

ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ (ФИЛИАЛ) ФГАОУ ВО
"СЕВЕРО-ВОСТОЧНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМ. М.К.
АММОСОВА" В Г. МИРНОМ

На правах рукописи



Семёнов Александр Сергеевич

**ПРОСТРАНСТВЕННО ЛОКАЛИЗОВАННЫЕ И
ДЕЛОКАЛИЗОВАННЫЕ КОЛЕБАНИЯ
НЕЛИНЕЙНЫХ РЕШЕТОК**

Специальность 1.3.8. «Физика конденсированного состояния»

Диссертация на соискание учёной степени
доктора физико-математических наук

Научный консультант:
д.ф.-м.н., профессор
Дмитриев Сергей Владимирович

Мирный - 2022

Оглавление

Введение	6
Глава 1. Нелинейная динамика решеток: достижения и	
открытые проблемы	15
1.1 Нелинейные эффекты в дискретных моделях	15
1.1.1 Типы нелинейных колебаний решеток	16
1.1.2 Условия существования пространственно локализованных колебаний	18
1.1.3 Движущиеся ДБ	20
1.2 Характеристика различных нелинейных моделей решеток	21
1.2.1 Мягкий и жесткий тип нелинейности	21
1.2.2 Наличие локального потенциала	22
1.2.3 Простые и сложные (многокомпонентные) решетки	24
1.2.4 Учет дальнего действия	25
1.2.5 Размерность решетки	26
1.2.6 Скалярные и векторные решетки	28
1.2.7 Связь между свойствами решетки и свойствами нелинейных колебательных мод	29
1.3 Экспериментальные исследования нелинейной динамики модельных и кристаллических решеток	30
1.4 Влияние локализованных и делокализованных колебаний на физические и механические свойства решеток	34
1.4.1 Влияние ДБ на свойства решеток	34
1.4.2 Влияние ДНКМ на свойства решеток	35
1.5 Точечные дефекты в нелинейных решетках	35
1.6 Выводы по главе 1	37
Глава 2. ДНКМ двумерных решеток	
2.1 ДНКМ треугольной решетки	40
2.1.1 Однокомпонентные ДНКМ треугольной решетки	40

2.1.2	Влияние локального потенциала на свойства однокомпонентных ДНКМ треугольной решетки	43
2.1.3	Двухкомпонентные ДНКМ треугольной решетки	48
2.1.4	ДНКМ треугольной решетки Морзе и их устойчивость	48
2.2	ДНКМ квадратной решетки с потенциалом β -ФПУ	57
2.2.1	Квадратная β -ФПУ решетка	57
2.2.2	Дисперсионные соотношения фононных колебаний	60
2.2.3	Однокомпонентные ДНКМ квадратной решетки	63
2.2.4	Аналитические результаты для некоторых однокомпонентных ДНКМ	66
2.2.5	Частотные характеристики однокомпонентных ДНКМ	71
2.2.6	Кинетическая и потенциальная энергии однокомпонентных ДНКМ	76
2.2.7	Механические напряжения, создаваемые ДНКМ	79
2.2.8	Влияние ДНКМ на константы жесткости квадратной решетки	81
2.3	Устойчивость однокомпонентных ДНКМ решетки графена	83
2.3.1	Детали моделирования	83
2.3.2	Анализ неустойчивости ДНКМ	85
2.3.3	Обсуждение результатов	89
2.4	Трехкомпонентная ДНКМ решетки графена	92
2.4.1	Детали компьютерного эксперимента	92
2.4.2	Результаты моделирования	94
2.4.3	Обсуждение результатов и заключение	100
2.5	Выводы по главе 2	102
Глава 3. ДБ двумерных решеток		105
3.1	Хаотические дискретные бризеры треугольной β -ФПУ решетки	105
3.1.1	Треугольная β -ФПУ решетка, ДНКМ с частотами выше фононного спектра и макроскопические характеристики	105
3.1.2	Локализация энергии на хаотических ДБ и эволюция макроскопических параметров треугольной решетки	112
3.2	Новые ДБ, основанные на ДНКМ треугольной решетки	120
3.2.1	Описание модели и деталей моделирования	120
3.2.2	Аналитические результаты	125

3.2.3 Свойства ДНКМ	134
3.2.4 Дискретные бризеры	137
3.3 ДБ в треугольной решетке β -ФПУ на основе ДНКМ цепочки	148
3.4 ДБ в треугольной решетке Леннарда-Джонса на основе ДНКМ цепочки	150
3.4.1 Описание модели	151
3.4.2 Результаты моделирования	153
3.5 Движущиеся ДБ в треугольной решетке Морзе	157
3.6 Щелевой дискретный бризер с ангармонизмом жесткого типа в двумерном биатомном кристалле	162
3.7 Выводы по главе 3	167
Глава 4. ДНКМ трехмерных решеток	171
4.1 Влияние жесткости межатомных связей на свойства ДНКМ в ГЦК решетке Морзе	171
4.1.1 ГЦК решетка Морзе и её макроскопические свойства	171
4.1.2 Однокомпонентные ДНКМ ГЦК решетки	176
4.1.3 Последовательность выполняемых расчетов	176
4.1.4 Дисперсионные кривые фононов для ГЦК-решетки	178
4.1.5 Амплитудно-частотные характеристики ДНКМ	180
4.1.6 Энергия ДНКМ	184
4.1.7 Механический отклик решетки на возбуждение ДНКМ	184
4.2 ДНКМ ОЦК решетки	192
4.2.1 Постановка задачи и описание компьютерной модели	192
4.2.2 Результаты моделирования и обсуждение	193
4.3 Выводы по главе 4 и направления дальнейших исследований	197
Глава 5. ДБ трехмерных решеток	200
5.1 ДБ в ГПУ металлах	200
5.1.1 Движущиеся ДБ в бериллии и цирконии	200
5.1.2 Двумерный ДБ в титане	204
5.2 Сферически локализованные ДБ в ОЦК-металлах V и Nb	207
5.2.1 Постановка задачи и описание компьютерной модели	208
5.2.2 Дискретные бризеры в V и Nb	209

5.3	Перенос энергии дискретными бризерами в ионном кристалле со структурой NaCl	214
5.4	Выводы по главе 5	221
Глава 6. Решетки с топологическими дефектами		223
6.1	Влияние межатомных потенциалов на массоперенос сверхзвуковыми 2-краудионами	223
6.1.1	Описание модели и используемых потенциалов	224
6.1.2	Условие самофокусировки при движении сверхзвуковых краудионов	227
6.1.3	Влияние межатомных потенциалов на массоперенос сверхзвуковыми 2-краудионами	228
6.2	Взаимодействие движущегося ДБ с вакансией	231
6.2.1	Постановка компьютерного эксперимента	231
6.2.2	Полученные результаты	233
6.3	О возможной связи между треками в кристаллах слюды с фазовыми переходами в бистабильной решетке	237
6.3.1	Постановка проблемы	237
6.3.2	Двумерная модель кристалла слюды	241
6.3.3	Влияние глубины локального потенциала	244
6.3.4	Структурная устойчивость доменных стенок	248
6.3.5	Обсуждение результатов раздела 6.3 и заключительные замечания	252
6.4	Выводы по главе 6	253
Заключение		255
Благодарности		257
Список сокращений и условных обозначений		258
Список литературы		259
Список рисунков		281
Список таблиц		302

Введение

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). 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 фононного спектра решетки или выходить из него.

В пределе малых амплитуд ДНКМ превращаются в стоячие фононные 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 отщепляются от границ фононного спектра решетки и лежат вне его. В этом случае невозможна передача энергии ДНКМ непосредственно другим фононным 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 фононным модам из-за того, что частота ДНКМ не принадлежит фононному 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 достаточно выполнения 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]. Данные условия очень часто оказываются выполненными и, 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 настоящей 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 колебатель-

ных 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.

Всё 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:

1. 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.
2. Изучить влияние локального потенциала на свойства ДНКМ нелинейных решеток.
3. Продемонстрировать возможность построения новых типов ДБ в двумерных и трехмерных нелинейных решетках, включая кристаллы, путем наложения локализирующих функций на ДНКМ с частотами вне фононного спектра.

4. Исследовать возможность существования движущихся ДБ в ГПУ металлах.
5. 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.
6. Изучить взаимодействие движущегося ДБ с вакансией в модельной двумерной решетке Морзе.
7. Разработать модель двумерной решетки, проявляющей бистабильность, с целью предложить возможное объяснение механизма формирования темных треков в кристалле слюды мусковита.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Для всех исследованных двумерных и трехмерных решеток с парными и многочастичными потенциалами взаимодействия были изучены свойства ДНКМ и найдены ДНКМ с частотами выше фононного спектра. Такие ДНКМ, как правило, порождают ДБ в результате развития модуляционной неустойчивости.
2. Добавление локального потенциала треугольной β -ФПУ решетке приводит к появлению новой ДНКМ с синхронным движением всех частиц и открывает возможность существования целевых ДБ, если локальный потенциал имеет мягкий тип нелинейности.
3. Наложения локализирующих функций на ДНКМ с частотами вне фононного спектра является продуктивным подходом к поиску новых типов ДБ в нелинейных решетках.
4. ГПУ металлы Be и Zr поддерживают существование движущихся ДБ.
5. Все изученные ДНКМ двумерной решетки Морзе и графена оказались устойчивыми для амплитуд меньше порогового значения.
6. ДБ с жестким типом нелинейности в двумерной β -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.

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.

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 Be 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 модуляци-

- онной 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, использование 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.

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 школе-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 школе-конференции стран СНГ «Ультрамелкозернистые и наноструктурные материалы» (Уфа, 2014 г.); Международной школе-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 школе-семинаре «Эволюция дефектных структур в конденсированных средах» (Барнаул, 2018 г.); Открытой школе-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 «CHAOS 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 школе-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.); V Меж-

дународной 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 [52–75], в 13 статьях в журналах, рекомендованных ВАК и не входящих в международные базы данных [76–94], 18 публикаций в журналах РИНЦ и сборниках трудов конференций, имеется 2 свидетельства о регистрации программы для ЭВМ. Итого, общий список трудов автора по теме диссертации включает 65 наименований.

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

Глава 1. Нелинейная динамика решеток: достижения и открытые проблемы

В данной главе будет 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.

1.1 Нелинейные эффекты в дискретных моделях

В данной работе рассматриваются преимущественно ансамбли взаимодействующих частиц, имеющих трансляционную симметрию, в которых представительная ячейка периодически повторяется в пространстве. Такие объекты принято называть решетками.

Природа сил связи между частицами, составляющими решетку, может быть самой разной. Например, для научных, демонстрационных и образовательных целей создаются цепочки грузов, связанных пружинками [95], взаимодействующих обычных и магнитных маятников [96; 97], цепи из повторяющихся электрических колебательных контуров [98–100], массивы взаимодействующих микрокантелеверов [101–103], джозефсоновских сверхпроводящих контактов [104; 105], цепочки упругих элементов, имитирующих поведение гранулированных кристаллов [106; 107].

Существуют и нерукотворные периодические системы, например, кристаллы. Мир кристаллов тоже очень разнообразен, как по симметрии, по типу химических связей (молекулярные, ионные, ковалентные, металлические), так и по сложности трансляционной ячейки.

Во всех перечисленных выше периодических системах, включая кристаллы, взаимодействия между частицами можно считать линейными только для сравнительно малых амплитуд колебаний. С ростом отклонения частиц от положений равновесия силы взаимодействия между частицами начинают нелинейно зависеть от перемещений частиц. Отметим, что нелинейность взаимодействия

между частицами может иметь как *физическую*, так и чисто *геометрическую* природу. В первом случае сила связи между элементами нелинейно зависит от расстояния между ними, во втором случае нелинейность возникает при значительных перемещениях частиц за счет изменения проекций сил на координатные оси, даже если связь подчиняется нелинейному гукковскому закону [108; 109].

Ниже будут описаны основные эффекты, связанные с проявлением нелинейности взаимодействий в решетках частиц. Будут выделены те общие явления, которые наблюдаются в различных нелинейных системах в силу их одинаковой физической природы.

1.1.1 Типы нелинейных колебаний решеток

Анализ любой нелинейной решетки следует начинать с изучения её поведения в пределе малых амплитуд колебаний. В этом случае, используя хорошо разработанный аппарат [110—112], можно найти точные решения в виде *бегущих фононных волн* малой амплитуды. Важной характеристикой этих волн является связь между волновым вектором и частотой, которая определяет спектр фононных колебаний решетки. Фононные моды в линейных решетках не взаимодействуют друг с другом в силу принципа суперпозиции решений линейных дифференциальных уравнений.

С ростом амплитуды колебаний и включением нелинейных составляющих взаимодействия между частицами фононы начинают взаимодействовать друг с другом и обмениваться энергией.

Интересно, что некоторые фононные моды сохраняют свою индивидуальность и при больших амплитудах колебаний, если только не проявляется их неустойчивость. Существование таких особых фононных мод обусловлено симметрией решетки.

Мы приходим к понятию *делокализованных нелинейных колебательных мод* (ДНКМ), теория которых была разработана Чечиным и Сахненко [1—3]. В этих оригинальных работах ДНКМ назывались бушами нелинейных нормальных мод.

ДНКМ могут быть многокомпонентными, число компонент определяет число степеней свободы или число связанных уравнений движения, описывающих динамику всей решетки. Простейшие однокомпонентные ДНКМ имеют одну степень свободы и движение всех атомов решетки описывается одним динамическим уравнением. Таким образом, колебания всех атомов однокомпонентной ДНКМ происходят на одной частоте, которая зависит от амплитуды в силу нелинейности колебаний. ДНКМ, имеющая N компонент, характеризуется N , вообще говоря, несоразмерными частотами, которые также зависят от амплитуд составляющих компонент.

ДНКМ определяются из анализа только симметрии решетки [1–3] и поэтому, как точные решения уравнений движения частиц, они существуют вне зависимости от природы сил взаимодействия между частицами и для любых амплитуд колебаний.

Помимо делокализованных фононных колебаний и ДНКМ решетки также поддерживают *пространственно локализованные колебания*. Широкий класс таких колебания составляют колебания на дефектах решетки [110; 111]. Например, если один атом металла заменить более легким атомом, то он может колебаться с большой амплитудой, в то время как амплитуда колебаний соседних атомов будет убывать экспоненциально быстро с удалением от легкого атома. Локализованные колебания возможны не только на точечных, но и на многих других типах дефектов, например, на свободной поверхности кристаллов.

Напомним, что в данном диссертационном исследовании решетки с дефектами практически не рассматриваются, поэтому о локализованных на дефектах колебаниях речи, за редким исключением, не будет.

В 1986 году Долговым было совершено открытие, показавшее, что пространственно локализованные колебания возможны и в бездефектных решетках [14]. Двумя годами позже это открытие было независимо повторено в работе Сиверса и Такено [15], где такие пространственно локализованные колебания были поименованы *внутренними колебательными модами* (intrinsic localised modes). Позже наряду с этим термином в литературе укоренился и синонимический термин *дискретный бризер* (discrete breather) [16; 17]. В данной работе мы отдаем предпочтение второму более короткому термину.

Итак, были названы три типа колебаний решетки, которые будут изучаться в данной работе, это фононы, ДНКМ и дискретные бризеры (ДБ).

1.1.2 Условия существования пространственно локализованных колебаний

Квинтэссенцией многих классических работ по локализованным колебаниям нелинейных решеток стало обоснование следующей "формулы": дискретность + нелинейность = локализация энергии.

Для того, чтобы группа частиц могла совершать колебания, не отдавая свою колебательную энергию решетке, необходимо, чтобы колебания частиц совершались на частоте, лежащей вне фононного спектра малоамплитудных колебаний решетки. В этом случае колеблющиеся частицы не будут резонировать с фононами, последние не будут возбуждаться и уносить энергию в решетку.

Рассмотрим классическое волновое уравнение

$$mu_{tt} = ku_{xx}, \quad (1.1)$$

где константы m и k определяют скорость звука $c = \sqrt{k/m}$. Подстановка в данное уравнение решения в виде бегущей волны $u(x,t) = A \sin(qx - \omega t)$ с амплитудой A позволяет получить следующее дисперсионное соотношение, то есть связь между частотой волны ω и ее волновым числом q

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}q. \quad (1.2)$$

Если же рассмотреть дискретный аналог уравнения (1.1)

$$m\ddot{u}_n = k(u_{n-1} - 2u_n + u_{n+1}), \quad (1.3)$$

и искать его решение в виде бегущей волны $u_n(t) = A \sin(qn - \omega t)$, то приходим к следующему дисперсионному соотношению:

$$\omega = 2\sqrt{\frac{k}{m}} \sin \frac{q}{2}. \quad (1.4)$$

Как видим, дисперсионное уравнение (1.2) допускает сколь угодно большие частоты колебаний, поскольку чем короче длина волны (чем больше q), тем пропорционально выше ее частота, а в континуальной среде фонон может

иметь сколь угодно короткую длину волны. В дискретной же системе самая короткая длина волны соответствует $q = \pm\pi$, и ей, как следует из уравнения (1.4), соответствует максимальная частота фононного спектра $\omega_{\max} = 2\sqrt{k/m}$.

Становится понятным, что в континуальной системе с неограниченным фононным спектром невозможны локализованные колебания, в то время как в дискретной системе фононный спектр ограничен сверху и появляется возможность осуществления локализованных колебаний на частоте, превышающей ω_{\max} .

Отметим, что частоты колебаний в линейных системах не зависят от амплитуды волн A , как это следует из выражений (1.2) и (1.4). Добавление нелинейных членов в уравнения приводит к появлению зависимости частот колебаний от амплитуды. Покажем это на примере нелинейного осциллятора с кубической нелинейностью (см. рисунок 1.1), динамика которого описывается уравнением $m\ddot{u} + ku + \beta u^3 = 0$, где степень нелинейности контролируется параметром β . Приближенное решение данного уравнения имеет вид $u(t) = A \sin(\omega t) + B \sin(3\omega t)$, где предполагается, что $B \ll A$. Подстановка этого решения в нелинейное уравнение позволяет получить приближенную зависимость частоты от амплитуды $m\omega^2 = k + (3/4)\beta A^2$. Видно, что при $\beta \neq 0$ появляется зависимость частоты колебаний от амплитуды. При $\beta > 0$ частота растет с амплитудой, а при другом знаке β падает. Случай $\beta > 0$ будет называться нелинейностью жесткого типа, а при $\beta < 0$ имеем нелинейность мягкого типа. Именно за счет этой зависимости частота колебаний частиц в решетке может расти с амплитудой, оказываясь выше частоты ω_{\max} .

Итак, 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 фононного спектра с увеличением амплитуды колебаний.

При наличии этих двух составляющих (дискретность и нелинейность) появляется принципиальная возможность существования пространственно локализованных колебаний, имеющих частоту вне фононного спектра, которые не будут возбуждать фононных колебаний и тратить на это свою энергию. Как показали многочисленные исследования, эта возможность очень часто реализуется в различных нелинейных решетках [16; 17], в том числе, в кристаллах [18].

1.1.3 Движущиеся ДБ

Одним из важных вопросов является возможность существования движущихся ДБ [27]. Подвижность ДБ представляет значительный интерес, поскольку она связана с переносом энергии в решетке; действительно, такие когерентные структуры были предложены в качестве средства целенаправленной передачи энергии в дискретных нелинейных системах [28]. Подвижные ДБ в цепочке магнитных маятников наблюдались в работе [97]. Движущиеся ДБ были смоделированы в двумерной гексагональной нелинейной решетке [113–115].

Точный движущийся бризер периодичен во времени со сдвигом на один или несколько шагов решетки. Такие решения были построены итерационным методом Ньютона, например, для решеток Клейна-Гордона [29; 30] и β -ФПУ [31; 116]. Для общих потенциалов взаимодействия, не обладающих определенной симметрией [32; 33], движущиеся бризеры не локализованы в пространстве: вместо этого они обладают колебательными крыльями, амплитуда которых зависит от внутренней частоты бризера и скорости его распространения.

Движущиеся ДБ могут существовать и в решетках более высокой размерности. Хаас с соавторами получили движущиеся ДБ в металлах, задавая асимметрию в начальных условиях [34]. Для возбуждения движущихся ДБ в двумерных решетках в работе [35] был предложен анзац, содержащий несколько параметров с ясным физическим смыслом.

Очевидно, что движущиеся по решетке ДБ могут сталкиваться друг с другом и возникает интересная задача - какими могут быть сценарии столкновения? Например, в работе [117] исследовались столкновения ДБ в треугольной решетке Морзе. Рассматривались как лобовые столкновения ДБ движущихся навстречу друг другу в одном плотноупакованном ряду, так и столкновения ДБ, движущихся в параллельных атомных рядах. Было показано, что может происходить слияние двух ДБ в один, что можно рассматривать как механизм накачки дискретных бризеров энергией.

Статистическая картина столкновений ДБ в двумерной гексагональной решетке была построена в работе [118]. Дело в том, что результат столкновения ДБ, являющихся периодическими колебательными модами, существенно зависит от фазы столкновения. Поскольку фазу ДБ трудно контролировать,

естественно рассматривать её как случайную величину и анализировать статистические характеристики взаимодействия ДБ.

1.2 Характеристика различных нелинейных моделей решеток

Полезно дать характеристику различным нелинейным решеткам, рассматривая их отличительные особенности.

1.2.1 Мягкий и жесткий тип нелинейности

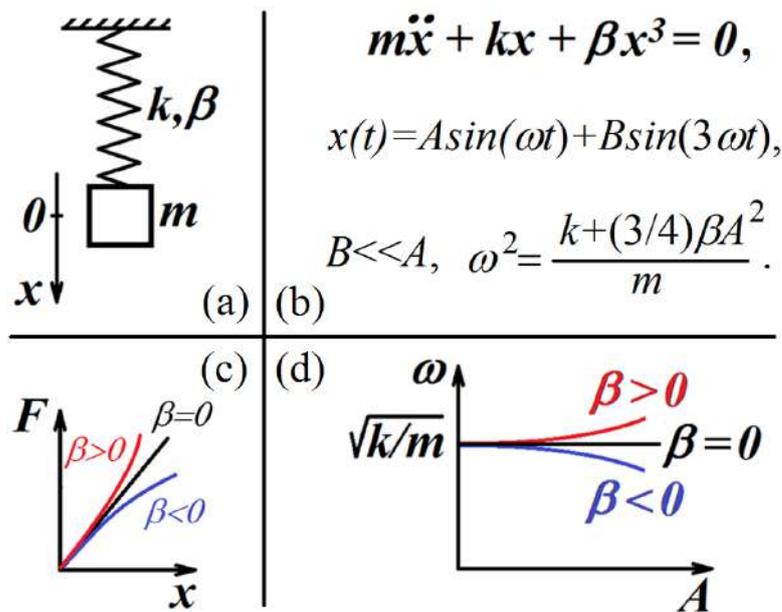


Рисунок 1.1 — (а) Нелинейный осциллятор с одной степенью свободы. (б) Уравнение движения осциллятора и его приближенное решение. (с) Схематическая зависимость силы упругости пружины от её удлинения. (д) Схематическая зависимость частоты осциллятора от амплитуды.

В разделе 1.1.2 был рассмотрен нелинейный осциллятор с одной степенью свободы, см. рисунок 1.1(а). Груз массы m осциллирует на пружине, жесткость которой характеризуется линейным коэффициентом k и коэффициентом кубической нелинейности β . На рисунке 1.1(б) выписано уравнение движения ос-

циллятора, его приближенное решение $x(t)$, справедливое для случая $B \ll A$, а также зависимость частоты ω от амплитуды A .

На рисунке 1.1(c) схематично показано как восстанавливающая упругая сила пружины F зависит от удлинения пружины x . Если $\beta = 0$ имеем линейную зависимость $F(x)$ при постоянной жесткости пружины $E = dF/dx$. При $\beta > 0$ кривая $F(x)$ растет ускоренно, то есть жесткость пружины увеличивается с деформацией. Этот случай называется жестким типом нелинейности. Обратную ситуацию (мягкий тип нелинейности) имеем при $\beta < 0$.

На рисунке 1.1(d) схематично показана зависимость частоты от амплитуды колебаний. Для $\beta = 0$ частота не зависит от амплитуды. В случае жесткой нелинейности ($\beta > 0$) частота растет с амплитудой, и уменьшается, если нелинейность мягкая ($\beta < 0$).

1.2.2 Наличие локального потенциала

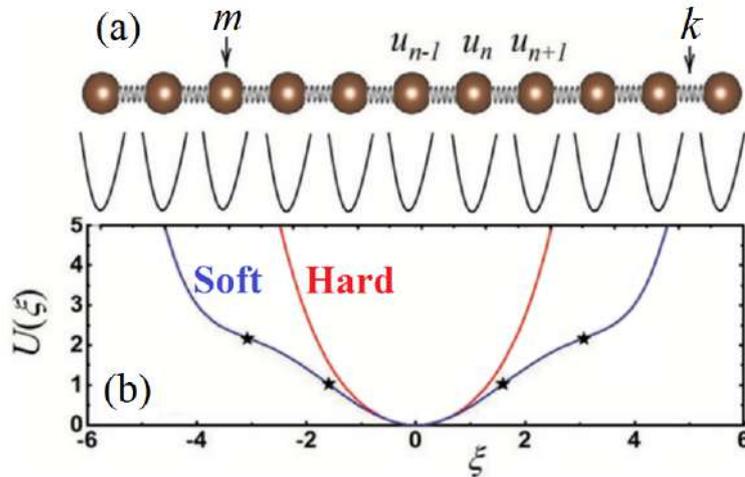


Рисунок 1.2 — (a) Цепочка частиц массы m , взаимодействующих с ближайшими соседями посредством пружин жесткости k и с локальным потенциалом. (b) Локальный потенциал, заданный полиномом шестого порядка (1.5). Верхнему (нижнему) знаку потенциала соответствует жесткий (мягкий) тип нелинейности.

Простейшая модель одномерного кристалла - это цепочка взаимодействующих частиц. Весьма полезным во многих приложениях оказывается добавление

локального потенциала. Например, можно рассмотреть движение атомов одного плотноупакованного ряда кристалла, заменив влияние всех окружающих атомов эффективным потенциалом. Приходим к модели, представленной на рисунке 1.2. Здесь рассматривается цепочка частиц массы m , каждая взаимодействует с соседями посредством линейных пружин жесткости k и с одноямным локальным потенциалом. Разумеется, данная модель может быть усложнена, например, рассмотрением взаимодействия частиц со вторыми и более дальними соседями, рассмотрением нелинейных пружин, заменой одноямого потенциала двухямным, как в модели ϕ^4 или многоямным, как в модели Френкеля-Конторовой [119].

В работе [120], например, рассматривался локальный потенциал в форме полинома шестой степени (модель ϕ^6)

$$U(\xi) = \delta\xi^2 \pm \alpha\xi^4 + \beta\xi^6, \quad (1.5)$$

что позволяет рассмотреть жесткий или мягкий тип нелинейности, выбрав верхний или нижний знак соответственно. Значения параметров равнялись $\delta = 1/2$, $\alpha = 1/24$ и $\beta = 1/720$.

Гамильтониан модели имел вид

$$H = \sum_n \frac{m}{2} \dot{u}_n^2 + \sum_n \left[\frac{k}{2} (u_n - u_{n-1})^2 + U(u_n) \right], \quad (1.6)$$

откуда, используя принцип Гамильтона, были получены следующие уравнения движения

$$m\ddot{u}_n = k(u_{n-1} - 2u_n + u_{n+1}) - \delta u_n - \alpha u_n^3 - \beta u_n^5. \quad (1.7)$$

Для нас важно подчеркнуть, что добавление локального потенциала принципиально изменяет фононный спектр цепочки. Полагая в уравнении (1.7) $\alpha = \beta = 0$ получаем линейное уравнение движения, справедливое для малых перемещений частиц u_n . Разыскивая решение линейного уравнения в виде $u_n(t) = A \sin(qn - \omega t)$ приходим к дисперсионному соотношению

$$\omega^2 = \frac{2}{m} [\delta + k(1 - \cos q)]. \quad (1.8)$$

Из выражения (1.8) следует, что фононный спектр лежит в полосе от $\omega_{\min} = 2\delta/m$ при $q = 0$ до $\omega_{\max} = 2(\delta + 2k)/m$ при $q = \pi$. Это означает, что локализованные колебания в цепочке с локальным потенциалом возможны как на частотах выше фононного спектра, так и на частотах в интервале от 0 до ω_{\min} . В отсутствии локального потенциала (при $\delta = 0$) имеем $\omega_{\min} = 0$ и возможность существования локализованных колебаний с частотами ниже фононного спектра пропадает.

1.2.3 Простые и сложные (многокомпонентные) решетки

Обсудим какие типы ДБ могут существовать в простых и сложных решетках.

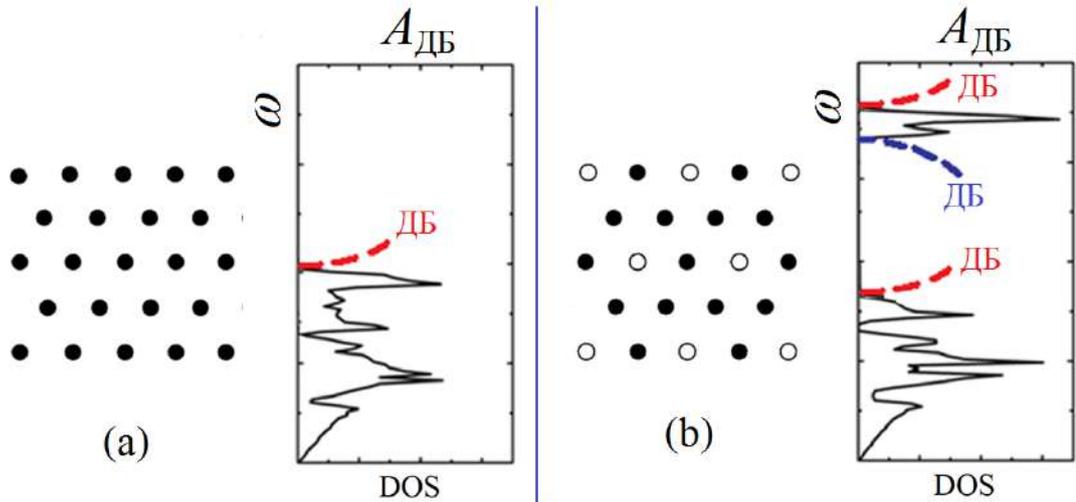


Рисунок 1.3 — (а) Моноатомная решетка, её плотность фононных состояний и возможная амплитудно-частотная характеристика ДБ. (б) То же для биатомной решетки. Амплитудно-частотные характеристики ДБ с жестким (мягким) типом нелинейности показаны красным (синим).

Известно, что решетки со сложной структурой могут иметь сложный фононный спектр. Например, на рисунке 1.3(а) схематически представлены: моноатомная решетка с одной частицей в примитивной трансляционной ячейке, плотность фононных состояний (черная кривая) и возможная амплитудно-частотная характеристика ДБ с жестким типом нелинейности (красная пунк-

тирная кривая). Очевидно, что ДБ с мягким типом нелинейности в такой решетке существовать не могут.

На рисунке 1.3(b) схематически представлены: бимоноатомная решетка с четырьмя частицами в примитивной трансляционной ячейке, плотность фононных состояний (черная кривая) и возможные амплитудно-частотные характеристики ДБ с жестким типом нелинейности (красные пунктирные кривые) и с мягким типом нелинейности (синяя пунктирная кривая). Предполагаем, что частицы, показанные светлым, имеют массу меньше чем темные частицы. Подрешетка более легких частиц будет колебаться на более высоких частотах, чем подрешетка тяжелых частиц, в результате в спектре фононных колебаний образуется запрещенная зона или щель. В такой решетке возможно три семейства ДБ. Во первых, возможны ДБ с жестким типом нелинейности с частотами выше фононного спектра. Кроме того, возможны так называемые щелевые ДБ, имеющие частоты в щели фононного спектра. Они могут иметь как жесткий, так и мягкий тип нелинейности.

1.2.4 Учет дальнего действия

Свойства цепочек с дальним действием рассматривались, например, в работах [121; 122], где были рассчитаны их динамические и статистические характеристики. Была рассмотрена цепочка Ферми-Паста-Улама (ФПУ) (без локального потенциала) [121], а также цепочка с локальным потенциалом [122].

Теплопроводность в цепочке с дальним действием изучалась в работе [123], где, кроме того, было показано, что учет дальнего действия не мешает существованию ДБ.

Стоит отметить, что все межатомные взаимодействия в кристаллах не ограничиваются ближайшим соседством и, как правило, простираются на несколько межатомных расстояний. Наиболее дальнедействующими, по-видимому, являются кулоновские взаимодействия, играющие определяющую роль в ионных кристаллах. Тем не менее, существование щелевых ДБ в ионном кристалле иодида натрия (NaI) было показано экспериментально [25; 26] и путем молекулярно-динамического моделирования [19; 20; 124].

В модельных решетках с потенциалом Морзе, как правило, учитываются все соседи, входящие в сферу радиуса 5ρ , где ρ - это расстояние между ближайшими частицами. Такие решетки поддерживают ДБ различных типов [35; 125].

Можно заключить, что дальное действие не является критическим фактором, влияющим на существование ДБ в нелинейных решетках. Тем более дальное действие не влияет на факт существования ДНКМ в решетках поскольку, как уже говорилось, они существуют вне зависимости от типа взаимодействия в решетке.

1.2.5 Размерность решетки

В литературе рассматриваются как одномерные решетки (цепочки), когда некая структурная единица транслируется в одном пространственном измерении, так и двух- и трехмерные решетки, где примитивные ячейки структуры транслируются соответственно в двух и трех измерениях.

Покажем на одном примере, что размерность решетки играет очень важное значение при анализе возможности существования ДБ, так, что выводы справедливые для цепочки, могут оказаться неверными для решеток большей размерности.

В работе [126] было показано, что в моноатомной цепочке без локального потенциала невозможно существование ДБ, если частицы взаимодействуют посредством потенциала Тоды, Леннард-Джонса, Борна-Майера или Морзе. Для этих потенциалов удалось возбудить только щелевой ДБ с мягким типом нелинейности, рассмотрев биатомную цепочку со щелью в фононном спектре. Авторы пришли к выводу, что перечисленные потенциалы обладают мягким типом нелинейности и могут поддерживать лишь щелевые ДБ с мягким типом нелинейности, см. раздел 1.2.3.

На основании полученных результатов авторы работы [126], опубликованной в 1993 году, сделали далеко идущие выводы о том, что кристаллы с простой решеткой, не имеющие щели в фононном спектре (например, все чистые ГЦК и ОЦК металлы) не могут поддерживать ДБ. Этот вывод надолго затормозил

поиски ДБ в металлах и усилия ученых были направлены на поиск и анализ свойств щелевых ДБ в кристаллах со щелью в фононном спектре [19; 20]. Лишь в 2011 году Хаас с соавторами показали существование ДБ в ГЦК Ni и ОЦК Nb на основе молекулярно-динамических расчетов [34].

Позже в работах [35; 74; 117; 125] была раскрыта причина, по которой выводы работы [126] нельзя распространять на решетки размерности выше 1. В действительности классические потенциалы Морзе и Леннард-Джонса имеют точку перегиба и демонстрирует мягкую нелинейность только на относительно больших расстояниях, а на малых расстояниях они проявляют жесткую нелинейность. Этот факт отражает строение атомов, имеющих компактное ядро и электронные облака. На больших расстояниях электроны обеспечивают силы притяжения между атомами с мягким типом нелинейности, а на малых включаются жесткие силы отталкивания ядер. В цепочках без локального потенциала колебания большой амплитуды приводят к эффекту теплового расширения, когда средние расстояния между частицами возрастают и преобладает мягкий тип взаимодействия. В таких условиях существование ДБ в моноатомной цепочке без щели в фононном спектре действительно невозможно, что и было доказано в работе [126]. Однако добавление локального потенциала коренным образом меняет картину. В его присутствии тепловое расширение подавлено, частицы при больших амплитудах колебаний начинают взаимодействовать жестко и появляется возможность возбуждения ДБ с частотами выше фононного спектра. В двумерных и трехмерных решетках ДБ локализованы в плотноупакованном ряду частиц и роль локального потенциала играют частицы, окружающие данный ряд.

Существует еще ряд важных особенностей которые следует учитывать при переходе от анализа динамики цепочек к двумерным и трехмерным решеткам.

В цепочках можно рассматривать лишь продольные и поперечные волны, в то время как в решетках большей размерности возможны волны с различными векторами поляризации.

При обсуждении ДБ, движущихся по решетке, можно заметить, что в цепочке существует лишь возможность движения ДБ вдоль неё, в то время как в решетках большей размерности ДБ могут двигаться в разных направлениях.

В цепочках возможно только лобовое столкновение ДБ, а в случае решеток более высокой размерности возможны боковые столкновения или столк-

новения ДБ движущихся в близких параллельных, но не совпадающих рядах частиц. В одномерных цепочках продольные колебания не могут приводить к проявлению геометрической нелинейности, а в решетках большей размерности могут.

Можно сделать вывод, что в решетках большей размерности мир ДБ более разнообразен, и возможен более широкий набор их ориентации в пространстве, сценариев движения и взаимодействия друг с другом.

Одномерные решетки были изучены довольно хорошо [14–17; 36], поэтому в данной диссертации упор будет сделан на анализ ДБ и ДНКМ в двумерных и трехмерных решетках.

1.2.6 Скалярные и векторные решетки

Решетки, у которых каждая частица имеет одну степень свободы, называются скалярными, если более одной, то векторными.

Реальные кристаллы представляют собой векторные решетки. Например, атомы углерода в одномерном кристалле карбина могут двигаться не только в продольном, но и в поперечных направлениях, имея по три степени свободы. Аналогично, двумерный кристалл углерода - графен также предполагает движение атомов как в плоскости решетки, так и по нормали к ней.

Интересно, что ДБ в решетке графена возможны как с колебаниями в плоскости [127–133], так и с поперечными колебаниями [24; 134].

В работе [135] изучалось существование и устойчивость ДБ в конечной цепочке ФПУ, размещенной в трехмерном пространстве. Оказалось, что ДБ с продольными колебаниями существуют, но они оказываются неустойчивыми, если частицы имеют три степени свободы. В случае скалярной ФПУ цепочки ДБ устойчивы. Таким образом, в разобранный в работе [135] примере показано, что ДБ, устойчивый в скалярной решетке, может становиться неустойчивым при введении дополнительных степеней свободы частиц.

Для двумерных решеток возможны ДНКМ с колебаниями в плоскости и поперек плоскости. До сих пор в наибольшей степени изучены первые [136], в то время как вторые остались практически без внимания исследователей. Остается

открытым вопросом о существовании ДНКМ двумерных решеток с векторами смещений частиц под углом к плоскости решетки, отличным от $\pi/2$.

1.2.7 Связь между свойствами решетки и свойствами нелинейных колебательных мод

Можно подытожить сказанное в разделе 1.2 следующим образом.

Свойства решетки и свойства взаимодействий между частицами решетки во многом определяют их фононные спектры и, как следствие, возможность существования и свойства ДБ.

В решетках со сплошным фононным спектром возможны только ДБ с жестким типом нелинейности, имеющие частоты выше спектра. При наличии локального потенциала появляется запрещенная зона ниже полосы фононного спектра и появляется возможность существования двух типов ДБ - с жестким типом нелинейности с частотами выше спектра, а также с мягким типом нелинейности с частотами ниже спектра. В решетках со сложной структурой при появлении щели в фононном спектре возможно уже три типа ДБ, с жестким типом нелинейности с частотами выше фононного спектра, а также два типа щелевых ДБ с мягким и жестким типом нелинейности. Если же решетка имеет сложную структуру, приводящую к появлению щели в фононном спектре, а также испытывает действие локального потенциала, то имеется две щели в спектре и возможно существование четырех типов ДБ.

Что касается ДНКМ, их существование определяется только размерностью и симметрией решетки, а вот свойства зависят ещё и от типа взаимодействия между частицами.

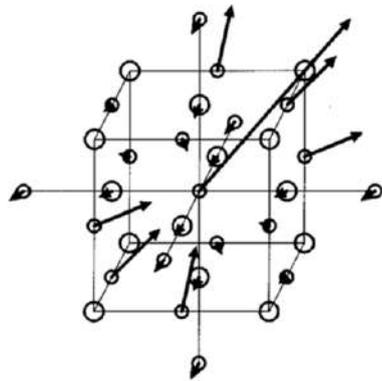
1.3 Экспериментальные исследования нелинейной динамики модельных и кристаллических решеток

Для изучения ДБ создаются рукотворные периодические системы, поддерживающие их существование.

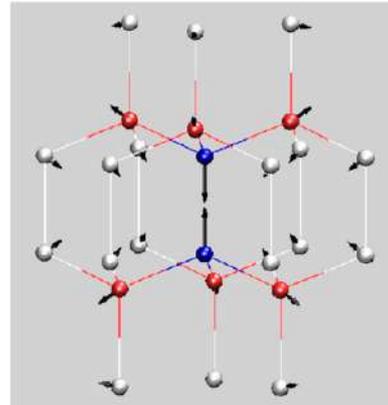
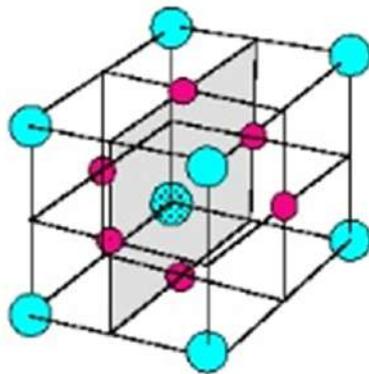
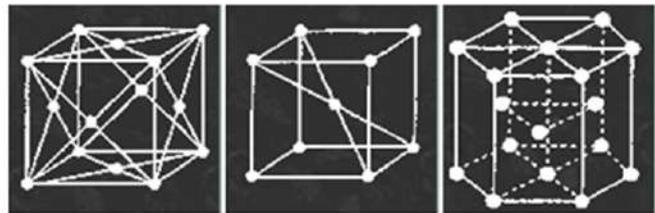
Например, ДБ изучались экспериментально в массиве микромеханических кантелеверов [101–103], массиве сверхпроводящих Джозефсоновских контактов [104; 105], электрических цепях, состоящих из цепочки колебательных контуров [98; 99], цепочек собранных из грузов и пружин [95], цепочек связанных маятников [96], цепочек взаимодействующих упругих элементов, имитирующих поведение гранулированных сред [106; 107]. В последнее время стали создаваться двумерные модельные решетки, поддерживающие ДБ, например, треугольная решетка магнитов, взаимодействующих посредством отталкивательного потенциала [137; 138].

Более сложной задачей является детектирование ДБ в кристаллах. Методом молекулярной динамики [19–24; 139] и на основе первопринципного моделирования [140–142] было показано существование ДБ в кристаллах с различной химической связью и различной размерности, см. рисунок 1.4. Речь идет о ДБ в щелочно-галогидных кристаллах со структурой NaCl, например, NaI [19; 20]; ковалентных кристаллах со структурой алмаза, таких как кремний и германий [21], а также алмаз [22]; в упорядоченных сплавах [143; 144], в чистых металлах с ГЦК, ОЦК и ГПУ решетками [34; 58; 69; 70; 145; 146] и в α -уране [23]; в двумерных кристаллах графена [24; 128–132; 141], графана [139; 140] и нитрида бора [147]. Есть свидетельство существования ДБ в одноосном киральном гелимагнетике [148].

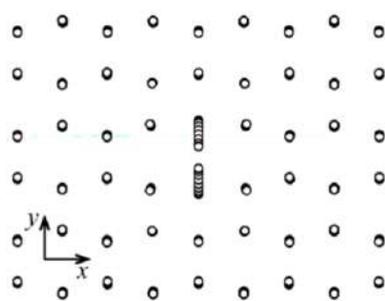
Дискретные бризеры имеют частоты колебаний вне фононного спектра. Поэтому для их экспериментального обнаружения применяют методы спектроскопии с целью измерения колебательных спектров атомов кристаллов. Основная идея состоит в том, что ДБ - нелинейные объекты, концентрация которых должна расти с температурой.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



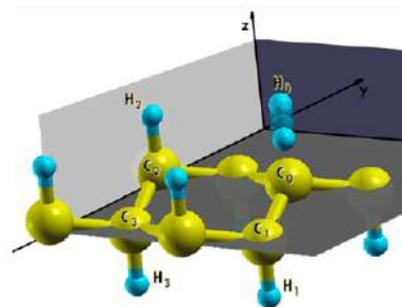
Ионные кристаллы (NaI)

Ковалентные кристаллы
(Si, Ge, алмаз)Упорядоченные сплавы
(Pt₃Al)

Чистые ГЦК, ОЦК и ГПУ металлы



Графен



Графит

Рисунок 1.4 — Примеры ДБ в кристаллах, существование которых было показано в молекулярно-динамических [19–24; 139] и первопринципных расчетах [140–142], а в некоторых случаях и экспериментально [25; 26].

Именно таким образом Манли с соавторами показали возбуждение щелевых ДБ при достижении температуры 555 К в иодиде натрия [25; 26]. Появившийся пик плотности фононных состояний располагался в щели фононного спектра кристалла. Неоднозначность регистрации ДБ в кристалле NaI состоит в том, что щель в фононном спектре кристалла оказывается заполненной уже при криогенных температурах, что связано с наличием примесей и дефектов кристаллической структуры. Появление высокотемпературных пиков также можно связывать с возбуждением колебательных мод на дефектах. В независимых измерениях спектров неупругого рассеяния нейтронов кристаллом NaI, представленных в работе [149], никаких новых пиков при повышении температуры обнаружено не было. Причиной отрицательного результата данной работы может быть невысокая концентрация тепловых ДБ [150] или различие в чистоте кристаллов, исследованных разными авторами. Сомнений в том, что кристалл NaI поддерживает ДБ нет, поскольку их описали в целом ряде теоретических работ [19; 20; 124; 151].

Цикл экспериментальных работ был посвящен регистрации ДБ в α -уране с использованием методов рассеяния рентгеновских лучей и нейтронов [45—47], свойства которых также изучались и методом молекулярной динамики [23].

Измерение медленной компоненты люминесценции щелочно-галогенидных кристаллов показало неэкспоненциальную (аномальную) скорость её затухания [152], что можно объяснить, например, зарождением ДБ вблизи центров люминесценции [153—155].

Измерение спектров рассеяния нейтронов для ОЦК кристалла ^4He , помимо трех акустических ветвей колебаний, выявило присутствие оптической моды колебаний с поляризацией [110], что можно отнести к возбуждению локализованных колебаний [156].

Интересный эксперимент по бомбардировке поверхности монокристалла германия высокой чистоты ионами холодной плазмы с энергией от 2 до 8 эВ был выполнен в работе [157]. На спектрограммах были измерены интенсивности пиков пяти характерных дефектов германия до и после обработки плазмой. Оказалось, что такая низкоэнергетическая обработка поверхности приводит к отжигу дефектов на большом удалении от поверхности, что можно объяснить возбуждением на поверхности локализованных колебаний, которые двигались вглубь решетки и отжигали дефекты. Авторами работы [157] было показано,

что термический отжиг не приводит к тому снижению концентрации дефектов, как плазменная обработка. Естественно предположить, что за отжиг дефектов вдали от поверхности кристалла ответственны ДБ, возбуждаемые на поверхности ионами плазмы и движущиеся внутрь.

Биметаллическая пластина медь/никель бомбардировалась ионами Ar^+ с энергией 500 эВ, в результате чего наблюдалось значительное ускорение диффузии на границе раздела двух металлов, которая была удалена от бомбардируемой поверхности на расстояние порядка 1 мм [158]. Ионы аргона с такими энергиями не способны проникать на столь большие глубины материала, поэтому было высказано предположение об участии ДБ в данном процессе.

Изучение дифракции Кикучи для графита выявило колебания, поляризация которых не характерна для малоамплитудных колебаний решетки графита [159]. Одним из возможных объяснений полученного результата может быть возбуждение ДБ с большими амплитудами колебаний.

Как следует из приведенного выше обзора, 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. Кроме того, наблюдать ДБ в объеме кристалла ещё сложнее и следует изучать возможность существования ДБ на их поверхности [144].

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

Проблеме влияния ДБ на макросвойства кристаллов посвящен следующий раздел.

1.4 Влияние локализованных и делокализованных колебаний на физические и механические свойства решеток

В данном разделе анализируются литературные данные о влиянии ДБ и ДНКМ на макроскопические характеристики модельных решеток и реальных кристаллов.

1.4.1 Влияние ДБ на свойства решеток

В своей известной работе [44], опубликованной в 2010 году, Манли, опираясь на известные к тому времени экспериментальные данные, высказал ряд идей о том, как ДБ влияют на свойства кристаллов. Речь шла о влиянии ДБ на теплоемкость α -урана, на его тепловое расширение и механические свойства. Обсуждались и свойства щелочно-галлоидного кристалла NaI.

ДБ аккумулируют энергию порядка нескольких эВ [160] и способны транспортировать её по решетке [74; 114; 161; 162]. Эта энергия может быть потрачена на отжиг дефектов [157], на снижение энергетических порогов миграции дефектов [75; 163]. ДБ на поверхности кристалла могут снижать потенциальный барьер испарения атомов [144].

ДБ способны переносить не только энергию, но и электрический заряд, тем самым, электрический ток может наблюдаться в средах, не имеющих свободных зарядов. ДБ обеспечивают локализацию заряда и при движении переносят его, создавая электрический ток [164–168].

ДБ рассеивают фононы, хоть и не являются топологическими дефектами, поэтому они снижают теплопроводность решеток при повышенных температурах [123; 169]. В частности, для нелинейной цепочки было показано, что ДБ ответственны за переход от баллистической к диффузионной теплопроводности при превышении определенной температуры [169].

При изучении хаотических ДБ, возникающих в цепочках в результате модуляционной неустойчивости ДНКМ, было показано, что при жестком типе нелинейности ДБ снижают теплоемкость, тепловое расширение и констан-

ты упругости, а при мягком типе нелинейности повышают эти характеристики [120; 170]. Важно провести аналогичные исследования и для решеток размерности два и три, включая реальные кристаллы.

