lattice (2021) Physical Review E, 103 (5), статья № 052202.

12. Bayazitov, A.M., Korznikova, E.A., Semenov, A.S., Borisov, D.I., Dmitriev, S.V. Interaction of supersonic 2-crowdions in fcc platinum (2020) IOP Conference Series: Materials Science and Engineering, 1008 (1), статья № 012068.

13. Sunagatova, I.R., Subkhangulova, A.M., Semenova, M.N., Borisov, D.I., Semenov, A.S., Dmitriev, S.V. Properties of one-dimensional nonlinear vibrational modes in triangular lattice with Lennard-Jones interactions (2020) IOP Conference Series: Materials Science and Engineering, 1008 (1), статья № 012073.

14. Krylova, K.A., Lobzenko, I.P., Semenov, A.S., Kudreyko, A.A., Dmitriev, S.V. Spherically localized discrete breathers in bcc metals V and Nb (2020) Computational Materials Science, 180, статья № 109695.

15. Poletaev, G.M., Zorya, I.V., Rakitin, R.Y., Semenov, A.S., Starostenkov, M.D. Influence of carbon and oxygen impurities on migration velocity of grain-boundary triple junctions in fcc metals (2020) Russian Physics Journal, 62 (10), pp. 1840-1845. (Полетаев Г.М., Зоря И.В., Ракитин Р.Ю., Семёнов А.С.,

Старостенков М.Д. Влияние примесных атомов углерода и кислорода на скорость миграции тройных стыков границ наклона в ГЦК-металлах // Известия высших учебных заведений. Физика. 2019. Т. 62. № 10 (742). С. 83-87.).

16. Krylova, K.A., Korznikova, E.A., Semenov, A.S., Bachurin, D.V., Dmitriev, S.V. Linking tracks in mica crystals with phase transitions in a bistable lattice (2020) European Physical Journal B, 93 (2), статья № 23.

17. Shepelev, I.A., Korznikova, E.A., Bachurin, D.V., Semenov, A.S., Chetverikov, A.P., Dmitriev, S.V. Supersonic crowdion clusters in 2D Morse lattice (2020) Physics Letters, Section A: General, Atomic and Solid State Physics, 384 (1), статья № 126032.

18. Poletaev, G.M., Novoselova, D.V., Rakitin, R.Y., Semenov, A.S. Modeling the formation of free volume at grain boundaries and triple junctions during nickel crystallization (2020) Letters on Materials, 10 (3), pp. 299-302.

19. Semenov, A.S., Murzaev, R.T., Bebikhov, Y.V., Kudreyko, A.A., Dmitriev, S.V. New types of one-dimensional discrete breathers in a two-dimensional lattice (2020) Letters on Materials, 10 (2), pp. 185-188.

20. Dmitriev S.V., Semenov A.S., Savin A.V., Ilgamov M.A., Bachurin D.V. Rotobreather in a carbon nanotube bundle (2020) Journal of Micromechanics and Molecular Physics, 5 (3), статья № 2050010.

21. Korznikova, E.A., Sunagatova, I.R., Bayazitov, A.M., Semenov, A.S., Dmitriev, S.V. Effect of interatomic potentials on mass transfer by supersonic 2-crowdions (2019) Letters on Materials, 9 (4), pp. 386-390.

22. Abdullina, D.U., Semenova, M.N., Semenov, A.S., Korznikova, E.A., Dmitriev, S.V. Stability of delocalized nonlinear vibrational modes in graphene lattice (2019) European Physical Journal B, 92 (11), статья № 249.

23. Shcherbinin, S.A., Semenova, M.N., Semenov, A.S., Korznikova, E.A., Chechin, G.M., Dmitriev, S.V. Dynamics of a three-component delocalized nonlinear vibrational mode in graphene (2019) Physics of the Solid State, 61 (11), pp. 2139-2144. (Щербинин С.А., Семёнова М.Н., Семёнов А.С., Корзникова Е.А., Чечин Г.М., Дмитриев С.В. Динамика трехкомпонентной делокализованной нелинейной колебательной моды в графене // Физика твердого тела. 2019. Т. 61. № 11. С. 2163-2168.).

24. Babicheva, R.I., Semenov, A.S., Dmitriev, S.V., Zhou, K. Effect of grain boundary segregations on martensitic transformation temperatures in NiTi bi-crystals (2019) *Letters on Materials*, 9 (2), pp. 162-167.

25. Abdullina, D.U., Semenova, M.N., Semenov, A.S., Ryabov, D.S., Chechin, G.M., Korznikova, E.A., Baimova, J.A., Dmitriev, S.V. Stability of in-plane delocalized vibrational modes in triangular Morse lattice (2018) *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, 447 (1), статья № 012060.

26. Bachurina, O.V., Murzaev, R.T., Semenova, M.N., Semenov, A.S., Ryabov, D.S., Chechin, G.M., Korznikova, E.A., Dmitriev, S.V. Two-dimensional discrete breathers in hcp titanium (2018) *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, 447 (1), статья № 012033.

27. Bachurina, O.V., Murzaev, R.T., Semenov, A.S., Korznikova, E.A., Dmitriev, S.V. Properties of moving discrete breathers in beryllium (2018) *Physics of the Solid State*, 60 (5), pp. 989-994. (Бачурина О.В., Мурзаев Р.Т., Семёнов А.С., Корзникова Е.А., Дмитриев С.В. Свойства движущихся дискретных бризеров в бериллии // *Физика твердого тела*. 2018. Т. 60. № 5. С. 978-983.).

28. Semenov, A.S., Fomin, S.Y., Zhou, K., Soboleva, E.G. Hard-type anharmonicity gap discrete breather in 2D biatomic crystal (2017) *Letters on Materials*, 7 (3), pp. 327-331.

29. Semenov, A.S., Bebikhov, Y.V., Kistanov, A.A. Simulation of energy transport in crystal with NaCl structure assisted by discrete breathers (2017) *Letters on Materials*, 7 (2), pp. 77-80.

30. Semenov, A.S., Korznikova, E.A., Dmitriev, S.V. Discrete breathers with hard and soft type of nonlinearity in 1D Morse lattices with long-range interactions (2015) *Letters on Materials*, 5 (1), pp. 11-14.

31. Kistanov, A.A., Semenov, A.S., Dmitriev, S.V. Properties of moving discrete breathers in a monoatomic two-dimensional crystal (2014) *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 119 (4), pp. 766-771. (Кистанов А.А., Семёнов А.С., Дмитриев С.В. Свойства движущихся дискретных бризеров в моноатомном двумерном кристалле // *Журнал экспериментальной и теоретической физики*. 2014. Т. 146. № 4. С. 869-875.).

32. Kistanov, A.A., Dmitriev, S.V., Semenov, A.S., Dubinko, V.I., Terent'ev, D.A. Interaction of propagating discrete breathers with a vacancy in a two-dimensional crystal (2014) *Technical Physics Letters*, 40 (8), pp. 657-661. (Кистанов

А.А., Дмитриев С.В., Семёнов А.С., Дубинко В.И., Терентьев Д.А. Взаимодействие движущихся дискретных бризеров с вакансией в двумерном кристалле // Письма в Журнал технической физики. 2014. Т. 40. № 15. С. 58-65.).

2) Публикации из перечня ВАК

33. Семёнов А.С., Семёнова М.Н., Бебихов Ю.В., Хазимуллин М.В. Моделирование процессов молекулярной динамики в двумерных и трехмерных кристаллических структурах // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2022. Т. 19. № 1. С. 77-84.

34. Семёнов А.С., Семёнова М.Н., Упадхья А., Дмитриев С.В. Хаотические дискретные бризеры в треугольной решетке Ферми-Паста-Улама // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2021. Т. 18. № 4. С. 459-469.

35. Шепелев И.А., Семёнов А.С., Дмитриев С.В., Корзникова Е.А. Исследование ударных волн в графене методом молекулярной динамики // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2020. Т. 17. № 2. С. 188-194.

36. Лобзенко И.П., Халиков А.Р., Шарапов Е.А., Корзникова Е.А., Семёнов А.С., Дмитриев С.В. Моделирование методом Монте-Карло процесса диффузионной сварки двух металлов через прокладку // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2019. Т. 16. № 1. С. 47-54.

37. Халиков А.Р., Шарапов Е.А., Семёнов А.С., Валитов В.А., Дмитриев С.В. Моделирование структуры жаропрочных сплавов ВКНА-25 и ЭП975 методом Монте-Карло // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2019. Т. 16. № 4. С. 429-436.