1.4.2 Влияние ДНКМ на свойства решеток

Возбуждение ДНКМ приводит к периодическому во времени изменению кинетической и потенциальной энергий решетки, внутренних напряжений и констант упругости. В ряде работ были изучены эти свойства, осредненные за период колебания ДНКМ. Например, с помощью метода молекулярной динамики анализировались одно- и двухкомпонентные ДНКМ в графене [136]. Были изучены все 4 одно- и 12 двухкомпонентных ДНКМ с колебаниями атомов в плоскости графена. При определенном выборе амплитуд составляющих двухкомпонентных ДНКМ, наблюдаются периодические во времени колебания для двух степеней свободы на частотах ω и 2ω , т. е. происходит генерация второй гармоники [136]. Для конкретной ДНКМ высшая гармоника может иметь частоту почти в два раза большую, чем максимальная частота фононного спектра графена. Возбуждение некоторых ДНКМ приводит к возникновению отрицательного давления в плоскости графена. Этот, на первый взгляд аномальный результат, объясняется вращательным движением углеродных шестиугольников в данных ДНКМ.

Данные работы также следует продолжить для двумерных и трехмерных решеток, в том числе и для кристаллов.

1.5 Точечные дефекты в нелинейных решетках

Многие физические процессы в кристаллах, например, пластическая деформация [171—176], структурные преобразования при термообработке [177] и набухание под облучением [178—182] сопровождаются переносом массы по кристаллической решетке. Диффузия вакансий вносит заметный вклад в массопе-

ренос в кристаллах при повышенных температурах [177; 183]. Концентрация межузельных атомов в тепловом равновесии значительно меньше, чем вакансий, так как первые имеют более высокую энергию, но роль межузельных атомов значительно возрастает в сильно неравновесных процессах. Энергия миграции межузельных атомов может быть относительно высокой [184] или очень низкой, если они расположены в плотноупакованных атомных рядах [185], в последнем случае они называются краудионами.

Интересно, что краудионы обычно имеют более низкую потенциальную энергию, чем неподвижные межузельные атомы [185; 186]. Краудионы могут находиться в покое, но могут двигаться и с дозвуковой или сверхзвуковой скоростью [187—189].

Стационарные или дозвуковые краудионы имеют профиль кинка, ширина которого составляет от полдюжины до дюжины атомов. Классические сверхзвуковые краудионы сильно локализованы на одном атоме [189; 190]. Краудионы играют очень важную роль в релаксационных процессах, связанных с переносом массы и энергии [191—197]. Показано, что образующиеся при облучении кластеры междоузлий обладают очень высокой подвижностью [191—197].

В рамках данной диссертации очень важным является вопрос о взаимодействии ДБ с дефектами кристаллической решетки, прежде всего с точечными дефектами.

Энергия образования ДБ в металлах относительно мала (порядка 1 эВ) по сравнению с энергией образования стабильной пары Френкеля (несколько эВ) [34; 198; 199]. Поскольку ДБ в металлах обладают высокой подвижностью, они могут эффективно передавать концентрированную колебательную энергию на большие расстояния вдоль плотноупакованных кристаллографических направлений [199], согласно МД-моделированию, основанному на потенциале, полученном методом внедренного атома [200]. Недавно была предложена теоретическая основа для объяснения взаимодействия подвижных ДБ с дефектами решетки для объяснения аномальной ускоренной диффузии, наблюдаемой в условиях интенсивного образования ДБ [201].

Лишь в последнее время интерес исследователей переключился на изучение влияния ДБ на физические свойства материалов [140; 160; 168; 201; 202]. Это направление исследований является принципиально новым и находится на

стыке нелинейной физики и материаловедения, поэтому требует участия исследователей из обеих дисциплин.

Атомистическое моделирование, свидетельствующее о существовании стационарных и мобильных ДБ в металлах, поднимает важные вопросы: как ДБ взаимодействуют с первичными дефектами решетки и как это взаимодействие влияет на свойства материала. Некоторые технологические процессы (облучение, колебания магнитного поля, градиенты температуры и напряжения, электрический ток высокой плотности), а также диагностические процедуры с использованием пучков высокоэнергетических частиц (например, электронная микроскопия, медицинская терапия) могут вызывать непрерывное образование ДБ внутри материалов из-за возбуждения решетки внешними факторами, таким образом накачивая материал газом ДБ [200]. Присутствие газа ДБ может спровоцировать, например, ускоренную самодиффузию (взаимодействие ДБ-вакансия), сверхпластичность и ускоренную ползучесть (взаимодействие ДБ с дислокациями), ускоренную рекристаллизацию (взаимодействие ДБ с границами зерен), растворение или рост частиц второй фазы (взаимодействие ДБ с выделениями).

В диссертации в последней главе будет рассмотрено взаимодействие ДБ с вакансией. В более поздней работе [163] рассматривалось взаимодействие ДБ с вакансией, с дислокацией и с границей зерен.

1.6 Выводы по главе 1

На основании литературного обзора, представленного в данной главе, можно резюмировать следующее.

Несмотря на большой прогресс в изучении ДБ и ДНКМ за последние несколько десятилетий, остается немало нерешенных проблем.

Прежде всего, наибольшее внимание получили одномерные скалярные решетки [14–17; 36]; двумерные, а тем более трехмерные решетки и кристаллы исследованы значительно меньше. В то же время, решетки большей размерности поддерживают большее разнообразие нелинейных колебательных мод и

выводы, сделанные для систем меньшей размерности, не всегда могут переноситься на случаи большей размерности, см. раздел 1.2.5.

Был разработан достаточно общий подход к поиску новых типов ДБ в решетках любой сложности и любой размерности, состоящий в наложении локализирующих функций на ДНКМ с частотами вне фононного спектра решетки, а для поиска всех возможных ДНКМ разработан теоретико-групповой подход [1—3]. Остается актуальным применение этого подхода к описанию разнообразных ДБ в двумерных и трехмерных решетках, включая металлы, упорядоченные сплавы и другие кристаллы.

В этой связи, на первый план также выходят задачи построения ДНКМ для различных решеток высокой размерности и со сложной структурой, а также анализ устойчивости, амплитудно-частотных характеристик и других свойств ДНКМ.

Существуют большие пробелы в знании о влиянии ДБ и ДНКМ на макроскопические свойства решеток и кристаллов. Если для одномерных решеток уже были выполнены достаточно подробные исследования [120; 170], то для решеток большей размерности степень понимания проблемы остается на начальном уровне. Решение этой важной задачи позволило бы разработать экспериментальные методы идентификации ДБ в кристаллах путем измерения макроскопических характеристик, чувствительных к их присутствию.

Одна и та же решетка может поддерживать различные нелинейные колебательные моды в зависимости от сил взаимодействия между частицами, от наличия или отсутствия локального потенциала, от свойств этого потенциала. Вопросы о влиянии потенциалов на свойства ДБ и ДНКМ остаются важными для изучения, особенно для решеток размерности два и три.

Известно, что некоторые типы ДБ способны двигаться по решетке, перенося энергию. Для одномерных решеток вопросы подвижности топологических дефектов и ДБ детально рассматривались, и естественным следующим шагом является рассмотрение двумерных и трехмерных решеток, для которых было выполнено значительно меньше работ.

Практически неисследованным полем остается взаимодействие ДБ с дефектами кристаллической структуры. Роль ДБ в снижении потенциальных барьеров миграции дефектов кристаллической решетки может быть существенной в далеких от равновесия процессах, например, в ходе пластической деформации

или радиационного воздействия. Большая часть данной диссертационной работы посвящена анализу ДБ и ДНКМ в бездефектных решетках, но и вопросы динамики дефектов будут затронуты в последней главе.

Многие из перечисленных открытых проблем станут предметом исследования в данной работе.

Глава 2. ДНКМ двумерных решеток

Будут исследованы устойчивость и различные свойства ДНКМ в треугольной и квадратной решетках с модельными потенциалами и в решетке графена. Все исследованные ДНКМ были получены проф. Чечиным с учениками (Лобзенко, Рябов, Щербинин), ссылки на оригинальные работы даются по тексту.

2.1 ДНКМ треугольной решетки

В данном разделе будут описаны ДНКМ треугольной решетки, полученные Рябовым [203] с использованием теории бушей нормальных нелинейных мод, разработанной Чечиным и Сахненко [1–3]. К ним будет добавлена очевидная ДНКМ, в которой все частицы движутся синхронно, и которая существует только при наличии локального потенциала.

Будет исследовано влияние локального потенциала на динамику ДНКМ треугольной решетки.

2.1.1 Однокомпонентные ДНКМ треугольной решетки

Рассматривается двумерная треугольная решетка с межатомным расстоянием, равным единице ($h = 1$), и частицами, имеющими единичную массу ($m = 1$). Каждая частица имеет две степени свободы, двигаясь в плоскости xu .

Потенциальная энергия связи между двумя ближайшими частицами определяется выражением

$$\varphi(r) = \frac{k}{2}(r - h)^2 + \frac{\beta}{4}(r - h)^4, \quad (2.1)$$

где r - расстояние между атомами, k и β - линейные и нелинейные константы, описывающие жесткость связи. Это классический потенциал β -ФПУ, предложенный Ферми, Пастой и Уламом. Мы устанавливаем $k=1$ (выбором подходя-

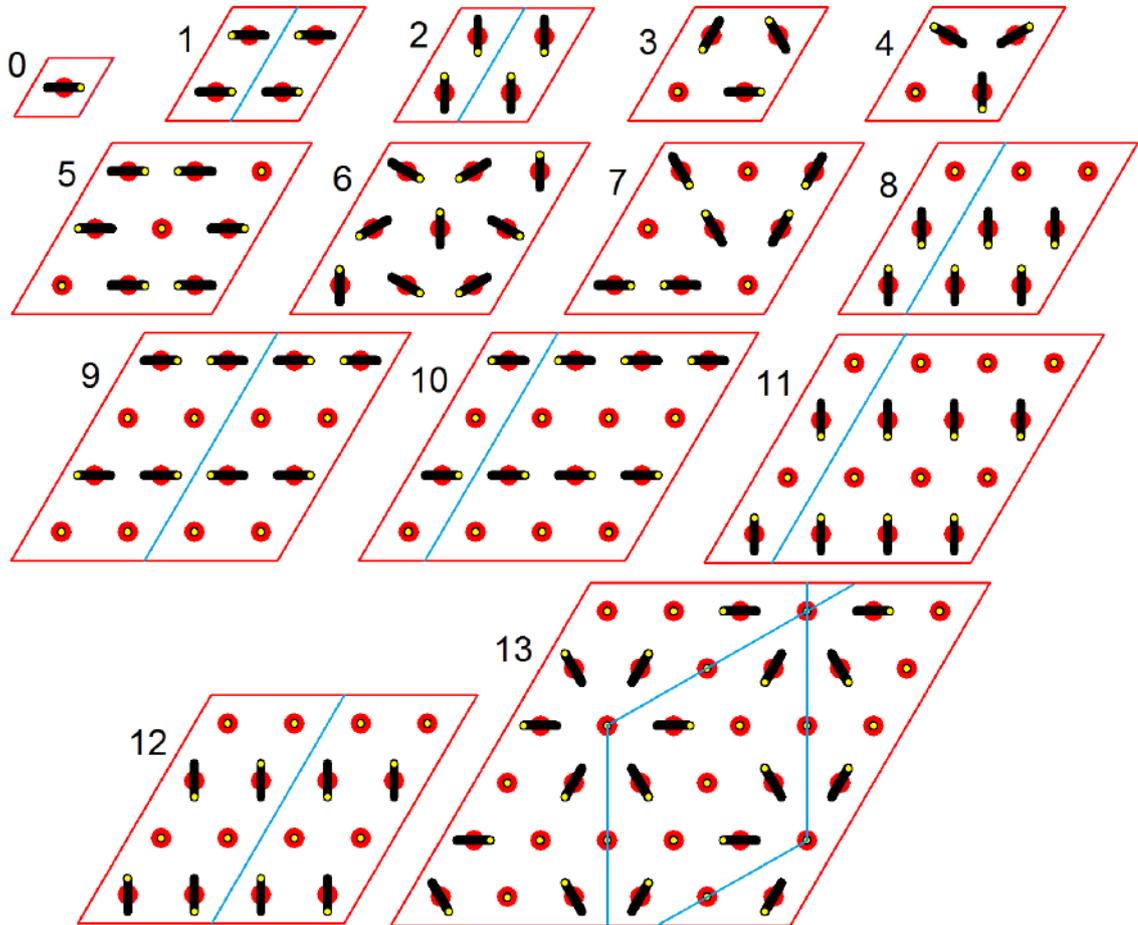


Рисунок 2.1 — Однокомпонентные ДНКМ треугольной решетки, полученные Рябовым [203] с использованием теории бушей нормальных нелинейных мод, разработанной Чечиным и Сахненко [1–3]. Показаны трансляционные ячейки 14 однокомпонентных ДНКМ. Точки треугольной решетки показаны красным цветом, начальные положения атомов - желтым, а траектории колеблющихся атомов - черными линиями. Синие линии отделяют трансляционные ячейки минимальной площади. Все начальные векторы смещения имеют одинаковую длину. В модах 3, 4, 5 и 7-13 есть частицы, имеющие нулевые начальные смещения, и они остаются в решеточных положениях все время.

щих единиц расстояния) и $\beta=10$, для которых эффекты нелинейности становятся заметными для смещений частицы порядка 0,1, аналогично тому, что обычно реализуется в кристаллах.

Каждая частица взаимодействует с локальным ангармоническим потенциалом

$$U(r) = \frac{P}{2}\xi^2 + \frac{Q}{4}\xi^4 + \frac{S}{6}\xi^6, \quad (2.2)$$

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 .

На рисунке 2.1 представлены 14 однокомпонентных ДНКМ треугольной решетки, пронумерованные от 0 до 13 [203]. Они были получены Рябовым с использованием теории бушей нормальных нелинейных мод, разработанной Чечиным и Сахненко [1–3]. Точки решетки показаны красными точками, начальные положения атомов, используемых для возбуждения ДНКМ, показаны желтыми точками. Траектории колеблющихся атомов показаны черными линиями. Трансляционные ячейки минимальной площади показаны синими линиями.

Размер блока моделирования принимается равным $N \times N$ примитивных трансляционных ячеек с $N = 1, 2, 3, 4$ или 6, в зависимости от рассматриваемой ДНКМ. Блок моделирования должен быть достаточно большим, чтобы соответствовать трансляционной ячейке рассматриваемой ДНКМ, см. рисунок 2.1. Граничные условия считаются периодическими по обоим направлениям.

Шаг по времени для этого моделирования взят равным 0,1 пс с использованием интегратора Верле четвертого порядка.

Начальные условия устанавливаются путем задания начальных смещений частицам в соответствии со схемами, показанными на рисунке 2.1. Начальные скорости всех частиц равны нулю.

2.1.2 Влияние локального потенциала на свойства однокомпонентных ДНКМ треугольной решетки

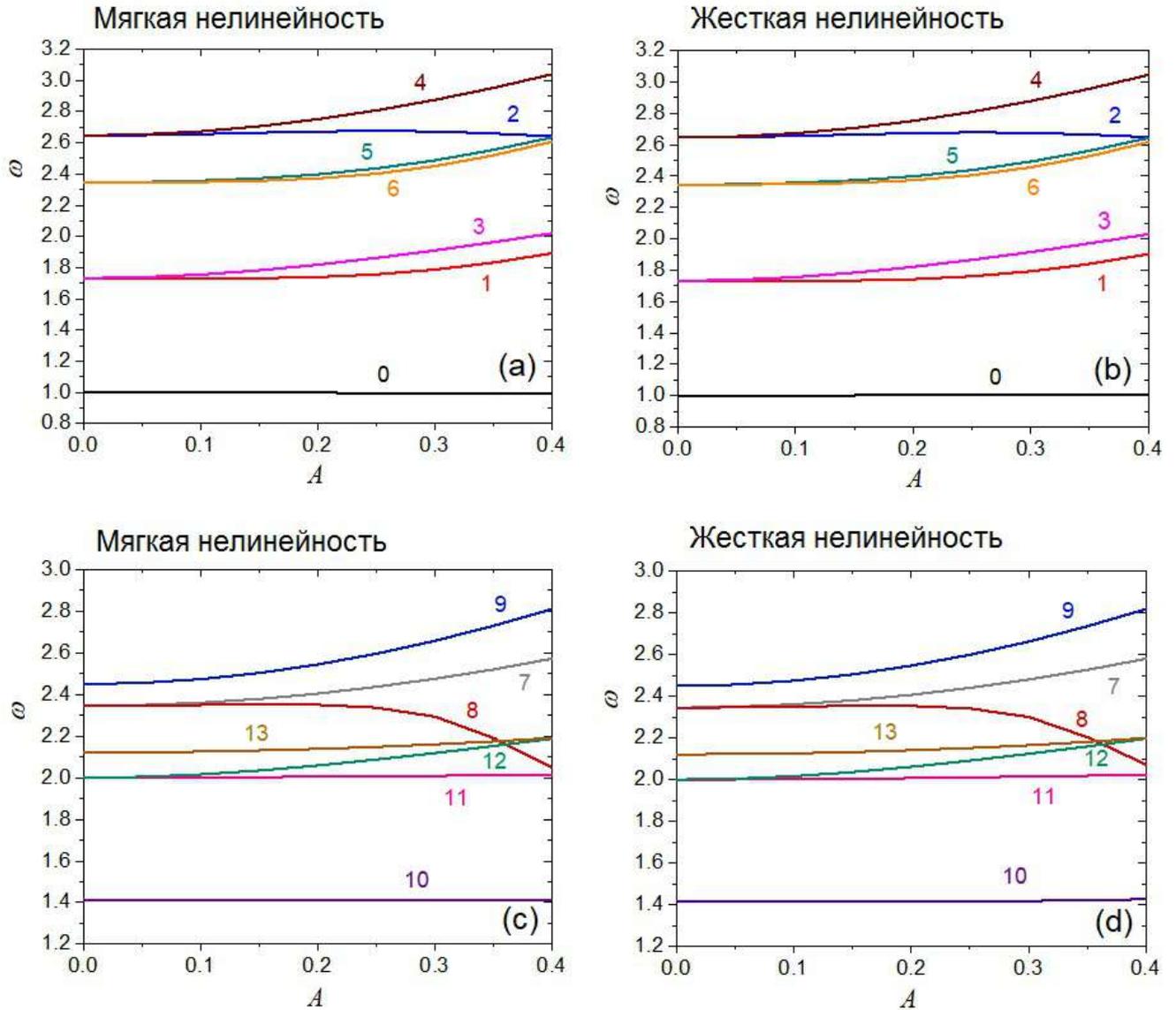


Рисунок 2.2 — Зависимость частоты от амплитуды для всех исследованных однокомпонентных ДНКМ при мягкой (а), (с) и жесткой (b), (d) ангармоничности. На панелях (а), (b) показаны результаты для мод от 0 до 6, а результаты для остальных мод показаны на (с) и (d).

Далее методом молекулярной динамики рассмотрено влияние локального потенциала с ангармонизмом мягкого и жесткого типа на некоторые свойства однокомпонентных ДНКМ в треугольной решетке. Всего рассмотрено 14 ДНКМ, одна из которых, мода 0, характеризуется движением атомов в одном направлении, то есть все атомы в решетке движутся синхронно в направлении

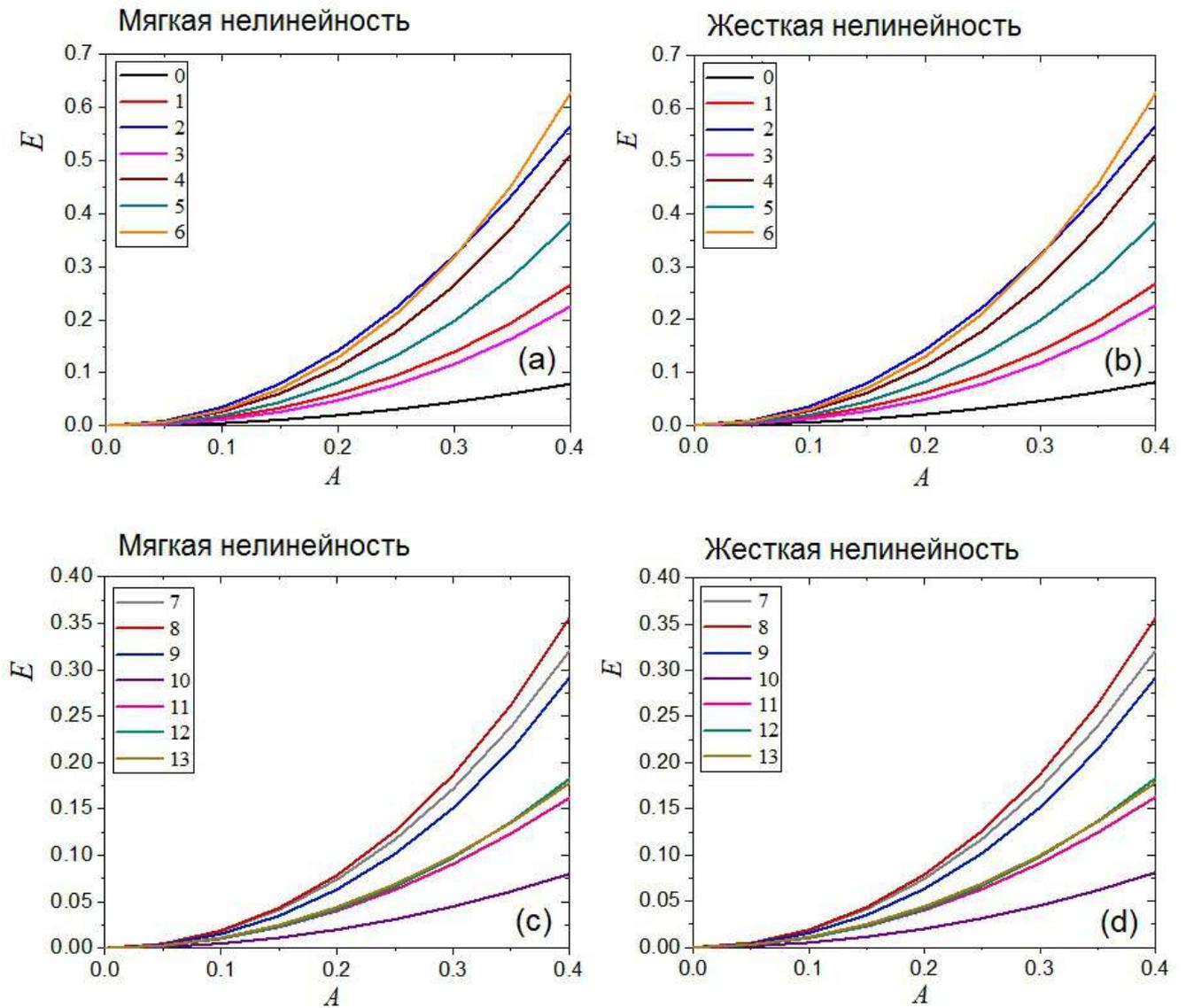


Рисунок 2.3 — Зависимость полной (кинетической плюс потенциальной) энергии, приходящейся на одну частицу, от амплитуды ДНКМ для мягкой (а), (с) и жесткой (б), (д) нелинейности. На панелях (а), (б) показаны результаты для мод от 0 до 6, а результаты для остальных мод показаны на (с) и (д).

оси x . В работе [203] эта мода не рассматривалась, так как при отсутствии локального потенциала она соответствует движению решетки как жесткого целого с нулевой частотой.

Особый интерес представляет возможность использования ДНКМ для возбуждения дискретных бризеров в решетке. Дискретные бризеры могут быть основаны только на ДНКМ, частота которых лежит вне фононного спектра, например, выше спектра или в щели спектра, если таковая имеется. В рассматриваемой модели существует два типа нелинейности, при которых могут существовать дискретные бризеры: мягкий и жесткий. При отсутствии локального потенциала спектр сплошной и возможны только бризеры с частотой выше спектра. При наличии локального потенциала открывается запрещенная зона ниже фононной полосы и появляется возможность существования щелевых бризеров. Реализация такой возможности, как будет показано ниже, зависит от типа локального потенциала.

Рассмотрим два типа нелинейности локального потенциала отдельно.

Для существования дискретного бризера с мягким типом нелинейности кривая $A(\omega)$ должна лежать ниже фононного спектра. Минимальная частота фононов в рассматриваемой модели $\omega_{min} = 1.0$. Мода 0 отщепляется от нижней границы фононного спектра и в случае ангармонизма мягкого типа, см. рисунок 2.2(а), входит в щель ниже фононной полосы. Можно сделать вывод, что в рассмотренной решетке, для мягкого ангармонизма, возможно обнаружение дискретного бризера, основанного на ДНКМ 0. ДНКМ 2 и 8 также демонстрируют мягкий тип нелинейности, но генерация на их основе дискретных бризеров невозможна, так как частоты этих мод находятся в пределах фононного спектра. Выше частоты $\omega_{max}=2.64$, соответствующей верхнему краю фононного спектра, лежит частота ДНКМ 4 см. рисунок 2.2(а). На основе данной ДНКМ может быть получен дискретный бризер с жесткой нелинейностью.

В случае жесткого ангармонизма частоты мод ожидаемо увеличиваются по сравнению со случаем мягкого ангармонизма, некоторые из амплитудно-частотных зависимостей меняют ход, например, частота ДНКМ 0 начинает расти, а не падать с ростом амплитуды. Но мода 8 остается мягкой даже в случае жесткого ангармонизма. Дискретные бризеры в случае жесткого ангармонизма можно получить только на основе ДНКМ 4 (на максимальной частоте), а мода 0 не мо-

жет породить дискретный бризер, так как её частота лежит в фоновом спектре см. рисунок 2.2(b) .

Расчет проводился только до амплитуды ДНКМ $A = 0,4$, поскольку при больших значениях амплитуды довольно быстро развивается модуляционная неустойчивость мод.

На рисунке 2.3 показана зависимость энергии системы от амплитуды в расчете на одну частицу. Если посмотреть на графики, то видно, что энергия в разных режимах растет незначительно при переходе от мягкого к жесткому типу нелинейности. Для мод с низкой частотой наблюдается небольшое увеличение энергии: мода 0 имеет энергию 0,075 эВ с мягким ангармонизмом и 0,08 с жестким; мода 10 - 0,075 для мягкого и 0,08 эВ для жесткого. В то время как высокочастотные моды показывают меньший относительный прирост энергии, например, энергия моды 2 с мягким ангармонизмом составляет 0,56 эВ, а жестким - 0,57 эВ; для моды 4 эти энергии составляют 0,5 и 0,51 эВ соответственно. Также большое увеличение энергии наблюдается для моды 6. Для моды 8 значения энергий для двух типов нелинейности практически не отличаются и составляют 0,355 эВ.

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 2.1. При отсутствии локального потенциала эта мода трансформируется в движение решетки как жесткого целого. Частота ДНКМ 0 отщепляется от нижнего края фонового 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 фонового спектра, и появляется возможность существования дискретного бризера, основанного на этой моде.

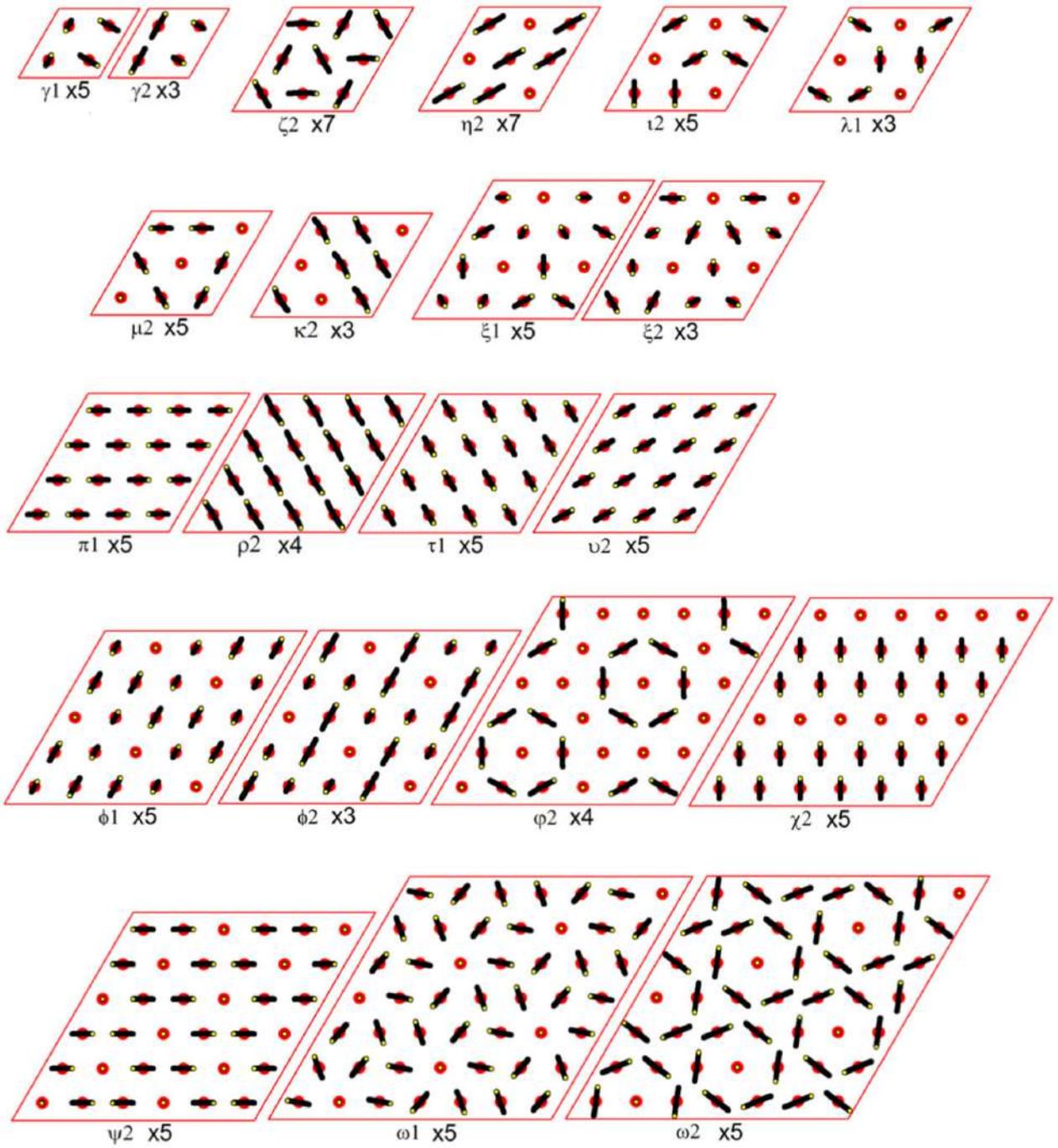


Рисунок 2.4 — Синхронизированные двухкомпонентные ДНКМ треугольной решетки, описанные в работе [203]. Для каждой из 21 ДНКМ показаны трансляционные ячейки. Точки треугольной решетки отмечены красным цветом, начальные положения атомов - желтым, а траектории колеблющихся атомов - черными линиями.

2.1.3 Двухкомпонентные ДНКМ треугольной решетки

В работе [203] были описаны не только однокомпонентные ДНКМ (см. рисунок 2.1), но и двухкомпонентные ДНКМ, динамика которых описывается не одним, а двумя связанными уравнениями движения. Иначе говоря, двухкомпонентные ДНКМ имеют две степени свободы, причем, их частоты колебаний, вообще говоря, несоразмерны. Однако, для большинства из них удастся найти соотношение между амплитудами компонент, при которых происходит их синхронизация [203]. На рисунке 2.1 показаны трансляционные ячейки 21-ой синхронизированных двухкомпонентных ДНКМ треугольной β -ФПУ решетки. Точки треугольной решетки отмечены красным цветом, начальные положения атомов - желтым, а траектории колеблющихся атомов - черными линиями. В работе [203] были рассчитаны амплитудно-частотные характеристики мод и показано, что в дополнение к однокомпонентными ДНКМ 2 и 4 двухкомпонентная синхронизированная ДНКМ γ_2 имеет частоту выше фононного спектра. Эти три ДНКМ будут далее исследованы на предмет возможности получения ДБ на их основе.

2.1.4 ДНКМ треугольной решетки Морзе и их устойчивость

Излагаемые в данном разделе результаты опубликованы в работах [68; 86].

Рассматривается двумерная плотноупакованная треугольная решетка. Для описания межчастичных взаимодействий используется классический потенциал Морзе:

$$V(r) = A\{\exp[-2\beta(r - r_m)] - 2\exp[-\beta(r - r_m)]\}, \quad (2.3)$$

где r - расстояние между двумя частицами, A - энергия взаимодействия и β характеризует жесткость связи. Минимум функции $V(r)$ располагается при $r = r_m$. При правильном выборе единиц энергии, расстояния и времени мы полагаем $A = 1$, $r_m = 1$ и масса частиц $m = 1$. Возьмем $\beta = 5$ и радиус обрезки потенциала $5r_m$. В этом случае равновесное межчастичное расстояние

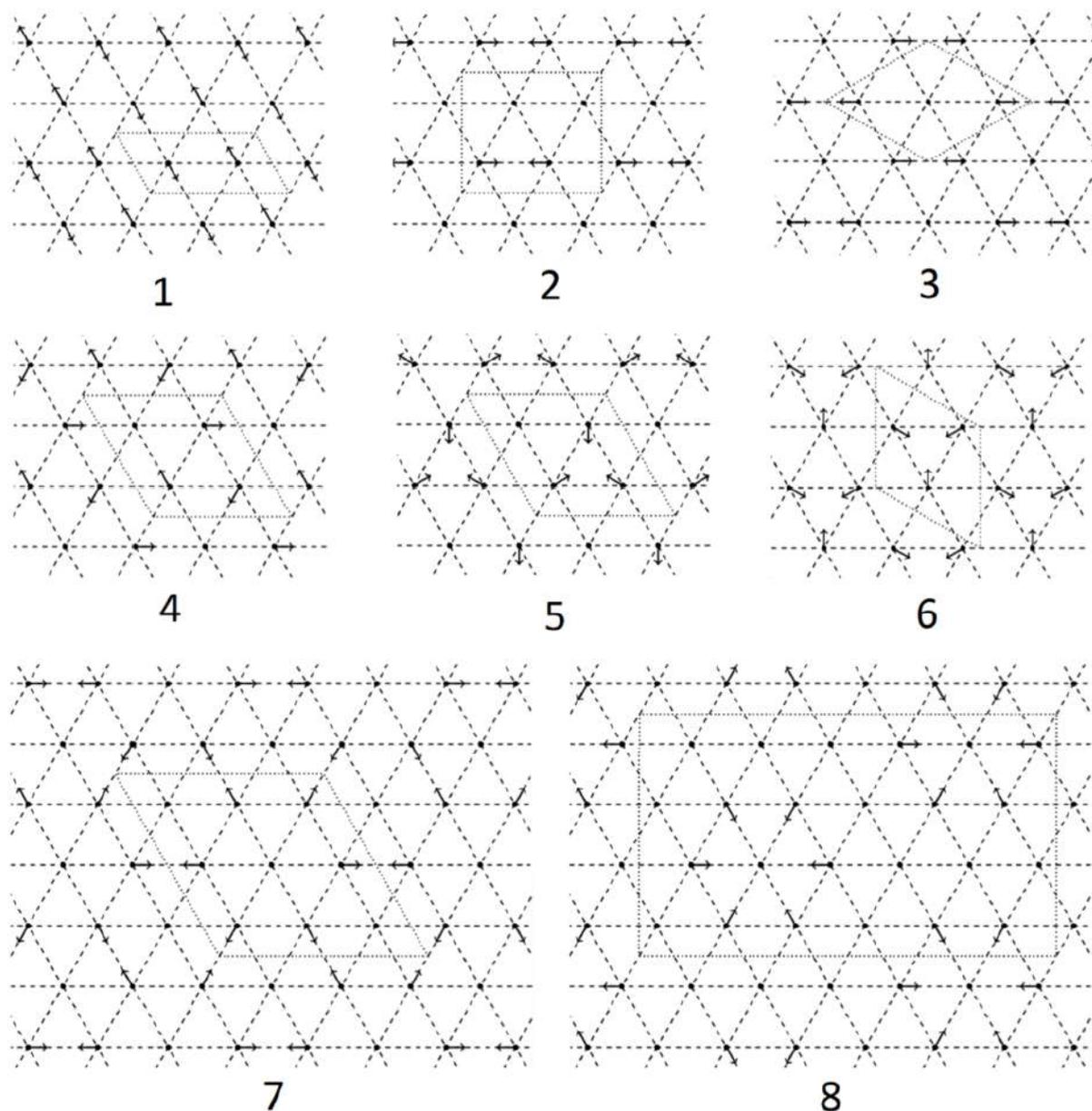


Рисунок 2.5 — Восемь однокомпонентных ДНКМ, поддерживаемых треугольной решеткой, полученных Чечиным и Рябовым в работе [203]. Вектора перемещений имеют длину D_0 , которая определяет начальную амплитуду ДНКМ. Пунктирными линиями показаны трансляционные ячейки паттернов смещений частиц. ДНКМ с 1 по 8 на данном рисунке совпадают с ДНКМ 1, 9, 5, 3, 4, 6, 7 и 13 соответственно на рисунке 2.1.

$a = 0,9881329$. Расчетная ячейка включает 24×24 частиц. Применяются периодические граничные условия.

На рисунке 2.5 показаны восемь ДНКМ со смещениями частиц в плоскости, полученные Рябовым [203] с использованием теории бушей нормальных нелинейных мод, разработанной Чечиным и Сахненко [1–3]. Заметим, что ДНКМ с 1 по 8 на рисунке 2.5 совпадают с ДНКМ 1, 9, 5, 3, 4, 6, 7 и 13 соответственно, изображенными на рисунке 2.1.

Все стрелки на рисунке 2.5 имеют одинаковую длину D_0 . Начальные условия определяются заданием начальных перемещений по этим схемам с нулевыми начальными скоростями частиц. Выбор D_0 определяет амплитуду ДНКМ, но, как будет показано ниже, не всегда амплитуда равна D_0 .

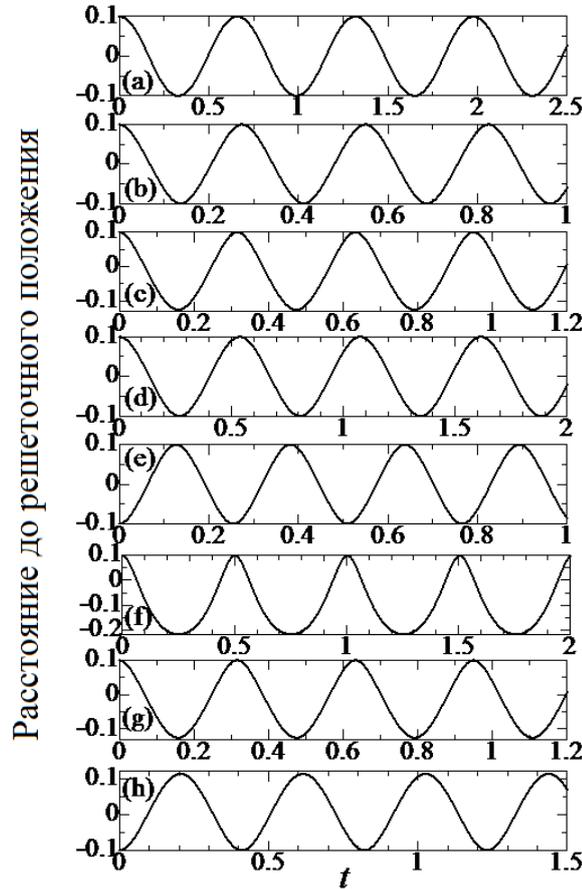


Рисунок 2.6 — (a-h) Расстояние от движущейся частицы до её равновесного решеточного положения в зависимости от времени для ДНКМ 1-8 соответственно. Начальное смещение частиц $D_0 = 0.1$ для всех ДНКМ.

На рисунке 2.6(a-h) приводятся зависимости перемещений движущихся частиц от времени для ДНКМ 1-8 соответственно для начальных смещений $D_0 = 0.1$. Ввиду различия частот мод, масштаб по оси абсцисс для разных мод

выбран разным, так, чтобы показать 3-4 периода колебаний. Отметим, что в ДНКМ 1, 2, 4 и 5 максимальные и минимальные значения перемещений частиц совпадают по абсолютной величине и равны D_0 . Такие колебания будем называть симметричными. Колебания частиц в ДНКМ 3, 6, 7 и 8 несимметричны, ведь для них абсолютные величины максимальных и минимальных значений перемещений отличаются. За амплитуду ДНКМ A возьмем половину разницы между максимальным и минимальным отклонением частицы от положения равновесия. Тогда для симметричных мод выполняется $A = D_0$, однако для несимметричных мод это не так. На рисунке 2.7 для восьми ДНКМ изображена зависимость амплитуды ДНКМ A от начального смещения D_0 . Здесь хорошо видно, что $A = D_0$ для симметричных ДНКМ 1, 2, 4 и 5, в то время как для несимметричных ДНКМ 3, 6, 7 и 8 наблюдается $A > D_0$. Для ДНКМ 6 зависимость $A(D_0)$ оказывается немонотонной, что объясняется переходом от асимметричных колебаний к симметричным для $D_0 > 0.11$.

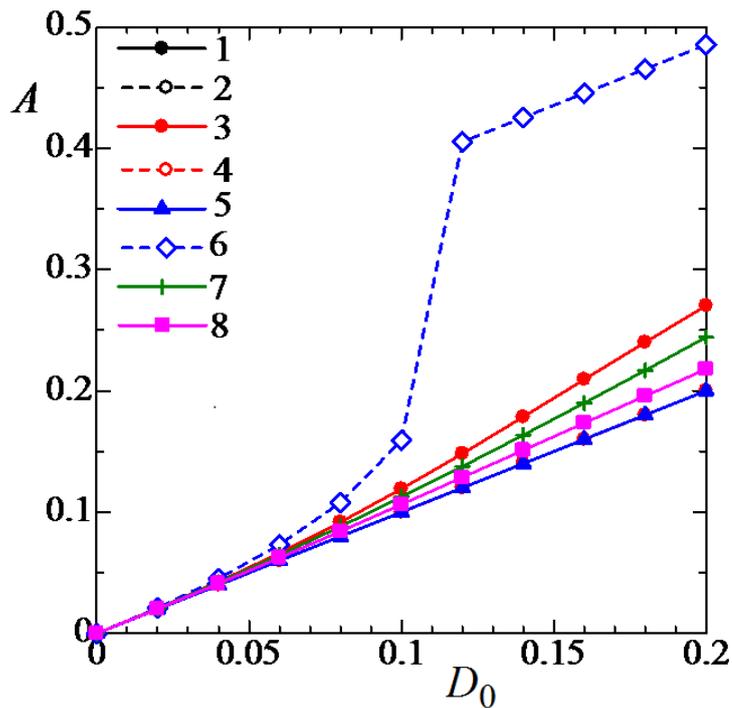


Рисунок 2.7 — Амплитуда ДНКМ A как функция начального смещения частиц D_0 для восьми однокомпонентных ДНКМ. Для симметричных ДНКМ 1, 2, 4 и 5 имеем $A = D_0$, в то время как для несимметричных ДНКМ 3, 6, 7 и 8 амплитуда колебаний A превышает величину начального смещения D_0 .

На рисунке 2.8 показаны зависимости частоты от начального смещения частиц D_0 для восьми ДНКМ. Только ДНКМ 1 и 6 (последняя - при небольших амплитудах) имеют мягкий тип нелинейности, то есть снижение частоты с

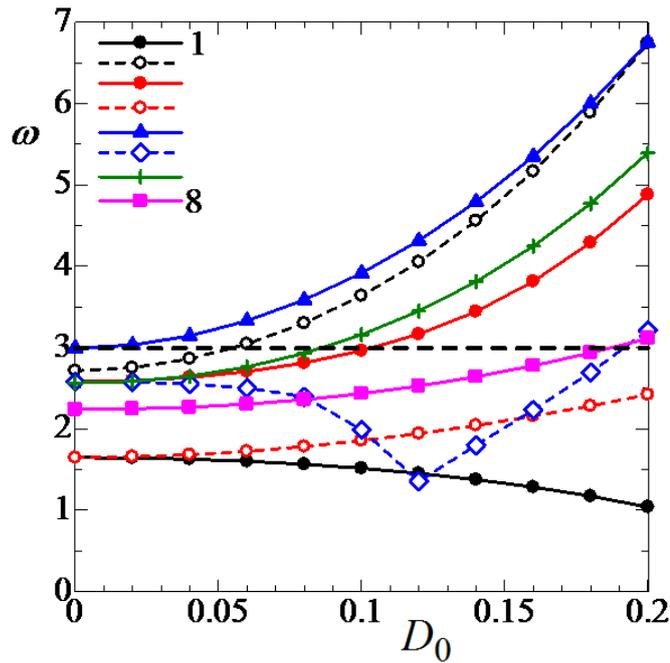


Рисунок 2.8 — Амплитудно-частотные зависимости для восьми однокомпонентных ДНКМ. Верхняя граница фононного спектра решетки отмечена горизонтальной пунктирной линией.

увеличением амплитуды. Остальные моды показывают жесткий тип нелинейности с частотой, увеличивающейся с амплитудой. Пунктирная горизонтальная линия отмечает верхнюю границу фононного спектра решетки. Лишь ДНКМ 5 имеет частоту, ответвляющуюся от верхней границы фононного спектра и лежащую выше фононного спектра. Все остальные ДНКМ при малых амплитудах имеют частоты в фононном спектре.

На рисунке 2.9 показаны зависимости энергии системы в расчете на атом для восьми ДНКМ от начального смещения атомов. Для небольших значений D_0 энергия растет пропорционально квадрату амплитуды, как это и должно быть для колебаний близких к гармоническим. С ростом амплитуды наблюдается отклонение от квадратичной зависимости. Для ДНКМ, в которых частицы сталкиваются друг с другом и происходит сильная деформация связей, наблюдается ускоренный по сравнению с квадратичным рост энергии с амплитудой, это происходит, например, для ДНКМ 3, 5, 6 и 7. Для ДНКМ 1 происходит обратное, с ростом амплитуды происходит замедление роста энергии. Это связано с тем, что в данной моде ряды частиц сдвигаются друг относительно друга, связи между частицами деформируются мало и геометрическая нелинейность преобладает над физической.

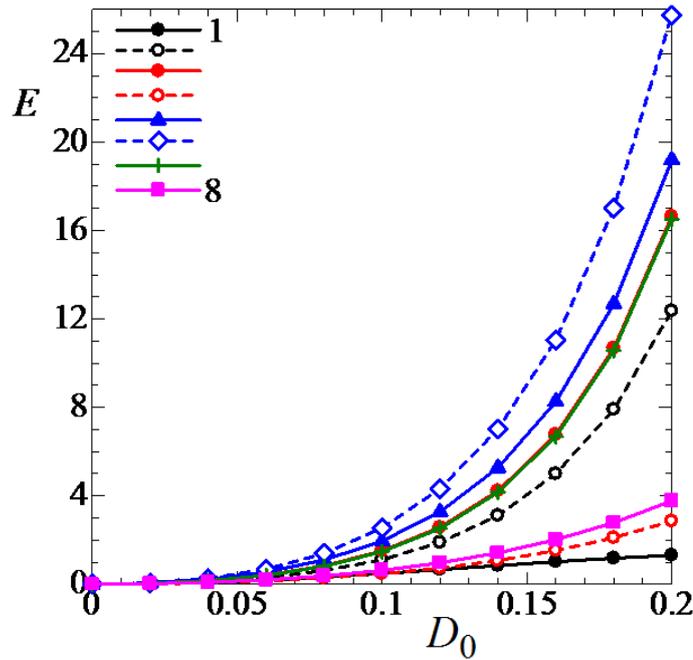


Рисунок 2.9 — Полная энергия системы в расчете на один атом как функция амплитуды ДНКМ.

По этой же причине (сильная деформация связей) наибольшую энергию имеет ДНКМ 6, за ней идет ДНКМ 5 и далее с практически одинаковыми энергиями идут ДНКМ 3 и 7. Наименьшую энергию имеет ДНКМ 1, в которой атомы плотноупакованных атомных рядов скользят друг относительно друга и деформация связей мала.

Далее рассмотрим какие нормальные напряжения возникают в расчетной ячейке при возбуждении ДНКМ. Речь пойдет о напряжениях σ_{xx} и σ_{yy} , осредненных за период колебания ДНКМ, см. рисунок 2.10. Были рассчитаны также и сдвиговые напряжения, но они оказались равными нулю для всех ДНКМ. Сопоставляя данные, приведенные на рисунке 2.10, делаем вывод, что ДНКМ 1, 2 и 3 нарушают изотропию треугольной решетки, поскольку для них компоненты нормальных напряжений σ_{xx} и σ_{yy} не равны друг другу. Остальные ДНКМ не нарушают изотропию решетки так как для них $\sigma_{xx} = \sigma_{yy}$. Для всех ДНКМ напряжения отрицательны, кроме компоненты напряжения σ_{xx} для ДНКМ 1. Однако σ_{yy} для ДНКМ 1 отрицательно и превосходит по абсолютному значению σ_{xx} , следовательно, ДНКМ 1, как и все остальные ДНКМ, создают в решетке положительное давление.

Уместно отметить, что некоторые ДНКМ в графене создают отрицательное давление благодаря особой структуре движения атомов углерода [136].

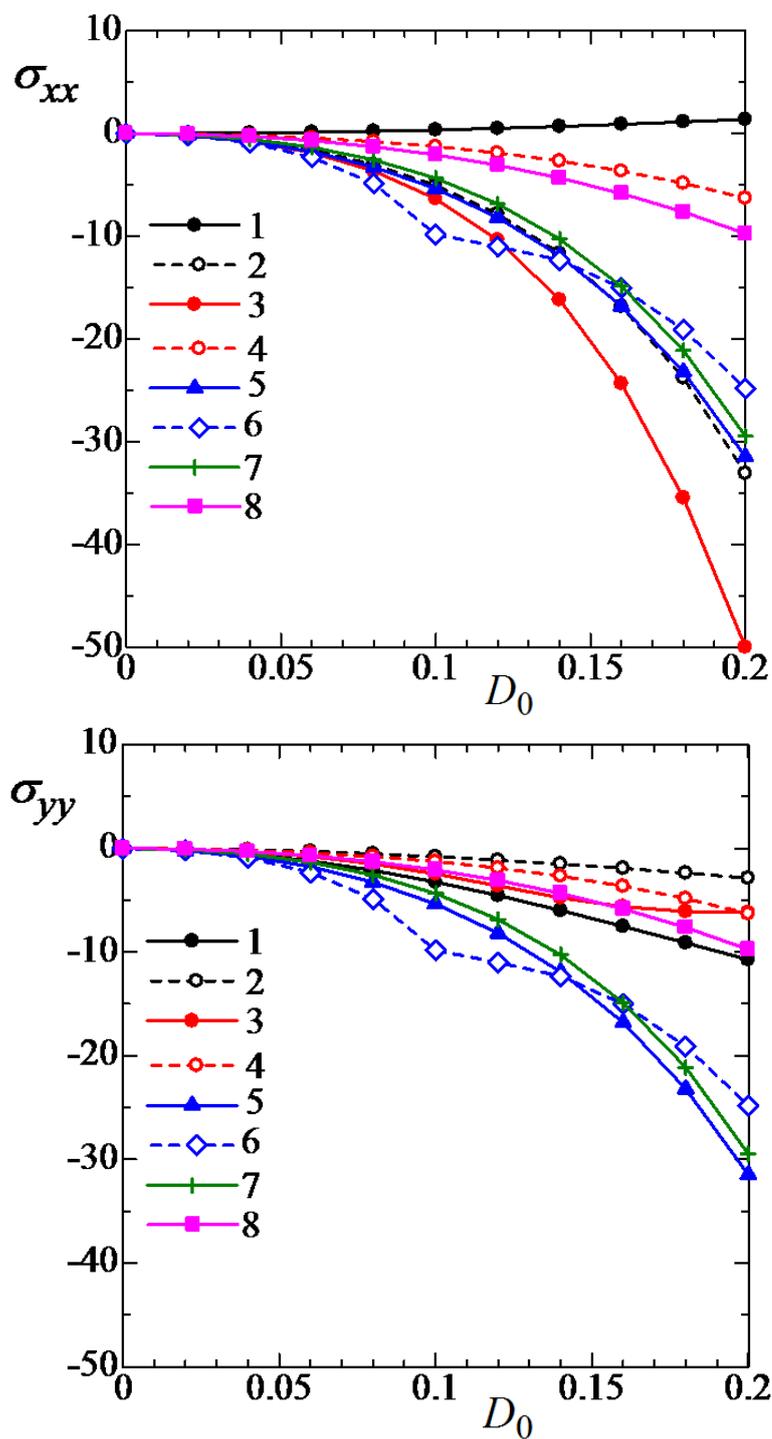


Рисунок 2.10 — Напряжения σ_{xx} и σ_{yy} , осредненные за период колебания ДНКМ как функции амплитуды ДНКМ.

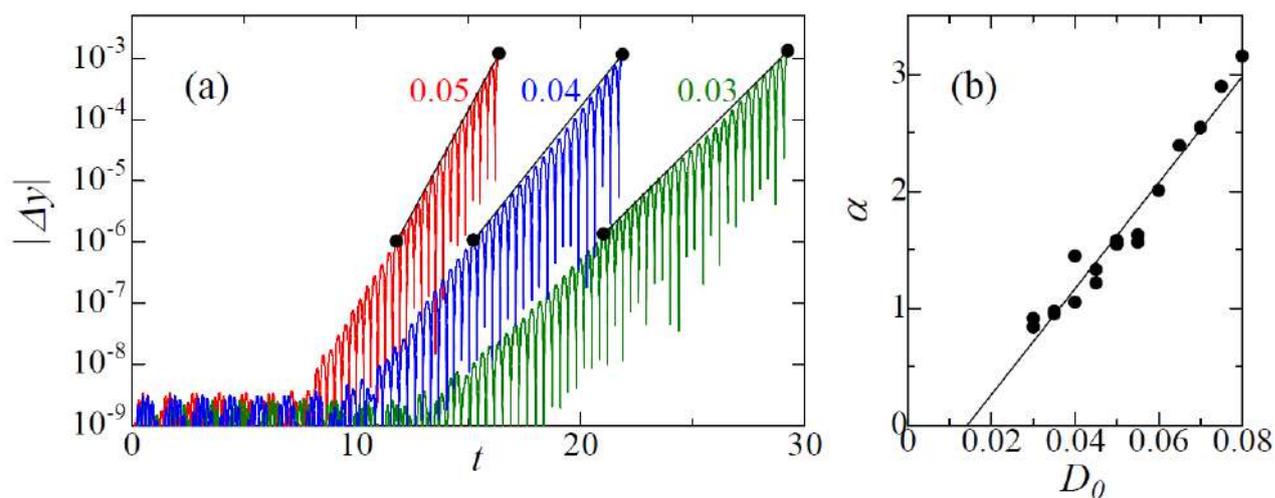


Рисунок 2.11 — Результаты анализа устойчивости ДНКМ 2. (а) Абсолютное значение смещения $|\Delta y|$ как функция времени для движущейся частицы. Три кривые показывают результаты для трех различных значений начальных смещений частиц, $D_0 = 0,03, 0,04$ и $0,05$, как показано на рисунке. Прямые линии показывают наклоны, по которым рассчитывались показатели критических экспонент. (б) Показатель критической экспоненты как функция амплитуды начальных смещений частиц. Прямая линия показывает аппроксимацию методом наименьших квадратов.

Переходим к анализу устойчивости ДНКМ 1-8, представленных на рисунке 2.1.

Для облегчения развития неустойчивости ко всем частицам добавляются случайные начальные смещения в плоскости с максимальным отклонением от положения равновесия, равным 10^{-9} .

На рисунке 2.11 мы в качестве примера приводим численные результаты, полученные для ДНКМ 2. Обратим внимание, что в этой ДНКМ все движущиеся частицы колеблются в горизонтальном (x) направлении. В качестве меры неустойчивости этой моды можно проанализировать появление смещений в вертикальном (y) направлении. Было обнаружено, что y -компонента сначала оставалась на уровне начального возмущения, а затем начинала экспоненциально расти со временем, $\max |\Delta y| \sim \exp(\alpha t)$, с показателем критической экспоненты α . Это показано на рисунке 2.11(a) для трех значений начальных смещений частиц, $D_0 = 0,03, 0,04$ и $0,05$. Обратим внимание, что для ординаты используется логарифмическая шкала. Отрезки прямых показывают наклоны, по которым рассчитывались показатели критических экспонент. На рисунке 2.11(b) показатель критической экспоненты показан для ДНКМ 2 как функция D_0 . Прямая линия представляет собой линейную аппроксимацию методом наименьших квадратов $\alpha = a + bD_0$, где $a = -0,641$ и $b = 45,3$. Это показывает, что показатель критической экспоненты обращается в нуль при $D_0 = 0,0142$. При меньших значениях D_0 ДНКМ 2 является модуляционно устойчивой. Коэффициент b указывает на чувствительность показателя критической экспоненты к амплитуде ДНКМ 2.

В таблице 1 коэффициенты a и b приведены для всех восьми изученных однокомпонентных ДНКМ. Как видно из таблицы 1, наиболее чувствительной к амплитуде ДНКМ является устойчивость ДНКМ 5 ($b = 125$), а наименее чувствительной является устойчивость ДНКМ 8 ($b = 11,8$).

Итак, методом молекулярной динамики для треугольной решетки Морзе исследована модуляционная неустойчивость восьми ДНКМ с колебаниями частиц в плоскости решетки. Установлено, что критическое значение амплитуды ДНКМ, выше которого она становится неустойчивой, составляет порядка 1% от межатомного расстояния.

В будущих исследованиях было бы важно проанализировать влияние размера вычислительной ячейки на развитие модуляционной неустойчивости. Так-

Таблица 1 — Коэффициенты аппроксимации методом наименьших квадратов зависимости $\alpha = a + bD_0$ для восьми изученных ДНКМ.

ДНКМ	1	2	3	4
a	-0.383	-0.641	-1.75	-0.811
b	13.3	45.3	70.1	23.8
ДНКМ	5	6	7	8
a	-3.92	-1.49	-0.170	-0.055
b	125	73.3	23.4	11.8

же следует проанализировать устойчивость ДНКМ с поперечными колебаниями частиц (в направлении оси z), а также двухкомпонентных ДНКМ.

2.2 ДНКМ квадратной решетки с потенциалом β -ФПУ

В данном разделе будет описана квадратная решетка с потенциалом взаимодействия β -ФПУ между ближайшими и вторыми соседями, даны выражения для вычисления некоторых механических и физических характеристик решетки, описаны шестнадцать однокомпонентных ДНКМ квадратной решетки, найденные ранее Рябовым с применением теории бушей нормальных мод, разработанной Чечиным и Сахненко [1–3]. Будут представлены дисперсионные соотношения квадратной решетки. Для нескольких ДНКМ, в качестве примера, будут получены аналитические выражения, связывающие частоту их колебаний с амплитудой. Далее будут представлены результаты численного моделирования свойств ДНКМ, и описано их влияние на макроскопические свойства решеток.

2.2.1 Квадратная β -ФПУ решетка

Рассматривается двумерная квадратная β -ФПУ решетка с учетом взаимодействий между ближайшими и вторыми соседями, см. рисунок 2.12. Квадратная решетка с шагом решетки h представляет собой набор точек плоскости xy

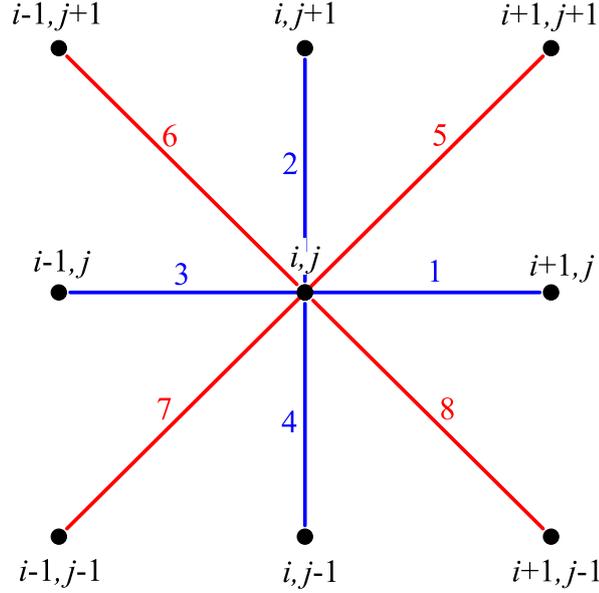


Рисунок 2.12 — Нумерация частиц индексами i и j , а также нумерация ближайших связей (синие линии) и связей со вторыми соседями (красные линии) в квадратной решетке.

с радиус-векторами

$$\boldsymbol{\xi}_{i,j} = i\mathbf{e}_1 + j\mathbf{e}_2, \quad (2.4)$$

где i и j - произвольные целые числа, а базисные векторы решетки определены как $\mathbf{e}_1 = (h, 0)$ и $\mathbf{e}_2 = (0, h)$.

В узлах решетки располагаются частицы массы m , каждая из которых имеет две степени свободы - компоненты вектора смещения $(u_{i,j}, v_{i,j})$. Положение частицы i, j в момент времени t задается радиус-вектором $\mathbf{r}_{i,j}(t) = \boldsymbol{\xi}_{i,j} + (u_{i,j}(t), v_{i,j}(t))$.

Каждая частица взаимодействует с четырьмя ближайшими (n - nearest) и четырьмя вторыми (nn - next-nearest) соседями посредством β -ФПУ потенциала

$$\varphi_{n,nn}(r) = \frac{k_{n,nn}}{2}(r - a_{n,nn})^2 + \frac{\beta_{n,nn}}{4}(r - a_{n,nn})^4, \quad (2.5)$$

где r - расстояние между частицами, $a_n = h$ и $a_{nn} = \sqrt{2}h$ - равновесные длины связей для ближайших и вторых соседей соответственно; k_n и k_{nn} (β_n и β_{nn}) - это коэффициенты для гармонической (ангармонической) части потенциала для ближайших и вторых соседей соответственно. Мы полагаем $h = 1$ и $k_n = 1$, выбирая единицы измерения расстояния и энергии соответственно. Далее будут

рассмотрены различные значения k_{nn} . Для коэффициентов, определяющих ангармонизм взаимодействий, положим $\beta_n = \beta_{nn} = 10$, при этом выборе эффекты нелинейности становятся заметными для смещений частиц порядка $0,1h$. Массу частиц полагаем равной $m = 1$, что может быть всегда достигнуто масштабированием единицы измерения времени.

Ссылаясь на рисунок 2.12, определим следующие векторы, соединяющие ближайших и вторых соседей частицы i, j :

$$\begin{aligned}
\mathbf{R}_{i,j,1} &= \mathbf{r}_{i+1,j} - \mathbf{r}_{i,j}, & \mathbf{R}_{i,j,2} &= \mathbf{r}_{i,j+1} - \mathbf{r}_{i,j}, \\
\mathbf{R}_{i,j,3} &= \mathbf{r}_{i,j} - \mathbf{r}_{i-1,j}, & \mathbf{R}_{i,j,4} &= \mathbf{r}_{i,j} - \mathbf{r}_{i,j-1}, \\
\mathbf{R}_{i,j,5} &= \mathbf{r}_{i+1,j+1} - \mathbf{r}_{i,j}, & \mathbf{R}_{i,j,6} &= \mathbf{r}_{i-1,j+1} - \mathbf{r}_{i,j}, \\
\mathbf{R}_{i,j,7} &= \mathbf{r}_{i,j} - \mathbf{r}_{i-1,j-1}, & \mathbf{R}_{i,j,8} &= \mathbf{r}_{i,j} - \mathbf{r}_{i+1,j-1}.
\end{aligned} \tag{2.6}$$

Вычислительная ячейка включает $I \times J$ частиц с периодическими граничными условиями: $\mathbf{r}_{i,j} = \mathbf{r}_{i+I,j} = \mathbf{r}_{i,j+J}$. Гамильтониан (полная энергия) расчетной ячейки представляет собой сумму кинетической и потенциальной энергий взаимодействия между ближайшими и вторыми соседями:

$$\begin{aligned}
H &= K + P_n + P_{nn} = \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \frac{m}{2} (\dot{\mathbf{r}}_{i,j}, \dot{\mathbf{r}}_{i,j}) \\
&+ \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \left(\sum_{k=1}^2 \varphi_n(|\mathbf{R}_{i,j,k}|) + \sum_{l=5}^6 \varphi_{nn}(|\mathbf{R}_{i,j,l}|) \right),
\end{aligned} \tag{2.7}$$

где точка означает дифференцирование по времени.

Уравнения движения Гамильтона, полученные из уравнения (2.7), следующие:

$$\begin{aligned}
m\ddot{u}_{i,j} &= - \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \left(- \sum_{k=1}^2 D_n R_{i,j,k,x} + \sum_{k=3}^4 D_n R_{i,j,k,x} \right. \\
&\quad \left. - \sum_{l=5}^6 D_{nn} R_{i,j,l,x} + \sum_{l=7}^8 D_{nn} R_{i,j,l,x} \right), \\
m\ddot{v}_{i,j} &= - \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \left(- \sum_{k=1}^2 D_n R_{i,j,k,y} + \sum_{k=3}^4 D_n R_{i,j,k,y} \right. \\
&\quad \left. - \sum_{l=5}^6 D_{nn} R_{i,j,l,y} + \sum_{l=7}^8 D_{nn} R_{i,j,l,y} \right), \tag{2.8}
\end{aligned}$$

где

$$D_n = \frac{\varphi'_n(|\mathbf{R}_{i,j,k}|)}{|\mathbf{R}_{i,j,k}|}, \quad D_{nn} = \frac{\varphi'_{nn}(|\mathbf{R}_{i,j,l}|)}{|\mathbf{R}_{i,j,l}|}. \tag{2.9}$$

Для интегрирования уравнений движения (2.8) используется метод Штормера шестого порядка с шагом по времени 0,002 единицы времени. Этот симплектический интегратор эффективен для обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка, не содержащих первой производной от неизвестной функции [48].

Размер ячейки моделирования принят равным $I = J = 12$. При таком выборе могут быть описаны ДНКМ, имеющие пространственные периоды с 2, 3 и 4 примитивными трансляционными ячейками, и, как это будет показано ниже, однокомпонентных ДНКМ с другим трансляционным периодом не существует.

2.2.2 Дисперсионные соотношения фононных колебаний

Предполагая, что $u_{ij} \ll h$ и $v_{ij} \ll h$, мы раскладываем в ряд Тейлора правые части уравнений (2.8) по компонентам малых перемещений и отбрасываем члены со степенями выше первой, получая линеаризованные уравнения

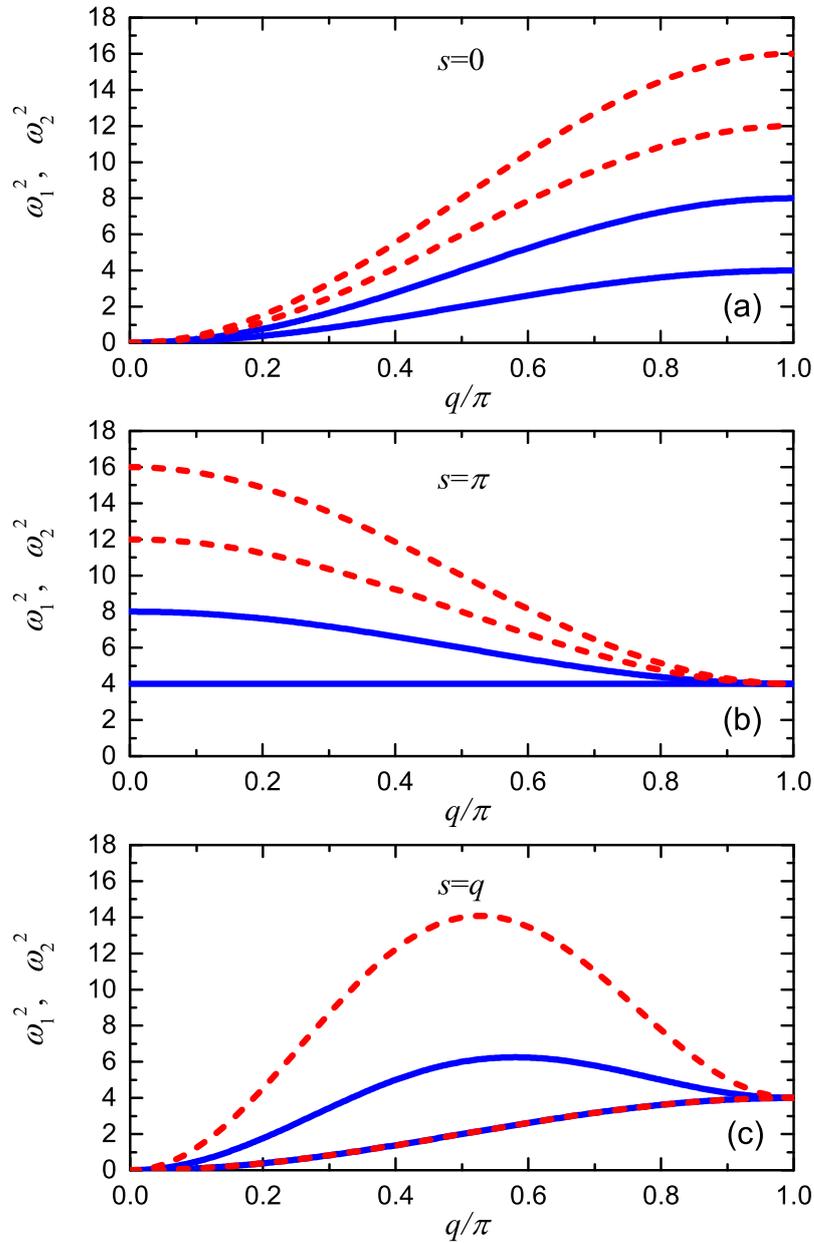


Рисунок 2.13 — Примеры дисперсионных кривых квадратной решетки β -ФПУ (построены квадраты частот как функции волновых чисел q и s). Кривые построены вдоль линий первой зоны Бриллюэна (а) $s = 0$, (б) $s = \pi$ и (в) $s = q$. Синие сплошные (красные пунктирные) кривые построены для $k_{nn} = 1$ ($k_{nn} = 3$). Частоты продольных колебаний с частотами ω_1 лежат выше частот поперечных колебаний ω_2 .

ДВИЖЕНИЯ

$$\begin{aligned}
m\ddot{u}_{i,j} &= k_n(u_{i-1,j} - 2u_{i,j} + u_{i+1,j}) \\
&+ \frac{k_{nn}}{2}(u_{i-1,j-1} - 2u_{i,j} + u_{i+1,j+1}) \\
&+ \frac{k_{nn}}{2}(v_{i-1,j-1} - 2v_{i,j} + v_{i+1,j+1}) \\
&+ \frac{k_{nn}}{2}(u_{i-1,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i+1,j-1}) \\
&- \frac{k_{nn}}{2}(v_{i-1,j+1} - 2v_{i,j} + v_{i+1,j-1}), \\
m\ddot{v}_{i,j} &= k_n(v_{i,j-1} - 2v_{i,j} + v_{i,j+1}) \\
&+ \frac{k_{nn}}{2}(u_{i-1,j-1} - 2u_{i,j} + u_{i+1,j+1}) \\
&+ \frac{k_{nn}}{2}(v_{i-1,j-1} - 2v_{i,j} + v_{i+1,j+1}) \\
&- \frac{k_{nn}}{2}(u_{i-1,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i+1,j-1}) \\
&+ \frac{k_{nn}}{2}(v_{i-1,j+1} - 2v_{i,j} + v_{i+1,j-1}). \tag{2.10}
\end{aligned}$$

Ищем решение уравнения (2.10) в виде $u_{i,j} = F \exp[i(qi + sj - \omega t)]$, $v_{i,j} = B \exp[i(qi + sj - \omega t)]$, где i - мнимая единица, и находим следующие дисперсионные соотношения

$$\omega_{1,2}^2(q, s) = \frac{-\xi \pm \sqrt{\xi^2 - 4m^2\gamma}}{2m^2}, \tag{2.11}$$

где

$$\begin{aligned}
\xi &= m(Q + S + 2U + 2G), \\
\gamma &= (Q + U + G)(S + U + G) - (U - G)^2, \\
Q &= 2k_n(\cos q - 1), \quad S = 2k_n(\cos s - 1), \\
U &= k_{nn}[\cos(q + s) - 1], \quad U = k_{nn}[\cos(q - s) - 1]. \tag{2.12}
\end{aligned}$$

Знак плюс в уравнении (2.11) отвечает продольным, а минус - поперечным колебаниям, следовательно, частоты продольных колебаний выше, чем поперечных.

Частоты фононов в точках $(q,s) = (\pm\pi,0)$ и $(0, \pm\pi)$ равны

$$\omega_1 = 2\sqrt{(k_n + k_{nn})/m}, \quad \omega_2 = 2\sqrt{k_{nn}/m}. \quad (2.13)$$

Здесь ω_1 - максимальная фононная частота. Связи между ближайшими и вторыми соседями вносят одинаковый вклад в максимальную частоту.

В точках $(q,s) = (\pm\pi, \pm\pi)$ частоты равны $\omega_1 = \omega_2 = 2\sqrt{k_n/m}$, что не зависит от k_{nn} и для $k_{nn} > 0$ меньше, чем ω_1 в уравнении (2.13).

Примеры дисперсионных кривых квадратной решетки β -ФПУ представлены на рисунке 2.13, где построены квадраты частот вдоль линий первой зоны Бриллюэна (а) $s = 0$, (б) $s = \pi$ и (в) $s = q$. Синие сплошные (красные пунктирные) кривые соответствуют $k_{nn} = 1$ ($k_{nn} = 3$). Частоты продольных колебаний с частотами ω_1 лежат выше частот поперечных колебаний ω_2 .

Естественно, что кривые для большего значения жесткости связи k_{nn} лежат выше, чем для меньшего значения. Исключение составляет кривая поперечных колебаний на рисунке 2.13(в), не зависящая от k_{nn} .

Максимальная частота фононных колебаний, $\omega_1 = 2\sqrt{(k_n + k_{nn})/m}$, достигается для продольных волн в точках $(q,s) = (\pm\pi,0)$ и $(0, \pm\pi)$, см. уравнение (2.13).

2.2.3 Однокомпонентные ДНКМ квадратной решетки

Шестнадцать однокомпонентных ДНКМ, полученных Рябовым на основе теории бушей нелинейных нормальных мод, разработанной Чечиним и Сахненко [1–3], могут быть возбуждены путем задания начальных смещений частицам в соответствии со схемами, показанными на рисунках 2.14 и 2.15. Начальные скорости всех частиц равны нулю. Пунктиром показаны трансляционные ячейки минимальной площади. Наименьшие трансляционные ячейки с двумя частицами имеют ДНКМ 1, 3, 6 и 9. Самые большие трансляционные ячейки с 8 частицами имеют ДНКМ 13 и 14. Трансляционные ячейки ДНКМ 2 и 10 включают три частицы, а в трансляционных ячейках всех других ДНКМ имеется четыре частицы (4, 5, 7, 8, 11, 12, 15 и 16).

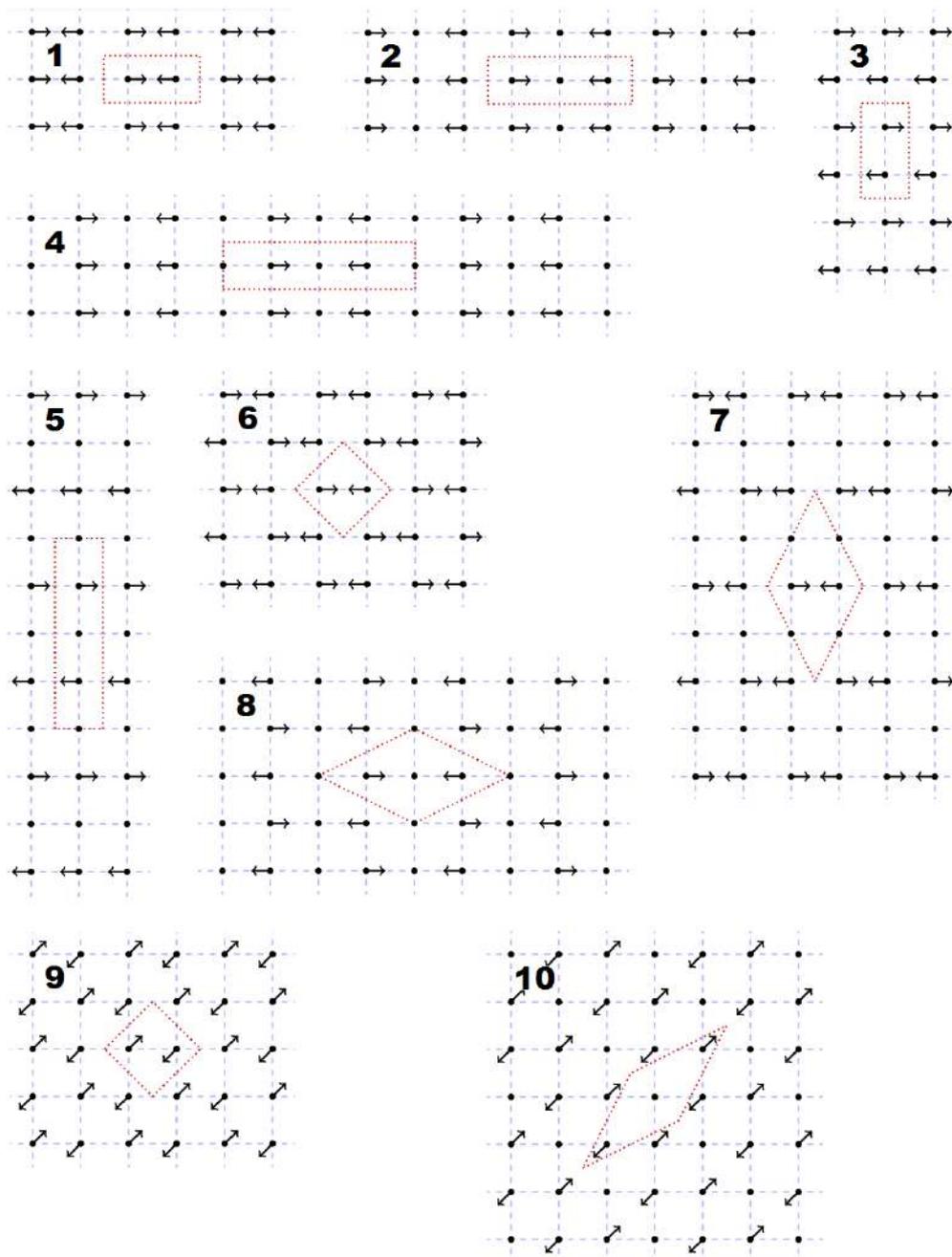


Рисунок 2.14 — Десять первых однокомпонентных ДНКМ квадратной решетки. Стрелками показаны начальные перемещения частиц. Все векторы смещения имеют одинаковую длину, равную A , что является амплитудой ДНКМ. Трансляционные ячейки начальных смещений частиц показаны пунктирными линиями.

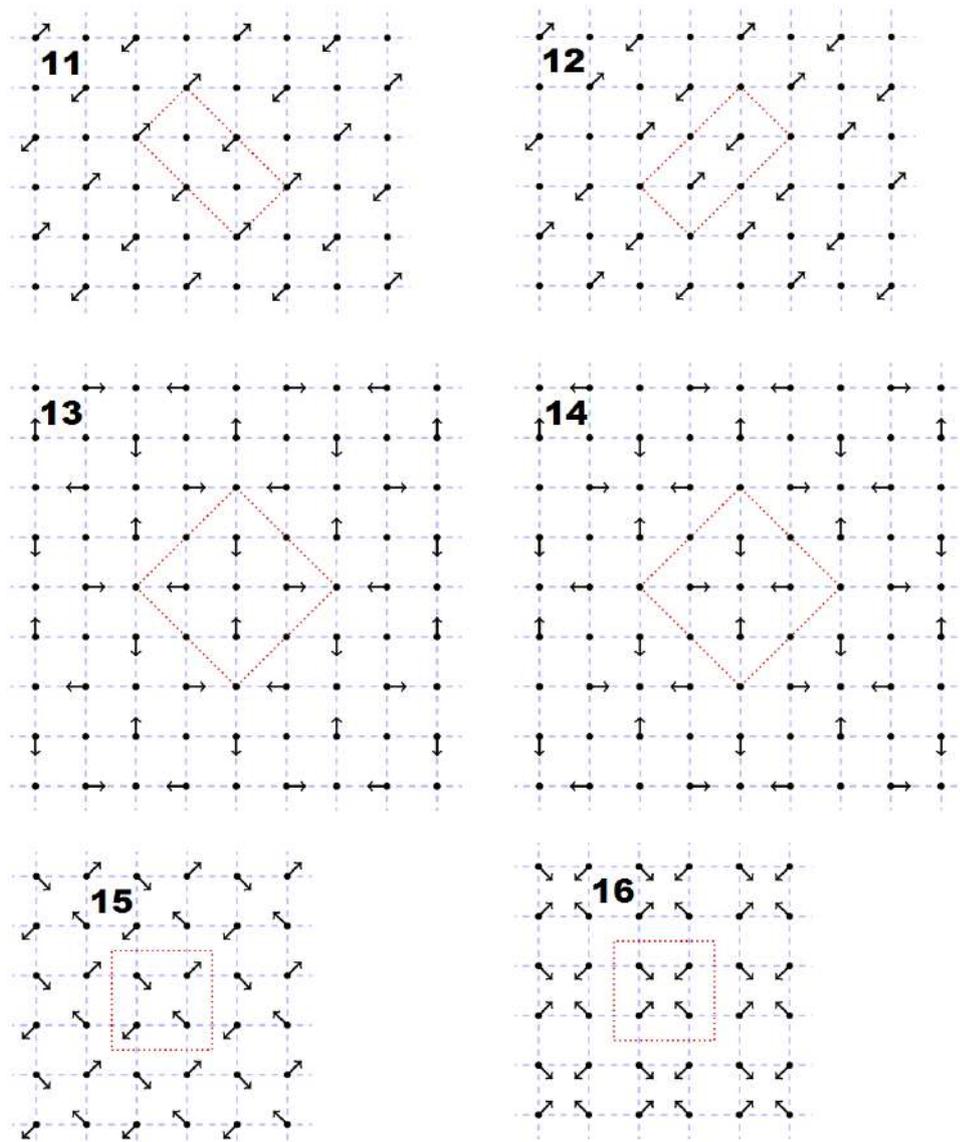


Рисунок 2.15 — Оставшиеся шесть однокомпонентных ДНКМ квадратной решетки. Стрелками показаны начальные перемещения частиц. Все векторы смещения имеют одинаковую длину, равную A , что является амплитудой ДНКМ. Трансляционные ячейки начальных смещений частиц показаны пунктирными линиями.

Все ненулевые векторы начального смещения на рисунках 2.14 и 2.15 имеют одинаковую длину A , которая является амплитудой колебаний ДНКМ. В ДНКМ 1, 3, 6, 9, 15 и 16 движутся все частицы. Половина частиц в ДНКМС 4, 5, 7, 8, 11, 12, 13 и 14 имеют нулевые начальные смещения и остаются в покое в любое время, в то время как другие частицы колеблются. То же самое верно для трети частиц в ДНКМ 2 и 10.

В ДНКМ от 1 до 6 все движущиеся частицы колеблются в направлении плотной упаковки (x или y). В ДНКМ 13 и 14 движущиеся частицы колеблются в обоих направлениях плотной упаковки. В ДНКМ 9–12 частицы движутся по $y = x$ или по $y = -x$, а в ДНКМ 15 и 16 они движутся в обоих этих направлениях.

2.2.4 Аналитические результаты для некоторых однокомпонентных ДНКМ

В качестве примера, для ДНКМ 1, 6 и 16 выпишем точный гамильтониан, уравнение движения с точностью до кубических слагаемых и получим зависимость частоты от амплитуды в рамках кубической аппроксимации, справедливую для не слишком больших амплитуд.

ДНКМ 1

Как было сказано ранее, любая однокомпонентная ДНКМ имеет единственную степень свободы - расстояние движущейся частицы от ее положения равновесия, $a(t)$, при $a(0) = A$. Например, для ДНКМ 1 (см. рисунок 2.14), учитывая характер смещений частиц, получаем гамильтониан

$$\begin{aligned}
 H = & \frac{m\dot{a}^2}{2} + \frac{1}{2} \left[\varphi_n(L_1 - h) + \varphi_{nn}(L_2 - \sqrt{2}h) \right. \\
 & + \varphi_{nn}(L_3 - \sqrt{2}h) + \varphi_n(L_4 - h) + \\
 & \left. + \varphi_{nn}(L_5 - \sqrt{2}h) + \varphi_{nn}(L_6 - \sqrt{2}h) \right], \quad (2.14)
 \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} L_1 &= h + 2a, & L_2 &= \sqrt{(h + 2a)^2 + h^2}, \\ L_3 &= \sqrt{(h - 2a)^2 + h^2}, & L_4 &= h - 2a, \\ L_5 &= \sqrt{(h - 2a)^2 + h^2}, & L_6 &= \sqrt{(h + 2a)^2 + h^2}. \end{aligned} \quad (2.15)$$

Здесь h - равновесное расстояние между точками решетки, L_1 и L_4 - расстояния между ближайшими частицами, L_2, L_3, L_5 и L_6 - расстояния между вторыми соседями; межчастичные потенциалы $\varphi_n(r)$ и $\varphi_{nn}(r)$ определяются формулой (2.5).

Раскладывая потенциальную энергию в уравнении (2.14) в ряд Тейлора и сохраняя члены до четвертого порядка, получаем упрощенный гамильтониан

$$\begin{aligned} H &= \frac{m\dot{a}^2}{2} + 2(k_n + k_{nn})a^2 \\ &+ \left(4\beta_n + 2\beta_{nn} - \frac{3k_{nn}}{2h^2}\right)a^4. \end{aligned} \quad (2.16)$$

Уравнение движения, соответствующее гамильтониану (2.16), имеет вид

$$m\ddot{a} = -4(k_n + k_{nn})a - \left(16\beta_n + 8\beta_{nn} - \frac{6k_{nn}}{h^2}\right)a^3. \quad (2.17)$$

Ищем решение уравнения (2.17) в виде $a(t) = A \sin(\omega t) + A_1 \sin(3\omega t)$, где предполагается, что $A_1 \ll A$, что позволяет найти связь между частотой и амплитудой ДНКМ в виде

$$\begin{aligned} \omega^2 &\approx \frac{4}{m}(k_n + k_{nn}) \\ &+ \frac{3}{4m}\left(16\beta_n + 8\beta_{nn} - \frac{6k_{nn}}{h^2}\right)A^2. \end{aligned} \quad (2.18)$$

Интересно, что если

$$16\beta_n + 8\beta_{nn} < \frac{6k_{nn}}{h^2}, \quad (2.19)$$

то ДНКМ 1 будет демонстрировать мягкий тип нелинейности даже при положительных значениях β_n и β_{nn} . Такой неожиданный результат объясняется противоборством двух типов нелинейности - геометрической и физической. Гео-

метрическая нелинейность для данной колебательной моды приводит к снижению частоты с амплитудой (мягкий тип нелинейности), а физическая - к росту (жесткий тип нелинейности). При малых положительных значениях β_n и β_{nn} превалирует мягкий тип нелинейности, и частота колебаний уменьшается с амплитудой.

Для параметров, используемых в нашей работе, и $k_{nn} = 1$, из уравнения (2.18) находим

$$\omega \approx \sqrt{8 + 175.5A_1^2}. \quad (2.20)$$

ДНКМ 6

Аналогично, для ДНКМ 6 (см. рисунок 2.14), учитывая характер смещения частиц, получаем гамильтониан

$$\begin{aligned} H &= \frac{m\dot{a}^2}{2} + \varphi_n(L_1 - h) + \varphi_n(L_2 - h), \\ L_1 &= h + 2a, \quad L_2 = \sqrt{h^2 + 4a^2}, \end{aligned} \quad (2.21)$$

где h - равновесное расстояние между точками решетки, L_1 , L_2 - расстояния между ближайшими частицами, а $\varphi_n(r)$ - межчастичный потенциал, в нашем случае он задан формулой (2.5). Отметим, что колебания ДНКМ 6 не задействуют связи между вторыми соседями. Расстояния между ними не меняются при любых амплитудах колебаний и потенциал $\varphi_{nn}(r)$ не входит в гамильтониан. Уравнение движения, соответствующее гамильтониану Eq. (2.21), имеет вид

$$H = \frac{m\dot{a}^2}{2} + 2k_n a^2 + (4\beta_n + \frac{2k_n}{h^2})a^4. \quad (2.22)$$

Раскладывая правую часть уравнения (2.22) в ряд Тейлора и сохраняя члены не старше кубических, получаем уравнение движения

$$m\ddot{a} = -4k_n a - 8(2\beta_n + k_n/h^2)a^3. \quad (2.23)$$

Решение уравнения (2.23) для не слишком больших амплитуд может быть записано в виде $a(t) = A \sin(\omega t) + A_1 \sin(3\omega t)$, где предполагается, что $A_1 \ll A$. Находим связь между частотой и амплитудой моды в виде

$$\omega^2 \approx \frac{4k_n + 6(2\beta_n + k_n/h^2)A^2}{m}. \quad (2.24)$$

В отличие от ДНКМ 1, ДНКМ 6 демонстрирует жесткий тип нелинейности для любых положительных значений β_n .

Для параметров, используемых в нашей работе и $k_{nn} = 1$, из уравнения (2.24) получаем

$$\omega \approx \sqrt{4 + 126A^2}. \quad (2.25)$$

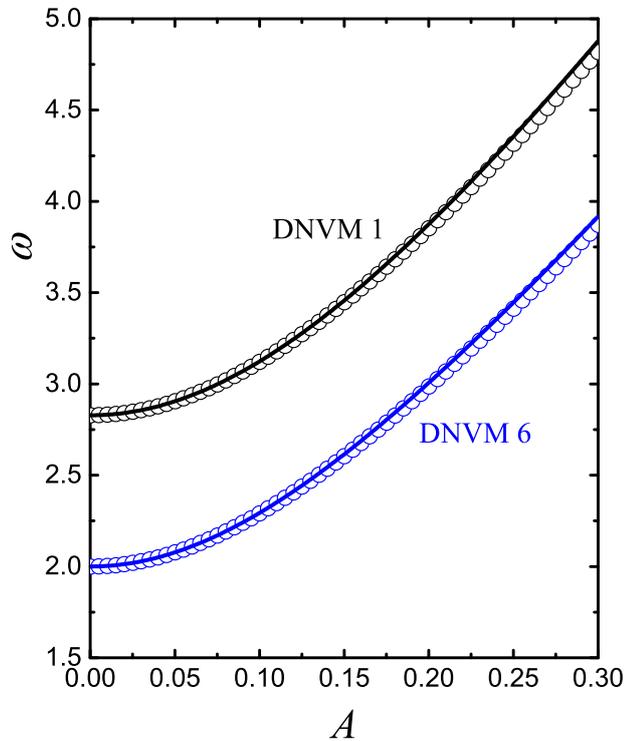


Рисунок 2.16 — Кружками показаны найденные численно частоты ДНКМ 1 (черный) и ДНКМ 6 (синий). Линии представляют собой аналитические оценки Eq. (2.20) и (2.25) соответственно. Результаты для $k_{nn} = 1$.

ДНКМ 16

Аналогично, для ДНКМ 16 (см. рисунок 2.15), принимая во внимание характер смещения частиц, получаем гамильтониан

$$\begin{aligned}
 H = & \frac{m\dot{a}^2}{2} + \frac{1}{2} \left[\varphi_n(L_1 - h) + \varphi_{nn}(L_2 - \sqrt{2}h) \right. \\
 & + \varphi_n(L_3 - h) + \varphi_{nn}(L_4 - \sqrt{2}h) + \\
 & + \varphi_n(L_5 - h) + \varphi_{nn}(L_6 - \sqrt{2}h) \\
 & \left. + \varphi_n(L_7 - h) + \varphi_{nn}(L_8 - \sqrt{2}h) \right], \tag{2.26}
 \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned}
 L_1 &= h + \frac{2a}{\sqrt{2}}, & L_2 &= \sqrt{2h^2 + 4a^2}, \\
 L_3 &= h - \frac{2a}{\sqrt{2}}, & L_4 &= \sqrt{2}h - 2a, \\
 L_5 &= h - \frac{2a}{\sqrt{2}}, & L_6 &= \sqrt{2}h - 2a \\
 L_7 &= h - \frac{2a}{\sqrt{2}}, & L_8 &= \sqrt{2h^2 + 4a^2}. \tag{2.27}
 \end{aligned}$$

Здесь h - равновесное расстояние между точками решетки, L_1 , L_3 , L_5 и L_7 - расстояния между ближайшими частицами, L_2 , L_4 , L_6 и L_8 - расстояния между вторыми соседями; межчастичные потенциалы $\varphi_n(r)$ и $\varphi_{nn}(r)$ определяются уравнением (2.5).

Раскладывая потенциальную энергию в уравнении (2.26) в ряд Тейлора и сохраняя члены не старше четвертой степени, получаем упрощенный гамильтониан

$$H = \frac{m\dot{a}^2}{2} + 4k_n a^2 + \left(6\beta_n + \frac{k_{nn}}{h^2} \right) a^4. \tag{2.28}$$

Особенностью данной моды является независимость члена при a^4 от ангармонизма связи между вторыми соседями β_{nn} .

Уравнение движения, соответствующее гамильтониану (2.28), имеет вид

$$m\ddot{a} = -8k_n a - 4\left(6\beta_n + \frac{k_{nn}}{h^2}\right)a^3. \quad (2.29)$$

Ищем решение уравнения (2.29) в виде $a(t) = A \sin(\omega t) + A_1 \sin(3\omega t)$, где предполагается, что $A_1 \ll A$. Связь между частотой и амплитудой находится в виде

$$m\omega^2 \approx 8k_n + 3\left(6\beta_n + \frac{k_{nn}}{h^2}\right)A^2. \quad (2.30)$$

Частота моды растет с увеличением амплитуды при любом положительном значении β_n .

Для параметров, используемых в нашей работе, и $k_{nn} = 1$, из уравнения (2.30) находим

$$\omega \approx \sqrt{8 + 183A_1^2}. \quad (2.31)$$

Подобные аналитические расчеты легко провести и для любой другой однокомпонентной ДНКМ.

Аналитические результаты (линии) сравниваются с численно найденными частотами (кружки) для ДНКМ 1 (черный цвет) и ДНКМ 6 (синий цвет) на рисунке 2.16. Здесь $k_{nn} = 1$. Для малых амплитуд согласие очень хорошее, ошибка увеличивается с увеличением A , но не превышает 1,3% при $A < 0,3$. Для ДНКМ 16 точность аналитической оценки (2.31) не хуже, чем для ДНКМ 1 и ДНКМ 6 (см. рисунок 2.16).

2.2.5 Частотные характеристики однокомпонентных ДНКМ

Возбуждая ДНКМ и интегрируя уравнения движения (2.8), определяем зависимость расстояния любой движущейся частицы от решеточного положения, $a(t)$, определяем период данной функции T и затем круговую частоту колебания частиц $\omega = 2\pi/T$.

Зависимости частоты ДНКМ от амплитуды показаны на рисунках 2.17, 2.18 и 2.19 для $k_{nn} = 3, 1$ и $0,3$, соответственно. Горизонтальная прямая показывает верхнюю границу фононного спектра, определенного уравнениями (2.11)

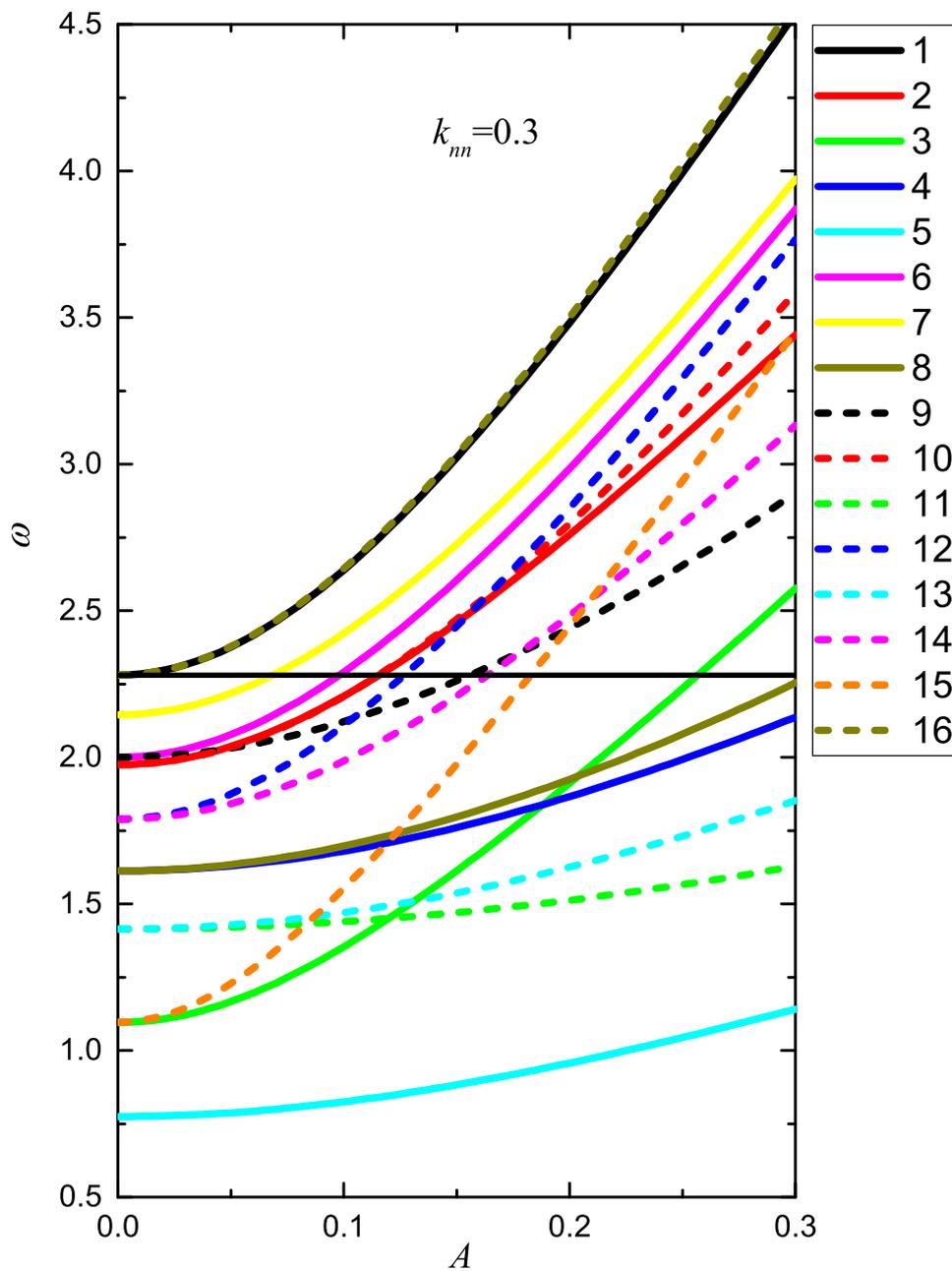


Рисунок 2.17 — Амплитудно-частотные характеристики однокомпонентных ДНКМ квадратной решетки для случая $k_{mn} = 0.3$.