38. Сунагатова И.Р., Семёнов А.С., Баязитов А.М., Корзникова Е.А. Динамика сверхзвуковых 2-краудионов в нелинейных двумерных решетках // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2019. Т. 16. № 4. С. 482-488.

39. Семёнова М.Н., Семёнов А.С., Дмитриев С.В. Некоторые физические свойства делокализованных нелинейных колебательных мод в графене // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2019. Т. 16. № 4. С. 501-510.

40. Семёнова М.Н., Семёнов А.С., Бебихов Ю.В., Рябов Д.С., Чечин Г.М., Рахматуллина Ж.Г., Корзникова Е.А., Дмитриев С.В. Некоторые характеристики одномерных делокализованных нелинейных колебательных мод треугольной решетки с Морзевским взаимодействием // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2018. Т. 15. № 2. С. 257-264.

41. Семёнов А.С., Мурзаев Р.Т., Кистанов А.А., Бебихов Ю.В. Исследование дискретных бризеров в ГПУ металлах бериллии и цирконии // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2015. Т. 12. № 1. С. 26-30.

42. Кистанов А.А., Семёнов А.С., Дмитриев С.В. О задании начальных условий для моделирования движущихся дискретных бризеров в моноатомном двумерном кристалле // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2014. Т. 11. № 2. С. 223-227.

43. Кистанов А.А., Семёнов А.С. Столкновение движущихся дискретных бризеров в двумерном моноатомном кристалле // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2014. Т. 11. № 2. С. 241-244.

44. Кистанов А.А., Семёнов А.С., Мурзаев Р.Т., Дмитриев С.В. Неподвижные и движущиеся дискретные бризеры в ГПУ металле Co // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2014. Т. 11. № 3. С. 322-325.

45. Кистанов А.А., Семёнов А.С., Мурзаев Р.Т., Дмитриев С.В. Взаимодействие движущихся дискретных бризеров в ГПУ металле Mg // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2014. Т. 11. № 4-2. С. 572-577.

3) Результаты интеллектуальной деятельности (патенты и свидетельства)

46. Бебихов Ю.В., Семёнов А.С., Семёнова М.Н., Якушев И.А. Программа выбора потенциала межчастичного взаимодействия для молекулярно-динамического моделирования // *Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ 2022662820 от 07.07.2022. Заявка № 2022662053 от 29.06.2022.*

47. Семёнов А.С., Семёнова М.Н., Якушев И.А., Бебихов Ю.В. Программа математического моделирования физических процессов в металлах и

упорядоченных сплавах // Свидетельство о регистрации программы для ЭВМ 2021615775 от 13.04.2021. Заявка № 2021614436 от 02.04.2021.

4) Другие публикации (в журналах РИНЦ и сборниках трудов конференций)

48. Semenova M.N., Semenov A.S., Sabychikova A.A. Nonlinear oscillations in crystal lattices of metals under forced actions at terahertz frequencies // Journal of Advanced Research in Technical Science. 2022. № 30. С. 110-112.

49. Семёнов А.С. Анализ явлений вынужденных нелинейных колебаний в кристаллических решетках металлов // Молодежь и научно-технический прогресс в современном мире: сборник материалов XI-й Всероссийской научно-практической конференции студентов, аспирантов и молодых ученых. Мирный, 2022. С. 139-142.

50. Cherednichenko A.I., Starostenkov M.D., Bebihov Ju.V., Semenov A.S., Zakharov P.V. Investigation of the characteristics of a discrete breather in the CuPt alloy // Materials in external fields: proceedings of the 11th International online symposium. Novokuznetsk, 2022. С. 71-73.

51. Семёнов А.С., Рябов Д.С., Чечин Г.М., Дмитриев С.В. Локализованные и делокализованные нелинейные колебательные моды треугольной решетки // Комплексный анализ, математическая физика и нелинейные уравнения. Сборник тезисов Международной научной конференции. Уфа, 2021. С. 64-65.

52. Семёнов А.С., Якушев И.А. Математическое моделирование физических процессов в двумерных и трехмерных кристаллических структурах // Актуальные вопросы теплофизики, энергетики и гидрогазодинамики в условиях Арктики. Тезисы Всероссийской научно-практической конференции с международным участием, посвященной 85-летию со дня рождения заслуженного деятеля науки РФ и ЯАССР, д.т.н., профессора Э.А. Бондарева. Киров, 2021. С. 274-276.