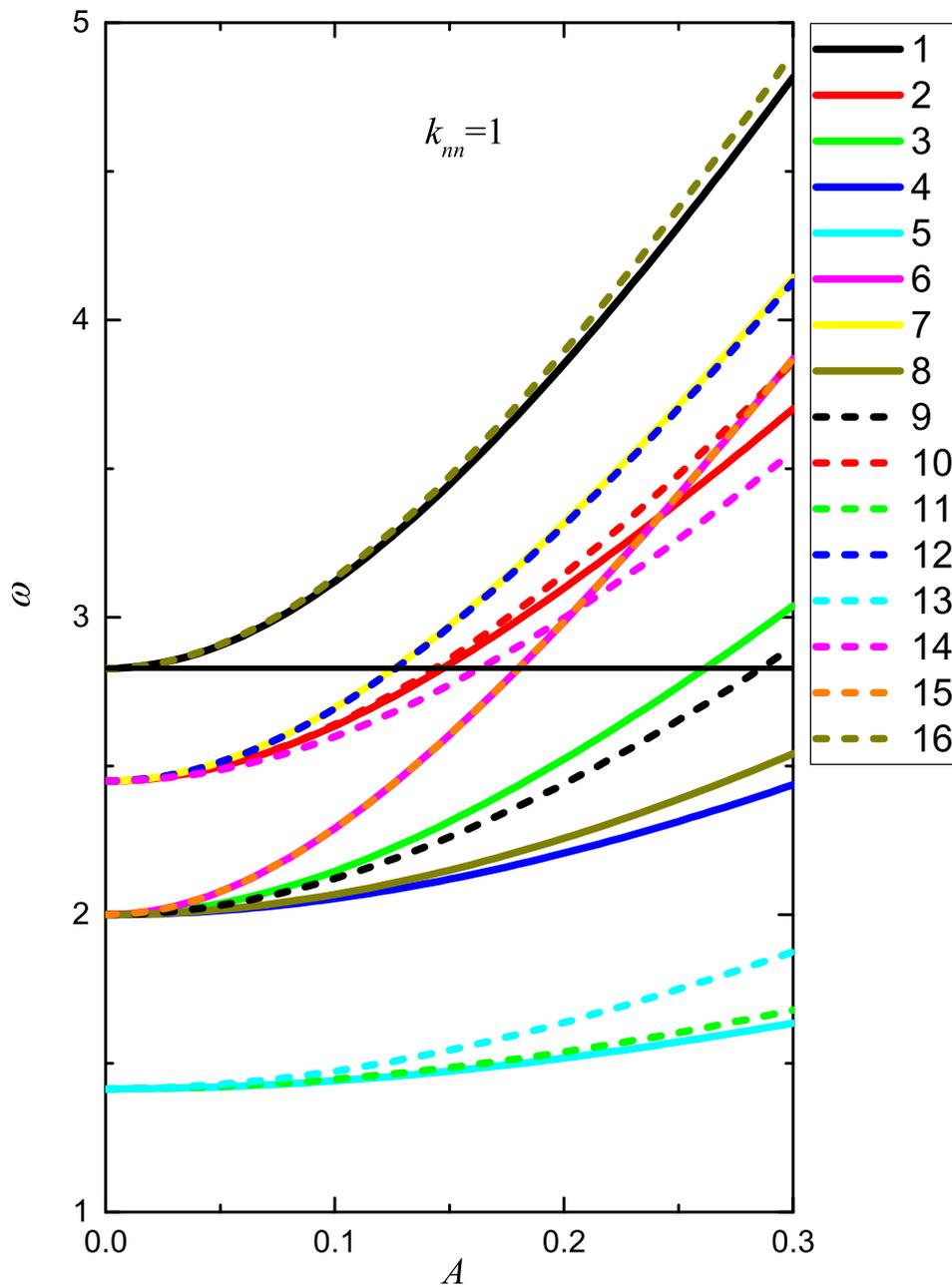


Рисунок 2.18 — Амплитудно-частотные характеристики однокомпонентных ДНКМ квадратной решетки для случая $k_{nn} = 1$.

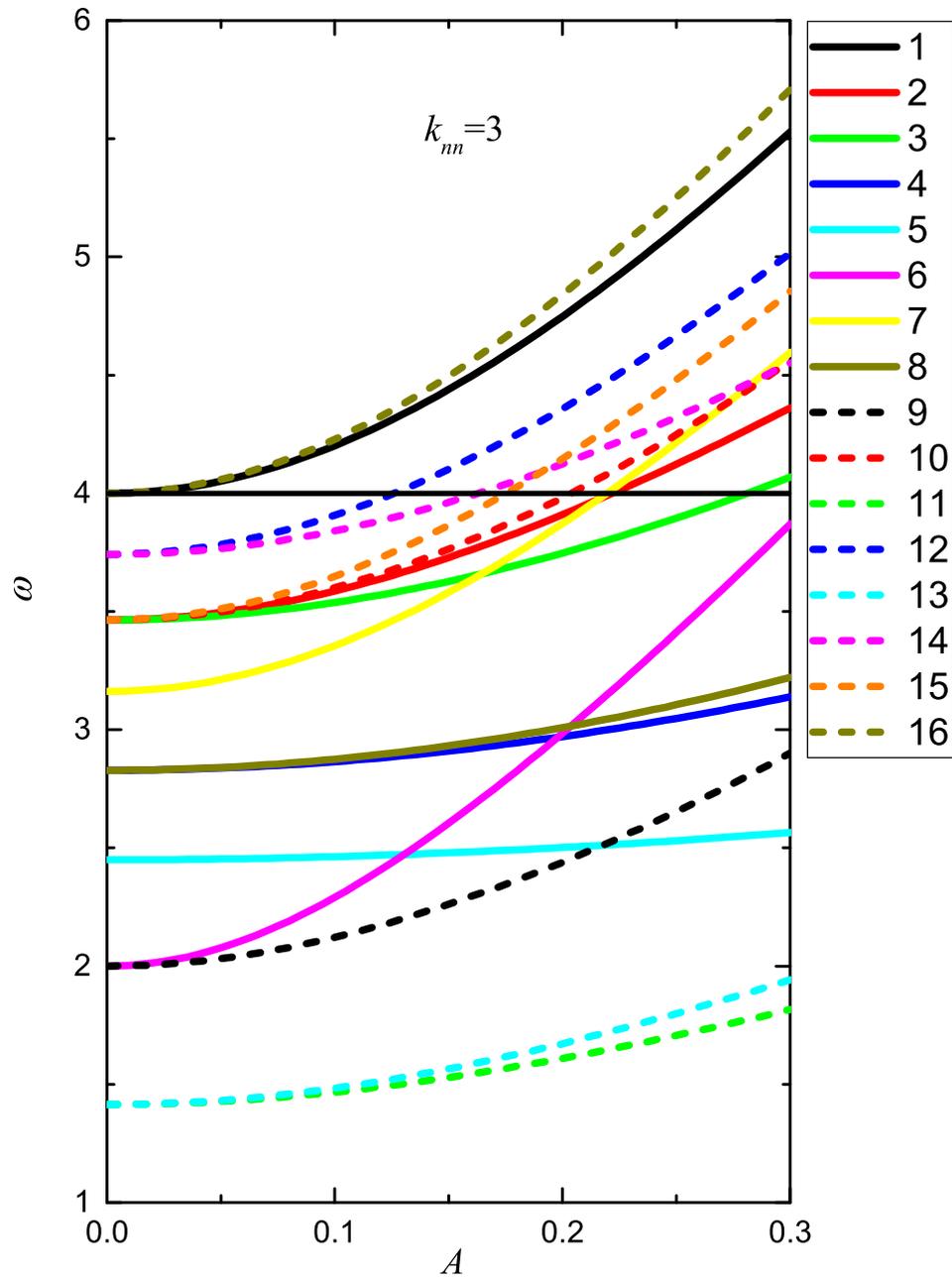


Рисунок 2.19 — Амплитудно-частотные характеристики однокомпонентных ДНКМ квадратной решетки для случая $k_{nn} = 3$.

и (2.12). Первым делом отметим, что частоты колебаний растут с увеличением параметра ангармоничности k_{nn} .

Заметим, что только ДНКМ 1 и 16 имеют частоты выше фонованого спектра во всем диапазоне амплитуд колебаний для рассмотренных параметров модели. Остальные ДНКМ при малых амплитудах имеют частоты внутри фонованого спектра. Для выбранных значений параметров, все ДНКМ показывают жесткий тип нелинейности, то есть рост частоты с амплитудой. Напомним, что согласно условию (2.19), при достаточно малых значениях параметров k_n и k_{nn} , ДНКМ 1 будет показывать мягкий тип нелинейности и, следовательно, её частота будет находиться в фонованом спектре. Самую низкую частоту могут иметь различные ДНКМ в зависимости от параметра k_{nn} . Так, при $k_{nn} = 0.3$ и 1 это ДНКМ 5, а при $k_{nn} = 3$ это ДНКМ 11.

АЧХ ДНКМ 6 не зависит от параметра k_{nn} в полном соответствии с аналитическими расчетами, проведенными в разделе 2.2.4, поскольку гамильтониан 2.21 не содержит потенциала ϕ_{nn} .

Можно заметить, что амплитудно-частотные характеристики (АЧХ) некоторых мод при малых амплитудах совпадают. С изменением параметра k_{nn} различные моды могут иметь одинаковые частоты в пределе $A \rightarrow 0$. Однако некоторые моды имеют в малоамплитудном пределе одинаковые частоты при любых значениях параметров модели. Очевидно, что при $A \rightarrow 0$ ДНКМ трансформируются в фонованые моды. Зададимся вопросом, какие волновые вектора имеют ДНКМ в малоамплитудном пределе. Располагая дисперсионными соотношениями (2.11) и (2.12), определим точки первой зоны Бриллюэна для всех ДНКМ в малоамплитудном пределе. Кроме того, определим для каждой моды какой их ветвей дисперсионного соотношения она принадлежит - продольной или поперечной.

На рисунке 2.20 показаны волновые вектора ДНКМ в пределе малых амплитуд, когда они переходят в фонованые моды. Красным (синим) показаны моды с продольными (поперечными) колебаниями. Номера ДНКМ указаны в правом верхнем углу каждой панели. Пять ДНКМ (3, 5, 11, 13 и 15) являются поперечными, остальные одиннадцать - продольными. На границе первой зоны Бриллюэна располагаются волновые вектора продольных мод 1, 6, 7, 9 и 16, а также поперечных мод 3 и 15. Остальные ДНКМ имеют волновые вектора внутри первой зоны Бриллюэна.

Некоторые ДНКМ сгруппированы парами. Например, на рисунке 2.20(a) показаны волновые вектора ДНКМ 1 и 16. ДНКМ 1 имеет единственный волновой вектор, скажем, $(q,s) = (\pi,0)$, в то время как ДНКМ 16 есть ни что иное, как суперпозиция двух фононов с волновыми векторами $(q,s) = (\pi,0)$ и $(q,s) = (0,\pi)$. Аналогично, на рисунке 2.20(f) показаны волновые вектора ДНКМ 6 и 9. ДНКМ 9 имеет единственный волновой вектор, например, $(q,s) = (-\pi,\pi)$, а ДНКМ 6 есть суперпозиция двух фононов с волновыми векторами $(q,s) = (-\pi,\pi)$ и $(q,s) = (\pi,\pi)$.

Стоит отметить, что ДНКМ 6 и 9 на рисунке 2.20(f) показаны красным цветом как продольные моды, но в равной степени они являются и поперечными модами и могли бы быть показаны синим цветом. Дело в том, что у этих мод совпадают частоты ω_1 и ω_2 в точках $(q,s) = (\pm\pi, \pm\pi)$ при любых значениях параметров модели.

2.2.6 Кинетическая и потенциальная энергии однокомпонентных ДНКМ

Энергия малоамплитудных колебаний поровну распределена между кинетической и потенциальной составляющими, однако повышение амплитуды колебаний в нелинейных системах приводит к отклонению от равенства этих энергий. Таким образом, отличие кинетической энергии от потенциальной служит мерой ангармоничности колебаний.

На рисунке 2.21, для шестнадцати ДНКМ, как функции амплитуды колебаний, показаны осредненные за период колебаний кинетическая (красные линии) и потенциальная (синие линии) энергии расчетной ячейки в расчете на одну частицу, согласно уравнению (3.17). Угловые скобки у осредненных величин опущены для краткости. Номер ДНКМ указан на каждой панели.

Для всех шестнадцати ДНКМ, как и следовало ожидать, разница между кинетической и потенциальной энергиями возрастает с увеличением амплитуды A . Для всех мод кинетическая энергия выше потенциальной, что отражает жесткий тип нелинейности мод. В самом деле, рост частоты колебаний связан с

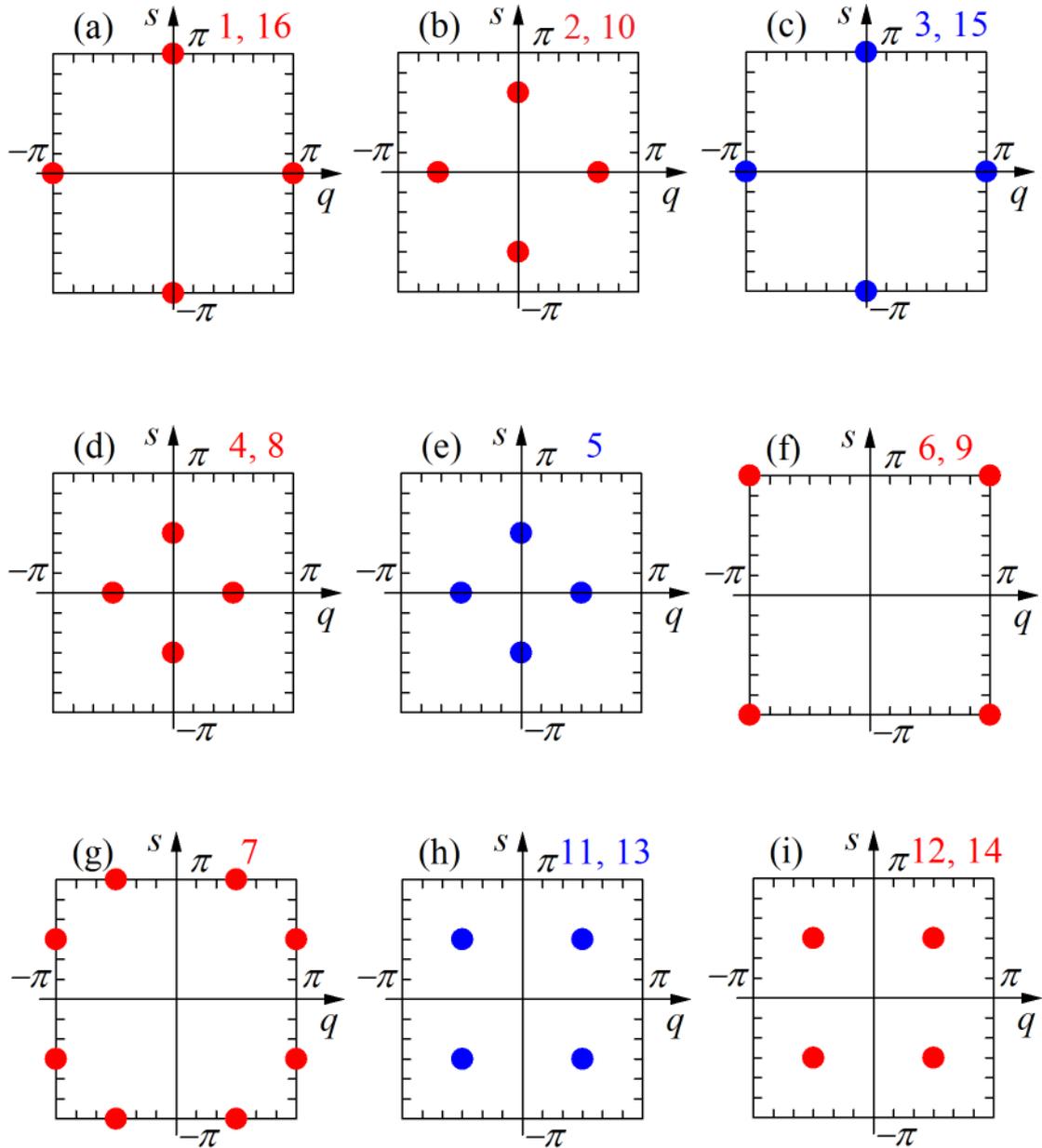


Рисунок 2.20 — Волновые вектора ДНКМ в пределе малых амплитуд.

Красным (синим) показаны моды с продольными (поперечными) колебаниями. Номера ДНКМ указаны в правом верхнем углу каждой панели.

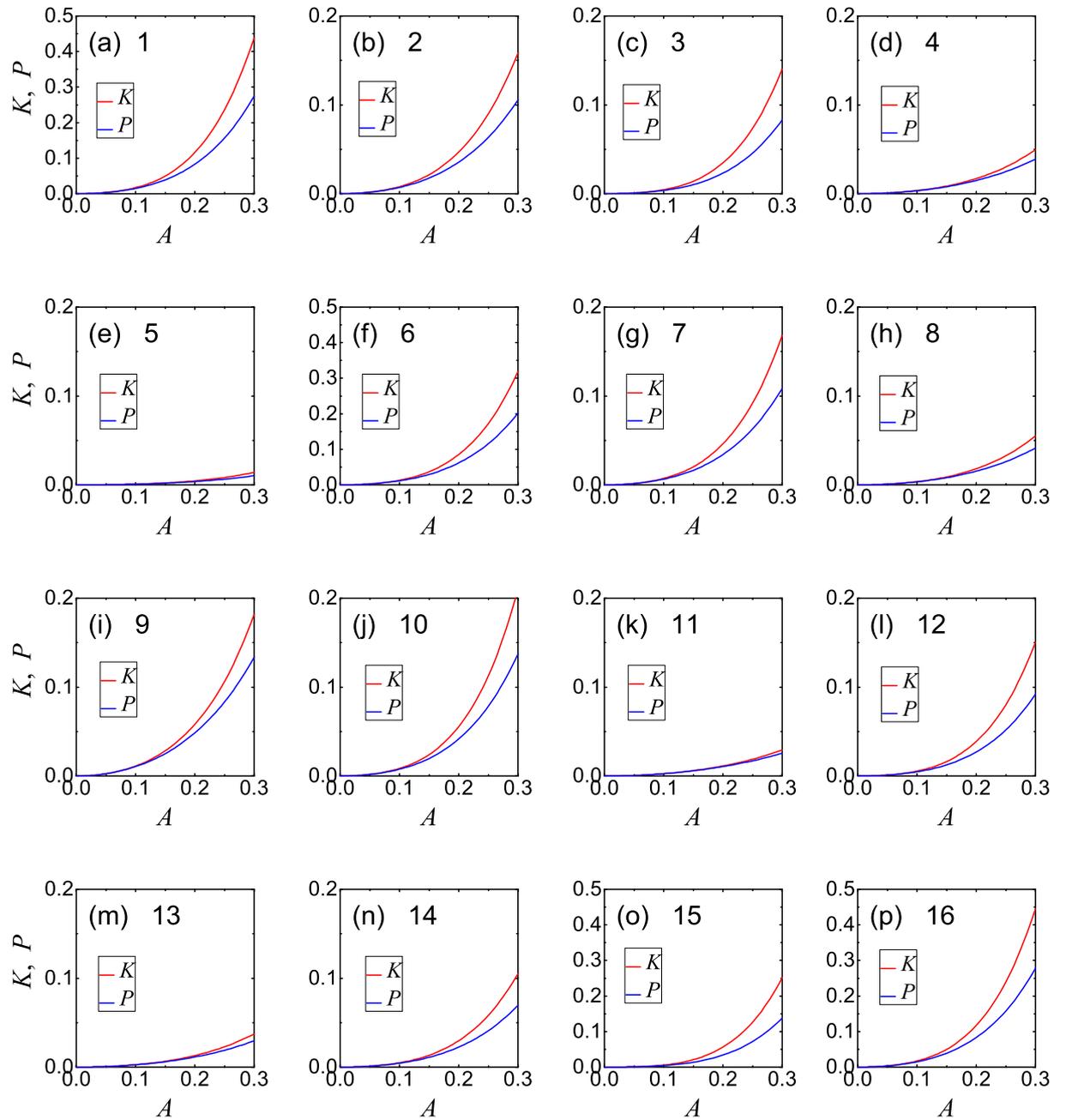


Рисунок 2.21 — Кинетическая (красные линии) и потенциальная (синие линии) энергии на частицу, осредненные за период колебания ДНКМ. Номер ДНКМ указан на каждой панели. Результат для $k_{nn} = 0.3$.

ростом средних скоростей частиц и, следовательно, средней кинетической энергии.

Скорость роста энергии с амплитудой выше для мод с более высокими частотами, что видно из сравнения рисунков 2.21 и 2.17. Наибольшую энергию имеют самые высокочастотные ДНКМ 1 и 16. Наименьшую энергию, как и наименьшую частоту, имеет ДНКМ 5. Поскольку на 2.21 представлена энергия на одну частицу, скорость её роста также зависит от доли частиц, совершающих колебания. Так, например, в ДНКМ 6 колеблются все частицы, а в ДНКМ 7 только половина, поэтому, несмотря на то, что частота ДНКМ 7 несколько выше частоты ДНКМ 6, последняя имеет более высокую энергию на частицу.

2.2.7 Механические напряжения, создаваемые ДНКМ

Напряжения, рассчитанные по соотношениям (3.9) и осредненные согласно (3.13), приведены на рисунке 2.22 для шестнадцати ДНКМ для случая $k_{nn} = 0.3$. Угловые скобки опущены для краткости. Напряжения σ_{xx} показаны красными сплошными линиями, σ_{yy} синими пунктирными, а σ_{xy} - зелеными сплошными линиями.

Сдвиговые напряжения (σ_{xy}) не равны нулю только для ДНКМ с 9 по 12. Это связано с тем, что в этих модах все частицы колеблются в одном направлении, вдоль связей, соединяющих вторых соседей. Интересно, что сдвиговые напряжения в этих модах лишь незначительно отличаются от нормальных (σ_{xx} и σ_{yy}).

Равенство нормальных компонент напряжений наблюдается только для ДНКМ с 13 по 16. Это наиболее симметричные колебательные моды.

ДНКМ 5, 11 и 13 создают очень незначительные напряжения в решетке, что объясняется их низкими частотами колебаний, см. рисунок 2.17.

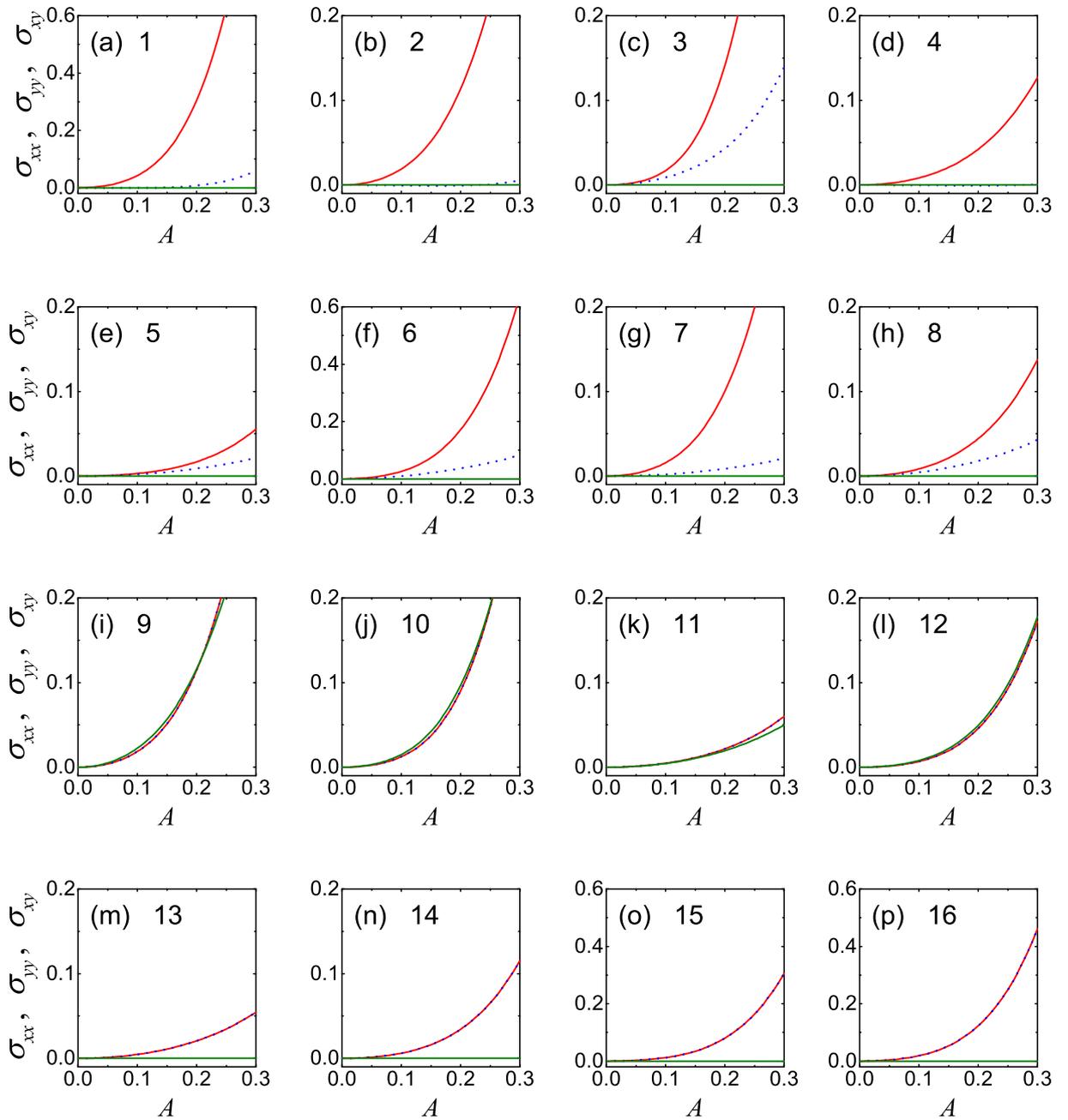


Рисунок 2.22 — Компоненты тензора напряжений, осредненные за период колебания для шестнадцати однокомпонентных ДНКМ. Красными, синими пунктирными и зелеными кривыми показаны компоненты σ_{xx} , σ_{yy} и σ_{xy} , соответственно. Угловые скобки, обозначающие осреднение по времени, опущены для краткости. Результат для $k_{nn} = 0.3$.

2.2.8 Влияние ДНКМ на константы жесткости квадратной решетки

Константы жесткости, $C_{ij} = C_{ji}$, равновесной квадратной решетки, рассчитанные по формулам (3.11), равны значениям, указанным в таблице 2 для трех значений параметра жесткости связи между вторыми соседями k_{nn} .

Таблица 2 — Константы жесткости равновесной квадратной решетки, $C_{ij} = C_{ji}$, рассчитанные по формулам (3.11), для трех значений параметра жесткости связи между вторыми соседями k_{nn} .

k_{nn}	C_{11}	C_{12}	C_{13}	C_{22}	C_{23}	C_{33}
0,3	1.3	0.3	0.0	1.3	0.0	0.3
1,0	2.0	1.0	0.0	2.0	0.0	1.0
3,0	4.0	3.0	0.0	4.0	0.0	3.0

Как видно из таблицы 2, $C_{11} = C_{22}$ в силу симметрии квадратной решетки. Жесткость на сдвиг решетки меньше жесткость на растяжение-сжатие: $C_{33} < C_{11} = C_{22}$. С увеличением жесткости связей, соединяющих вторых соседей, разница между жесткостями на сдвиг и на растяжение-сжатие уменьшается.

Рассмотрим как возбуждение ДНКМ влияет на константы жесткости решетки, осредненные за период колебаний согласно уравнению (3.13).

На рисунке 2.23 построены зависимости констант жесткости, осредненных за период колебания, от амплитуды ДНКМ. Красными, синими пунктирными и зелеными кривыми показаны C_{11} , C_{22} и C_{33} , соответственно. Угловые скобки, обозначающие осреднение по времени, опущены для краткости. В данном примере $k_{nn} = 0.3$.

Как следует из рисунка 2.23, ДНКМ увеличивают жесткость решетки, причем, их влияние на жесткость растет с амплитудой ДНКМ. Исключение составляет лишь величина жесткости C_{22} для ДНКМ 6, которая незначительно снижается с увеличением A , что, однако, происходит на фоне достаточно быстрого возрастания жесткости C_{11} . Уменьшение C_{22} с ростом амплитуды наблюдается для ДНКМ 6 и при $k_{nn} = 1.0$ и 3.0 .

Отметим, что сдвиговая жесткость C_{33} во всем исследованном диапазоне амплитуд для всех ДНКМ остается ниже жесткостей C_{11} и C_{22} .

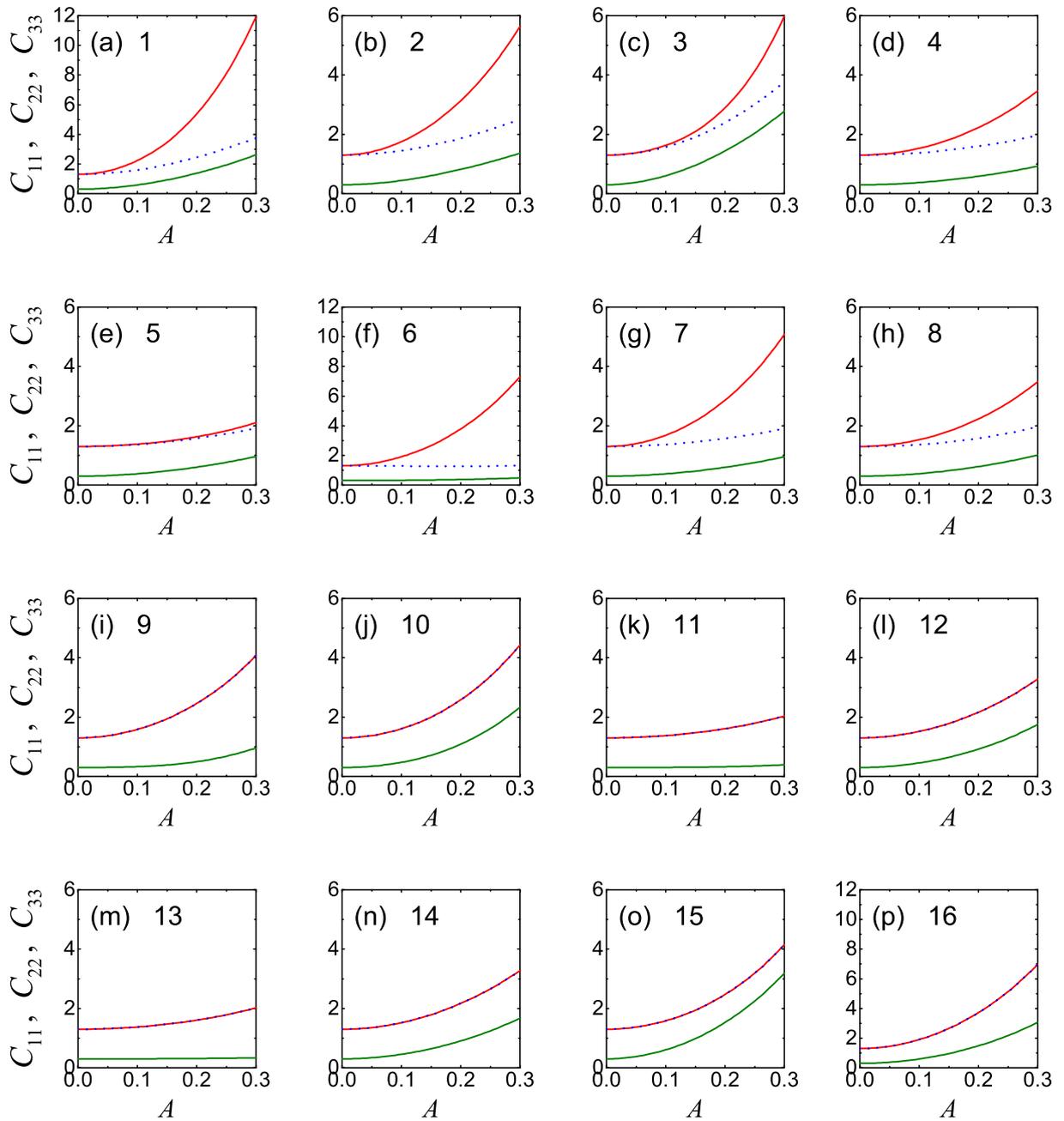


Рисунок 2.23 — Константы жесткости, осредненные за период колебания для шестнадцати однокомпонентных ДНКМ. Красными, синими пунктирными и зелеными кривыми показаны компоненты C_{11} , C_{22} и C_{33} , соответственно.

Угловые скобки, обозначающие осреднение по времени, опущены для краткости. Результат для $k_{nn} = 0.3$.

Для ДНКМ с 1 по 8 при $A > 0$ выполняется $C_{11} > C_{22}$, что связано с тем, что частицы в этих модах колеблются вдоль оси x . Однако можно инициировать их колебание вдоль оси y и тогда константы C_{11} и C_{22} поменяются местами.

Для ДНКМ с 9 по 16 выполняется $C_{11} = C_{22}$ при любом A . Это объясняется тем, что частицы в этих модах колеблются эквивалентно по отношению к осям x и y .

ДНКМ 5, 11 и 13 очень незначительно влияют на жесткость решетки, что связано с их низкими частотами колебаний, см. рисунок 2.17. Наибольшее влияние на жесткость решетки оказывают высокочастотные ДНКМ 1 и 16.

2.3 Устойчивость однокомпонентных ДНКМ решетки графена

В данном разделе будут представлены результаты анализа устойчивости однокомпонентных ДНКМ графена, полученных Чечиным, Рябовым и Щербининым в работе [204]. Затем будет проанализирована трехкомпонентная ДНКМ графена, найденная Щербининым.

Результаты данного раздела были опубликованы в работе [65].

2.3.1 Детали моделирования

Молекулярно-динамические расчеты проводились с использованием оригинального программного обеспечения, написанного на языке программирования C++. Выбрана декартова система координат с осью x (y) вдоль направления зигзаг (кресло). Примитивная трансляционная ячейка графена содержит два атома углерода, каждый из которых имеет три степени свободы - компоненты вектора смещения. Взаимодействие атомов углерода описывается потенциалами, разработанными Савиным [51], с учетом энергии, связанной с деформацией валентных связей, валентных углов и двугранных углов. Этот потенциал был успешно протестирован для решения ряда проблем для sp^2 структур углерода [24; 51; 128; 133; 136; 205; 206].

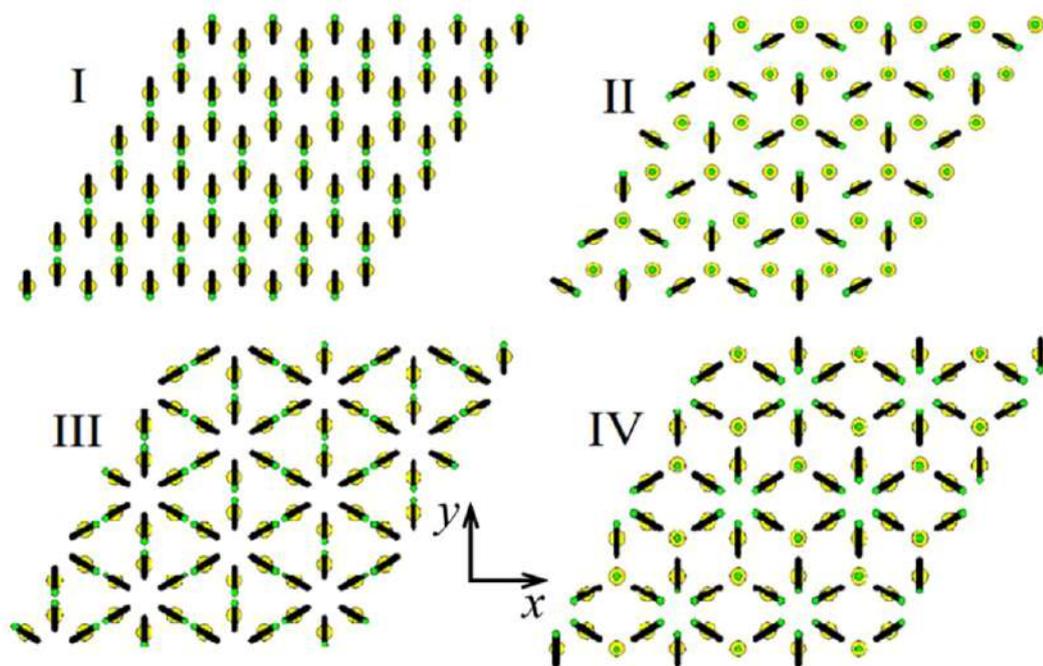


Рисунок 2.24 — Паттерны атомных колебаний в четырех однокомпонентных ДНКМ, имеющих смещения в плоскости. ДНКМ были получены Чечиным, Рябовым и Щербининым в работе [204]. Большие желтые кружки показывают точки идеальной гексагональной решетки, маленькие зеленые кружки показывают атомы углерода на расстоянии A от точек решетки, черные линии показывают линейные траектории колеблющихся частиц. Представленные картины колебаний продиктованы симметрией решетки; они являются точными решениями уравнений движения атомов независимо от межатомных потенциалов и для любого A . При $A > A^*$, где A^* - пороговое значение начальных смещений, эти колебательные моды неустойчивы.

Моделирование с различными вычислительными размерами ячеек показало, что развитие неустойчивости чувствительно к размеру ячейки для малых ячеек и становится практически нечувствительным для ячейки, содержащей 12×12 или более примитивных трансляционных ячеек. Это происходит потому, что за развитие неустойчивости ДНКМ ответственны коротковолновые моды. Здесь представлены результаты, полученные для расчетной ячейки, содержащей 12×12 примитивных ячеек (288 атомов углерода). Периодические граничные условия накладываются по направлениям x и y . Используется ансамбль NVE, то есть постоянное количество частиц, постоянный объем и постоянная энергия системы. Ньютоновские уравнения движения атомов интегрируются методом Штормера шестого порядка с шагом интегрирования 0,1 фс.

В этой работе рассматривается устойчивость четырех ДНКМ, показанных на рисунке 2.24. Моды возбуждаются заданием начальных смещений в плоскости согласно схемам, показанным на рисунке 2.24. Начальные скорости всех атомов равны нулю. Начальные векторы смещения имеют одинаковую длину A для всех смещенных атомов. В ДНКМ I и III в момент времени $t = 0$ смещены все атомы, в ДНКМ II смещена только половина всех атомов, а в ДНКМ IV смещены три из четырех атомов.

Чтобы вызвать развитие неустойчивости, ко всем степеням свободы добавляются небольшие случайные начальные смещения. Точнее, каждому атому углерода добавляется вектор смещения $(\xi_1, \xi_2, \xi_3) \times 10^{-13} \text{ \AA}$, где $\xi_{1,2,3}$ - случайные числа, однородно распределенные в диапазоне $[-1,1]$. Первоначально все движущиеся атомы колеблются по прямым линиям с очень небольшими возмущениями. Развитие неустойчивости контролируется расчетом максимального по всем атомам расстояния от этих линий в плоскости xy , $|\Delta xy|$, и в направлении z , $|\Delta z|$.

2.3.2 Анализ неустойчивости ДНКМ

Развитие модуляционной неустойчивости ДНКМ от I до IV показано на рисунках 2.25(a-d), соответственно, путем построения максимального по всем атомам расстояния от начальных атомных траекторий в плоскости xy , $|\Delta xy|$

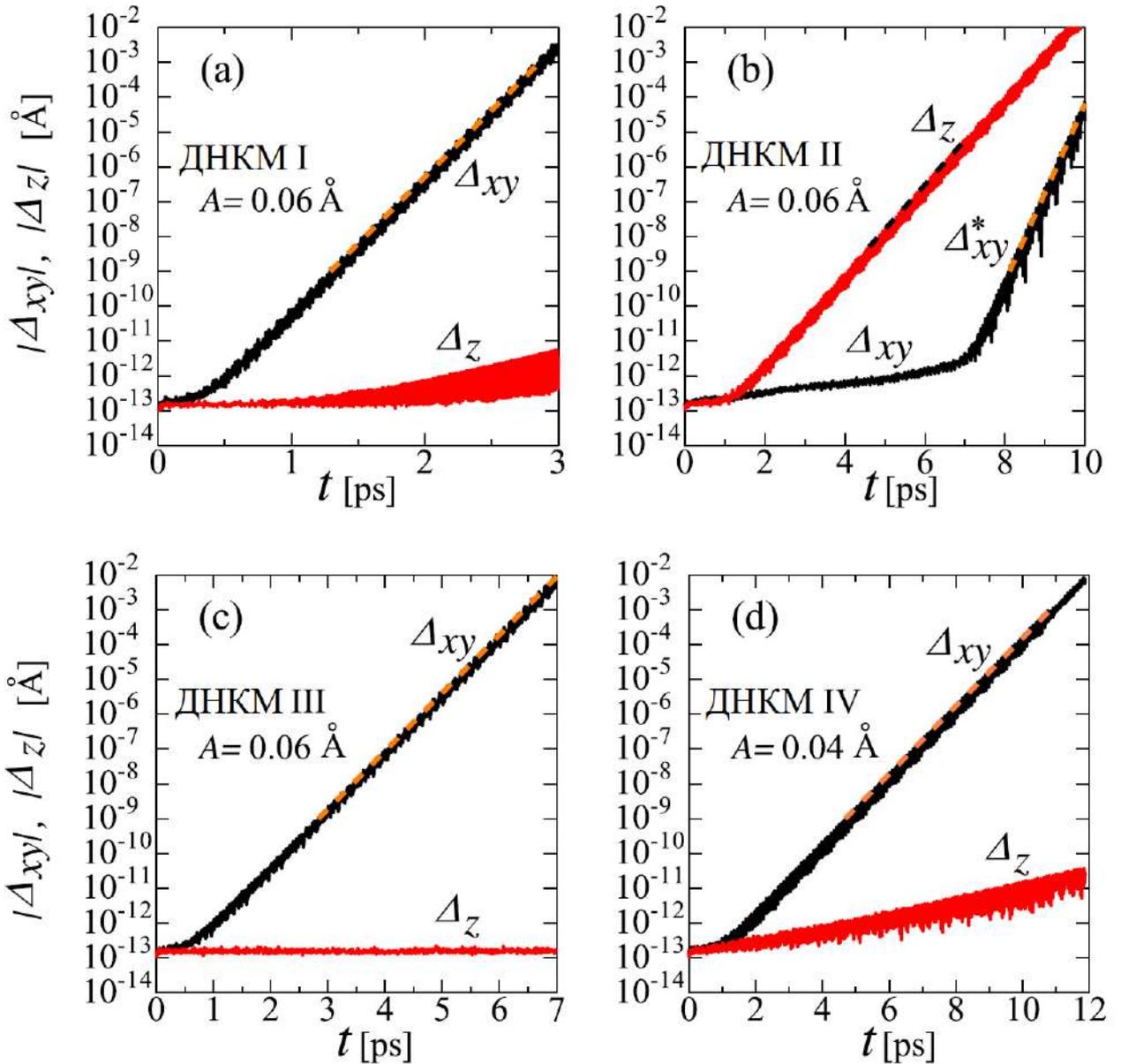


Рисунок 2.25 — Развитие модуляционной неустойчивости ДНКМ (a) I, (b) II, (c) III и (d) IV, возбужденных с величиной начального смещения $A = 0,06 \text{ \AA}$ на (a-c) и $A = 0,04 \text{ \AA}$ на (d). Показаны изменения во времени максимального по всем атомам расстояния от начальных траекторий колеблющихся атомов в плоскости xy , $|\Delta_{xy}|$ (черная линия), и в направлении z , $|\Delta_z|$ (красная линия). Обратим внимание, что для ординаты используется логарифмическая шкала.

Пунктирными линиями показаны линейные приближения, из которых извлекаются показатели критических экспонент.

(черные линии), и в направлении z , $|\Delta z|$ (красные линии). Начальные смещения атомов составляют $A = 0,06 \text{ \AA}$ для ДНКМ I, II и III и $A = 0,04 \text{ \AA}$ для ДНКМ IV. Видно, что для мод I, III и IV отклонения из плоскости остаются небольшими, а отклонения в плоскости от начальных траекторий экспоненциально растут во времени (обратим внимание на использование логарифмической шкалы для ординат) до значений порядка $0,01 \text{ \AA}$. Для моды II, см. рисунок 2.25(b), ситуация прямо противоположная, здесь отклонения в плоскости остаются небольшими, но отклонения из плоскости экспоненциально растут со временем. Однако когда $|\Delta z|$ достигает значения порядка 10^{-5} \AA , отклонения в плоскости начинают расти экспоненциально и даже быстрее, чем $|\Delta z|$.

Экспоненциальный во времени рост отклонений перемещений от начальных траекторий можно описать выражениями

$$|\Delta xy| = K_{xy} \exp(\alpha_{xy} t), \quad |\Delta z| = K_z \exp(\alpha_z t), \quad (2.32)$$

где α_{xy} и α_z - критические показатели, а K_{xy} и K_z - префакторы для отклонений в плоскости и из плоскости соответственно. Префакторы в основном определяются величиной начальных возмущений и здесь не анализируются. Пунктирные линии на рисунке 2.25 показывают линейные аппроксимации максимальных отклонений, из которых находятся критические показатели α_{xy} и α_z для отклонений в плоскости и из плоскости соответственно.

На рисунках 3(a-d), показаны критические экспоненты для отклонений атомов от начальных траекторий в плоскости и из плоскости для ДНКМ от I до IV соответственно. Черными точками показаны результаты для отклонений от плоскости (α_{xy}), а красными треугольниками - для отклонений от плоскости (α_z). На рис. 3b для ДНКМ II критический показатель для второго режима с быстрым ростом отклонений от плоскости (см. Рис. 2b) показан голубыми открытыми точками (ху *).

Из результатов, представленных на рисунке 2.26, видно, что ДНКМ I, III и IV имеют почти нулевое значение α_z , а неустойчивость развивается из-за экспоненциального роста отклонений в плоскости с положительными значениями α_{xy} . Для ДНКМ II неустойчивость развивается в две стадии: на первой стадии α_z положительно при почти нулевых α_{xy} , а на второй стадии, которая начинается когда $|\Delta z|$ достигает значения порядка 10^{-5} \AA , отклонения в плоскости

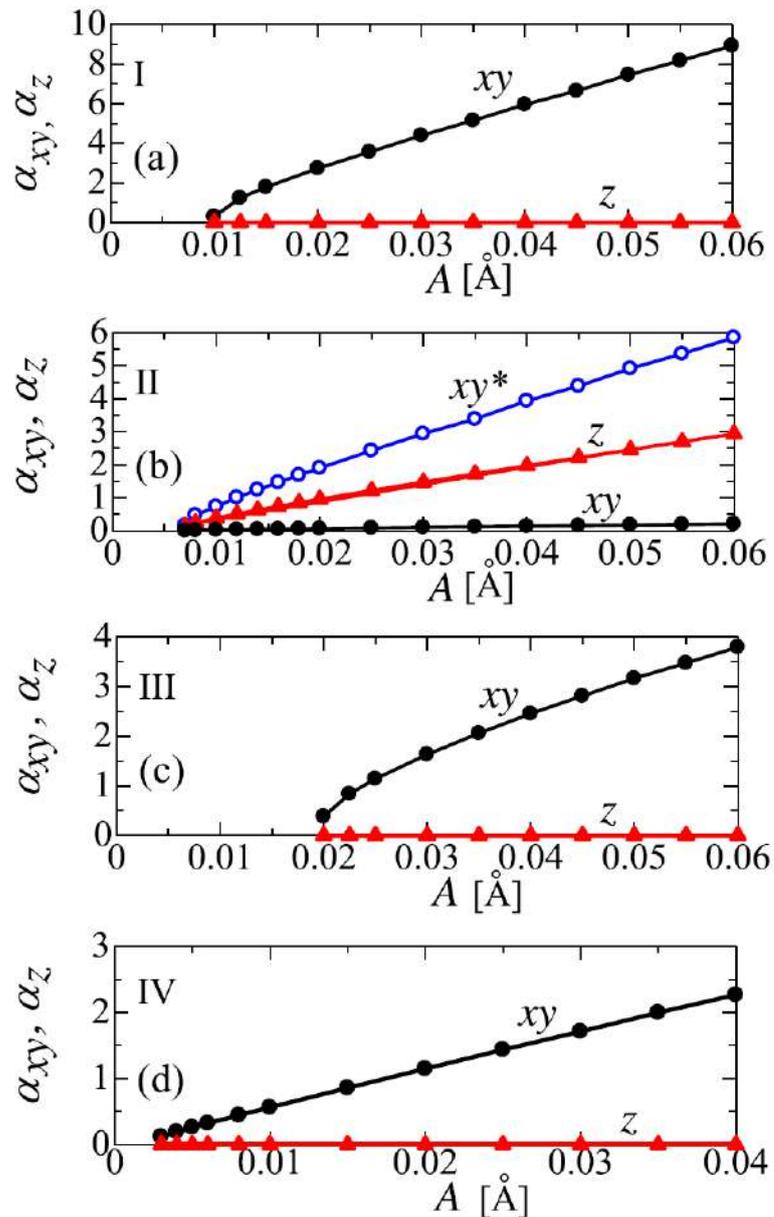


Рисунок 2.26 — Панели (a-d) показывают результаты для ДНКМ от I до IV, соответственно. Показаны критические экспоненты для отклонения от начальных траекторий атомов в плоскости (черные точки) из плоскости (красные треугольники) в зависимости от начального смещения A . На (b) показатель критической экспоненты для второго (быстрого) режима отклонения в плоскости показан голубыми светлыми точками.

начинают расти с критическим показателем α_{xy}^* . Интересно, что α_{xy}^* почти в два раза больше α_z .

Из рисунка 2.26 также видно, что положительные показатели критических экспонент уменьшаются с уменьшением начального смещения A почти линейно для относительно большого A и быстрее при уменьшении A , и они обращаются в ноль при определенном значении A . При $A < A^*$ ДНКМ устойчивы. Самой устойчивой оказывается ДНКМ III с $A^* = 0,019 \text{ \AA}$, следующая по устойчивости - ДНКМ I с $A^* = 0,009 \text{ \AA}$, следующая - ДНКМ II с $A^* = 0,006 \text{ \AA}$, и наименее устойчива ДНКМ IV с $A^* = 0,002 \text{ \AA}$.

2.3.3 Обсуждение результатов

Нами была исследована устойчивость всех четырех однокомпонентных ДНКМ со смещениями в плоскости (см. рисунок 2.24) в гексагональной решетке графена с помощью метода молекулярной динамики. В смещения атомов вносились небольшие начальные возмущения в плоскости и вне плоскости (порядка 10^{-13} \AA). Показатели критических экспонент α_{xy} и α_z , характеризующие скорость отклонения атомов от начальных траекторий в плоскости и из плоскости колебаний, были рассчитаны для различных значений начальных смещений атомов A . Положительные показатели критических экспонент уменьшаются с уменьшением начального смещения A почти линейно при относительно большом A и быстрее при уменьшении A . Они обращаются в ноль при некотором значении A^* (см. рисунок 2.26). ДНКМ устойчивы при $A < A^*$. Значения A^* составляют 0,009, 0,006, 0,019 и 0,002 \AA для ДНКМ от I до IV соответственно. Таким образом, наиболее устойчивой является ДНКМ III, а наименее устойчивой - ДНКМ IV.

Наиболее интригующий результат заключается в том, что неустойчивость ДНКМ II развивается из-за увеличения отклонений от начальных траекторий атомов из плоскости листа графена, в то время как для трех других мод растут отклонения в плоскости, а отклонения из плоскости остаются небольшими (см. рисунок 2.25). Интересно сравнить различные свойства четырех исследо-

ванных ДНКМ с целью выяснить причину такого качественного различия в динамике ДНКМ II.

Во-первых, обратим внимание, что возбуждение ДНКМ I разрушает упругую изотропию графена, в то время как другие ДНКМ этого не делают. В этом отношении ДНКМ II похожа на ДНКМ III и IV.

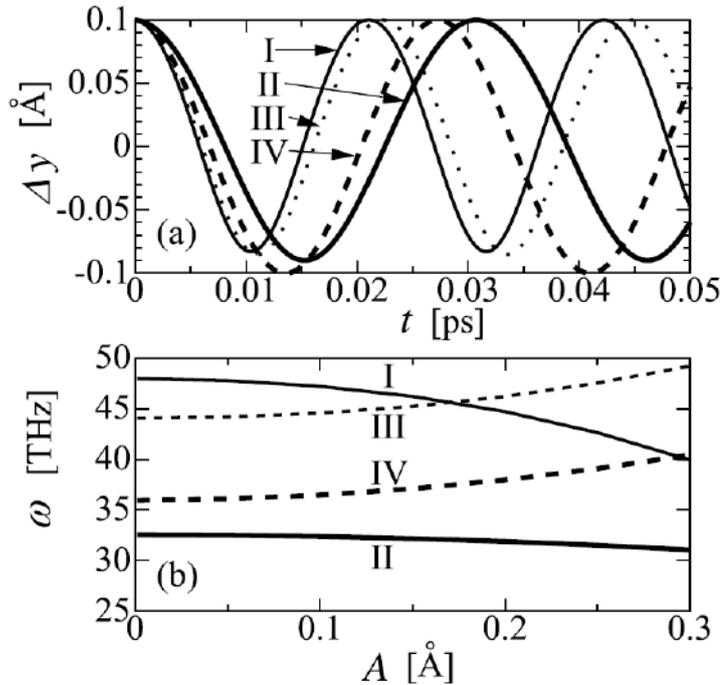


Рисунок 2.27 — (а) Атомные колебания для ДНКМ с I по IV показаны путем построения графика смещения Δy для атома, колеблющегося вдоль оси y , как функции времени. Начальное смещение атомов во всех случаях $A = 0,1 \text{ \AA}$. (б) Частоты колебаний ДНКМ в зависимости от начального смещения A .

Атомные колебания для ДНКМ с I по IV показаны на рисунке 2.27(a) путем построения графика смещения Δy для атома, колеблющегося вдоль оси y , как функции времени. Начальное смещение атомов во всех случаях $A = 0,1 \text{ \AA}$. Для ДНКМ I и II используются тонкие и толстые сплошные линии соответственно. Для ДНКМ III и IV используются тонкие и толстые пунктирные линии соответственно. Из этого графика видно, что только ДНКМ IV демонстрирует симметричные колебания с равными максимальным и минимальным значениями y , в то время как для других трех мод максимальное положительное значение y больше максимального отрицательного y . Опять же, ДНКМ II не уникальна в отношении симметрии колебаний.

Потенциальная энергия на атом для ДНКМ в то время, когда атомы находятся на максимальном расстоянии от узлов решетки, была рассчитана и раз-

Таблица 3 — Потенциальная энергия, приходящаяся на один атом, разделенная на энергию валентных связей и энергию валентных углов для четырех исследованных ДНКМ, возбужденных с начальными смещениями атомов $A = 0,03 \text{ \AA}$. Энергия рассчитывалась в момент максимального отклонения атомов от положений равновесия.

ДНКМ	Энергия связей, эВ	Энергия углов, эВ
I	$4,097 \times 10^{-2}$	$8,094 \times 10^{-3}$
II	$1,041 \times 10^{-2}$	$1,003 \times 10^{-3}$
III	$4,080 \times 10^{-2}$	0.0
IV	$2,148 \times 10^{-2}$	0.0

делена на две части: энергия, запасенная валентными связями, и валентными углами. Результат представлен в таблице 3 для начального атомного смещения $A = 0,03 \text{ \AA}$, используемого для всех четырех мод. Можно видеть, что ДНКМ I и II включают обе энергии, но ДНКМ III и IV не изменяют валентные углы на любой фазе колебаний, так что валентные углы остаются равными $2\pi/3$ и не вносят вклад в потенциальную энергию системы. В этом отношении ДНКМ II похожа на ДНКМ I.

Частоты колебаний ДНКМ в зависимости от начального смещения A показаны на рисунке 2.27(b). Здесь также тонкие и толстые сплошные линии используются соответственно для мод I и II, а тонкие и толстые пунктирные линии соответственно для мод III и IV. Все ДНКМ имеют частоты в фоновой полосе графена (максимальная частота фононов 48 ТГц). Моды I и II демонстрируют нелинейность мягкого типа с уменьшением частоты колебаний с амплитудой, в то время как моды III и IV демонстрируют нелинейность жесткого типа с противоположной тенденцией. Моды I и III имеют частоты выше, чем моды II и IV, потому что все атомы мод I и III колеблются, в то время как в модах II и IV некоторые атомы покоятся. Самую низкую частоту имеет ДНКМ II, в которой наибольшая часть атомов (половина) находится в состоянии покоя.

Устойчивость ДНКМ II относительно отклонений атомов от начальных траекторий в плоскости можно объяснить тем, что каждый движущийся атом колеблется между двумя покоящимися атомами (см. рисунок 2.24). Эти неподвижные атомы создают стабилизирующий эффект для колебаний в плоскости, но не для колебаний из плоскости.

Полученные результаты способствуют более глубокому пониманию нелинейной динамики решетки графена, поскольку они позволили разобраться в механизмах развития неустойчивости четырех точных нелинейных решений в виде делокализованных нелинейных колебательных мод. Исследование устойчивости двухкомпонентных мод в графене [136] может быть естественным продолжением этого исследования.

2.4 Трехкомпонентная ДНКМ решетки графена

Щербининым была найдена трехкомпонентная ДНКМ гексагональной решетки; им же было показано, что существует всего одна трехкомпонентная ДНКМ в гексагональной решетке. В данном разделе изучаются некоторые свойства этой ДНКМ и исследуется её модуляционная неустойчивость.

Результаты данного раздела были опубликованы в работе [66].

2.4.1 Детали компьютерного эксперимента

Графен — это двумерный кристалл атомов углерода, собранных в гексагональную решетку. Выберем декартову систему координат с осями x и y , направленными вдоль направлений зигзаг и кресло, соответственно, см. рис. 1. Рассматриваются только движения атомов в плоскости листа графена. Межатомные взаимодействия описываются потенциалом Савина [51], при использовании которого равновесное межатомное расстояние оказывается равным $\rho = 1.418 \text{ \AA}$.

Для запуска трехкомпонентной ДНКМ достаточно задать начальные смещения атомам, как показано на рисунке 2.28(а), при этом начальные скорости всех атомов равны нулю. Все вектора смещений имеют одинаковую длину A . Прimitивная трансляционная ячейка трехкомпонентной ДНКМ включает 12 атомов углерода (показана прямоугольником). Отметим, что координаты x и y на рисунке 2.28 нормированы на расстояние $d = \sqrt{3}\rho$.

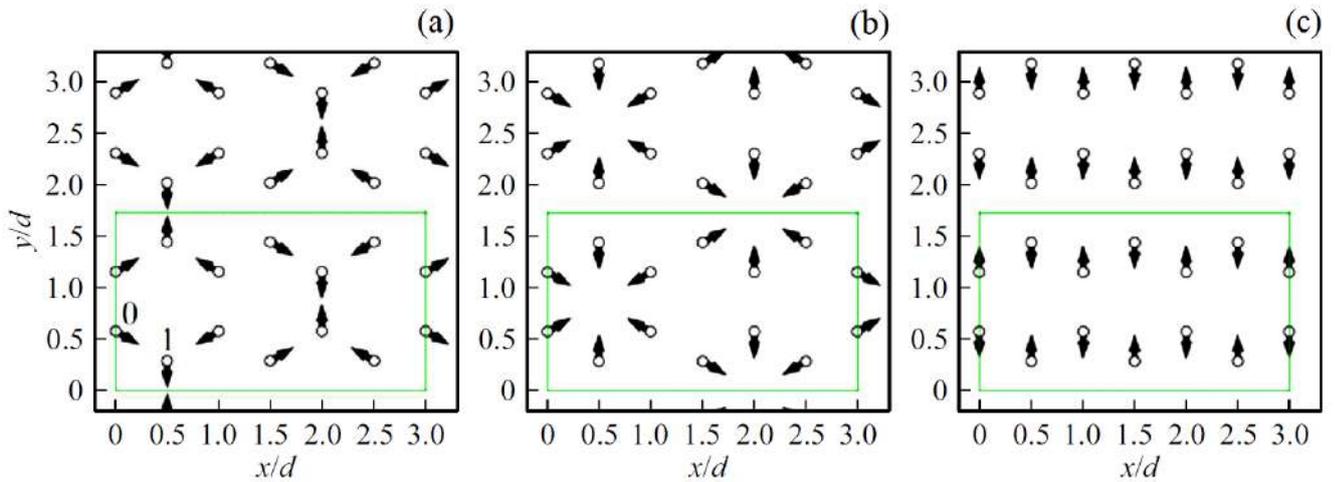


Рисунок 2.28 — Паттерны начальных смещений атомов (а) корневой моды и (b,c) однокомпонентных ДНКМ решетки графена, найденные Щербининым. Все вектора смещений на (а), (b) и (с) имеют длину A , B и C соответственно.

Примитивная трансляционная ячейка (т.е. ячейка минимальной площади) трехкомпонентной ДНКМ содержит 12 атомов (показана прямоугольником).

Координаты x и y нормированы на расстояние $d = \sqrt{3}\rho$, где $\rho = 1.418 \text{ \AA}$ - минимальное равновесное расстояние между атомами.

В расчетах использовалась ячейка, содержащая 24 атома углерода, то есть удвоенная вдоль оси y примитивная трансляционная ячейка. При изучении модуляционной неустойчивости ДНКМ размер расчетной ячейки был увеличен до 8×12 трансляционных ячеек, то есть количество атомов возросло до 1152. Вдоль обоих координатных направлений накладывались периодические граничные условия. Использовался NVE ансамбль, то есть постоянное число частиц, постоянный объем и постоянная энергия системы. Уравнения движения атомов интегрировались методом Штормера шестого порядка точности с шагом интегрирования 0.1 фс.

Отметим, что на рисунках 2.28(b,c) показаны начальные смещения атомов для запуска однокомпонентных ДНКМ, где все вектора перемещений имеют длину B и C , соответственно. Данные симметрично обусловленные моды являются точными решениями нелинейных уравнений движения атомов для любой амплитуды и вне зависимости от типа используемых межатомных потенциалов. Запуск данных мод, при условии, что они не теряют свою устойчивость, не приводит к возбуждению других колебательных мод решетки. Оказывается, что запуск корневой колебательной моды, показанной на рисунке 2.28(a), вовлекает в движение обе однокомпонентные моды, представленные на рисун-

ках 2.28(b,c), и не возбуждает никаких других мод, в случае устойчивого движения данной трехкомпонентной ДНКМ. Динамика трехкомпонентной ДНКМ может быть описана тремя амплитудами составляющих ее корневой моды (A) и однокомпонентных мод (B и C), следующим образом:

$$A = \frac{x_0}{\sqrt{3}} - \frac{y_0}{3} - \frac{y_1}{3}, \quad B = \frac{x_0}{\sqrt{3}} + \frac{y_0}{3} + \frac{y_1}{3}, \quad C = \frac{y_1 - 2y_0}{3}, \quad (2.33)$$

где (x_i, y_i) , $i = 0, 1$ - смещения атомов 0 и 1, отмеченных на рисунке 2.28(a).

2.4.2 Результаты моделирования

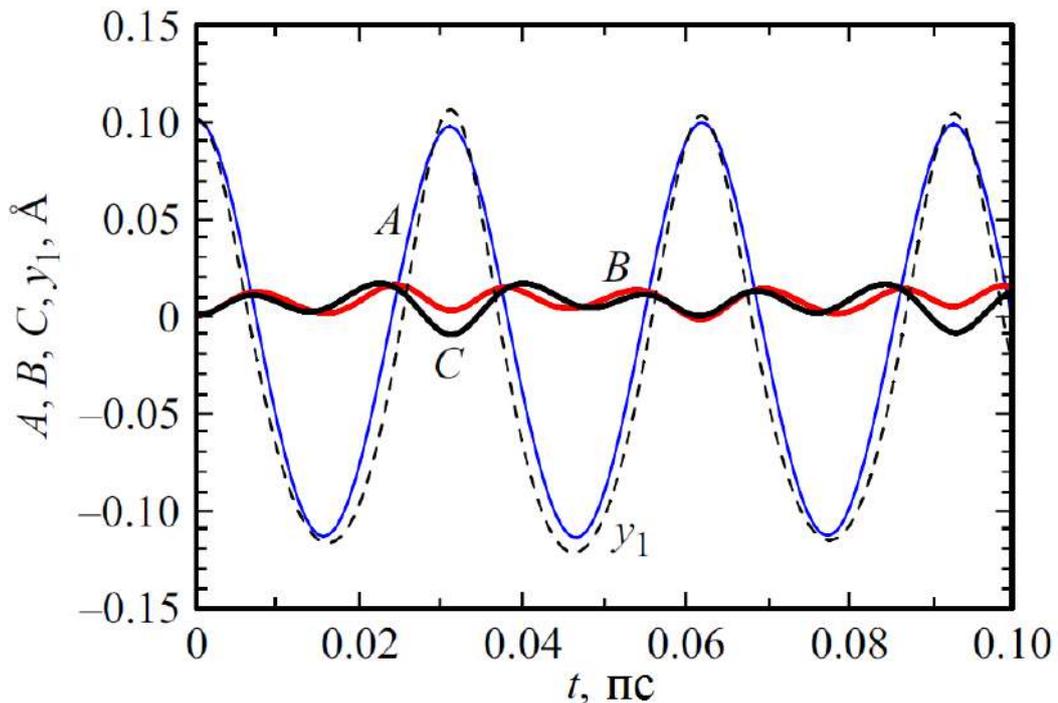


Рисунок 2.29 — Временные зависимости амплитуд мод A , B и C , а также y -компонента перемещения атома 1, который отмечен на рисунке 2.28(a).

Начальные перемещения атомов заданы в соответствии с паттерном, изображенном на рисунке 2.28(a) для случая при этом длины векторов перемещений выбраны равными $A = 0.1 \text{ \AA}$. В момент времени $t = 0$ имеем

$B = 0$ и $C = 0$, но компоненты B и C неизбежно возбуждаются при возбуждении корневой моды.

На рисунке 2.29 показаны в зависимости от времени y -компонента смещения атома 1, y_1 , и амплитуды мод A , B и C для случая, когда в момент времени $t = 0$ атомам были заданы начальные смещения в соответствии с рисунком 2.28(а), для длин векторов смещений $A = 0,1 \text{ \AA}$. Как следует из рисунка, возбуждение одной только корневой моды приводит к возбуждению однокомпонентных мод B и C . Отметим, что амплитуды мод A , B и C определялись по формуле (2.33).

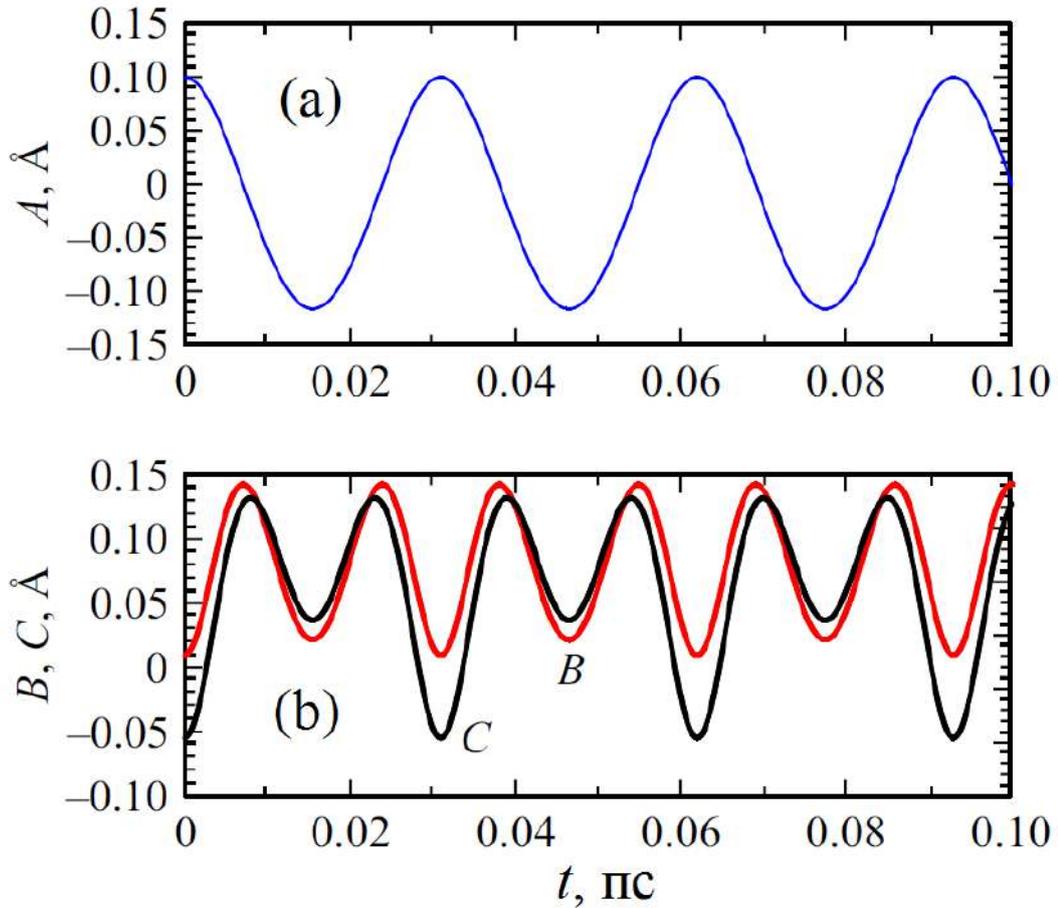


Рисунок 2.30 — Временные зависимости амплитуд (а) корневой и (б) однокомпонентных мод. При задании начальных условий задавалась суперпозиция трех мод, изображенных на рисунке 2.28(а-с), с амплитудами $A = 0.1$, $B = 0.933 \times 10^{-3}$ и $C = 0.5471 \times 10^{-2} \text{ \AA}$ соответственно. Такие начальные условия привели к периодическим колебаниям трехкомпонентной ДНКМ с периодом 0.031 пс и частотой 32.3 ТГц. Одному периоду колебания корневой моды, изображенной на (а), однокомпонентные моды, на (б), совершают два колебания на удвоенной частоте 64.6 ТГц, которая оказывается заметно выше максимальной частоты малоамплитудных фононных колебаний.

Ранее, при изучении двухкомпонентных ДНКМ в графене было установлено, что при определенном выборе амплитуд двух компонент можно добиться синхронизации их колебаний, так что их суперпозиция оказывается периодической во времени [136]. Покажем, что и для трехкомпонентной ДНКМ, при надлежащем выборе амплитуд B и C , для любой амплитуды A можно добиться строго периодических колебаний, как показано на рисунке 2.30. Для этого примера в качестве начальных условий задавалась прямая сумма всех трех мод, изображенных на рисунках 2.28(а-с) с амплитудами $A = 0.1$, $B = 0.933 \times 10^{-3} \text{ \AA}$ и $C = 0.5471 \times 10^{-2} \text{ \AA}$ соответственно. Значения амплитуд B и C находились методом покоординатного спуска так, чтобы минимизировать разницу периодов колебаний однокомпонентных мод и корневой моды. По-видимому, такой подход может быть рекомендован для синхронизации ДНКМ с любым числом компонент. Полученное в результате данной процедуры периодическое движение трехкомпонентной ДНКМ имеет период колебаний 0.031 пс и, соответственно частоту 32.3 ТГц. Из рисунка 2.30 видно, что одному периоду колебания корневой моды, см. рисунок 2.30(а), соответствует два колебания однокомпонентных мод, см. рисунок 2.30(б), что аналогично эффекту генерации второй гармоники, наблюдавшемуся для двухкомпонентных ДНКМ в графене [136]. Частота однокомпонентных мод, равная 64.6 ТГц, оказывается заметно выше максимальной частоты спектра малоамплитудных колебаний решетки графена, равной 46 ТГц [207; 208].

В таблице 4 показаны вычисленные значения амплитуд A , B и C , при которых наблюдаются периодические колебания трехкомпонентной ДНКМ. Амплитуда корневой моды на порядки превосходит амплитуды однокомпонентных мод. С увеличением A относительная величина амплитуд B и C возрастает. Например, при $A = 0.01 \text{ \AA}$ амплитуды B и C на три порядка меньше A , но при $A = 0.1 \text{ \AA}$ амплитуды B и C уже только на два порядка меньше A .

Рассчитаем некоторые физические свойства трехкомпонентной ДНКМ для случая периодических во времени колебаний. На рисунке 2.31, в зависимости от амплитуды корневой моды A , построены (а) частота колебаний, (б) полная энергия в расчете на атом и (с) осредненные за период колебания компоненты нормальных напряжений σ_{xx} и σ_{yy} , наведенные в листе графена колебаниями ДНКМ. При расчете напряжений принималось, что толщина листа графена равна межплоскостному расстоянию в графите, то есть 3.3 \AA. Приве-

Таблица 4 — Связь между амплитудами A , B и C , для которых трехкомпонентная ДНКМ графена оказывается периодической во времени.

$A, \text{Å}$	$B, \text{Å}$	$C, \text{Å}$
0.01	0.969×10^{-5}	-0.1318×10^{-4}
0.02	0.400×10^{-4}	-0.674×10^{-4}
0.04	0.1724×10^{-3}	-0.3944×10^{-3}
0.06	0.408×10^{-3}	-0.1194×10^{-2}
0.08	0.7144×10^{-3}	-0.27464×10^{-2}
0.1	0.933×10^{-3}	-0.5471×10^{-2}

денные результаты свидетельствуют о том, что трехкомпонентная ДНКМ демонстрирует мягкий тип нелинейности, при котором ее частота уменьшается с ростом амплитуды. Как можно было ожидать из общефизических соображений, энергия ДНКМ растет пропорционально квадрату амплитуды A корневой моды. Увеличение амплитуды корневой моды приводит к росту различия между напряжениями σ_{xx} и σ_{yy} . Отсюда видно, что возбуждение трехкомпонентной ДНКМ делает упругие свойства графена анизотропными, в то время как в обычном состоянии графен упругоизотропен. Давление, вычисляемое как $p = -(\sigma_{xx} + \sigma_{yy})/2$, оказывается положительным при отрицательных значениях напряжений σ_{xx} и σ_{yy} . Полученные результаты говорят о том, что колебания трехкомпонентной ДНКМ с амплитудой $A < 0.02 \text{ Å}$ можно считать малыми, поскольку для данных амплитуд влияние ДНКМ на свойства графена весьма мало, но оно становится заметными при возрастающих амплитудах.

Изучим особенности развития модуляционной неустойчивости трехкомпонентной ДНКМ. Явление модуляционной неустойчивости изучалось многими исследователями для ДНКМ в различных нелинейных системах [7–12], включая кристалл графена [65]. Было установлено, что если амплитуда ДНКМ превышает некоторое пороговое значение, она разрушается и ее энергия передается другим модам и система в итоге переходит к хаотическим тепловым колебаниям. То же было показано и для однокомпонентных ДНКМ в графене, см. раздел 2.3 и работу [65]. Здесь данная задача будет решаться численно путем изучения влияния малых случайных отклонений атомов от начальных положений, отвечающих начальным смещениям ДНКМ. Для этого к начальным координатам атомов (x_0, y_0, z_0) добавлялись случайные величины $\varepsilon(\xi_x, \xi_y, \xi_z)$, где $\varepsilon = 10^{-9} \text{ Å}$, а ξ_x, ξ_y, ξ_z - это равномерно распределенные на отрезке $[-1, 1]$ случайные числа.

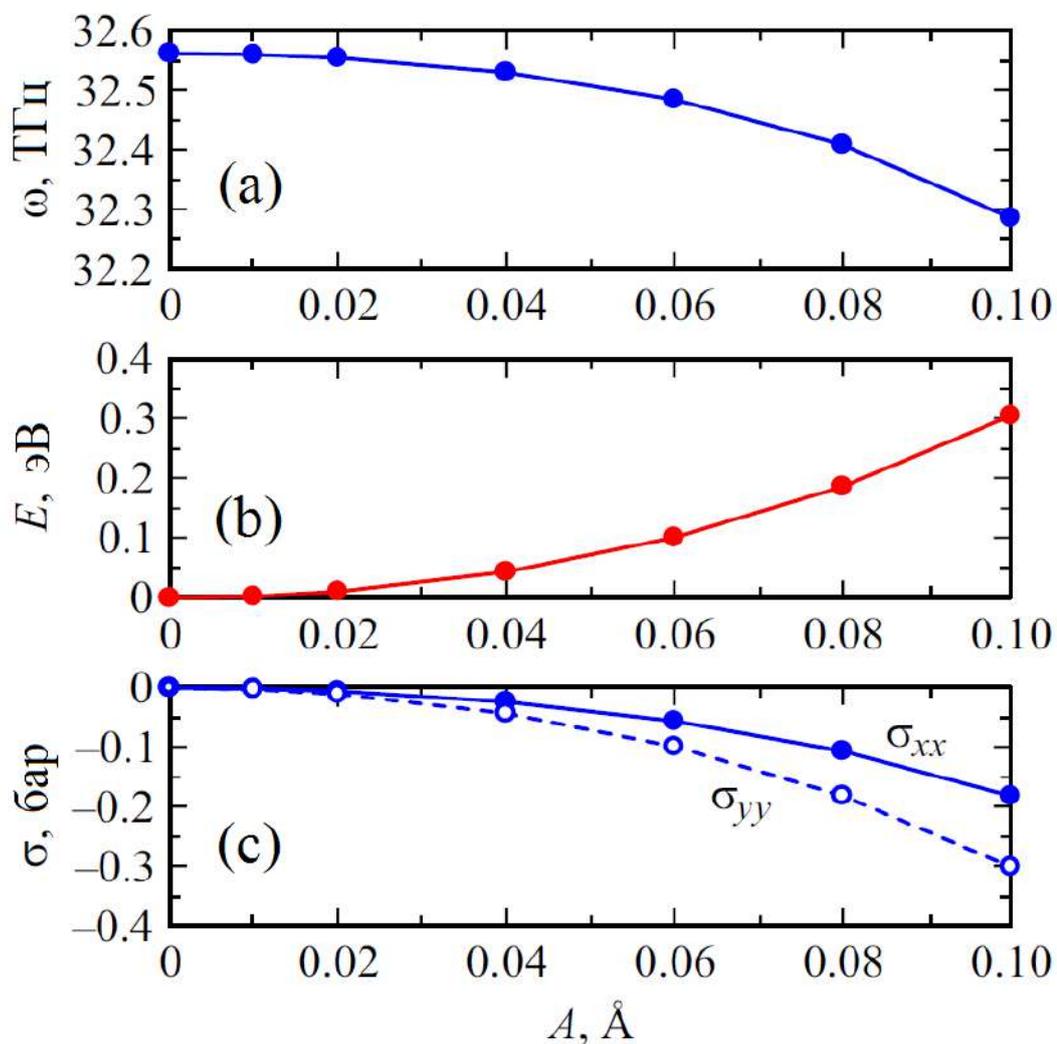


Рисунок 2.31 — (a) Частота корневой моды, (b) полная энергия в расчете на атом и (c) осредненные за период колебания нормальные напряжения σ_{xx} и σ_{yy} , возникающие в графене, как функции амплитуды корневой моды A для периодической во времени трехкомпонентной ДНКМ. Для выбранной амплитуды A , амплитуды однокомпонентных мод B и C выбирались из таблицы 4.

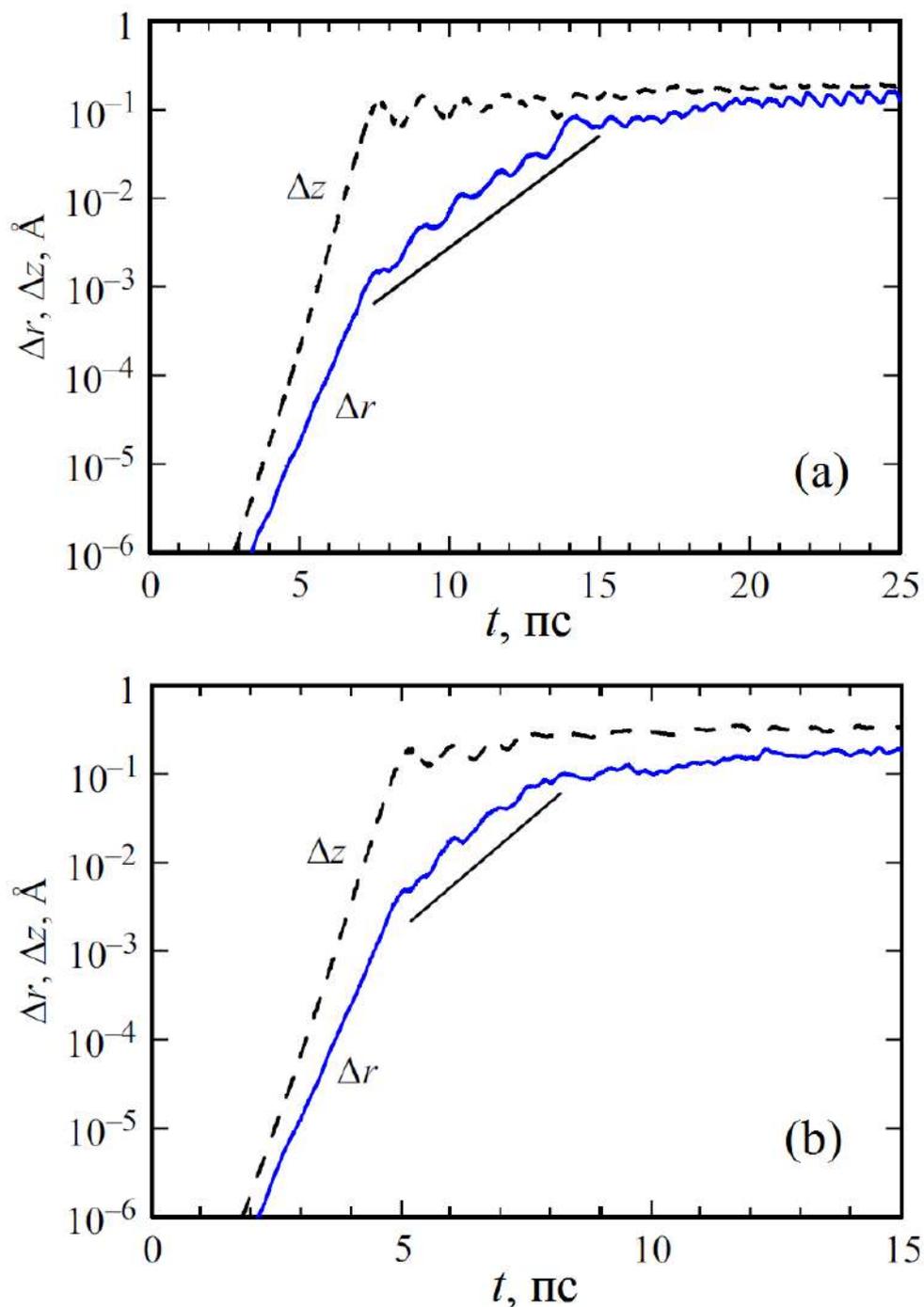


Рисунок 2.32 — Неустойчивость трехкомпонентной ДНКМ для двух различных амплитуд корневой моды (а) $A = 0.04$ и (б) $A = 0.06$ Å. Максимальные отклонения атомов от начальных траекторий в плоскости xy (Δr) показаны сплошными линиями, а по нормали (Δz) - пунктирными. Отрезки прямых имеющих наклон совпадающий с наклоном кривых $\Delta r(t)$ на отрезке времени, когда $\Delta z(t)$ достигает максимума.

В отсутствии возмущений атомы движутся вдоль прямолинейных траекторий. В ходе развития неустойчивости вычислялись величины Δr и Δz , определяемые как максимальные по всем атомам отклонения от прямолинейных траекторий в плоскости графена и перпендикулярно плоскости соответственно. Зависимости Δr и Δz приведены на рисунке 2.32 для амплитуд корневой моды (а) $A = 0.04 \text{ \AA}$ и (б) $A = 0.06 \text{ \AA}$. Для ординат на рисунке 2.32 используется логарифмическая шкала.

Из рисунка 2.32 следует, что модуляционная неустойчивость развивается в два этапа. Сначала экспоненциальный рост со временем показывают как Δr , так и Δz . При этом $\Delta r(t)$ остается на один-два порядка меньше, чем $\Delta z(t)$. После того, как $\Delta z(t)$ достигает своего максимума, начинается второй этап развития неустойчивости, когда скорость роста $\Delta r(t)$ существенно уменьшается. Второй этап заканчивается, когда система переходит в состояние теплового равновесия, когда $\Delta r(t)$ также достигает своего максимума. На рисунке 2.32 показаны отрезки прямых, имеющих наклон совпадающий с наклоном кривых $\Delta r(t)$ на втором этапе. Они аппроксимируются функцией $\Delta r(t) \approx \exp(\alpha t)$, где α - показатель критической экспоненты. Ранее было показано, что α уменьшается с уменьшением амплитуды ДНКМ линейно[68]. Для двух исследованных амплитуд $A = 0.04 \text{ \AA}$ и $A = 0.06 \text{ \AA}$ найдены значения $\alpha=0.56$ и 1.1 соответственно. Экстраполируя на значение $\alpha=0$ находим критическую амплитуду ДНКМ $A^* = 0.016 \text{ \AA}$. Для $A < A^*$ ДНКМ устойчива.

Проведенный анализ показал, что связь между продольными и поперечными колебаниями атомов в графене является слабой при не слишком больших амплитудах колебаний. Этот вывод следует, например, из того, что на втором этапе развития модуляционной неустойчивости, при максимально возможных амплитудах колебаний z -компоненты, ДНКМ продолжает существовать в течение 7 и 3 пс для амплитуд $A = 0.04 \text{ \AA}$ и $A = 0.06 \text{ \AA}$ соответственно.

2.4.3 Обсуждение результатов и заключение

Проведен анализ трехкомпонентной ДНКМ в графене с использованием метода молекулярной динамики и хорошо апробированного межатомного потен-

циала, разработанного Савиным [51]. Установлено, что в соответствии с предсказаниями, основанными на теоретико-групповых представлениях [204], запуск корневой колебательной моды в гексагональной решетке графена, показанной на рисунке 2.28(a) приводит к возбуждению двух однокомпонентных ДНКМ, показанных на рисунке 2.28(b,c), при этом другие колебательные моды не возбуждаются.

Показано, что подбором амплитуд трех компонент рассматриваемой ДНКМ можно добиться синхронизации компонент, т.е. периодичности колебаний. Периодические колебания были исследованы в интервале амплитуд корневой моды $A \leq 0.1 \text{ \AA}$ и было показано, что амплитуды однокомпонентных мод B и C оказываются на порядки меньше, по сравнению с A , но с ростом A растет относительный вклад составляющих B и C (см. таблицу 4).

Рассчитаны некоторые физические свойства периодической трехкомпонентной ДНКМ как функции амплитуды корневой моды A , см. рисунок 2.31. Частота ДНКМ уменьшается с ростом амплитуды, энергия на атом увеличивается пропорционально квадрату амплитуды. Возбуждение ДНКМ приводит к появлению в графене неравных компонент нормальных напряжений, $\sigma_{xx} \neq \sigma_{yy}$, при этом упруго-изотропный графен превращается в ортотропный двумерный материал.

Была показана генерация второй гармоники для малоамплитудных составляющих B и C , см. рисунок 2.30. Частота корневой моды оказалась близкой к 32 ТГц, в то время как частоты составляющих B и C в два раза выше, 64 ТГц, что лежит выше верхнего края спектра малоамплитудных фононных колебаний графена, которая лежит на отметке 46 ТГц [207; 208].

Заметим еще раз, что рассмотренная нами трехкомпонентная ДНКМ существует в любой гексагональной решетке с любыми межатомными потенциалами, но физические свойства ДНКМ зависят от потенциалов.

Важно обсудить принципиальную возможность экспериментального изучения динамики многокомпонентных ДНКМ в гексагональных решетках. Опираясь на факт существования ДНКМ в любых нелинейных гексагональных решетках, можно рассмотреть, например, макроскопическую модель взаимодействующих грузов или магнитов, собранных в гексагональную решетку. Подобного рода модели используются в демонстрационных и образовательных целях, а также для экспериментального подтверждения теоретических разрабо-

ток [95—97]. В таких моделях возбуждение ДНКМ легко осуществить заданием начальных отклонений частиц от положения равновесия, с последующим их одновременным освобождением для совершения свободных колебаний. Возбудить ДНКМ в графене намного сложнее. Одним из возможных путей является использование импульсных лазеров, работающими на частоте выше фононного спектра [209].

Таким образом, полученные результаты расширяют наши представления, в частности, о нелинейной динамике гексагональной решетки графена и, в общем, о многокомпонентных ДНКМ в нелинейных решетках.

2.5 Выводы по главе 2

В разделе 2.1.2 исследовано влияние локального потенциала 2.2 с регулируемым типом нелинейности на динамику четырнадцати ДНКМ, показанных на рисунке 2.1. Особый интерес представляют ДНКМ с частотами вне фононного спектра решетки, поскольку на их основе могут быть получены новые типы ДБ. При наличии локального потенциала любого типа или без него ДНКМ 2 и 4 имеют частоты выше фононного спектра и, следовательно, они могут порождать ДБ. При наличии локального потенциала любого типа в решетке появляется дополнительная ДНКМ, обозначенная на рисунке 2.1 цифрой 0. 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.

Методом молекулярной динамики в разделе 2.1.4 для треугольной решетки Морзе исследованы свойства восьми однокомпонентных ДНКМ, изображенных на рисунке 2.5. Получены амплитудно-частотные зависимости ДНКМ, рассчитаны их энергии и напряжения, создаваемые ими в решетке как функции амплитуды ДНКМ. Исследована модуляционная неустойчивость и установлено,

что критическое значение амплитуды ДНКМ, выше которого она становится неустойчивой, составляет порядка 1% от межатомного расстояния.

Исследования, описанные в разделе 2.2, были направлены на анализ свойств шестнадцати однокомпонентных ДНКМ квадратной решетки с потенциалом β -ФПУ. ДНКМ изображены на рисунках 2.14 и 2.14. Было установлено, что только ДНКМ 1 и 16 имеют частоты выше фононного спектра во всем интервале амплитуд. 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 была исследована устойчивость всех четырех однокомпонентных ДНКМ графена (см. рисунок 2.24) и рассчитаны показатели критических экспонент α_{xy} и α_z , характеризующие скорость отклонения атомов от начальных траекторий в плоскости и из плоскости колебаний для различных амплитуд ДНКМ A . Установлено, что показатели критических экспонент уменьшаются с уменьшением A почти линейно при относительно больших A и быстрее при уменьшении A . Они обращаются в нуль при некотором значении A^* (см. рисунок 2.26) ниже которого ДНКМ устойчивы. Оказалось, что неустойчивость ДНКМ II развивается из-за увеличения отклонений от начальных траекторий атомов из плоскости листа графена, в то время как для трех других мод растут отклонения в плоскости, а отклонения из плоскости остаются небольшими (см. рисунок 2.25). Устойчивость ДНКМ II относительно отклонений атомов от начальных траекторий в плоскости можно объяснить тем, что в ней каждый движущийся атом колеблется между двумя покоящимися атомами. Эти неподвижные атомы создают стабилизирующий эффект для колебаний в плоскости, но не для колебаний из плоскости графена.

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 [204], 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. Рассчитаны некоторые физические свойства периодической трехкомпонентной ДНКМ как функции амплитуды корневой моды A , см. рисунок 2.31. Частота ДНКМ уменьшается с ростом амплитуды, энергия на атом увеличивается пропорционально квадрату амплитуды. Возбуждение ДНКМ приводит к появлению в графене неравных компонент нормальных напряжений, $\sigma_{xx} \neq \sigma_{yy}$, при этом упруго-изотропный графен превращается в ортотропный двумерный материал. Показана генерация второй гармоники для малоамплитудных составляющих B и C , см. рисунок 2.30. Частота корневой моды оказалась близкой к 32 ТГц, в то время как частоты составляющих B и C в два раза выше, 64 ТГц, что лежит существенно выше верхнего края спектра малоамплитудных фононных колебаний графена.

Глава 3. ДБ двумерных решеток

Данная глава посвящена ДБ в двумерных решетках; в ней будут 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. Будут также рассмотрены движущиеся ДБ в треугольной решетке.

3.1 Хаотические дискретные бризеры треугольной β -ФПУ решетки

Результаты данного раздела были опубликованы в работе [77].

3.1.1 Треугольная β -ФПУ решетка, ДНКМ с частотами выше фононного спектра и макроскопические характеристики

Изучается двумерная треугольная решетка с частицами, взаимодействующими с ближайшими соседями посредством β -ФПУ потенциала. Решетка определяется как набор точек в плоскости xy , которые имеют радиус-векторы

$$\boldsymbol{\xi}_{i,j} = i\mathbf{e}_1 + j\mathbf{e}_2, \quad (3.1)$$

где i и j - целые числа, а базис решетки можно определить векторами $\mathbf{e}_1 = (h, 0)$ и $\mathbf{e}_2 = (h/2, h\sqrt{3}/2)$, где h - расстояние между ближайшими точками решетки. Ось x направлена вдоль одного из плотноупакованных направлений решетки.

Каждая частица имеет две степени свободы - компоненты вектора смещения $(u_{i,j}, v_{i,j})$, которые являются неизвестными функциями времени. Положение частицы i, j задается радиус-вектором $\mathbf{r}_{i,j} = \boldsymbol{\xi}_{i,j} + (u_{i,j}, v_{i,j})$. Каждая частица взаимодействует с шестью ближайшими соседями через потенциал β -ФПУ

$$\varphi(r) = \frac{k}{2}(r - h)^2 + \frac{\beta}{4}(r - h)^4, \quad (3.2)$$

где r - расстояние между частицами, k и β - коэффициенты при гармонической и ангармонической частях потенциала соответственно. Возьмем $h = 1$ и $k = 1$ (выбрав единицы расстояния и энергии соответственно) и положим $\beta=10$, при котором эффекты нелинейности становятся заметными для смещений частиц порядка 0,1. Масса частицы устанавливается равной $m = 1$ путем выбора единицы времени.

Рассматривается расчетная ячейка, включающая $I \times J$ частиц. Гамильтониан (полная энергия) расчетной ячейки включает кинетическую K и потенциальную P энергии:

$$H = K + P = \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \frac{m}{2} (\dot{\mathbf{r}}_{i,j}, \dot{\mathbf{r}}_{i,j}) + \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \sum_{k=1}^3 \varphi(|\mathbf{R}_{i,j,k}|), \quad (3.3)$$

где точка означает дифференцирование по времени, $\mathbf{R}_{i,j,k}$ - векторы, соединяющие ближайших соседей с частицей i,j :

$$\begin{aligned} \mathbf{R}_{i,j,1} &= \mathbf{r}_{i+1,j} - \mathbf{r}_{i,j}, \\ \mathbf{R}_{i,j,2} &= \mathbf{r}_{i,j+1} - \mathbf{r}_{i,j}, \\ \mathbf{R}_{i,j,3} &= \mathbf{r}_{i-1,j+1} - \mathbf{r}_{i,j}. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Используются периодические граничные условия: $\mathbf{r}_{i,j} = \mathbf{r}_{i+I,j} = \mathbf{r}_{i,j+J}$.

Для задания начальных условий, приводящих к возбуждению одной из трех ДНКМ, при $t = 0$ производились смещения частиц из положения равновесия согласно схемам, представленным на рисунке 1. Все три моды имеют частоты выше фононного спектра и обозначены так же как и в работе [203], где они были получены. Однокомпонентные ДНКМ показаны на (а) и (б). Начальные векторы смещения всех движущихся частиц имеют одинаковую длину A , которая определяет амплитуду моды. На (с) показана двухкомпонентная ДНКМ, где частицы, движущиеся вдоль оси x (вдоль оси y), имеют начальные векторы смещения длины A (длины B). Для всех трех мод начальные скорости всех частиц равны нулю, $\dot{\mathbf{r}}_{i,j}^0 = 0$. Дадим выражения для начальных смещений частиц для трех рассматриваемых ДНКМ.

Для ДНКМ 2

$$u_{i,j}^0 = 0, \quad v_{i,2j}^0 = A, \quad v_{i,2j+1}^0 = -A. \quad (3.5)$$

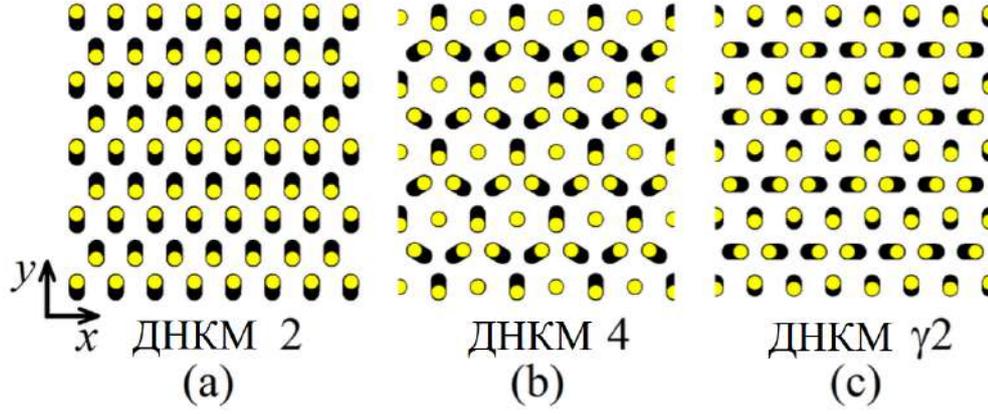


Рисунок 3.1 — Три ДНКМ треугольной решетки, имеющие частоты выше фононного спектра, взятые из работы [203]. Частицы изображены желтыми кружками, их траектории черными полосками. Частицы показаны в момент времени, когда они максимально удалены от положений равновесия. На (a) все частицы совершают колебания параллельно оси y с амплитудой A . На (b) все колеблющиеся частицы имеют амплитуду колебаний A , они движутся в направлениях перпендикулярных плотноупакованным рядам. Каждая четвертая частица находится в состоянии покоя. На (c) частицы, совершающие колебания вдоль оси x (оси y), имеют амплитуду колебаний A (B).

Для ДНКМ 4

$$\begin{aligned}
 u_{2i,2j}^0 &= 0, & v_{2i,2j}^0 &= 0, & u_{2i+1,2j}^0 &= 0, \\
 v_{2i+1,2j}^0 &= -A, & u_{2i,2j+1}^0 &= -u_{2i+1,2j+1}^0 = -A\sqrt{3}/2, \\
 v_{2i,2j+1}^0 &= v_{2i+1,2j+1}^0 = A/2.
 \end{aligned} \tag{3.6}$$

Для ДНКМ $\gamma 2$

$$\begin{aligned}
 u_{2i,2j}^0 &= A, & u_{2i+1,2j}^0 &= -A, & v_{i,2j}^0 &= 0, \\
 u_{i,2j+1}^0 &= 0, & v_{2i,2j+1}^0 &= -B, & v_{2i+1,2j+1}^0 &= B.
 \end{aligned} \tag{3.7}$$

В общем случае, две составляющие этой моды осциллируют с несоизмеримыми частотами, но амплитуды A и B можно выбрать так, что частоты обеих составляющих окажутся равными [55]. Для амплитуд, рассматриваемых в этом исследовании, и для выбранных параметров модели, частоты двух составляющих равны если $A = 0.02$, $B = 0.572A$; $A = 0.03$, $B = 0.5658A$ и $A = 0.04$, $B = 0.557438A$. В пределе $A \rightarrow 0$ имеем $B \rightarrow A/\sqrt{3}$ [55].

Опишем способы вычисления некоторых макроскопических характеристик решетки.

В качестве меры температуры будет использоваться Кинетическая энергия решетки. Теплоемкость при постоянном объеме, согласно работам [120; 165; 170; 210], может быть охарактеризована отношением полной энергии к кинетической энергии

$$C_V = \frac{H}{K}. \quad (3.8)$$

Для гармонической решетки всегда выполняется равенство $K = H/2$, поэтому для неё $C_V = 2$. Ангармонизм решетки приводит к неравенству между потенциальной и кинетической энергией и, как следствие, к отклонению C_V от 2.

Компоненты тензора напряжений в решетке можно рассчитать следующим образом

$$\begin{aligned} \sigma_{xx} &= \frac{1}{S} \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \left(\sum_{k=1}^2 D_n R_{i,j,k,x}^2 + \sum_{l=5}^6 D_{nn} R_{i,j,l,x}^2 \right), \\ \sigma_{yy} &= \frac{1}{S} \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \left(\sum_{k=1}^2 D_n R_{i,j,k,y}^2 + \sum_{l=5}^6 D_{nn} R_{i,j,l,y}^2 \right), \\ \sigma_{xy} &= \frac{1}{S} \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \left(\sum_{k=1}^2 D_n R_{i,j,k,x} R_{i,j,k,y} \right. \\ &\quad \left. + \sum_{l=5}^6 D_{nn} R_{i,j,l,x} R_{i,j,l,y} \right), \end{aligned} \quad (3.9)$$

где S - площадь расчетной ячейки.