53. Семёнова М.Н., Семёнов А.С., Бебихов Ю.В., Якушев И.А. Математическое моделирование физических процессов в металлических кристаллических решетках // Вестник Северо-Восточного федерального университета им. М.К. Аммосова. 2021. № 4 (84). С. 15-28.

54. Семёнов А.С., Мурзаев Р.Т., Захаров П.В., Дмитриев С.В., Старostenkov M.D., Полетаев Г.М. Пространственно локализованные и делокализованные нелинейные колебания в кристаллах // Современные

наноматериалы. Глава в коллективной монографии. Новокузнецк, 2020. С. 295-319.

55. Шепелев И.А., Семёнов А.С., Дмитриев С.В., Корзникова Е.А. Атомистическое моделирование ударных волн в графене // Ультрамелкозернистые и наноструктурные материалы. Сборник трудов Открытой школы-конференции стран СНГ. Отв. редактор А.А. Назаров. 2020. С. 63-65.

56. Sharapov E.A., Korznikova E.A., Semenov A.S., Dmitriev S.V. Crystal geometry of defectless three component L21 superstructure for antiphase boundaries specification in Heusler type compounds // Materials. Technologies. Design. 2020. Т. 2. № 1 (2). С. 23-28.

57. Дмитриев С.В., Семёнов А.С. Влияние дискретных бризеров на макроскопические свойства нелинейных цепочек // XII Всероссийский съезд по фундаментальным проблемам теоретической и прикладной механики. Сборник трудов. В 4-х томах. 2019. С. 548-549.

58. Семёнов А.С., Корзникова Е.А., Дмитриев С.В. Влияние on-site потенциала на возможность существования дискретных бризеров в цепочке атомов с реалистичным потенциалом взаимодействия // Эволюция дефектных структур в конденсированных средах. Сборник тезисов XV Международной школы-семинара. 2018. С. 110-111.

59. Семёнов А.С., Корзникова Е.А., Дмитриев С.В., EvazzadeI., ShahreeS.G. Двухфазное растяжение углеродной нанотрубки // Новые материалы и технологии. Сборник научных статей VI Российско-Казахстанской молодежной научно-технической конференции. 2018. С. 135-141.

60. Семёнова М.Н., Абдуллина Д.У., Семёнов А.С., Корзникова Е.А., Дмитриев С.В. Устойчивость делокализованной нелинейной моды в решетке графена в присутствии нормальных возмущений // Новые материалы и технологии. Сборник научных статей VI Российско-Казахстанской молодежной научно-технической конференции. 2018. С. 141-148.

61. Семёнов А.С., Дмитриев С.В. Дискретные бризеры в кристаллических материалах // Современное состояние и проблемы естественных наук. Сборник трудов Всероссийской научно-практической конференции молодых ученых, аспирантов и студентов. Юргинский технологический институт. 2014. С. 14-16.

62. Семёнов А.С. Дискретные бризеры в α -Ti // Физикохимия и технология неорганических материалов. XI Российская ежегодная конференция молодых научных сотрудников и аспирантов (с международным участием), сборник материалов. Москва, 2014. С. 172-173.

63. Кистанов А.А., Семёнов А.С. Взаимодействие движущегося дискретного бризера с вакансией на примере двумерного кристалла // Теоретические и экспериментальные исследования в конденсированных средах. Тезисы докладов научно-практической конференции студентов, аспирантов и молодых ученых-физиков. 2014. С. 18-19.

64. Кистанов А.А., Семёнов А.С. Свойства движущихся дискретных бризеров в ГПУ металле Co // Фундаментальная математика и ее приложения в естествознании. VII Международная школа-конференция для студентов, аспирантов и молодых ученых. 2014. С. 293-295.

65. Семёнов А.С., Кистанов А.А. Движущийся дискретный бризер в ГПУ металле α -Ti // Фундаментальная математика и ее приложения в естествознании. VII Международная школа-конференция для студентов, аспирантов и молодых ученых. 2014. С. 296-299.

Подписано в печать 12.12.2022.
Печать – цифровая. Усл. п. л. 2,7.
Тираж 100 экз. Заказ 2022-44

Отпечатано в типографии АлтГТУ,
656038, г. Барнаул, пр-т Ленина, 46
тел.: (8-3852) 36-84-61

Лицензия на полиграфическую деятельность
ПЛД № 28-35 от 15.07.97 г.