Компоненты напряжений связаны с компонентами деформаций через закон Гука, который для случая плоского напряженного состояния имеет вид

$$\begin{aligned} \sigma_{xx} &= C_{11}\varepsilon_{xx} + C_{12}\varepsilon_{yy} + C_{13}\varepsilon_{xy}, \\ \sigma_{yy} &= C_{21}\varepsilon_{xx} + C_{22}\varepsilon_{yy} + C_{23}\varepsilon_{xy}, \\ \sigma_{xy} &= C_{31}\varepsilon_{xx} + C_{32}\varepsilon_{yy} + C_{33}\varepsilon_{xy}, \end{aligned} \quad (3.10)$$

где $C_{ij} = C_{ji}$ - константы жесткости, которые можно вычислить следующим образом

$$\begin{aligned}
C_{11} &= \frac{1}{S} \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \left(\sum_{k=1}^2 F_n R_{i,j,k,x}^4 + \sum_{l=5}^6 F_{nn} R_{i,j,l,x}^4 \right), \\
C_{12} &= \frac{1}{S} \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \left(\sum_{k=1}^2 F_n R_{i,j,k,x}^2 R_{i,j,k,y}^2 \right. \\
&\quad \left. + \sum_{l=5}^6 F_{nn} R_{i,j,l,x}^2 R_{i,j,l,y}^2 \right), \\
C_{13} &= \frac{1}{S} \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \left(\sum_{k=1}^2 F_n R_{i,j,k,x}^3 R_{i,j,k,y} \right. \\
&\quad \left. + \sum_{l=5}^6 F_{nn} R_{i,j,l,x}^3 R_{i,j,l,y} \right), \\
C_{22} &= \frac{1}{S} \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \left(\sum_{k=1}^2 F_n R_{i,j,k,y}^4 + \sum_{l=5}^6 F_{nn} R_{i,j,l,y}^4 \right), \\
C_{23} &= \frac{1}{S} \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \left(\sum_{k=1}^2 F_n R_{i,j,k,x} R_{i,j,k,y}^3 \right. \\
&\quad \left. + \sum_{l=5}^6 F_{nn} R_{i,j,l,x} R_{i,j,l,y}^3 \right), \\
C_{33} &= C_{12}, \tag{3.11}
\end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned}
F_n &= \frac{\varphi_n''(|\mathbf{R}_k|)}{|\mathbf{R}_k|^2} - \frac{\varphi_n'(|\mathbf{R}_k|)}{|\mathbf{R}_k|^3}, \\
F_{nn} &= \frac{\varphi_{nn}''(|\mathbf{R}_l|)}{|\mathbf{R}_l|^2} - \frac{\varphi_{nn}'(|\mathbf{R}_l|)}{|\mathbf{R}_l|^3}. \tag{3.12}
\end{aligned}$$

Возбуждение ДНКМ приводит к появлению в решетке внутренних напряжений, являющихся функциями времени. Упругие постоянные также становятся зависимыми от времени. Усредненные по периоду колебаний напряжения и

константы жесткости рассчитываются следующим образом

$$\langle \sigma_{ij} \rangle = \frac{1}{T} \int_0^T \sigma_{ij}(t) dt, \quad \langle C_{ij} \rangle = \frac{1}{T} \int_0^T C_{ij}(t) dt. \quad (3.13)$$

Усредненное по времени давление (среднее напряжение) находится из выражения

$$p = \frac{\langle \sigma_{xx} \rangle + \langle \sigma_{yy} \rangle}{2}. \quad (3.14)$$

Главные напряжения, усредненные по T , находятся из [211]

$$\begin{aligned} \sigma_1 &= P + \sqrt{S^2 + \langle \sigma_{xy} \rangle^2}, \\ \sigma_2 &= P - \sqrt{S^2 + \langle \sigma_{xy} \rangle^2}, \end{aligned} \quad (3.15)$$

где

$$P = \frac{\langle \sigma_{xx} \rangle + \langle \sigma_{yy} \rangle}{2}, \quad S = \frac{\langle \sigma_{xx} \rangle - \langle \sigma_{yy} \rangle}{2}. \quad (3.16)$$

Кроме того, будут анализироваться усредненные по периоду колебаний кинетическая и потенциальная энергии в расчете на одну частицу,

$$\langle K \rangle = \frac{1}{TN} \int_0^T K(t) dt, \quad \langle P \rangle = \frac{1}{TN} \int_0^T P(t) dt, \quad (3.17)$$

где $N = IJ$ - число частиц в расчетной ячейке.

Зная константы жесткости можно определить инженерные упругие постоянные:

$$\begin{aligned} \nu_{xy} &= C_{21}/C_{22}, \quad \nu_{yx} = C_{12}/C_{11}, \quad G = C_{33}, \\ E_x &= C_{11}(1 - \nu_{xy}\nu_{yx}), \quad E_y = C_{22}(1 - \nu_{xy}\nu_{yx}), \end{aligned} \quad (3.18)$$

где ν_{xy} , ν_{yx} - коэффициенты Пуассона, G - модуль сдвига, а E_x , E_y - модули Юнга.

В большинстве расчетов рассматривается решетка размером $I = J = 192$, тогда общее число частиц равно 36864.

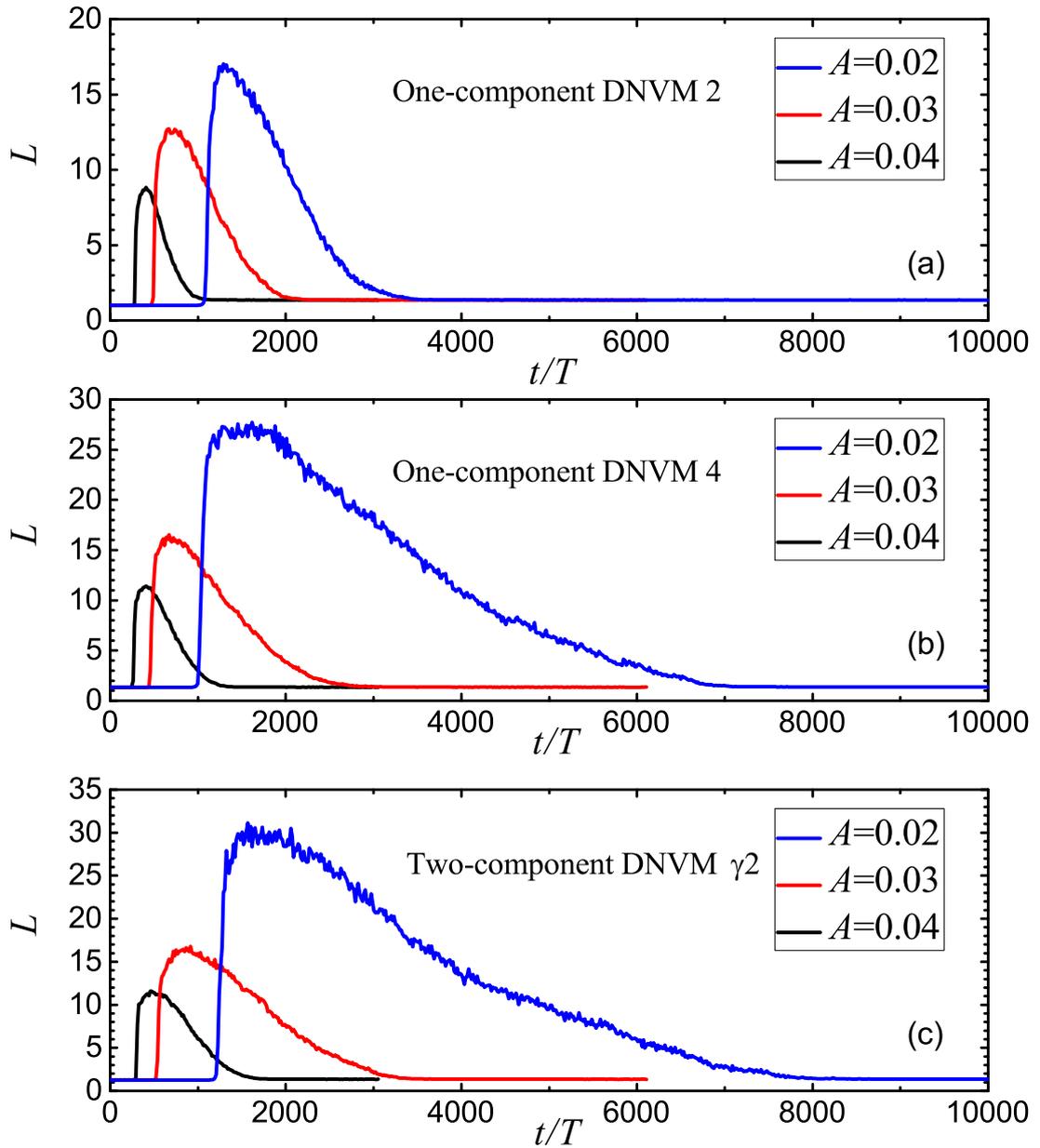


Рисунок 3.2 — Изменение параметра локализации от времени. Время нормировано на период колебаний фоновой моды с самой высокой частотой $T = 2\pi/\sqrt{6}$, который близок периоду дискретного бризера. Показаны кривые для (a) ДНКМ 2, (b) ДНКМ 4 и (c) ДНКМ $\gamma 2$. Синие, красные и черные линии соответствуют амплитудам ДНКМ: $A = 0,02, 0,03$ и $0,04$.

Количественную оценку степени локализации энергии в решетке можно дать с помощью параметра локализации, вычисляемого по формуле:

$$L = IJ \frac{\sum_i \sum_j e_{i,j}^2}{\left(\sum_i \sum_j e_{i,j} \right)^2}, \quad (3.19)$$

где $e_{i,j}$ - полная энергия частицы i,j . Если все частицы имеют одинаковую энергию, то $L = 1$. Если вся энергия системы локализована на одной частице, то $L = IJ$, то есть числу частиц в расчетной ячейке.

Перейдем к описанию результатов моделирования.

3.1.2 Локализация энергии на хаотических ДБ и эволюция макроскопических параметров треугольной решетки

На рисунке 3.2 показана эволюция во времени параметра локализации (3.19) для (а) ДНКМ 2, (б) ДНКМ 4 и (с) ДНКМ γ 2. Синими, красными и черными линиями представлены результаты для амплитуд ДНКМ $A = 0,02, 0,03$ и $0,04$ соответственно. Время отнормировано на период колебания фонона с максимальной частотой, $T = 2\pi/\sqrt{6}$. Частота ДБ лежит выше фононной полосы, поэтому период ДБ несколько меньше T . Можно приближенно принять, что T равно периоду ДБ. Из рисунка 3.2 следует, что с уменьшением A происходит замедление развития модуляционной неустойчивости, и что время жизни хаотических ДБ увеличивается. Самое короткое время жизни отмечается у ДБ, возникающих из ДНКМ 2, а самое длинное - из ДНКМ γ 2.

С целью мониторинга процесса локализации и делокализации энергии интересно рассмотреть, как максимальная энергия в системе изменяется во времени. График максимальной полной энергии частиц $e_{i,j}^{\max}$ показан на рисунке 3.3. Видно, что максимальная энергия мала во время развития неустойчивости ДНКМ, затем резко возрастает при возникновении в системе хаотических ДБ и остается высокой в течение времени жизни ДБ. Бризеры излучают энергию в виде малоамплитудных фононов, что приводит к их исчезновению и установлению теплового равновесия, при этом максимальная энергия становится малой.

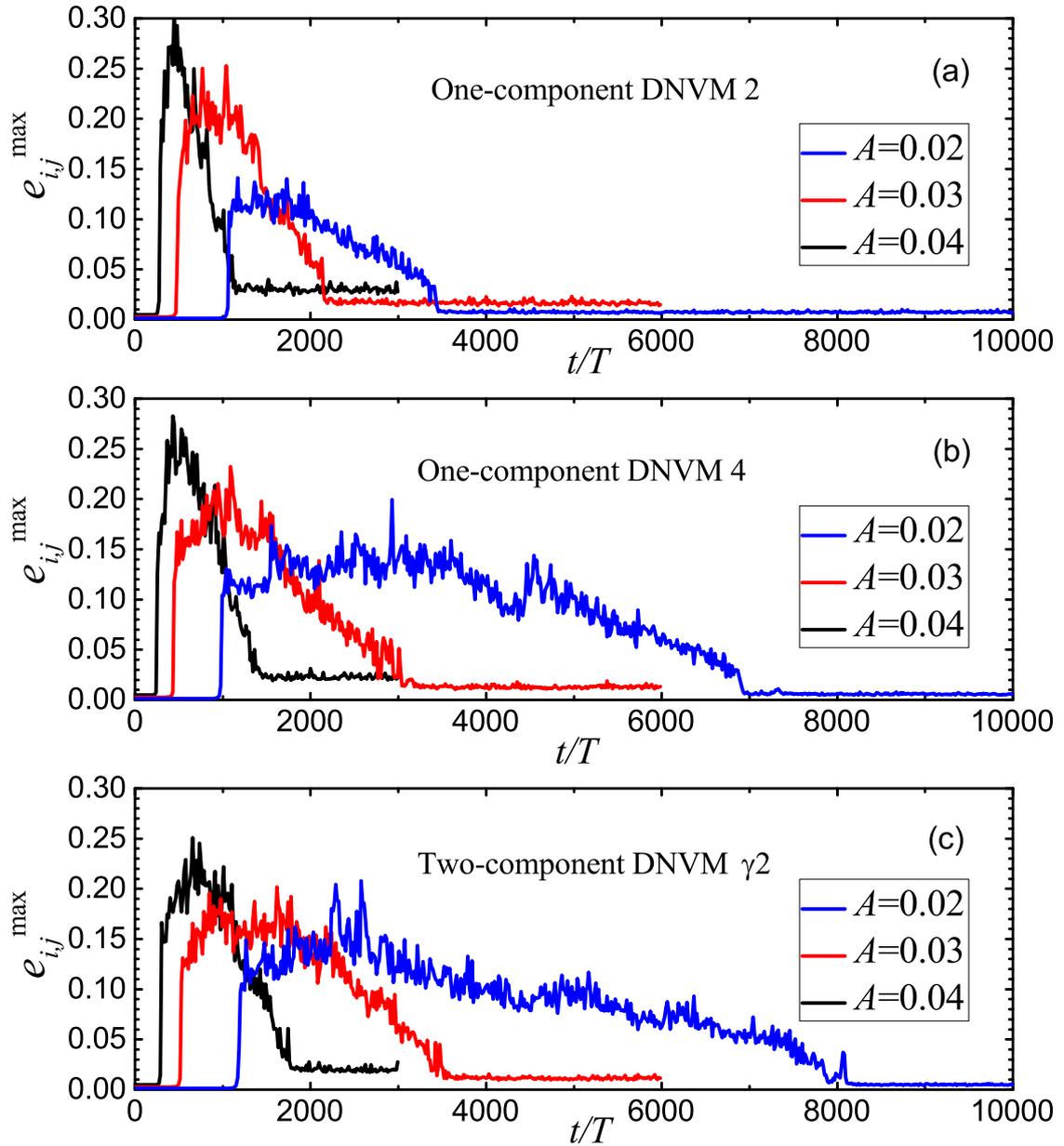


Рисунок 3.3 — Зависимость максимальной полной (кинетической и потенциальной) энергии частиц от времени для (a) ДНКМ 2, (b) ДНКМ 4 и (c) ДНКМ $\gamma 2$. Синим, красным и черным цветом показаны результаты для $A = 0,02, 0,03$ и $0,04$ соответственно.

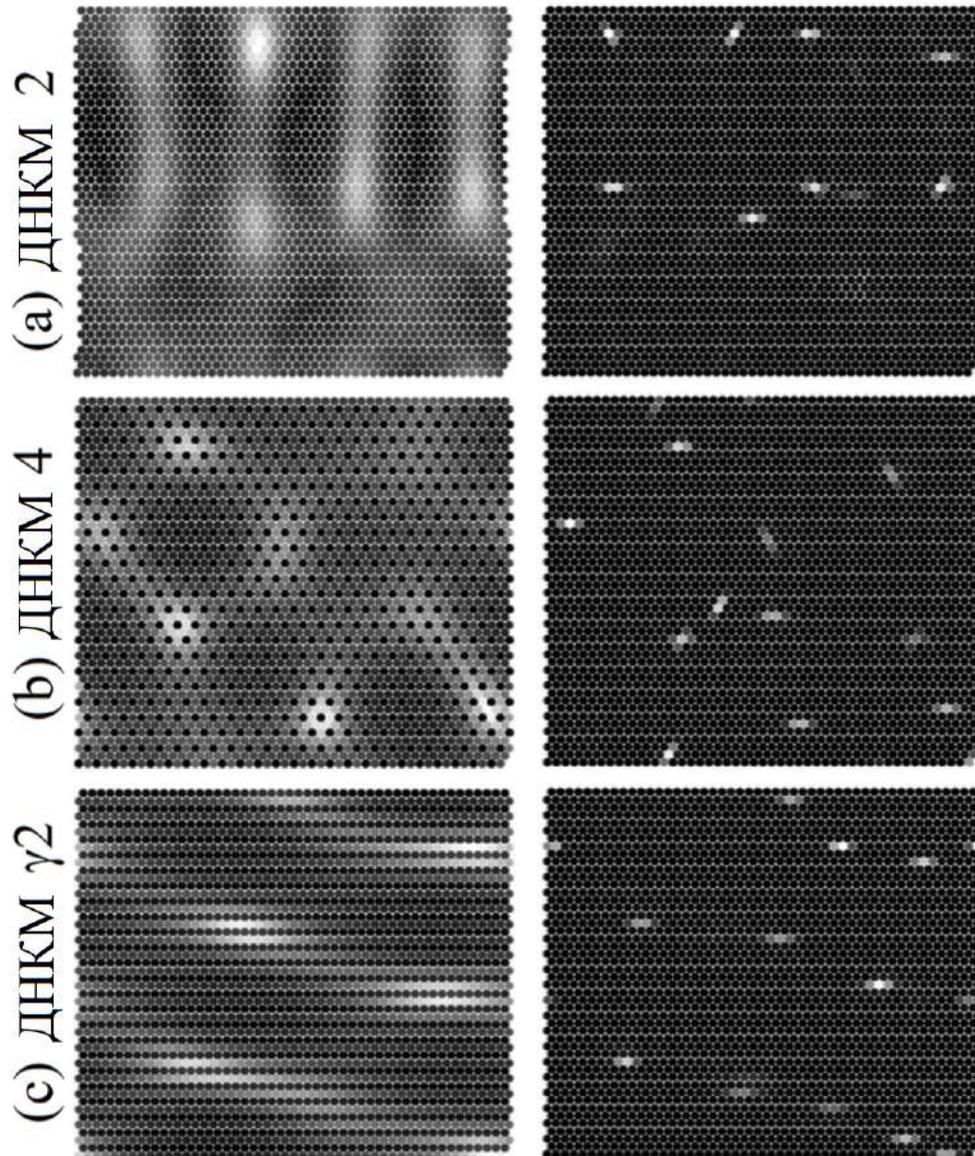


Рисунок 3.4 — Распределение энергии по решетке, показывающее развитие модуляционной неустойчивости (а) ДНКМ 2, (б) ДНКМ 4 и (с) ДНКМ γ^2 .

Результат получен для $A = 0,03$. Слева (справа) показано распределение энергии по решетке в момент, когда $L = 0,8L_{\max}$ ($L = L_{\max}$). Черный (белый) цвет соответствует минимальной (максимальной) энергии.

Максимальная энергия увеличивается с ростом A , но, как говорилось выше, время жизни ДБ увеличивается с уменьшением A .

Сначала энергия равномерно распределена по трансляционным ячейкам решетки. Модуляционной неустойчивости приводит к разрушению структуры ДНКМ и к временной локализации энергии. Кинетика локализации представлена на рисунке 3.4 для (а) ДНКМ 2, (б) ДНКМ 4 и (с) ДНКМ $\gamma 2$ для случая $A = 0,03$. В данном расчете достаточно рассмотреть небольшой размер вычислительной ячейки ($I = J = 48$). Черным (белым) цветом показаны частицы с низкой (высокой) энергией. Слева (справа) показано распределение энергии в системе в момент, когда с увеличением параметра локализации он достигает величины $L = 0,8L_{\max}$ ($L = L_{\max}$). На правой панели, в момент достижения максимума параметра локализации, можно видеть сильно локализованные ДБ.

Перейдем к анализу влияния бризеров на макроскопические свойства треугольной β -ФПУ решетки.

Из рисунка 3.5 видно изменение теплоемкости как функции времени для (а) ДНКМ 2, (б) ДНКМ 4 и (с) ДНКМ $\gamma 2$. Синяя, красная и черная кривые показывают результаты для $A = 0,02, 0,03$ и $0,04$ соответственно. Теплоемкость оказывается ниже, когда в решетке существуют хаотические ДБ, а в тепловом равновесии она выше. Таким образом, ДБ снижают теплоемкость решетки. Теплоемкость снижается сильнее для больших значений A , но продолжительность снижения больше для малых значений A , что коррелирует со временем жизни ДБ.

Среднее напряжение (давление), усредненное по времени согласно выражениям 3.13 и 3.14, показано на рисунке 3.6 как функция времени для (а) ДНКМ 2, (б) ДНКМ 4 и (с) ДНКМ $\gamma 2$. Как и ранее, синяя, красная и черная кривые соответствуют $A = 0,02, 0,03$ и $0,04$. Видно, что давление увеличивается с увеличением A , что связано с эффектом теплового расширения. Дело в том, что площадь расчетной ячейки в наших расчетах фиксирована, а тенденция к расширению компенсируется появлением положительного давления в решетке. Отметим, что среднее напряжение выше в режиме теплового равновесия по сравнению с режимом хаотических ДБ. Приходим к выводу, что ДБ снижают тепловое расширение решетки.

На рисунке 3.7, как функции времени, изображены усредненные по времени коэффициенты жесткости $\langle C_{ij} \rangle$, отнесенные к значениям в состоянии тепло-

вого равновесия \bar{C}_{ij} . Результаты получены для (а) ДНКМ 2, (b) ДНКМ 4 и (с) ДНКМ $\gamma 2$. Во всех примерах $A = 0,02$. Синие и зеленые кривые показывают C_{11} и C_{12} соответственно. В целом видно, что ДБ понижают жесткость решетки, что следует из увеличения $\langle C_{ij} \rangle$ при переходе от режима хаотических ДБ к тепловому равновесию.

По результатам данного раздела можно заключить следующее.

С использованием метода молекулярной динамики, было показано, что ДНКМ, имеющие частоты выше фононного спектра, по мере развития модуляционной неустойчивости создают хаотические ДБ. Были изучены все три таких ДНКМ, описанные в работе [203], а именно ДНКМ 2, ДНКМ 4 и ДНКМ $\gamma 2$, см. рисунок 3.1. Возникновение хаотических ДБ было доказано путем построения параметра локализации (см. рисунок 3.2), анализа максимальной энергии частиц (рисунок 3.3) и эволюции распределение энергии по вычислительной ячейке (рисунок 3.4). ДБ имели большое время жизни, измеряемое тысячами периодов колебаний (см. рисунке 3.2), однако со временем они исчезали, теряя свою энергию на излучение малоамплитудных фононов.

Расчет теплоемкости при постоянном объеме, осредненного по времени давления и констант жесткости проводился при переходе системы от режима с хаотическими ДБ к тепловому равновесию. Было выявлено, что во время этого перехода теплоемкость, давление и константы жесткости увеличиваются. Отметим, что изменение давления при фиксированной площади расчетной ячейки связано с тепловым расширением решетки. На основании полученных результатов был сделан вывод, что ДБ снижают теплоемкость, тепловое расширение и жесткость решетки.

Ранее было показано, что такой же эффект хаотические ДБ оказывают на макроскопические свойства в нелинейных цепочках с жестким типом нелинейности [120; 170]. В случае нелинейности мягкого типа влияние хаотических ДБ на макроскопические свойства может быть противоположным, как это было показано в работе [170], где было проведено сравнение результатов для двух типов нелинейности. Таким образом, выводы, полученные для треугольной решетки β -ФПУ, имеющей ангармонизм жесткого типа, аналогичны тем, что были сделаны для цепочек с жесткой нелинейностью [120; 170].

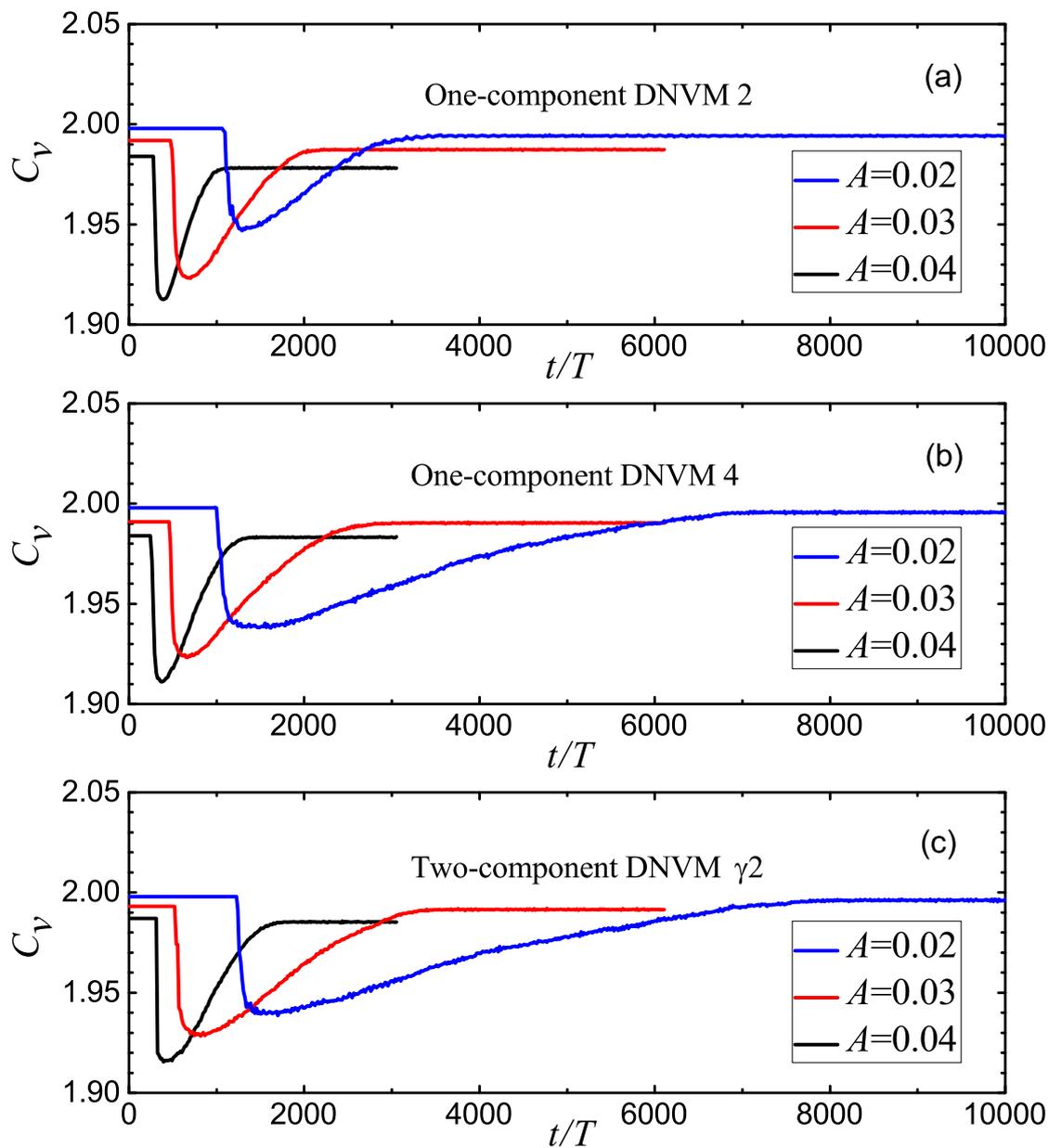


Рисунок 3.5 — Зависимость теплоемкости от времени для (а) ДНКМ 2, (б) ДНКМ 4 и (с) ДНКМ γ_2 . Синим, красным и черным цветом показаны результаты для $A = 0,02, 0,03$ и $0,04$ соответственно.

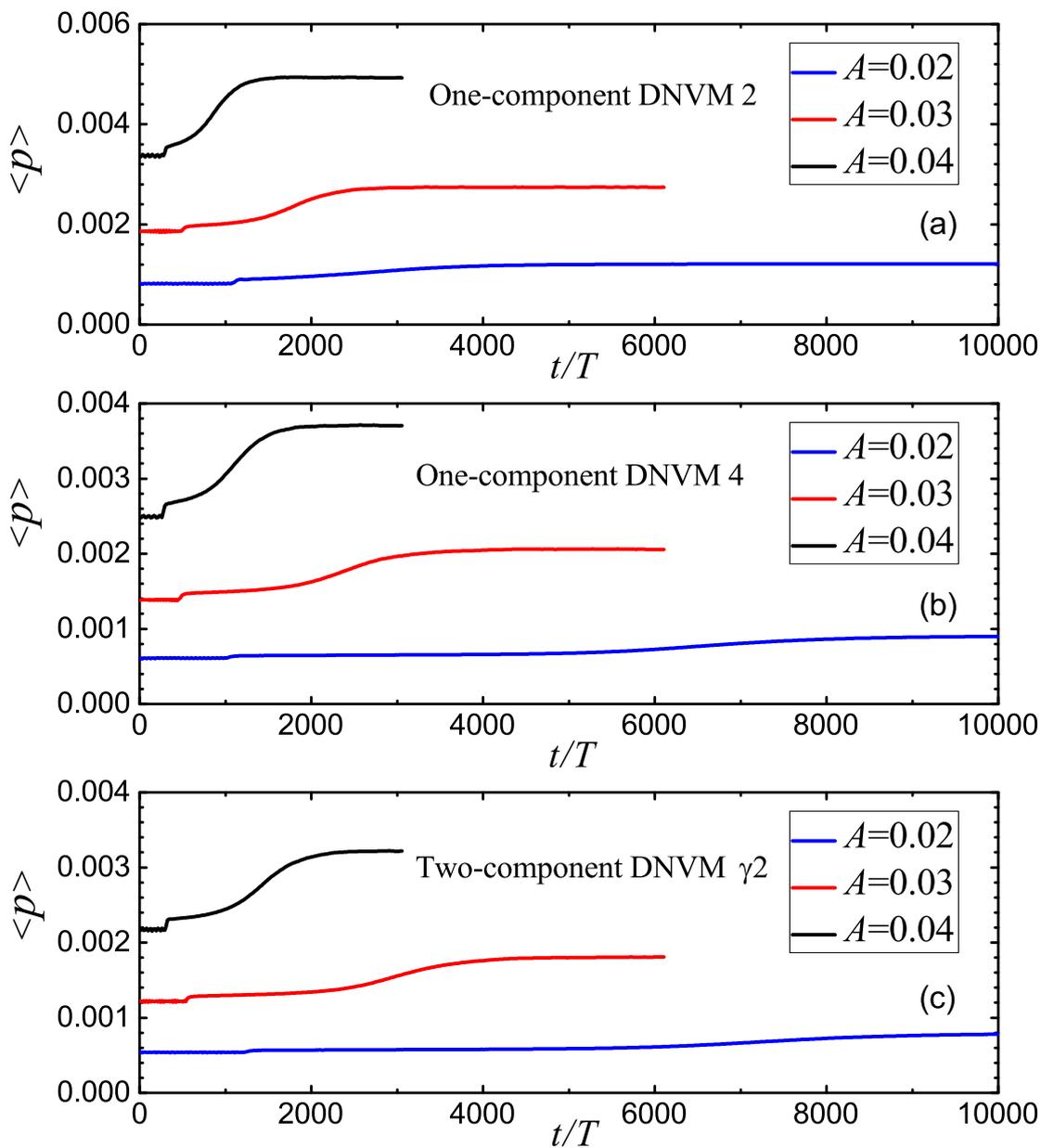


Рисунок 3.6 — Усредненное по периоду колебаний давление как функция времени для (а) ДНКМ 2, (б) ДНКМ 4 и (с) ДНКМ $\gamma 2$. Синим, красным и черным цветом показаны результаты для $A = 0,02, 0,03$ и $0,04$ соответственно.

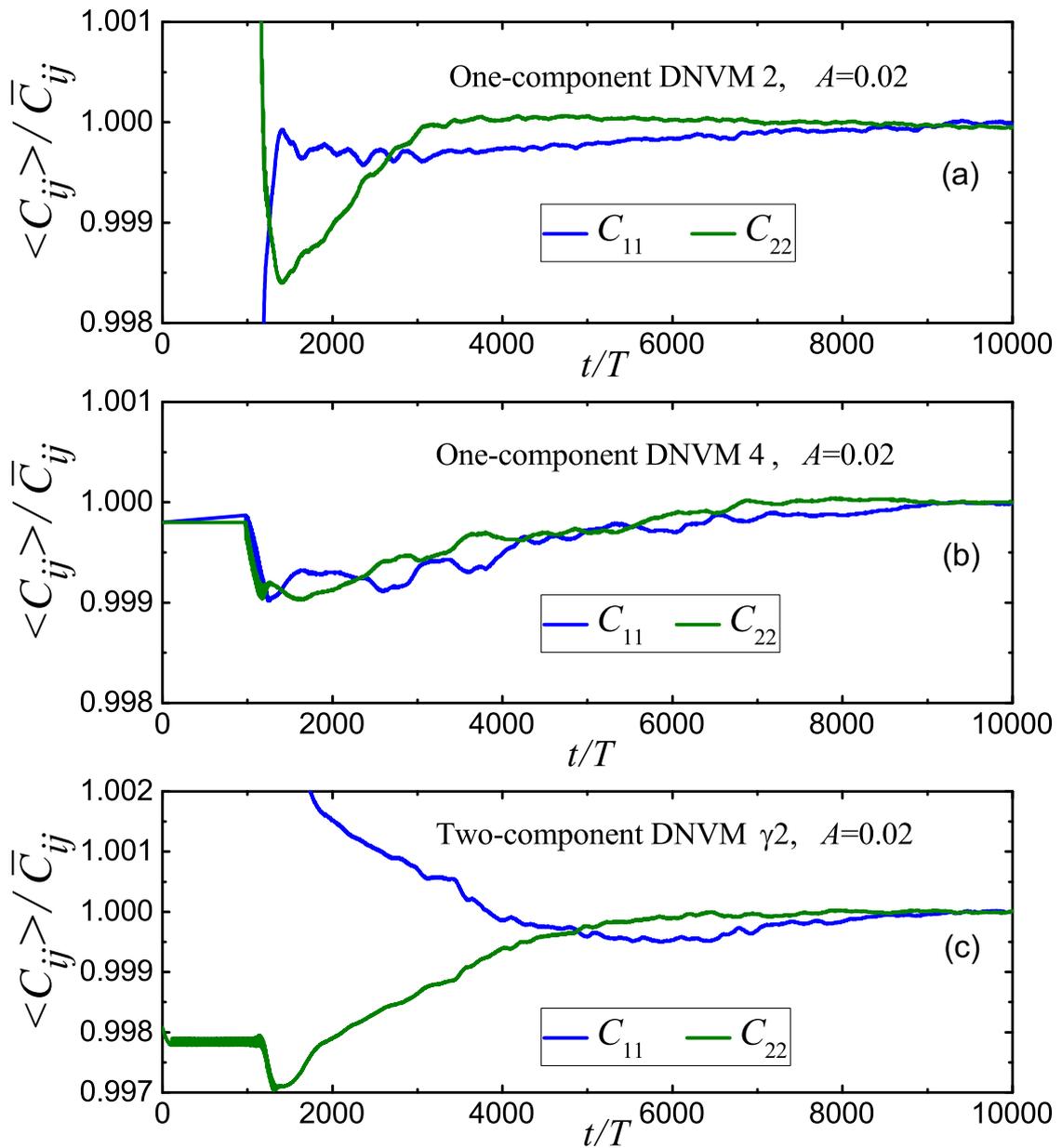


Рисунок 3.7 — Усредненные по периоду колебаний константы жесткости в зависимости от времени для (a) ДНКМ 2, (b) ДНКМ 4 и (c) ДНКМ $\gamma 2$. Константы жесткости отнесены к значениям в тепловом равновесии. Синяя и зеленая кривые показывают соответственно C_{11} и C_{12} . Результаты для $A = 0,02$.

3.2 Новые ДБ, основанные на ДНКМ треугольной решетки

Материалы данного раздела, были опубликованы в работе [55].

Предлагается практический подход к поиску (квази-) дискретных бризеров (ДБ) в треугольной решетке β -ФПУ. ДБ получаются путем наложения локализирующих функций на делокализованные нелинейные колебательные моды (ДНКМ), имеющие частоты выше фононного спектра решетки. Будут получены нульмерные и одномерные ДБ. Первые локализованы в обоих пространственных измерениях, а вторые - только в одном. Среди одномерных ДБ рассматриваются два семейства: первое основано на ДНКМ треугольной решетки, а второе - на ДНКМ цепочки. Можно ожидать, что предложенный систематический подход выявляет все возможные типы пространственно локализованных колебаний треугольной решетки β -ФПУ без локального потенциала, поскольку анализируются все ДНКМ с частотами выше фононной полосы. Однако справедливость данного утверждения требует тщательной проверки.

3.2.1 Описание модели и деталей моделирования

Двумерная треугольная решетка частиц с массой m , взаимодействующих с ближайшими соседями, рассматривается на плоскости x, y , см. рисунок 3.8. Расстояние между ближайшими узлами решетки равно h . Примитивная трансляционная ячейка решетки имеет векторы трансляций $(h, 0)$ и $(h/2, h\sqrt{3}/2)$. Блок моделирования содержит $N_x \times N_y$ примитивных трансляционных ячеек (или частиц). Значения N_x и N_y приведены ниже для каждой конкретной задачи. Частицы нумеруются индексами $i = 1, 2, \dots, N_x$ и $j = 1, 2, \dots, N_y$. Каждая частица, движущаяся в плоскости xy , имеет две степени свободы, компоненты вектора перемещения $(u_{i,j}(t), v_{i,j}(t))$, которые являются неизвестными функциями времени t . Компоненты вектора скорости частицы: $(\dot{u}_{i,j}, \dot{v}_{i,j})$, где точка означает дифференцирование по времени.

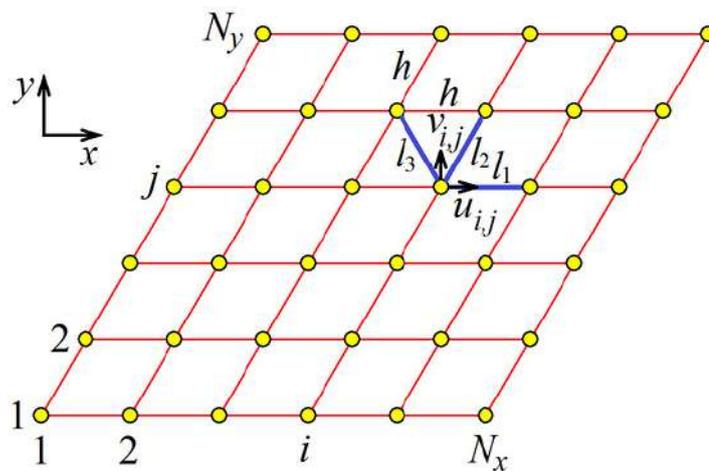


Рисунок 3.8 — Расчетная ячейка для треугольной решетки с шагом h , включающая $N_x \times N_y$ частиц, пронумерованных индексами $i = 1, 2, \dots, N_x$ и $j = 1, 2, \dots, N_y$. Положения равновесия частиц показаны желтыми кружками, а красные линии отделяют примитивные трансляционные ячейки. Частицы движутся в плоскости xy , имея две степени свободы - компоненты вектора перемещения $(u_{i,j}, v_{i,j})$. Каждая частица взаимодействует со своими шестью ближайшими соседями посредством потенциала β -ФПУ (3.2). Связи показаны только для одной трансляционной ячейки решетки, они обозначены как l_1, l_2 и l_3 .

Обращаясь к рисунку 3.8, можно выписать выражения для длин шести связей l_1, l_2, \dots, l_6 , соединяющих i, j -ю частицу с ее ближайшими соседями,

$$\begin{aligned}
l_1^2 &= (h + u_{i+1,j} - u_{i,j})^2 + (v_{i+1,j} - v_{i,j})^2, \\
l_2^2 &= \left(\frac{h}{2} + u_{i,j+1} - u_{i,j}\right)^2 + \left(\frac{h\sqrt{3}}{2} + v_{i,j+1} - v_{i,j}\right)^2, \\
l_3^2 &= \left(-\frac{h}{2} + u_{i-1,j+1} - u_{i,j}\right)^2 + \left(\frac{h\sqrt{3}}{2} + v_{i-1,j+1} - v_{i,j}\right)^2, \\
l_4^2 &= (-h + u_{i-1,j} - u_{i,j})^2 + (v_{i-1,j} - v_{i,j})^2, \\
l_5^2 &= \left(-\frac{h}{2} + u_{i,j-1} - u_{i,j}\right)^2 + \left(-\frac{h\sqrt{3}}{2} + v_{i,j-1} - v_{i,j}\right)^2, \\
l_6^2 &= \left(\frac{h}{2} + u_{i+1,j-1} - u_{i,j}\right)^2 + \left(-\frac{h\sqrt{3}}{2} + v_{i+1,j-1} - v_{i,j}\right)^2.
\end{aligned} \tag{3.20}$$

Гамильтониан модели выглядит следующим образом

$$\begin{aligned}
H &= \frac{m}{2} \sum_{i,j} (\dot{u}_{i,j}^2 + \dot{v}_{i,j}^2) \\
&+ \sum_{i,j} [\varphi(l_1 - h) + \varphi(l_2 - h) + \varphi(l_3 - h)],
\end{aligned} \tag{3.21}$$

где первая (вторая) сумма дает кинетическую (потенциальную) энергию расчетной ячейки, а l_1, l_2 и l_3 - длины трех связей в i, j -й примитивной трансляционной ячейке, определенных формулой (3.20).

Энергия связи, соединяющей две ближайшие частицы, описывается потенциалом β -ФПУ (3.2), где r - расстояние между частицами, k - линейная жесткость связи, β - коэффициент нелинейности. Положим $h = 1, k = 1$ (выбрав соответствующие единицы измерения расстояния и энергии) и $\beta = 10$. При этом значении β все эффекты нелинейности становятся заметными для смещений частиц порядка 0,1, как в типичных кристаллических решетках. Действительно, мы получаем ДБ с амплитудой порядка 0,1, когда линейный член порядка 0,01, а вклад члена четвертого порядка составляет около 0,001. Таким образом, вклад нелинейного члена составляет около 10%, что даёт заметный вклад в динамику решетки. Масса частиц, как упоминалось выше, принимается равной $m = 1$, и этого всегда можно добиться, выбрав единицу времени соответствующим образом.

Используя уравнение Гамильтона, из Гамильтониана (3.21) можно получить следующие уравнения движения

$$\begin{aligned}
m\ddot{u}_{i,j} = & (h + u_{i+1,j} - u_{i,j})[k(l_1 - h) + \beta(l_1 - h)^3]/l_1 \\
& + (\frac{h}{2} + u_{i,j+1} - u_{i,j})[k(l_2 - h) + \beta(l_2 - h)^3]/l_2 \\
& + (-\frac{h}{2} + u_{i-1,j+1} - u_{i,j})[k(l_3 - h) + \beta(l_3 - h)^3]/l_3 \\
& + (-h + u_{i-1,j} - u_{i,j})[k(l_4 - h) + \beta(l_4 - h)^3]/l_4 \\
& + (-\frac{h}{2} + u_{i,j-1} - u_{i,j})[k(l_5 - h) + \beta(l_5 - h)^3]/l_5 \\
& + (\frac{h}{2} + u_{i+1,j-1} - u_{i,j})[k(l_6 - h) + \beta(l_6 - h)^3]/l_6,
\end{aligned} \tag{3.22}$$

$$\begin{aligned}
m\ddot{v}_{i,j} = & (v_{i+1,j} - v_{i,j})[k(l_1 - h) + \beta(l_1 - h)^3]/l_1 \\
& + (\frac{h\sqrt{3}}{2} + v_{i,j+1} - v_{i,j})[k(l_2 - h) + \beta(l_2 - h)^3]/l_2 \\
& + (\frac{h\sqrt{3}}{2} + v_{i-1,j+1} - v_{i,j})[k(l_3 - h) + \beta(l_3 - h)^3]/l_3 \\
& + (v_{i-1,j} - v_{i,j})[k(l_4 - h) + \beta(l_4 - h)^3]/l_4 \\
& + (-\frac{h\sqrt{3}}{2} + v_{i,j-1} - v_{i,j})[k(l_5 - h) + \beta(l_5 - h)^3]/l_5 \\
& + (-\frac{h\sqrt{3}}{2} + v_{i+1,j-1} - v_{i,j})[k(l_6 - h) + \beta(l_6 - h)^3]/l_6.
\end{aligned} \tag{3.23}$$

Выпишем линеаризованные уравнения движения:

$$\begin{aligned}
m\ddot{u}_{i,j} = & k(u_{i-1,j} - 2u_{i,j} + u_{i+1,j}) \\
& + \frac{k}{4}[u_{i,j+1} - u_{i,j} + \sqrt{3}(v_{i,j+1} - v_{i,j})] \\
& + \frac{k}{4}[u_{i-1,j+1} - u_{i,j} - \sqrt{3}(v_{i-1,j+1} - v_{i,j})] \\
& + \frac{k}{4}[u_{i,j-1} - u_{i,j} + \sqrt{3}(v_{i,j-1} - v_{i,j})] \\
& + \frac{k}{4}[u_{i+1,j-1} - u_{i,j} - \sqrt{3}(v_{i+1,j-1} - v_{i,j})],
\end{aligned} \tag{3.24}$$

$$\begin{aligned}
m\ddot{v}_{i,j} = & \frac{k\sqrt{3}}{4}[u_{i,j+1} - u_{i,j} + \sqrt{3}(v_{i,j+1} - v_{i,j})] \\
& - \frac{k\sqrt{3}}{4}[u_{i-1,j+1} - u_{i,j} - \sqrt{3}(v_{i-1,j+1} - v_{i,j})] \\
& + \frac{k\sqrt{3}}{4}[u_{i,j-1} - u_{i,j} + \sqrt{3}(v_{i,j-1} - v_{i,j})] \\
& - \frac{k\sqrt{3}}{4}[u_{i+1,j-1} - u_{i,j} - \sqrt{3}(v_{i+1,j-1} - v_{i,j})].
\end{aligned} \tag{3.25}$$

Будем искать решение уравнений (3.24) и (3.25) в виде $u_{i,j} = F \exp[\mathbf{i}(qi + pj - \omega t)]$, $v_{i,j} = B \exp[\mathbf{i}(qi + pj - \omega t)]$, где \mathbf{i} - мнимая единица. Это позволит найти следующие дисперсионные соотношения

$$\omega_{1,2}^2(q,p) = \frac{-\xi \pm \sqrt{\xi^2 - 4\alpha\gamma}}{2\alpha}, \tag{3.26}$$

где

$$\begin{aligned}
\alpha &= 4m^2, \\
\xi &= 8mk(S + \cos q - 1), \\
\gamma &= 3k^2[4(\cos q - 1)S + S^2 - Q^2], \\
S &= \cos p + \cos(q - p) - 2, \\
Q &= \cos p - \cos(q - p).
\end{aligned} \tag{3.27}$$

Для обсуждения взаимосвязи между ДНКМ и ДБ важно знать границы фононного спектра, и, в частности, самую высокую частоту фононов. Для параметров модели, используемых в данном исследовании ($k = m = 1$), максимальная частота $\omega_{\max} = \sqrt{6}$ наблюдается в восьми точках первой зоны Бриллюэна, $(q,p) = (\pm\pi, \pm\pi)$, $(q,p) = (\pm\pi, 0)$, and $(q,p) = (0, \pm\pi)$.

При исследовании ДНКМ используются периодические граничные условия в обоих направлениях. При исследовании ДБ используются поглощающие граничные условия, поглощающие излучение, испускаемое на ранней стадии эволюции ДБ.

Шаг по времени для этих расчетов взят равным 0,002 единицы времени, при использовании симплектического интегратора Штормера шестого порядка точности [48].

Начальные условия будут детально описаны ниже, они состоят в задании начальных смещений частицам по определенным паттернам. Начальные скорости всех частиц всегда равны нулю. Поскольку все частицы имеют нулевую начальную скорость, полный импульс, переданный решетке, равен нулю. Более подробная информация о возбуждении одно- и двухкомпонентных ДНКМ представлена ниже.

3.2.2 Аналитические результаты

Поскольку наш подход к поиску новых типов квази-ДБ основан на наложении локализирующих функций на ДНКМ с частотами за пределами фононного спектра, важно показать, что ДНКМ, изучаемые в этой работе, имеют частоты выше фононного спектра. Согласно нашей предыдущей работе [203], таких ДНКМ три: однокомпонентные ДНКМ 2 и 4 и периодические двухкомпонентные ДНКМ γ_2 , см. рисунок 3.9(a)-(c) соответственно. В нашей предыдущей работе [203] это было продемонстрировано численно, но здесь мы подтверждаем численные результаты с помощью аналитики. Обозначения ДНКМ не отражают никакого физического смысла, они просто совпадают с обозначениями работы [203].

На рисунке 3.9 расстояние между ближайшими частицами равно h . Частицы в положениях равновесия показаны желтыми кружками. Красные линии показывают примитивные трансляционные ячейки решетки. Трансляционные ячейки ДНКМ включают четыре частицы и показаны синими линиями. Связи показаны только для одной трансляционной ячейки ДНКМ, они обозначены как l_k . Черные точки показывают начальные смещения частиц, используемые для возбуждения ДНКМ. На (a) и (b) все векторы смещения имеют длину A , в то время как на (c) горизонтальные и вертикальные смещения имеют величину A и B соответственно. На (a) и (c) все частицы смещаются при $t = 0$; на (b) одна из четырех частиц в трансляционной ячейке не смещается в момент $t = 0$

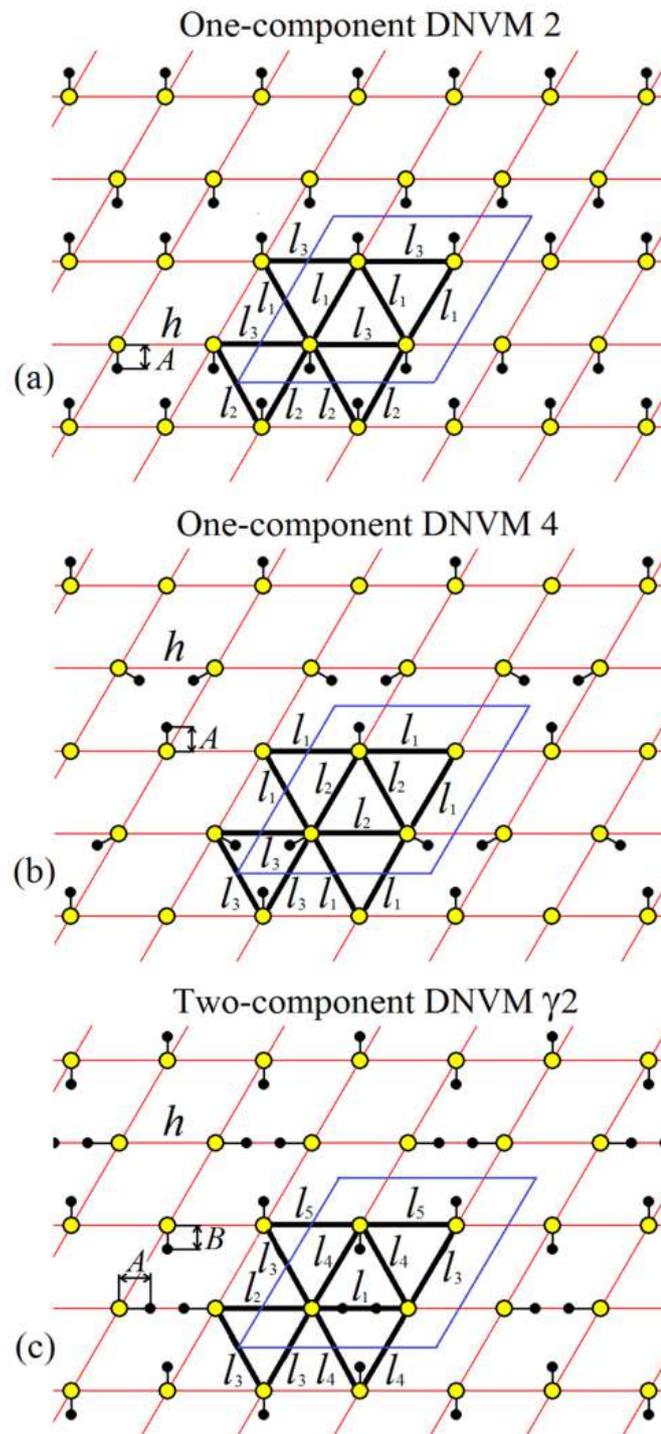


Рисунок 3.9 — Три ДНКМ треугольной решетки, рассматриваемые в данной работе: (a) однокомпонентная ДНКМ 2, (b) однокомпонентная ДНКМ 4 и (c) двухкомпонентная периодическая ДНКМ γ_2 [203].

и остается в покое при любом t . Каждая трансляционная ячейка включает двенадцать связей, показанных сплошными черными линиями. Все связи имеют длину l_i .

Для двухкомпонентной ДНКМ γ_2 очень важно найти взаимосвязь между двумя компонентами, приводящую к периодической во времени динамике. Это необходимо, потому что ДБ являются одночастотными локализованными модами, и для их возбуждения должны использоваться одночастотные ДНКМ, в то время как двухкомпонентные ДНКМ представляют собой суперпозицию двух мод с, вообще говоря, несоразмерными частотами. Напомним, что на рисунке 3.9 (с) горизонтальные (вертикальные) векторы начального смещения имеют длину A (B). При правильном выборе A и B двухкомпонентная ДНКМ γ_2 демонстрирует периодическое во времени движение [203].

Гамильтониан и уравнения движения для каждой из ДНКМ, изображенных на рисунке 3.9, представлены ниже.

Однокомпонентная ДНКМ 2

Мы начинаем с однокомпонентной ДНКМ 2, где все частицы в решетке находятся в движении, и все частицы в плотноупакованном ряду движутся синхронно, как показано на рисунке 3.9(а). Учитывая симметрию моды, можно записать гамильтониан однокомпонентной ДНКМ 2,

$$H = \frac{m\dot{a}^2}{2} + \varphi(l_1 - h) + \varphi(l_2 - h) + \varphi(l_3 - h), \quad (3.28)$$

where

$$l_1 = \sqrt{\left(\frac{h}{2}\right)^2 + \left(\frac{h\sqrt{3}}{2} + 2a\right)^2},$$

$$l_2 = \sqrt{\left(\frac{h}{2}\right)^2 + \left(\frac{h\sqrt{3}}{2} - 2a\right)^2},$$

$$l_3 = h.$$

Неизвестная функция $a(t)$ - это вертикальное смещение любой частицы от ее положения в решетке, а l_i ($i = 1, 2, 3$) - это расстояния между ближайшими точками решетки, см. рисунок 3.9(a).

Уравнение движения, соответствующее гамильтониану (3.28), имеет вид

$$\begin{aligned} m\ddot{a} = & -\frac{h\sqrt{3} + 4a}{l_1}[k(l_1 - h) + \beta(l_1 - h)^3] \\ & + \frac{h\sqrt{3} - 4a}{l_2}[k(l_2 - h) + \beta(l_2 - h)^3]. \end{aligned} \quad (3.29)$$

Разложение гамильтониана (3.28) до членов четвертой степени дает

$$H = \frac{m\dot{a}^2}{2} + 3ka^2 + \left(\frac{9\beta}{2} - \frac{11k}{4h^2}\right)a^4, \quad (3.30)$$

откуда можно вывести следующее кубическое уравнение движения:

$$m\ddot{a} = -6ka - \left(18\beta - \frac{11k}{h^2}\right)a^3. \quad (3.31)$$

Решение имеет вид $a(t) = A_1 \sin(\omega t) + A_2 \sin(3\omega t)$. Если предположить, что $A_1 \ll h$ и $A_2 \ll A_1$, амплитудно-частотная зависимость может быть найдена следующим образом:

$$\omega = \sqrt{\frac{6k}{m}} + \frac{3}{8\sqrt{6km}} \left(18\beta - \frac{11k}{h^2}\right) A_1^2. \quad (3.32)$$

Для параметров модели $m = h = k = 1$ и $\beta = 10$, уравнение (3.32) дает

$$\omega = \sqrt{6} + 25.87A_1^2. \quad (3.33)$$

Верхний край фононного спектра рассматриваемой решетки можно вычислить из выражения

$$\omega_{\max} = \sqrt{6} \approx 2.449, \quad (3.34)$$

Таким образом, частота ДНКМ 2 находится выше фононной полосы.

Полученное решение (3.32) предполагает малость перемещений, а точное решение может быть выражено через эллиптические функции.

Однокомпонентная ДНКМ 4

Гамильтониан однокомпонентной ДНКМ 4 имеет вид

$$H = \frac{3m\dot{a}^2}{4} + \frac{3}{2}\varphi(l_1 - h) + \frac{3}{4}[\varphi(l_2 - h) + \varphi(l_3 - h)], \quad (3.35)$$

where

$$\begin{aligned} l_1 &= \sqrt{h^2 + a^2}, \\ l_2 &= h + a\sqrt{3}, \\ l_3 &= h - a\sqrt{3}. \end{aligned}$$

Подобно однокомпонентной ДНКМ 2, $a(t)$ - это смещение движущейся частицы от ее решеточного положения, а l_i ($i = 1, 2, 3$) - это расстояние между ближайшими точками решетки, см. рисунок 3.9(b). Поскольку только три из четырех частиц в трансляционной ячейке находятся в движении, эффективная масса в гамильтониане равна $3m/4$.

Уравнение движения, соответствующее гамильтониану (3.35) имеют следующий вид

$$\begin{aligned} \frac{3}{4}m\ddot{a} &= -\frac{3a}{2l_1}[k(l_1 - h) + \beta(l_1 - h)^3] \\ &- \frac{3\sqrt{3}}{4}[k(l_2 - h) + \beta(l_2 - h)^3] \\ &+ \frac{3\sqrt{3}}{4}[k(l_3 - h) + \beta(l_3 - h)^3]. \end{aligned} \quad (3.36)$$

Разложение гамильтониана (3.35) до членов четвертой степени имеет вид

$$H = \frac{3m\dot{a}^2}{4} + \frac{9}{4}ka^2 + \left(\frac{3k}{16h^2} + \frac{27\beta}{8}\right)a^4. \quad (3.37)$$

Можно получить следующее кубическое уравнение движения, вытекающее из уравнения (3.37)

$$m\ddot{a} = -6ka - \left(\frac{k}{h^2} + 18\beta\right)a^3. \quad (3.38)$$

Решение уравнения 3.38 имеет вид $a(t) = A_1 \sin(\omega t) + A_2 \sin(3\omega t)$. Если предположить, что $A_1 \ll h$ и $A_2 \ll A_1$, частотно-амплитудная зависимость может быть найдена в виде:

$$\omega = \sqrt{\frac{6k}{m}} + \frac{3}{8\sqrt{6km}} \left(\frac{k}{h^2} + 18\beta \right) A_1^2. \quad (3.39)$$

Для $m = h = k = 1$ и $\beta = 10$, уравнение (3.39) сводится к

$$\omega = \sqrt{6} + 27.71 A_1^2. \quad (3.40)$$

Эта мода также имеет частоты выше верхнего края фононной полосы $\omega_{\max} = \sqrt{6}$.

Вместо приближенного решения уравнения (3.39) точное решение может быть дано в терминах эллиптических функций.

Периодическая по времени двухкомпонентная ДНКМ γ_2

Гамильтониан двухкомпонентной периодической по времени ДНКМ γ_2 имеет вид

$$\begin{aligned} H &= \frac{m}{4}(\dot{a}^2 + \dot{b}^2) + \frac{1}{4}\varphi(l_1 - h) + \frac{1}{4}\varphi(l_2 - h) \\ &+ \varphi(l_3 - h) + \varphi(l_4 - h) + \frac{1}{2}\varphi(l_5 - h), \end{aligned} \quad (3.41)$$

where

$$l_1 = h - 2a,$$

$$l_2 = h + 2a,$$

$$l_3 = \sqrt{\left(\frac{h}{2} + a\right)^2 + \left(\frac{h\sqrt{3}}{2} + b\right)^2},$$

$$l_4 = \sqrt{\left(\frac{h}{2} - a\right)^2 + \left(\frac{h\sqrt{3}}{2} - b\right)^2},$$

$$l_5 = \sqrt{h^2 + (2b)^2}.$$

Неизвестные функции $a(t)$ и $b(t)$ - это горизонтальные и вертикальные смещения частиц от их решеточных положений, а l_i ($i = 1, 2, \dots, 5$) - расстояние между ближайшими соседями решетки, см. рисунок 3.9(с). Эффективная масса равна $m/2$, потому что эта мода является суперпозицией двух мод, в каждой из которых только половина частиц движется [203].

Уравнения движения, соответствующие гамильтониану (3.41), имеют вид

$$\begin{aligned} \frac{m}{2}\ddot{a} &= \frac{1}{2}[k(l_1 - h) + \beta(l_1 - h)^3] \\ &- \frac{1}{2}[k(l_2 - h) + \beta(l_2 - h)^3] \\ &+ \frac{h - 2a}{2l_3}[k(l_3 - h) + \beta(l_3 - h)^3] \\ &- \frac{(h + 2a)}{2l_4}[k(l_4 - h) + \beta(l_4 - h)^3], \end{aligned} \quad (3.42)$$

$$\begin{aligned} \frac{m}{2}\ddot{b} &= \frac{\sqrt{3}h - 2b}{2l_3}[k(l_3 - h) + \beta(l_3 - h)^3] \\ &- \frac{\sqrt{3}h + 2b}{2l_4}[k(l_4 - h) + \beta(l_4 - h)^3] \\ &- \frac{b}{l_5}[k(l_5 - h) + \beta(l_5 - h)^3]. \end{aligned} \quad (3.43)$$

Разложение гамильтониана (3.41) до членов четвертой степени дает

$$\begin{aligned} H &= \frac{m}{4}(\dot{a}^2 + \dot{b}^2) + ka^2 + \frac{k}{4}(a + \sqrt{3}b)^2 \\ &+ \frac{k}{h^2}b^4 + 2\beta a^4 + \frac{\beta}{32}(a + \sqrt{3}b)^4 \\ &- \frac{k}{64h^2}(3a^4 - 26a^2b^2 + 11b^4 - 12\sqrt{3}ab^3 + 28\sqrt{3}a^3b). \end{aligned} \quad (3.44)$$

Кубические уравнения движения, соответствующие гамильтониану (3.44), следующие:

$$\begin{aligned} m\ddot{a} &= -5ka - \sqrt{3}kb - 16\beta a^3 - \frac{\beta}{4}(a + \sqrt{3}b)^3 \\ &+ \frac{k}{8h^2}(3a^3 + 21\sqrt{3}a^2b - 13ab^2 - 3\sqrt{3}b^3), \end{aligned} \quad (3.45)$$

$$\begin{aligned}
m\ddot{b} = & -\sqrt{3}ka - 3kb - \frac{8}{h^2}kb^3 - \frac{\beta\sqrt{3}}{4}(a + \sqrt{3}b)^3 \\
& + \frac{k}{8h^2}(7\sqrt{3}a^3 - 13a^2b - 9\sqrt{3}ab^2 + 11b^3).
\end{aligned} \tag{3.46}$$

Связь между компонентами ДНКМ a и b находится из условия, что линеаризованные уравнения движения (3.45, 3.46) имеют периодическое по времени решение. В эти уравнения подставляется следующее выражение:

$$a = pb, \tag{3.47}$$

где p - неизвестная постоянная. В результате получаем

$$m\ddot{a} = -\omega_a^2 a, \quad m\ddot{b} = -\omega_b^2 b, \tag{3.48}$$

где $\omega_a^2 = (5 + \sqrt{3}/p)k$ и $\omega_b^2 = (3 + \sqrt{3}p)k$. Частоты малоамплитудных колебаний ω_a и ω_b равны, если $p = (1 \pm 2)/\sqrt{3}$. Корень со знаком минус дает моду с частотой, равной $\omega_a = \omega_b = \sqrt{2k}$ (периодическая по времени ДНКМ γ_1 , см. работу [203]), частота которой находится в пределах фононного спектра. Далее рассматривается корень с положительным знаком, т.е. $p = \sqrt{3}$. Он определяет моду с частотой $\omega_a = \omega_b = \sqrt{6k}$ (периодическая по времени ДНКМ γ_2 , см. [203]), которая совпадает с верхним краем фононной полосы.

При малых амплитудах A и B выполняется $p = \sqrt{3}$. При таком соотношении амплитуд две компоненты ДНКМ γ_2 синхронизируются, и возникает периодическое во времени движение. Когда амплитуды велики, p больше не является постоянной, а зависит от амплитуды ДНКМ A . Таким образом, уравнение (3.47) принимает вид

$$A = p(A)B. \tag{3.49}$$

На рисунке 3.10 показана зависимость p от A , найденная численно, при которой ДНКМ γ_2 становится периодической по времени. На вставке показаны коэффициенты полиномиальной аппроксимации численных данных по методу наименьших квадратов.

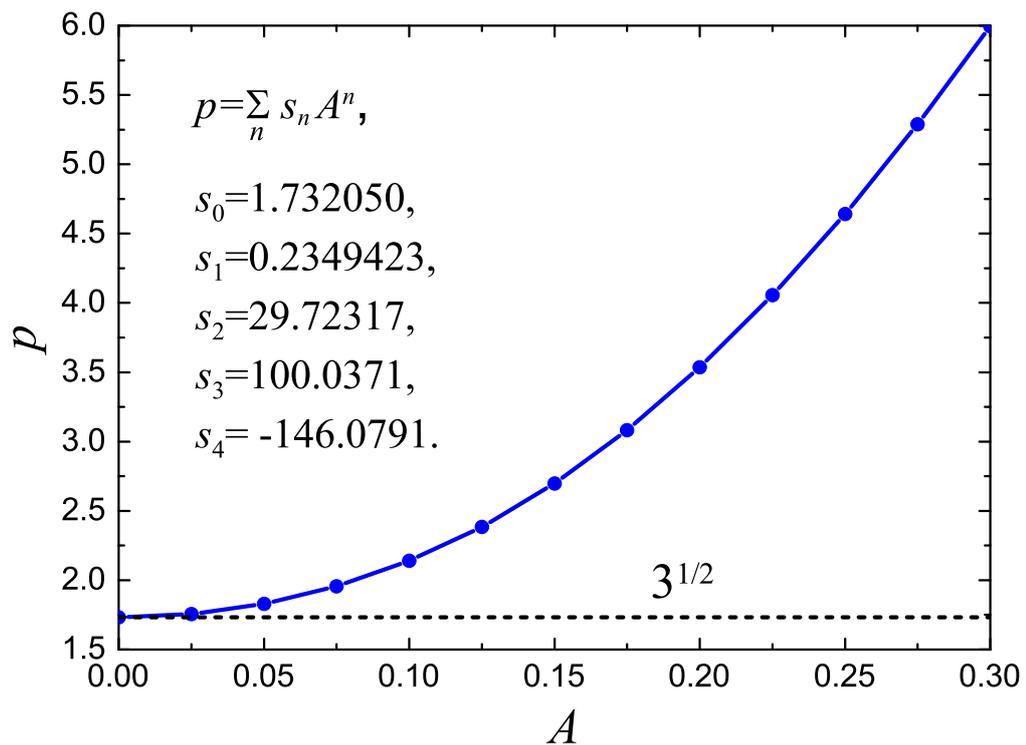


Рисунок 3.10 — Зависимость p от A в уравнении (3.49), когда двухкомпонентная ДНКМ γ_2 становится периодической по времени. На вставке показаны коэффициенты полиномиальной аппроксимации численных данных методом наименьших квадратов. Горизонтальная пунктирная линия показывает условие синхронизации $p = \sqrt{3}$, справедливое для малых A .

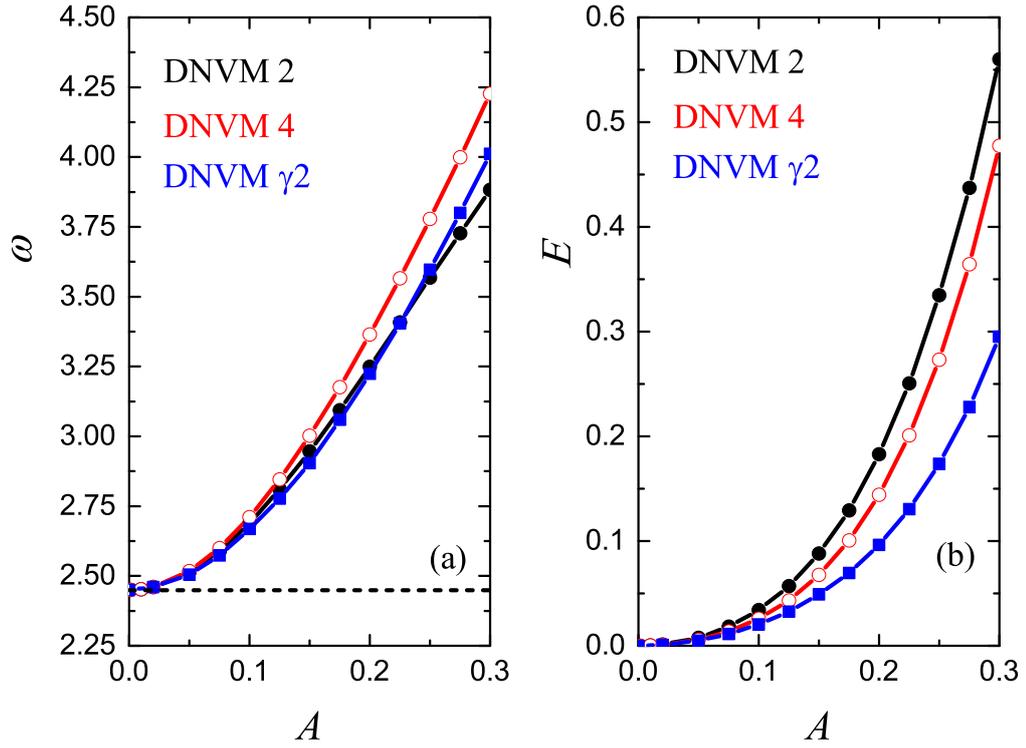


Рисунок 3.11 — (a) Частота ω и (b) энергия, приходящаяся на одну частицу E как функции амплитуды для ДНКМ 2 (черные точки), ДНКМ 4 (красные точки) и ДНКМ $\gamma 2$ (синие квадраты). Горизонтальная пунктирная линия на (a) указывает верхний край фононного спектра, $\omega_{\max} = \sqrt{6} \approx 2.449$ [203].

3.2.3 Свойства ДНКМ

Некоторые свойства трех исследованных ДНКМ треугольной решетки представлены на рисунках 3.11, 3.12, 3.13 и 3.14. Черные точки, красные кружки и синие квадраты относятся к ДНКМ 2, ДНКМ 4 и ДНКМ $\gamma 2$, соответственно. Для двухкомпонентной ДНКМ $\gamma 2$ уравнение (3.49) и рисунок 3.10 используются для вычисления амплитуды B при выбранной амплитуде A . Расчетная ячейка включает $N_x \times N_y = 4 \times 4$ частиц. Начальные смещения частиц задаются согласно рисунку 3.9. Начальные скорости частиц равны нулю.

Рисунок 3.11(a) показывает частотно-амплитудные зависимости для рассматриваемых ДНКМ. Верхний край фононной полосы, показанный горизонтальной пунктирной линией, указывает на то, что все три ДНКМ имеют частоты выше фононного спектра. Как показано на рисунке 3.11(b), энергия, приходящаяся на одну частицу, увеличивается с амплитудой ДНКМ как $E \sim A^2$.

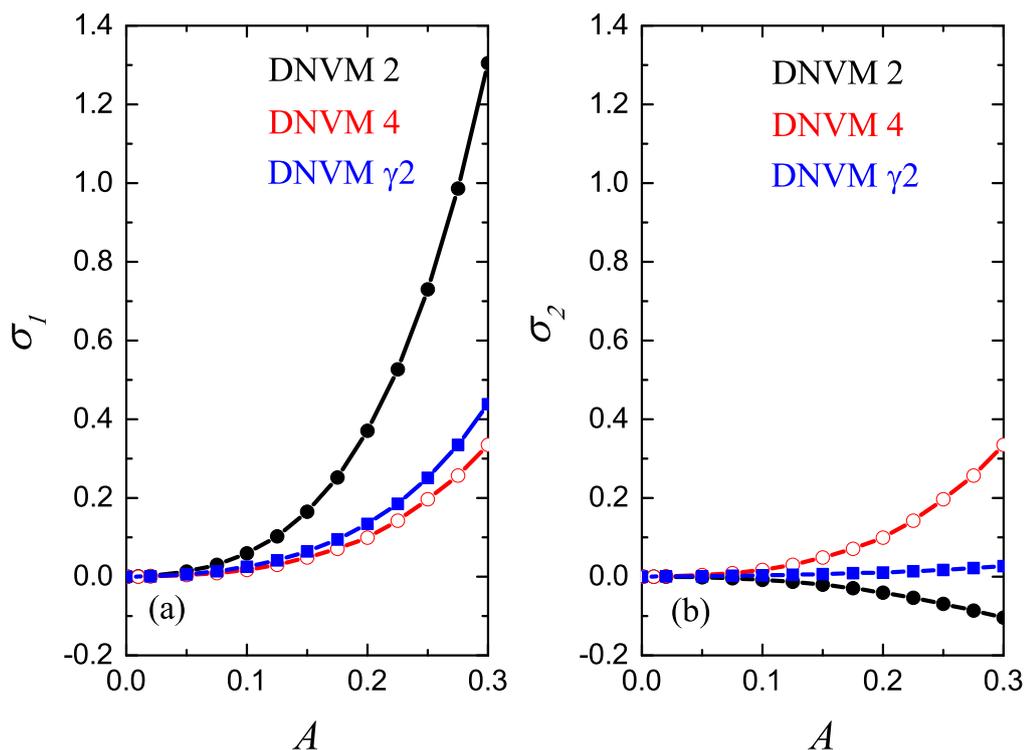


Рисунок 3.12 — (а,б) Главные напряжения σ_1 и σ_2 соответственно как функции амплитуды ДНКМ для ДНКМ 2 (черные точки), ДНКМ 4 (красные точки), и ДНКМ $\gamma 2$ (синие квадраты).

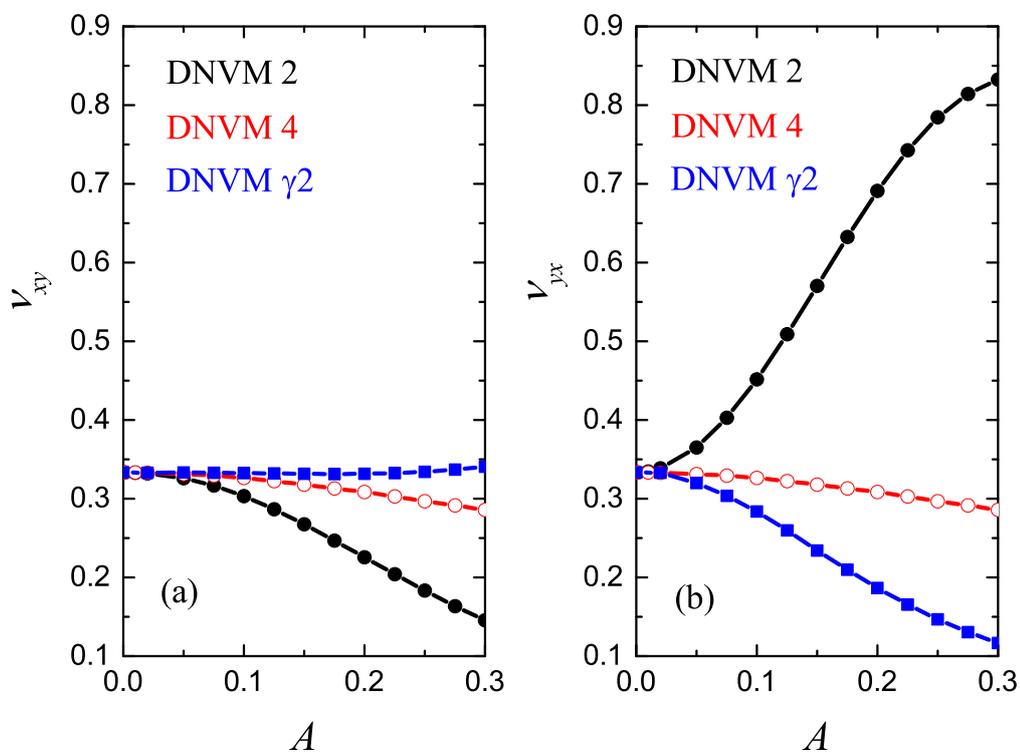


Рисунок 3.13 — (а,б) Коэффициенты Пуассона ν_{xy} и ν_{yx} соответственно как функции амплитуды ДНКМ для ДНКМ 2 (черные точки), ДНКМ 4 (красные точки), и ДНКМ $\gamma 2$ (синие квадраты).

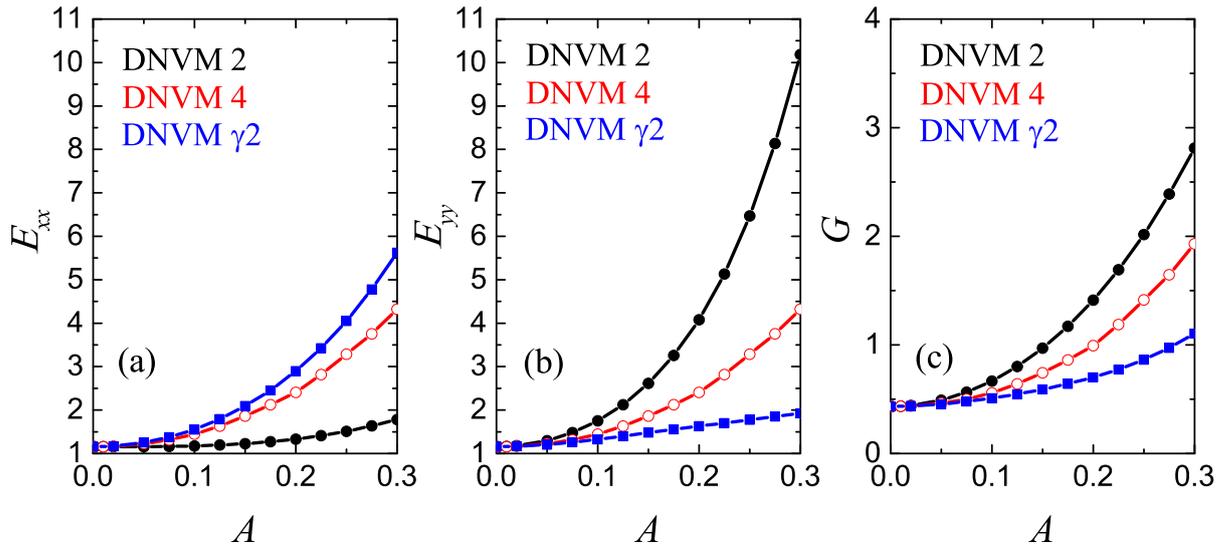


Рисунок 3.14 — (a,b) Модули Юнга E_{xx} и E_{yy} соответственно и (c) модуль сдвига G решетки как функции амплитуды ДНКМ для ДНКМ 2 (черные точки), ДНКМ 4 (красные точки) и ДНКМ $\gamma 2$ (синие квадраты).

Главные напряжения σ_1 и σ_2 как функции амплитуды ДНКМ показаны на рисунке 3.12(a) и (b) соответственно. Для ДНКМ 4 $\sigma_1 = \sigma_2$, поскольку возбуждение этой моды не влияет на механическую изотропию решетки. Для ДНКМ $\gamma 2$ напряжение σ_2 почти равно нулю, а для ДНКМ 2 даже отрицательно (растяжение).

Инженерные константы упругости рассчитывались по выражениям (3.18) а главные напряжения по (3.15).

На рисунке 3.13(a) и (b) коэффициенты Пуассона ν_{xy} и ν_{yx} , соответственно, показаны как функции амплитуды ДНКМ. Опять же, для изотропной ДНКМ 4 $\nu_{xy} = \nu_{yx}$. Две другие моды разрушают изотропию треугольной решетки.

Как видно из рисунка 3.14, возбуждение любой ДНКМ приводит к увеличению жесткости решетки, поскольку оба модуля Юнга E_{xx} и E_{yy} и модуль сдвига G растут с увеличением амплитуды моды. Только для изотропной ДНКМ 4 $E_{xx} = E_{yy}$. Для ДНКМ 2 выполняется соотношение $E_{yy} > E_{xx}$, потому что в этой моде частицы колеблются в направлении оси y . Для ДНКМ $\gamma 2$ имеем $E_{xx} > E_{yy}$, потому что здесь амплитуда колебаний частиц, движущихся вдоль оси x , больше, чем у частиц, движущихся вдоль оси y .

3.2.4 Дискретные бризеры

ДБ получаются путем наложения локализирующих функций на три рассматриваемых ДНКМ треугольной решетки, описанных в разделе 3.2.3. Параметры локализирующих функций выбираются методом проб и ошибок так, чтобы получить локализованную колебательную моду с максимальным временем жизни. Поиск более точных начальных условий для возбуждения локализованных мод отложен на будущее.

Есть два основных параметра функции локализации: первый - это степень пространственной локализации, которая должна быть найдена для данной амплитуды ДНКМ, а второй - положение центра локализирующей функции по отношению к решетке. Важность второго параметра была продемонстрирована Пейджем [36], который обнаружил ДБ центрированный между узлами цепочки в дополнение к ДБ с центром в узле решетки, описанный в работе Сиверса и Такено [15].

Для каждого ДБ, описанного в разделах 3.2.4 и 3.3, приводится по одному примеру, обычно для амплитуды ДНКМ 0,1 или 0,2. Для выбранной амплитуды ДНКМ и расположения центра ДБ, степень пространственной локализации определяется методом проб и ошибок, чтобы получить ДБ с максимальным временем жизни. Чтобы найти параметры локализации ДБ для другой амплитуды ДНКМ, следует иметь в виду общую тенденцию, согласно которой ДБ меньшей амплитуды менее локализованы и в пределе исчезающе малой амплитуды трансформируются в делокализованные фононы малой амплитуды. Другой важной тенденцией является то, что неустойчивость нестабильных ДБ развивается быстрее при большей амплитуде ДНКМ. Это означает, что неустойчивые ДБ с меньшей амплитудой имеют большее время жизни.

В следующих параграфах описаны нульмерные ДБ, локализованные в обоих пространственных измерениях, затем представлены одномерные ДБ, локализованные только в одном измерении. Начальные условия, используемые для возбуждения стоячих ДБ, предполагают, что все частицы имеют нулевую начальную скорость и, таким образом, полный импульс, переданный решетке, равен нулю.

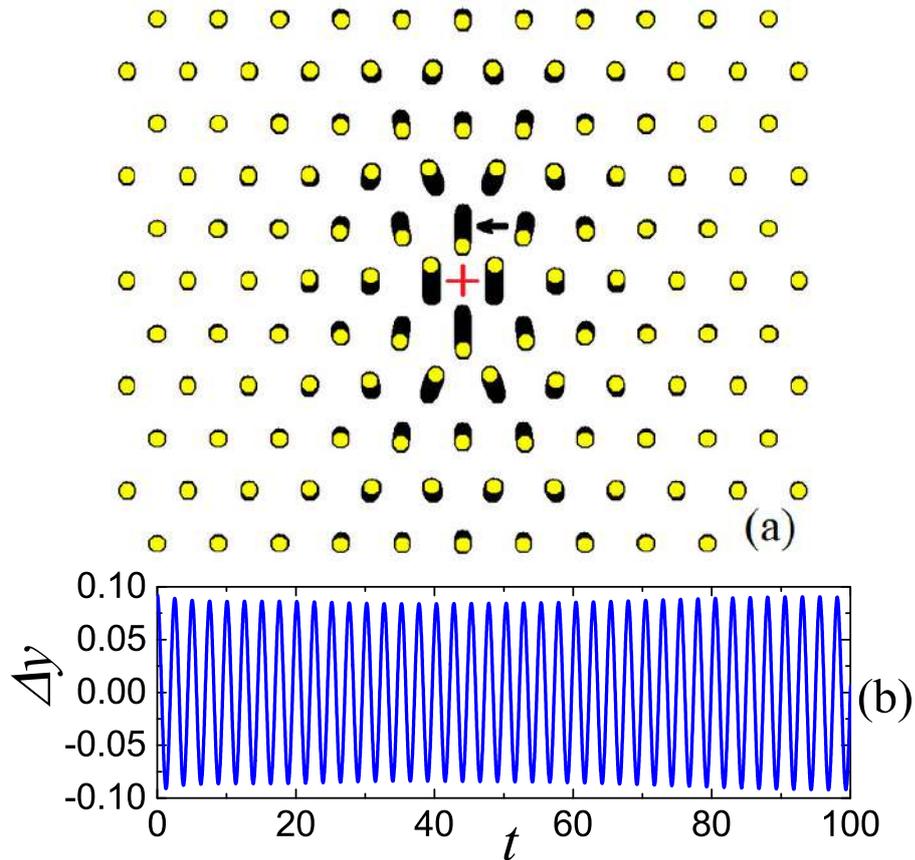


Рисунок 3.15 — (а) ДБ на основе ДНКМ 2 с центром между двумя частицами в горизонтальном плотноупакованном ряду (показан красным крестиком).

Траектории частиц показаны черным. (b) Вертикальное смещение как функция времени для частицы, обозначенной стрелкой на (а). ДБ был возбужден с использованием функции локализации (3.50) с $A = 0.1$, $\beta_x = 0.8$ и $\beta_y = 0.7$. Смещения частиц увеличены в 3 раза.

При исследовании нульмерных ДБ размер расчетной ячейки составляет $N_x \times N_y = 256 \times 256$, и используются поглощающие граничные условия для улавливания излучения, испускаемого на ранней стадии эволюции ДБ. Одномерные ДБ, локализованные в вертикальном (горизонтальном) направлении, исследуются в ячейке с частицами $N_x \times N_y = 8 \times 512$ ($N_x \times N_y = 512 \times 8$). На концах вытянутой ячейки накладываются поглощающие граничные условия.

Нульмерные ДБ на основе ДНКМ 2

Для упругоанизотропной ДНКМ 2 функция локализации берется в одном из возможных видов:

$$A_{ij} = \frac{A}{\cosh[\beta_x(x_{ij} - x_0)] \cosh[\beta_y(y_{ij} - y_0)]}, \quad (3.50)$$

где A_{ij} - величина начального смещения частицы, имеющей координаты (x_{ij}, y_{ij}) , A - амплитуда ДНКМ 2, параметры β_x и β_y определяют степень пространственной локализации ДБ в направлениях x и y соответственно, а (x_0, y_0) - координаты центра ДБ.

Пример ДБ на основе ДНКМ 2 показан на рисунке 3.15. Параметры функции локализации (3.50): $A = 0.1$, $\beta_x = 0.8$ и $\beta_y = 0.7$. Центр функции локализации находится между двумя частицами в горизонтальном плотноупакованном ряду (отмечен красным крестиком). Нам не удалось получить долговечного ДБ с другим расположением центра функции локализации. Рисунок 3.15(а) показывает траектории частиц. Смещения частиц увеличены в 3 раза. Вертикальное смещение частицы, указанной стрелкой, показано как функция времени на рисунке 3.15(б). ДБ имеет частоту $\omega = 1.019\omega_{\max}$, где $\omega_{\max} = \sqrt{6}$ - максимальная фононная частота.

Начальные условия, используемые для возбуждения ДБ, неточны, и часть энергии, первоначально переданной в локальную область решетки, испускается, после чего, устанавливается определенный характер колебаний ДБ. Представленный ДБ имеет относительно короткий срок жизни, около 150 единиц времени, по истечении которого он разрушается из-за неустойчивости. ДБ, возбуждаемые с меньшей амплитудой A , имеют большее время жизни и частоту, более близкую к ω_{\max} .

Нульмерные ДБ на основе ДНКМ 4

ДНКМ 4 имеет ось симметрии шестого порядка, как и треугольная решетка. Треугольная решетка упруго изотропна, что означает, что длинноволновые фононы имеют групповую скорость, не зависящую от направления. Имея это в виду, для ДНКМ 4 используется функция локализации с радиальной симметрией:

$$A_{ij} = \frac{A}{\cosh(\beta|\mathbf{r}_{ij} - \mathbf{r}_0|)}, \quad (3.51)$$

где A_{ij} - величина начального смещения частицы, имеющей радиус-вектор $\mathbf{r}_{ij} = (x_{ij}, y_{ij})$, A - амплитуда ДНКМ 4, параметр β определяет степень пространственной локализации ДБ, а \mathbf{r}_0 - радиус-вектор центра локализующей функции.

Примеры ДБ приведены на рисунке 3.16 с различным расположением центра локализующей функции (отмечены красными крестиками). Центр расположен на покоящейся частице на рисунке 3.16(а), в середине треугольника, образованного движущимися частицами на рисунке 3.16(б), и в решеточном положении движущейся частицы на рисунке 3.16(с). ДБ имеют оси симметрии шестого, третьего и второго порядка соответственно на трёх панелях рисунка 3.16. Параметры функции локализации (3.51) для (а-с): $\beta = 0.830$, $\beta = 0.730$ и $\beta = 0.838$ соответственно. Амплитуда ДНКМ во всех случаях составляет $A = 0,1$. Для наглядности смещения частиц увеличены в 3 раза. При выбранных параметрах ДБ практически не излучают энергию и имеют очень большое время жизни. Смещение частицы, колеблющейся с наибольшей амплитудой, как функция времени показано на рисунке 3.17(а-с) для ДБ, представленных на рисунке 3.16(а-с) соответственно. ДБ имеют частоты $\omega = 1.008\omega_{\max}$, $\omega = 1.018\omega_{\max}$ и $\omega = 1.017\omega_{\max}$ соответственно, где $\omega_{\max} = \sqrt{6}$.

ДБ с осью симметрии шестого порядка, показанной на рисунке 3.16(а), ранее наблюдался в треугольных решетках Морзе с локальным гармоническим потенциалом [13] и без локального потенциала [125]. Другие ДБ, насколько нам известно, ранее описаны не были.

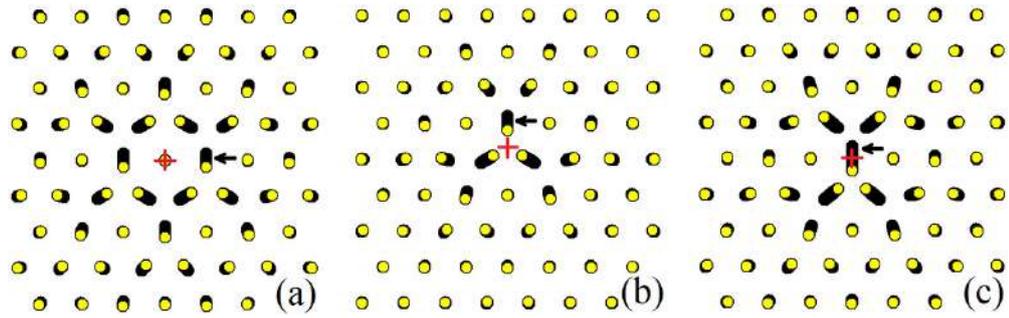


Рисунок 3.16 — ДБ, полученные наложением функции локализации (3.51) на ДНКМ 4 с амплитудой $A = 0.1$. В зависимости от расположения центра локализирующей функции \mathbf{r}_0 , показанного красными крестами, получаются ДБ с осью симметрии (а) шестого, (б) третьего и (с) второго порядка. Устойчивые долгоживущие колебания наблюдаются для (а) $\beta = 0.830$, (б) $\beta = 0.730$ и (с) $\beta = 0.838$ (см. рисунок 3.17). Траектории частиц показаны черным. Смещения частиц увеличены в 3 раза.

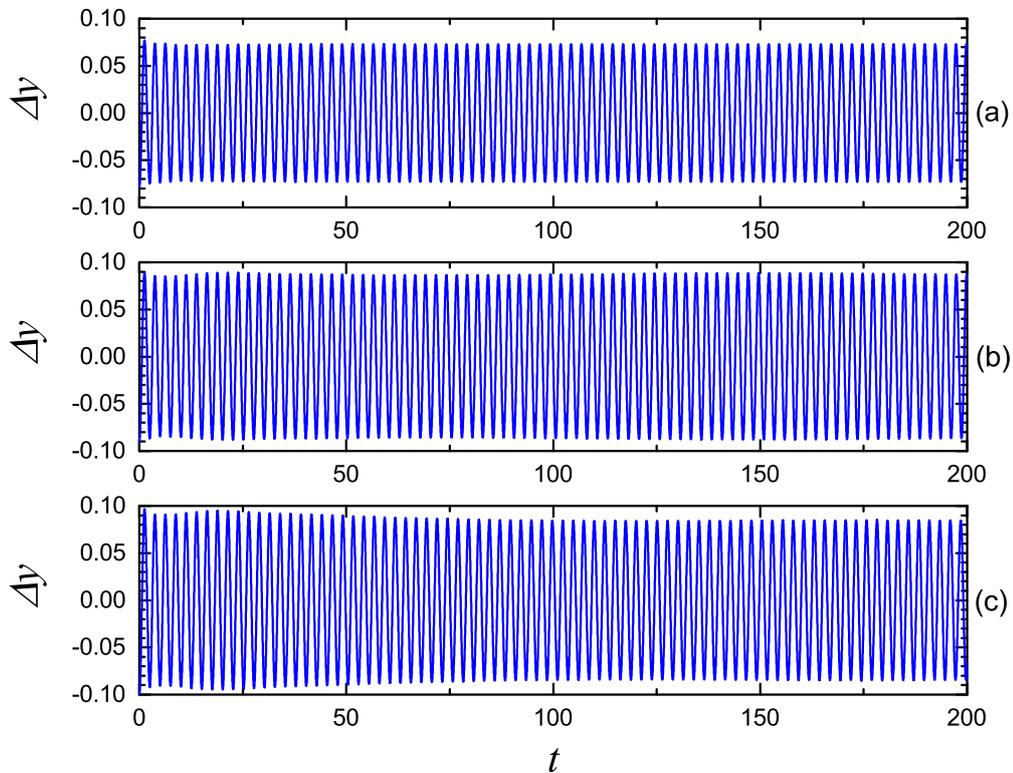


Рисунок 3.17 — (а-с) Смещения вдоль оси y частиц, отмеченных стрелками на рисунке 3.16(а-с), соответственно.

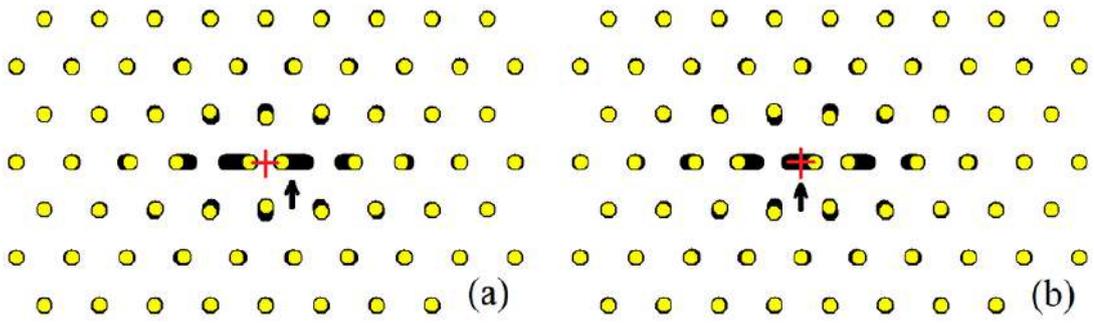


Рисунок 3.18 — ДБ на основе ДНКМ γ_2 . ДБ были получены путем наложения функции локализации (3.50) на ДНКМ γ_2 с амплитудой $A = 0.2$. Центр функции локализации показан красными крестиками. На (а) он расположен между двумя частицами, колеблющимися по горизонтали, а на (б), на частице, колеблющейся по горизонтали. Устойчивые долгоживущие колебания в обоих случаях наблюдаются при $\beta_x = 1.35$, $\beta_y = 1.10$. Траектории частиц показаны черным. Смещения частиц увеличены в 1,5 раза.

Нульмерные ДБ на основе ДНКМ γ_2

Поскольку ДНКМ γ_2 является анизотропной, используется функция локализации (3.50). Два примера ДБ, полученных из периодической по времени ДНКМ γ_2 , представлены на рисунке 3.18. Они были получены помещением центра функции локализации между горизонтально колеблющимися частицами и на горизонтально колеблющейся частице, соответственно. В обоих случаях $A = 0,2$, $\beta_x = 1,35$ и $\beta_y = 1,10$.

Перемещения частиц, отмеченных стрелками на рисунке 3.18(а,б), вдоль оси x показаны как функции времени на рисунке 3.19(а,б) соответственно. ДБ имеют очень большое время жизни и не проявляют признаков неустойчивости. Их частоты равны $\omega = 1.069\omega_{\max}$ и $\omega = 1.072\omega_{\max}$ соответственно.

В предыдущих работах [13; 117] было показано, что ДБ на основе ДНКМ γ_2 являются долгоживущими и могут перемещаться вдоль плотноупакованных рядов частиц и даже выдерживать столкновения друг с другом [117], сохраняя свою индивидуальность. Здесь мы не рассматриваем движение ДБ.

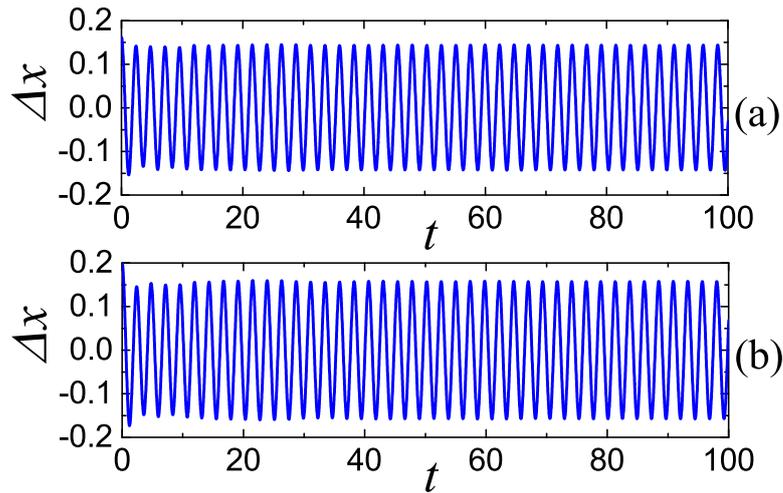


Рисунок 3.19 — (a,b) Временные зависимости смещения по оси x частиц, отмеченных стрелками на рисунке 3.18(a,b), соответственно.

Одномерные ДБ на основе ДНКМ треугольной решетки

Одномерные горизонтальные ДБ (локализованные в вертикальном направлении и делокализованные в горизонтальном направлении) возбуждаются путем наложения следующей функции локализации на ДНКМ:

$$A_{ij} = \frac{A}{\cosh[\beta_y(y_{ij} - y_0)]}, \quad (3.52)$$

где A_{ij} - величина начального смещения частицы, имеющей y -координату y_{ij} , A - амплитуда ДНКМ, параметр β_y определяет степень пространственной локализации ДБ, а y_0 - это y -координата максимума функции локализации.

Аналогичным образом одномерные вертикальные ДБ (локализованные только в горизонтальном направлении) возбуждаются путем наложения на ДНКМ локализирующей функции вида

$$A_{ij} = \frac{A}{\cosh[\beta_x(x_{ij} - x_0)]}, \quad (3.53)$$

где A_{ij} - величина начального смещения частицы, имеющей x -координату x_{ij} , A - амплитуда ДНКМ, параметр β_x определяет степень пространственной локализации ДБ, а x_0 - это x -координата максимума локализирующей функции.

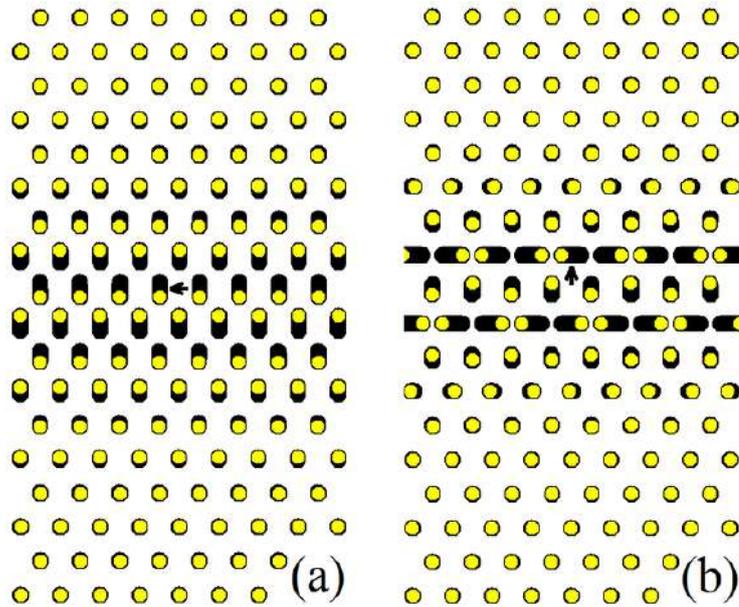


Рисунок 3.20 — Одномерные горизонтальные ДБ на основе (а) ДНКМ 2 и (б) ДНКМ $\gamma 2$, полученные наложением функции локализации (3.52) на ДНКМ с амплитудой $A = 0.1$. Долгоживущие колебания наблюдаются при (а) $\beta_x = 0.65$ и (б) $\beta_x = 0.79$. Траектории частиц показаны черным. Смещения частиц увеличены в 3 раза.

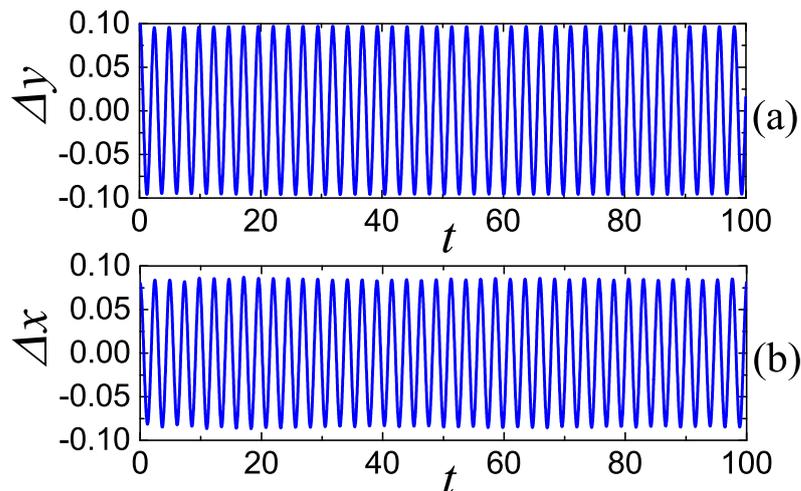


Рисунок 3.21 — (а,б) Смещения частиц, указанных стрелками на рисунке 3.20(а,б) соответственно, как функции времени. На (а) показано смещение вдоль оси y , а на (б) вдоль оси x .

Примеры одномерных горизонтальных ДБ показаны на рисунке 3.20. Они получены путем наложения функции локализации (3.52) на (а) ДНКМ 2 и (b) ДНКМ $\gamma 2$. В обоих случаях делокализованные моды имеют амплитуду $A = 0,1$. Функция локализации размещается так, чтобы ее максимум находился между двумя горизонтальными плотноупакованными рядами для (а) и в горизонтальном ряду с вертикально колеблющимися частицами для (b). Параметры локализации равны $\beta_x = 0.65$ и $\beta_x = 0.79$ соответственно в двух случаях. Эти два ДБ очень медленно теряют свою энергию на излучении и поэтому имеют очень большое время жизни. Напротив, ДНКМ 4 создает нестабильный ДБ со временем жизни в несколько десятков периодов колебаний. Мы не описываем здесь этот короткоживущий ДБ.

Смещения частиц, указанные стрелками на рисунке 3.20(a,b), показаны как функции времени на рисунке 3.21(a,b) соответственно. Частоты ДБ равны $\omega = 1.046\omega_{\max}$ и $\omega = 1.049\omega_{\max}$ соответственно.

На рисунке 3.22(a-c) показаны примеры одномерных вертикальных ДБ на основе ДНКМ 2, ДНКМ 4 и ДНКМ $\gamma 2$ соответственно. Во всех случаях амплитуда ДНКМ составляет $A = 0,1$. ДБ с большим временем жизни наблюдаются для (а) $\beta_x = 1.15$, (b) $\beta_x = 1.07$ и (с) $\beta_x = 0.687$. Смещения частиц, указанные стрелками, показаны как функции времени на рисунке 3.23. На рисунке 3.23(a,b) представлены смещения по оси y , а на рисунке 3.23(c) показаны смещения по оси x . ДБ имеют частоты $\omega = 1.048\omega_{\max}$, $\omega = 1.041\omega_{\max}$ и $\omega = 1.039\omega_{\max}$ соответственно.

ДБ, представленные на рисунке 3.22(a,c), не демонстрируют признаков неустойчивости, в то время как ДБ, показанный на рисунке 3.22(b), имеет относительно небольшое время жизни.

Насколько нам известно, одномерные ДБ на основе ДНКМ треугольной решетки, представленной выше, не описаны в литературе и, следовательно, являются новыми.

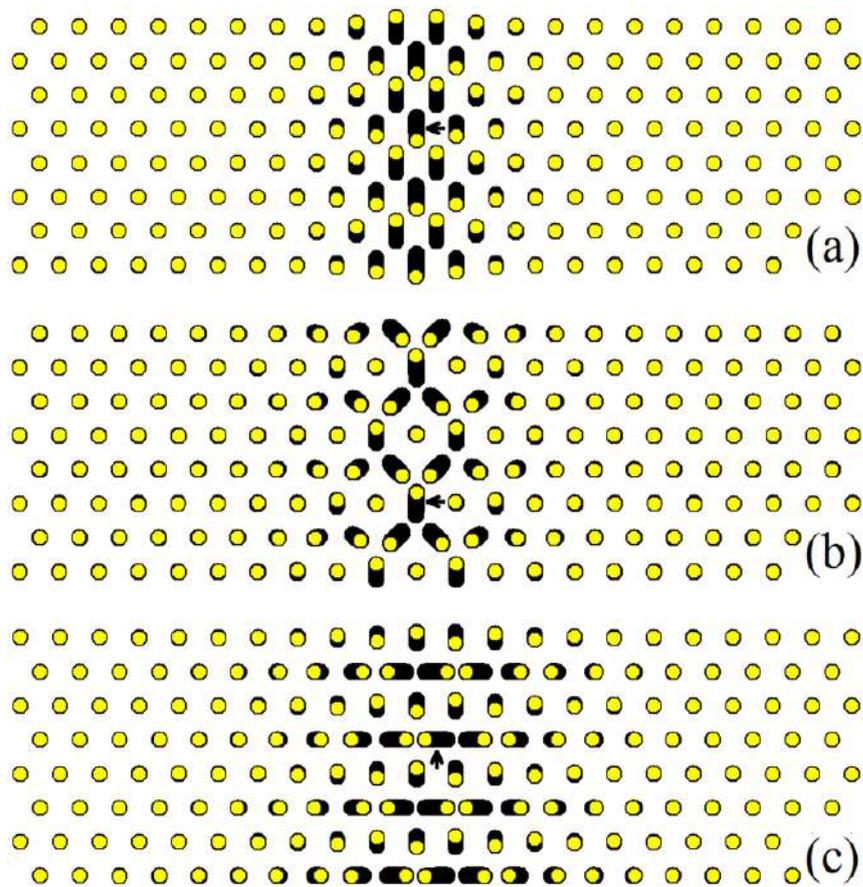


Рисунок 3.22 — Одномерные вертикальные ДБ на основе (а) ДНКМ 2, (б) ДНКМ 4 и (в) ДНКМ $\gamma 2$, полученные путем наложения функции локализации (3.53) на ДНКМ с амплитудой $A = 0,1$. Долгоживущие колебания наблюдаются при (а) $\beta_x = 1.15$, (б) $\beta_x = 1.07$ и (в) $\beta_x = 0.687$. Траектории частиц показаны черным. Смещения частиц увеличены в 3 раза.

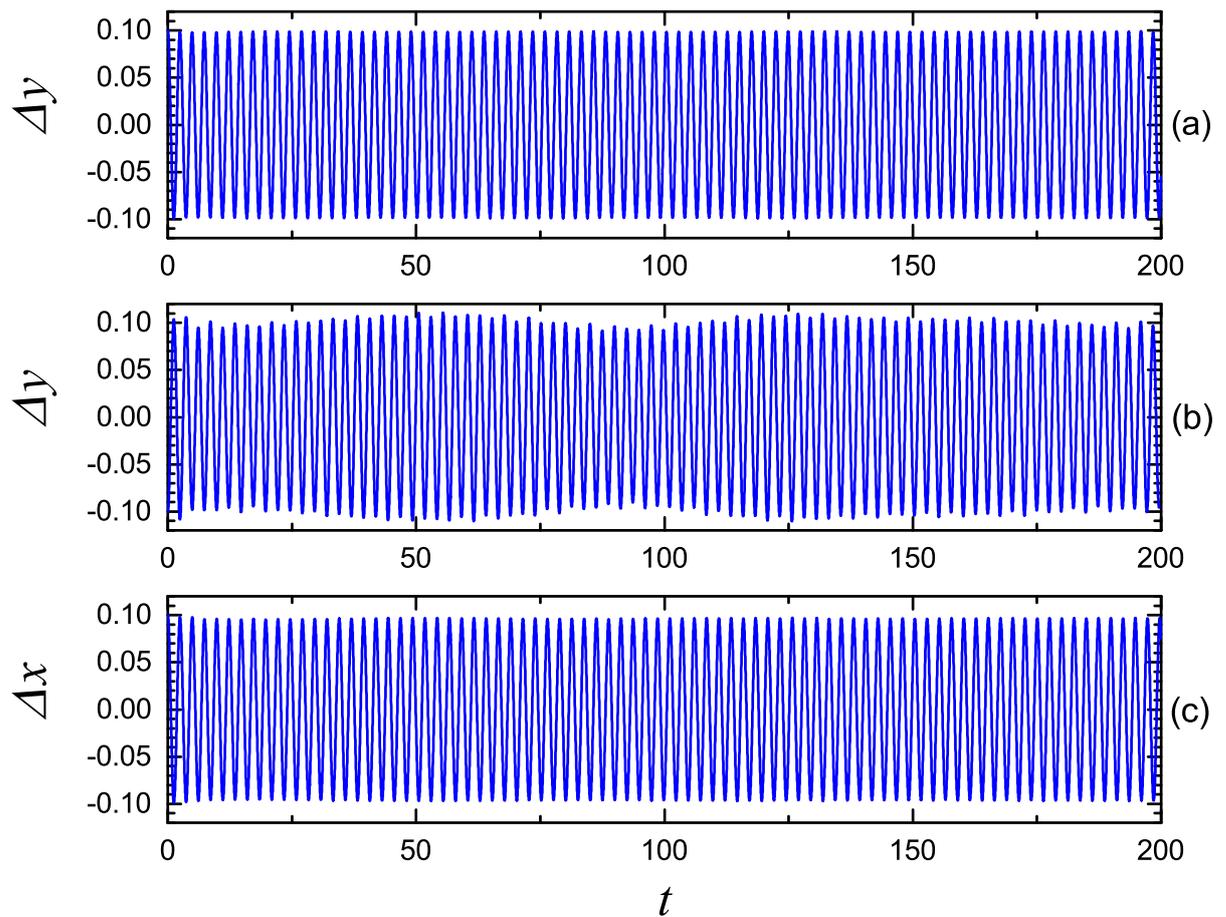


Рисунок 3.23 — (а-с) Смещения как функции времени для частиц, указанных стрелками на рисунке 3.22(а-с) соответственно. На (а,б) частицы движутся вдоль оси y и на (с) вдоль оси x .

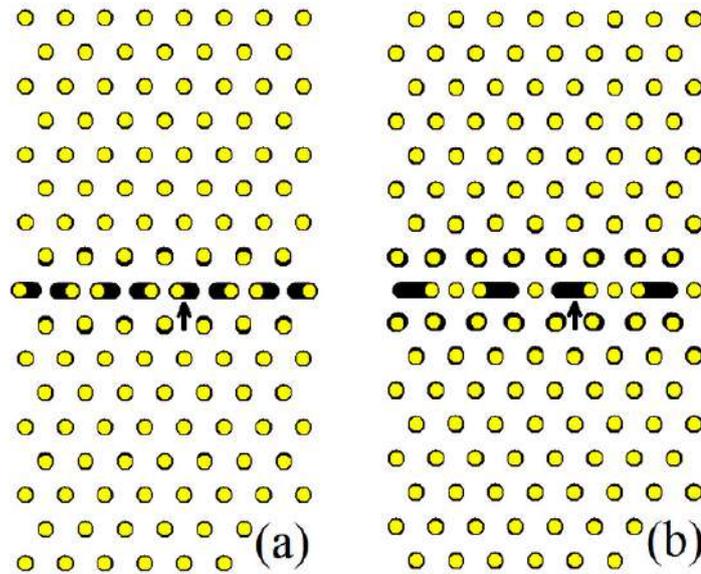


Рисунок 3.24 — Одномерные ДБ на основе ДНКМ цепочки, которые имеют периодические паттерны (а) $[x, -x]$ и (б) $[x, 0, -x, 0]$. ДБ возбуждаются заданием начальных смещений частицам плотноупакованного ряда в соответствии с этими паттернами. Пространственно локализованные колебания наблюдаются при (а) $x = A = 0,2$ и (б) $x = A = 0,8$. Траектории частиц показаны черным. Смещения частиц на (б) масштабированы с коэффициентом 0,5, чтобы предотвратить перекрытие траекторий частиц, колеблющихся с большими амплитудами.

3.3 ДБ в треугольной решетке β -ФПУ на основе ДНКМ цепочки

Традиционно всегда рассматривались нульмерные ДБ, которые локализованы во всех k измерениях k -мерной решетки. Однако в случае $k > 1$ возможна пространственная локализация колебаний не во всех измерениях. В данном разделе рассматриваются одномерные ДБ в двумерной треугольной решетке ($k = 2$), которые локализованы в одном направлении и делокализованы в перпендикулярном направлении. Важно также изучить влияние потенциала взаимодействия между частицами на возможность существования одномерных ДБ в треугольной решетке. Поэтому в данном разделе будет рассмотрена треугольная решетка с простейшим потенциалом взаимодействия ближайших соседей β -ФПУ (3.2), а в разделе 3.4 в решетке Леннард-Джонса, учитывающей дальное действие.

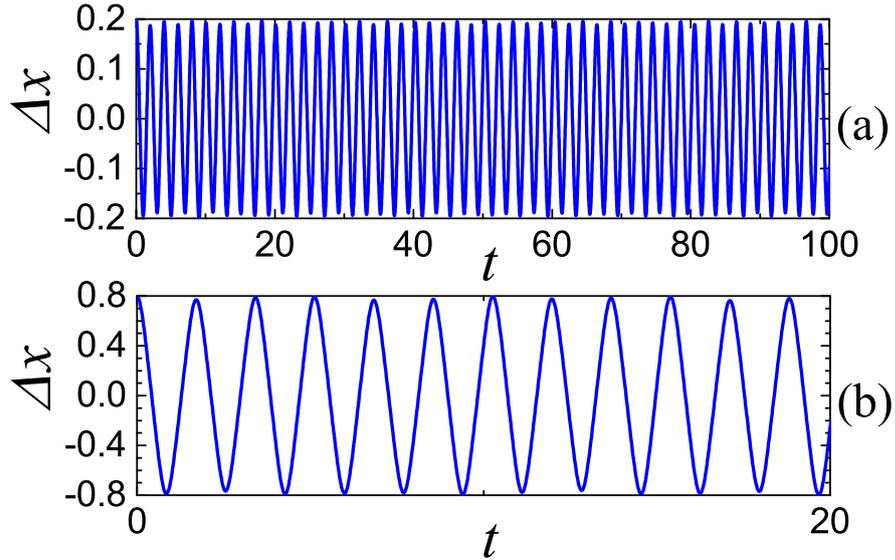


Рисунок 3.25 — (a,b) Смещения Δx как функции времени для частиц, указанных стрелками на рисунке 3.24(a,b) соответственно.

Таблица 5 — Схемы начальных смещений частиц плотноупакованного ряда треугольной решетки в соответствии с ДНКМ цепочки, описанными в работе [212]. Дан один период смещений.

ДНКМ	Перемещения	Период	Число компонент
1	$[x, -x]$	2	1
2	$[x, 0, -x]$	3	1
3	$[0, x, 0, -x]$	4	1
4	$[x, x, -x, -x]$	4	1
5	$[x_1, x_2, x_3]$, где $x_1 + x_2 + x_3 = 0$	3	2
6	$[x_1, x_2, -x_2, -x_1]$	4	2
7	$[x_1, -x_1, x_2, -x_2]$	4	2

Уже упоминалось, что нелинейные цепочки поддерживают однокомпонентные ДНКМ с периодическими паттернами, приведенными в первых четырех строках таблицы 5, основанной на работе [212]. В этом разделе показано, что моды $[x, -x]$ и $[x, 0, -x, 0]$ могут возбуждаться в плотноупакованном ряду решетки β -ФПУ.

На рисунке 3.24 представлены примеры ДБ, полученных с использованием начальных смещений (a) $[x, -x]$ и (b) $[x, 0, -x, 0]$. Частицы в одном плотноупакованном ряду смещаются в момент времени $t = 0$ согласно этим схемам, при этом начальные скорости всех частиц равны нулю. Величина начального отклонения $x = A$ определяет амплитуду колебаний частиц. Пространственно

локализованные колебания наблюдаются при $A = 0,2$ на (а) и $A = 0,8$ на (b). В первом случае ДБ имеет очень большое время жизни и практически не излучает энергию. Во втором случае время жизни ДБ ограничено несколькими десятками периодов колебаний. Это связано с тем, что колебания соответствующей ДНКМ имеют частоты выше фонного спектра только если их амплитуда очень велика, но при этом очень быстро развивается неустойчивость данной моды колебаний.

Следует отметить, что одномерные ДБ, показанные на рисунке 3.24(b), могут быть возбуждены путем наложения локализующей функции (3.52) на ДНКМ γ_2 с центром, локализованным в ряду с горизонтально колеблющимися частицами. Такой ДБ, естественно отличается от получаемого в случае центра, расположенного в ряду с вертикально колеблющимися частицами, см. рисунок 3.20(b).

Важно отметить, что этот ДБ не может иметь амплитуду меньше определенного значения, потому что ДНКМ $[A, 0, -A, 0]$ будет иметь частоты в фонной полосе.

Горизонтальные смещения частиц, указанные стрелками, показаны как функции времени на рисунке 3.25. Частоты ДНКМ: (а) $\omega = 1.27\omega_{\max}$ и (b) $\omega = 1.50\omega_{\max}$, что выше верхнего края фонной полосы.

3.4 ДБ в треугольной решетке Леннарда-Джонса на основе ДНКМ цепочки

В предыдущем разделе рассматривалась треугольная решетка с ближайшими взаимодействиями посредством потенциала β -ФПУ. Ниже рассматривается треугольная решетка с дальнедействующим потенциалом Леннарда-Джонса.

3.4.1 Описание модели

Рассматривается двумерная треугольная решетка с шагом d . Ось x декартовой системы координат направлена вдоль плотно упакованных рядов частиц. Частицы взаимодействуют посредством классического потенциала Леннарда-Джонса

$$U_{LJ}(r) = \varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - 2 \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right], \quad (3.54)$$

с параметрами ε и σ . Первый определяет энергию связи, а второй - равновесное расстояние для пары взаимодействующих частиц. Без потери общности примем $\varepsilon = 1$, $\sigma = 1$ и массу частицы $m = 1$, что всегда может быть достигнуто правильным выбором единиц длины, энергии и времени соответственно. Радиус обрезки потенциала равен 5σ , тогда равновесное расстояние между соседними частицами равно $d = 0,99027777$. Уравнения движения частиц интегрировались симплектическим методом Штормера [48] шестого порядка точности с шагом по времени $\tau = 10^{-3}$. Тепловые колебания не вводились, т.е. моделирование проводилось при температуре 0 К. Использовались периодические граничные условия. Размер расчетной ячейки составляет 12×60 частиц (12 частиц по оси x и 60 плотноупакованных рядов частиц по оси y).

Опишем как задавались начальные условия. Начальные смещения вдоль оси x задавались частицам одного плотноупакованного ряда, параллельного оси x . Все остальные частицы имели нулевые начальные смещения, и все частицы в расчетной ячейке имели нулевые начальные скорости. Характер начальных смещений для семи изученных ДНКМ приведен в таблице 5, на основе результатов работы [3]. Будут рассмотрены четыре однокомпонентных и три двухкомпонентных ДНКМ. Картина смещений частиц в ДНКМ имеет период p .

Однокомпонентные ДНКМ с 1 по 4, порождающие одномерные ДБ, изображены на рисунке 3.26.

Атомы, колеблющиеся в возбужденном ряду, производят своего рода локальное тепловое расширение. Чтобы учесть это тепловое расширение, атомные полуплоскости выше и ниже возбужденного ряда сдвигаются как твердые тела на Y и $-Y$ соответственно. Величина Y выбирается таким образом, чтобы минимизировать возмущение от начальных условий.

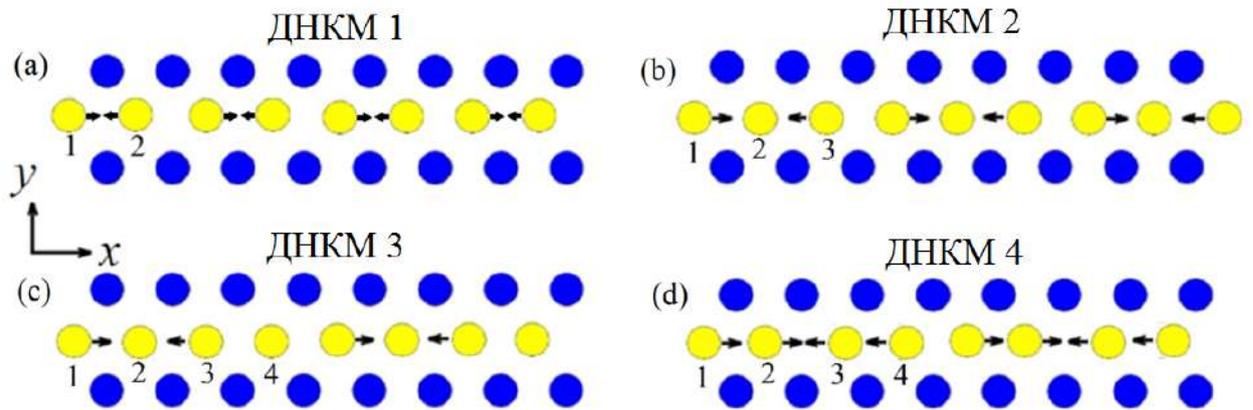


Рисунок 3.26 — (a)-(d) Паттерны начальных смещений, используемые для возбуждения одномерных ДБ в треугольной решетке на основе однокомпонентных ДНКМ цепочки от 1 до 4 соответственно. Ось x направлена вдоль плотноупакованного атомного ряда, а ось y перпендикулярна оси x . Первоначально возбуждаются только атомы в одном плотноупакованном ряду (показаны желтым цветом). На (a) и (d) все атомы колеблются, на (b) и (c) некоторые атомы покоятся. Период колебательной моды на (a) равен 2, на (b) - 3, а на (c) и (d) - 4. Полу плоскости выше и ниже возбужденного атомного ряда в нулевой момент времени смещаются как твердые тела на Y и $-Y$ соответственно.

Выбранный размер расчетной ячейки с 12-ю частицами вдоль плотноупакованного направления совместим с 2-, 3- и 4-периодическими ДНКМ, поскольку 2, 3 и 4 являются делителями 12.

3.4.2 Результаты моделирования

Результаты моделирования, представленные ниже, были опубликованы в работах [57; 63].

На рисунке 3.27, в зависимости от времени, показаны x -компоненты смещений, Δx_i , для частиц в первоначально возбужденном плотноупакованном ряду. Для ДНКМ с периодом p построены смещения p соседних частиц. Во всех случаях начальное смещение равнялось 0,2. Обратим внимание, что все четыре однокомпонентные ДНКМ периодичны во времени. ДНКМ 1, показанная на рисунке 3.27(a), представляет собой хорошо известную π -моду с волновым вектором на границе зоны Бриллюэна, которая использовалась для возбуждения одномерных ДБ в ГЦК-металлах [34] и в ряде других работ, например в [4]. Другие однокомпонентные ДНКМ, насколько нам известно, не анализировались в решетках размерности больше 1.

На рисунке 3.28 для трех двухкомпонентных ДНКМ с 5 по 7 представлены те же данные, что и на рисунке 3.27 для однокомпонентных ДНКМ. Можно видеть, что колебания частиц в двухкомпонентных ДНКМ не являются периодическими, что является следствием взаимодействия двух компонент. С другой стороны, другие гармоники не возбуждаются, как это следует из общей теории бушей нелинейных нормальных мод [1–3]. Таким образом, три двухкомпонентных ДНКМ одномерной решетки создают три новых одномерных ДБ в двумерной треугольной решетке.

В нашем моделировании для каждой из четырех исследованных однокомпонентных ДНКМ мы анализируем свойства соответствующих одномерных ДБ. На рисунке 3.29 представлены следующие результаты для каждого из четырех исследованных ДБ: (a) амплитуда ДБ как функция времени, (b) частота ДБ как функция амплитуды, (c) энергия возбужденного плотноупакованного ряда в расчете на атом как функция амплитуды и (d) сдвиг Y атомных полупро-

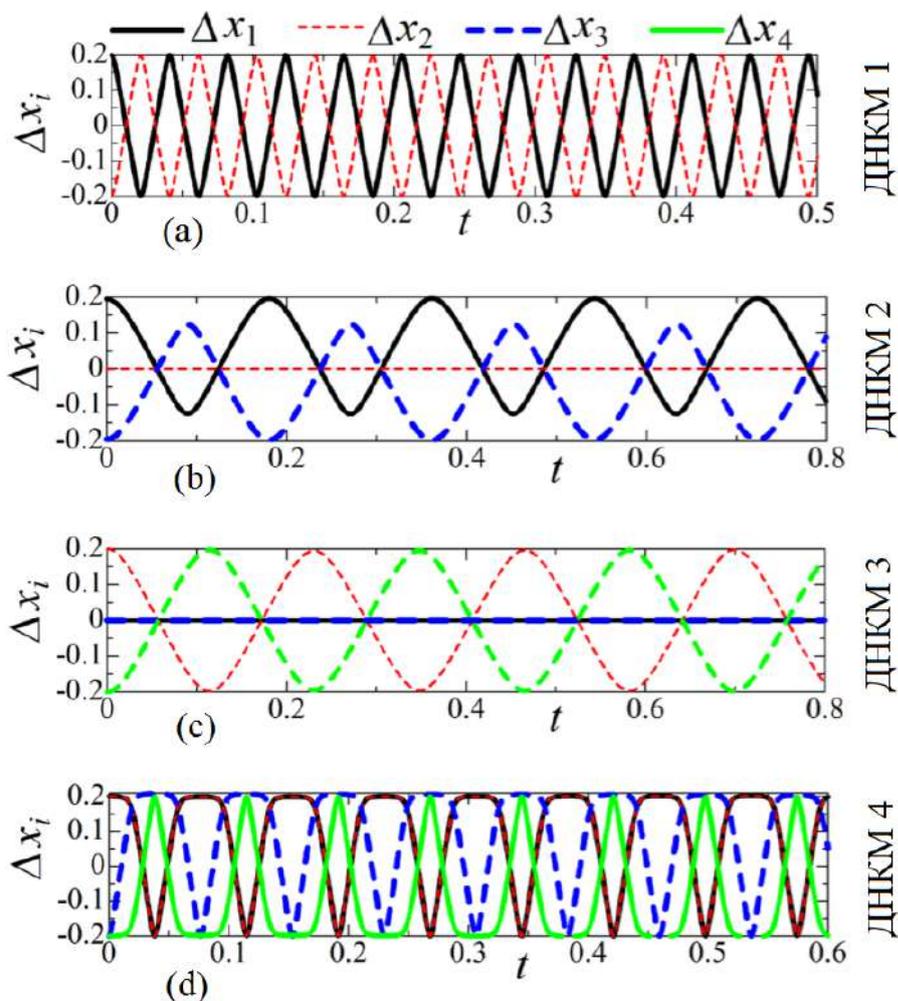


Рисунок 3.27 — (a)-(d) Смещения частиц как функции времени для однокомпонентных ДНКМ с 1 по 4 соответственно. Начальное смещение частиц равно 0,2 для всех четырех ДНКМ. Показаны только смещения частиц, принадлежащих одной трансляционной ячейке. Кривые разного типа используются для разных частиц, как указано в верхней части рисунка.

Номер ДБ указан для каждой кривой.

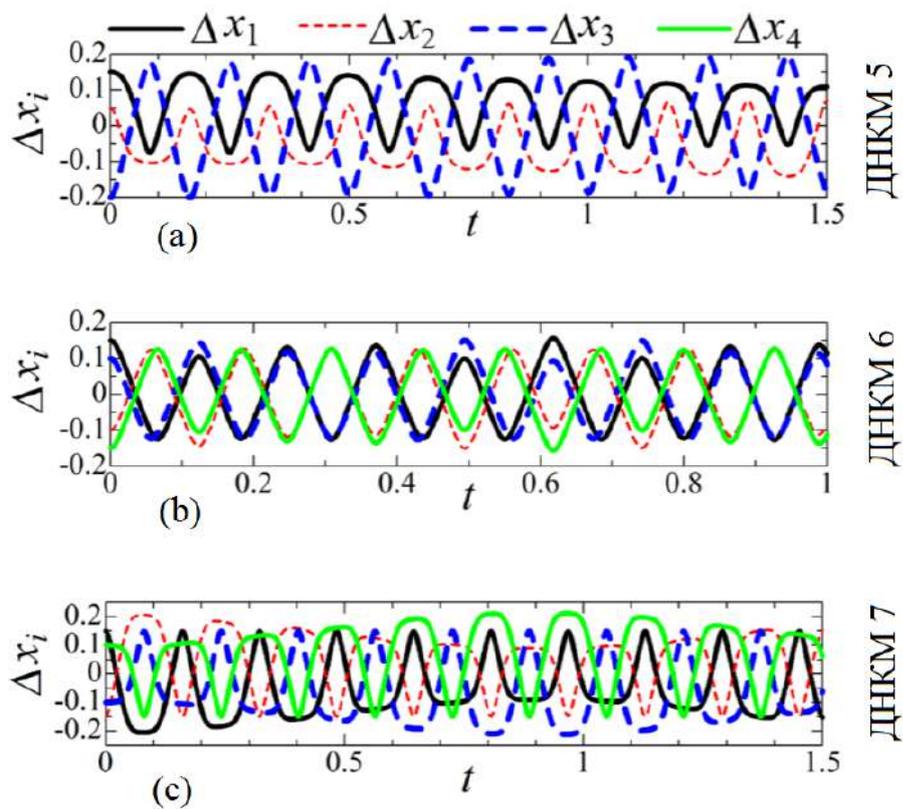


Рисунок 3.28 — (a)-(c) Смещения частиц как функции времени для двухкомпонентных ДНКМ с 5 по 7 соответственно. Начальные смещения частиц равны (a) $x_1 = 0,15$, $x_2 = 0,05$, $x_3 = -0,2$; (b) $x_1 = 0,15$, $x_2 = 0,1$; (c) $x_1 = 0,15$, $x_2 = 0,1$.

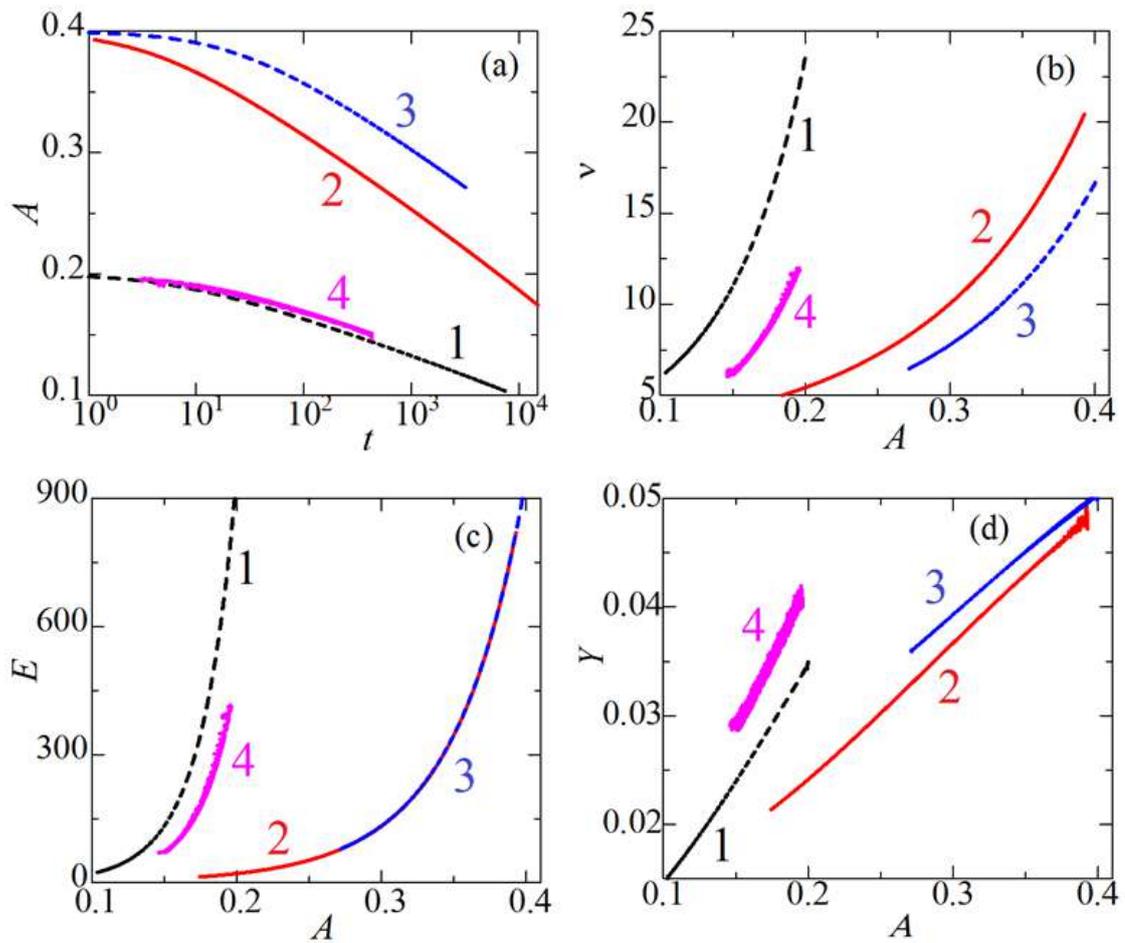


Рисунок 3.29 — (a) Амплитуда ДБ как функция времени. (b) Частота ДБ как функция амплитуды. (c) Энергия возбужденного плотноупакованного ряда в расчете на атом как функция амплитуды. (d) Сдвиг атомных полупространств от возбужденного атомного ряда как функция амплитуды.

странств от возбужденного атомного ряда как функция амплитуды. Кривые для ДБ с 1 по 4 пронумерованы.

Как видно из рисунка 3.29(а), амплитуда ДБ уменьшается со временем, поскольку они постоянно излучают энергию в виде фононов малой амплитуды. Напомним, что ДНКМ являются точными решениями для цепочки частиц, но в нашем моделировании цепочка возбужденных атомов взаимодействует с остальной частью двумерной решетки, и такие одномерные ДБ не являются точными решениями для треугольной решетки, что и приводит к постоянному излучению энергии. На рисунке 3.29(б) видно, что все четыре ДБ демонстрируют нелинейность жесткого типа с частотами, растущими с амплитудой. ДБ 1 имеет самую высокую частоту для данной амплитуды. Далее в порядке убывания частот следуют ДБ 4, 2 и 3. ДБ 1 и 4 имеют относительно высокие частоты, потому что в соответствующих ДНКМ все атомы движутся, в то время как в ДБ 2 одна треть атомов находится в состоянии покоя, а у ДБ 3, имеющего самую низкую частоту, половина атомов находится в состоянии покоя (см. рисунок 3.26). Из рисунка 3.29(с) мы делаем вывод, что, как и ожидалось, энергия ДБ уменьшается с уменьшением амплитуды. Наконец, глядя на рисунка 3.29(д), мы видим, что смещение полуплоскостей кристалла от возбужденного ряда практически линейно зависит от амплитуды ДБ. ДБ 4 производит больший сдвиг, чем ДБ 1. ДБ 2 производит наименьший сдвиг.

3.5 Движущиеся ДБ в треугольной решетке Морзе

Излагаемые ниже результаты были опубликованы в работе [74].

Рассматривается треугольная решетка с потенциалом Морзе, определенного выражением (2.3) с такими же параметрами: $A = 1$, $r_m = 1$, $\beta = 5$ и масса частиц $m = 1$. При радиусе обрезки потенциала $5r_m$ равновесное межчастичное расстояние равно $a = 0,9881329$. Расчетная ячейка включает 160×160 частиц с периодическими граничными условиями.

Занумеруем атомы одного плотноупакованного ряда частиц, параллельного оси x , индексом n , как показано на рисунке 3.30.

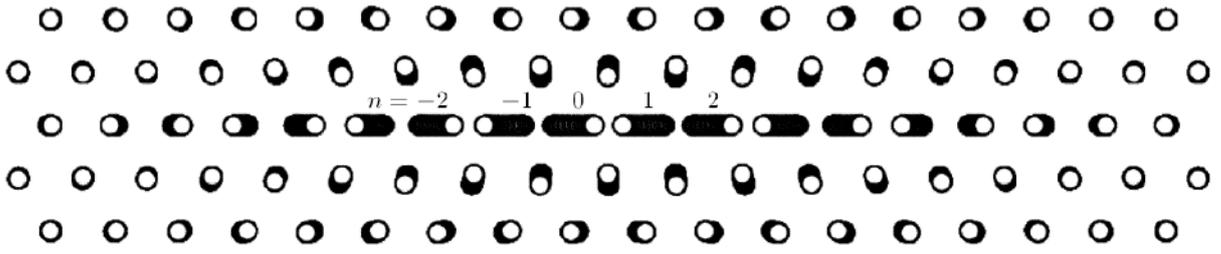


Рисунок 3.30 — Картина атомных колебаний стационарного ДБ, возбужденного с помощью анзаца (3.55) с параметрами $A = 0.3$, $B = 0$, $\beta = \gamma = 0.33$, $\delta = 0$, $x_0 = 0$.

Для инициирования движущихся ДБ использовался следующий физически мотивированный анзац [35]:

$$x_n(t) = \frac{(-1)^n A}{\cosh[\beta(n - x_0)]} \cos[\omega t + \varphi_0 + \delta(n - x_0)] - \frac{B(n - x_0)}{\cosh[\gamma(n - x_0)]}. \quad (3.55)$$

при этом $y_n = 0$ и $\dot{y}_n = 0$.

Член с амплитудой A в выражении (3.55) описывает пространственно локализованные колебания частиц, а член с амплитудой B - смещения центров колебаний частиц от центра ДБ за счет эффекта локального "теплового расширения" в ядре ДБ. Параметры β и γ определяют степень пространственной локализации этих двух частей анзаца. Параметр x_0 задает начальное положение ДБ относительно решетки. При $x_0 = 0$ ДБ центрирован на частице, а при $x_0 = a/2$ - посередине между двумя соседними частицами. Параметр δ - это набег фазы колебания частиц плотноупакованного ряда, он определяет скорость движения ДБ. От знака δ зависит направление движения ДБ.

Анзац (3.55) учитывает тот факт, что ДБ экспоненциально локализован в пространстве, это описывается гиперболическими функциями. Множитель $(-1)^n$ перед амплитудой A обеспечивает пространственную локализацию делокализованной моды с волновым числом на границе зоны Бриллюэна, имеющей максимальную частоту колебаний.

На рисунке 3.31 показан пример движения ДБ, инициированного при помощи анзаца (3.55) с параметрами $A = 0.3$, $B = 0$, $\beta = \gamma = 0.33$, $\delta = 0.05$, $x_0 = 0$. Поскольку анзац (3.55) не является точным решением уравнений движения частиц решетки, ДБ формируется только к моменту времени $t = 20$, в результате переходного процесса, в течении которого он теряет часть энергии.

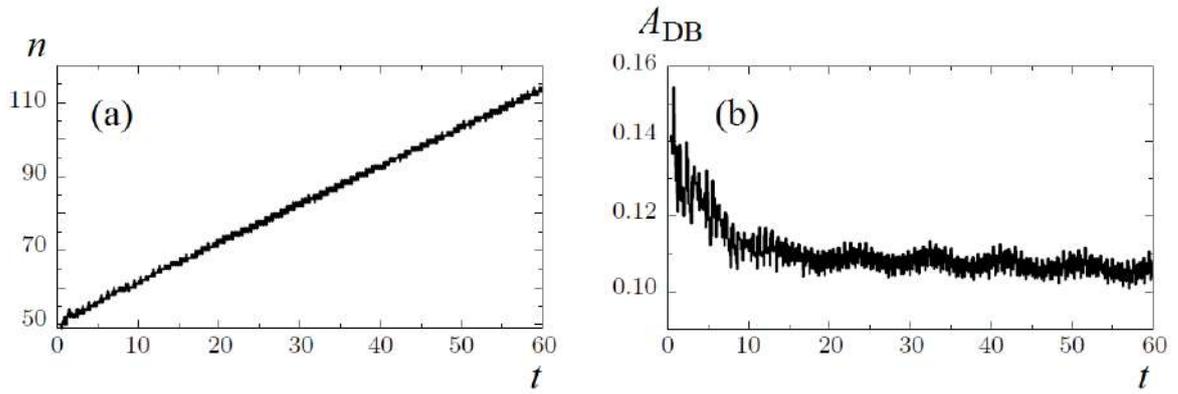


Рисунок 3.31 — (а) Положение центра ДБ и (б) амплитуда ДБ как функции времени для следующих параметров анзаца (3.55): $A = 0.3$, $B = 0$,
 $\beta = \gamma = 0.33$, $\delta = 0.05$, $x_0 = 0$.

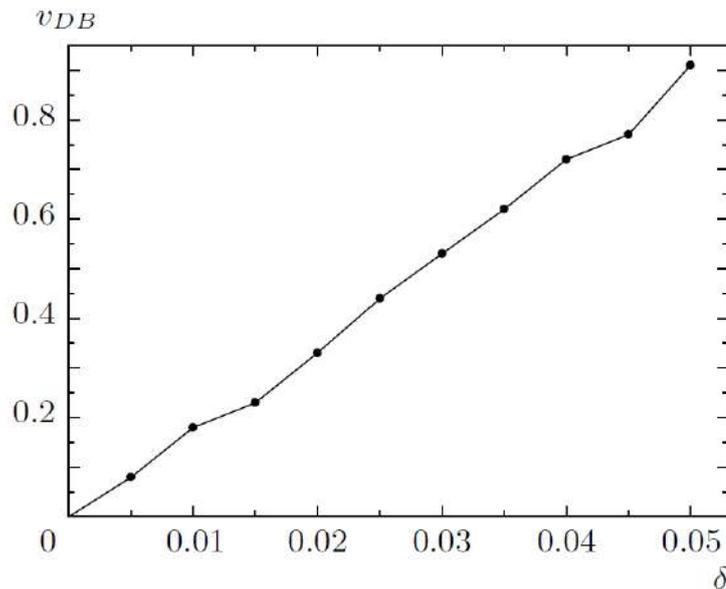


Рисунок 3.32 — Зависимость скорости ДБ от параметра δ анзаца (3.55).
 Другие параметры равны $A = 0.3$, $B = 0.012$, $\beta = \gamma = 0.27$, $x_0 = 0$.

Установившееся движение с практически постоянной скоростью v_{DB} и амплитудой A_{DB} наблюдается по истечении переходного процесса при $t > 20$.

Результат, представленный на рисунке 3.32, показывает как скорость ДБ зависит от параметра δ анзаца (3.55) при фиксированных других параметрах: $A = 0.3$, $B = 0.012$, $\beta = \gamma = 0.27$ и $x_0 = 0$. Видно, что v_{DB} линейно зависит от δ и при $\delta = 0$ имеем $v_{DB} = 0$. Для отрицательных δ скорость ДБ также отрицательна.

Далее приводятся результаты для двух значений параметра δ , 0 (неподвижный ДБ) и 0.05 (движущийся ДБ).

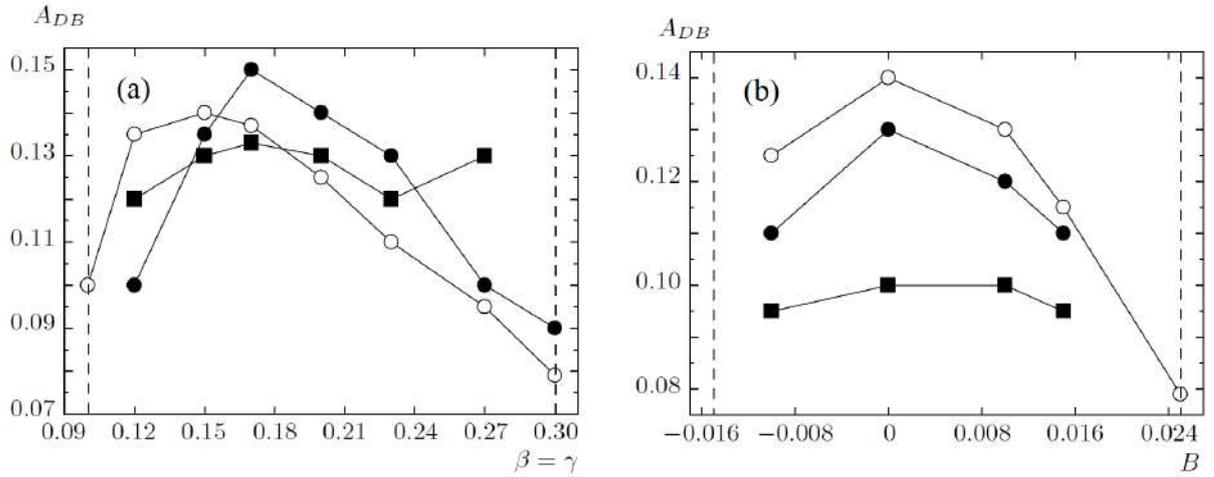


Рисунок 3.33 — (a) Зависимости амплитуд неподвижных ДБ от параметров анзаца (3.55) $\beta = \gamma$ для $V = -0.01, 0$ и 0.01 (светлые точки, темные точки и квадраты соответственно). (b) Зависимости амплитуд неподвижных ДБ от параметра анзаца (3.55) V при $\beta = \gamma = 0.20, 0.23$ и 0.27 (светлые точки, темные точки и квадраты соответственно). Остальные параметры: $A = 0.14, \delta = 0, x_0 = 0$. Вертикальные пунктирные линии отмечают границы области параметров, где удается инициировать ДБ.

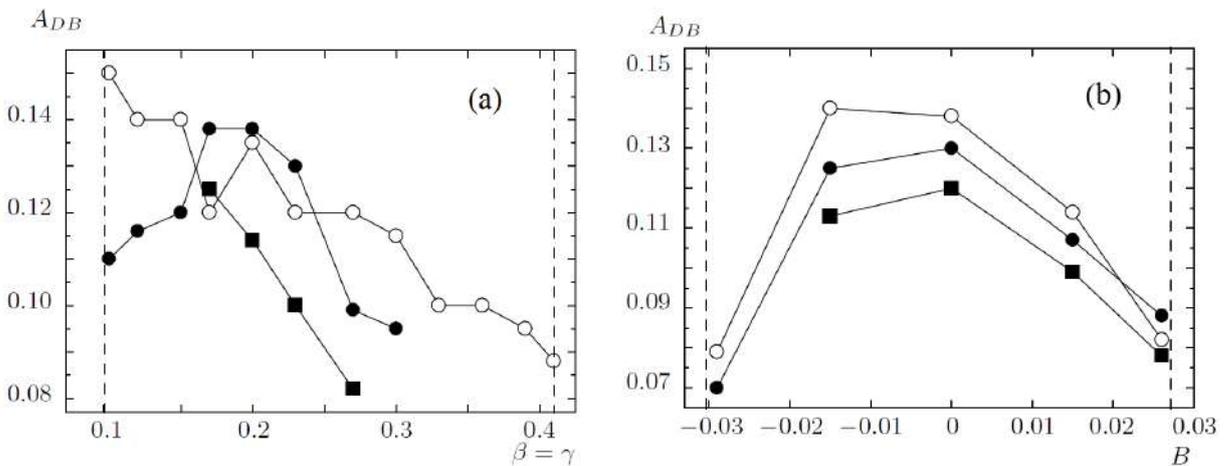


Рисунок 3.34 — (a) Зависимости амплитуд неподвижных ДБ от параметров анзаца (3.55) $\beta = \gamma$ для $V = -0.015, 0$ и 0.015 (светлые точки, темные точки и квадраты соответственно). (b) Зависимости амплитуд неподвижных ДБ от параметра анзаца (3.55) V при $\beta = \gamma = 0.20, 0.23$ и 0.27 (светлые точки, темные точки и квадраты соответственно). Остальные параметры: $A = 0.15, \delta = 0, x_0 = 0$. Вертикальные пунктирные линии отмечают границы области параметров, где удается инициировать ДБ.

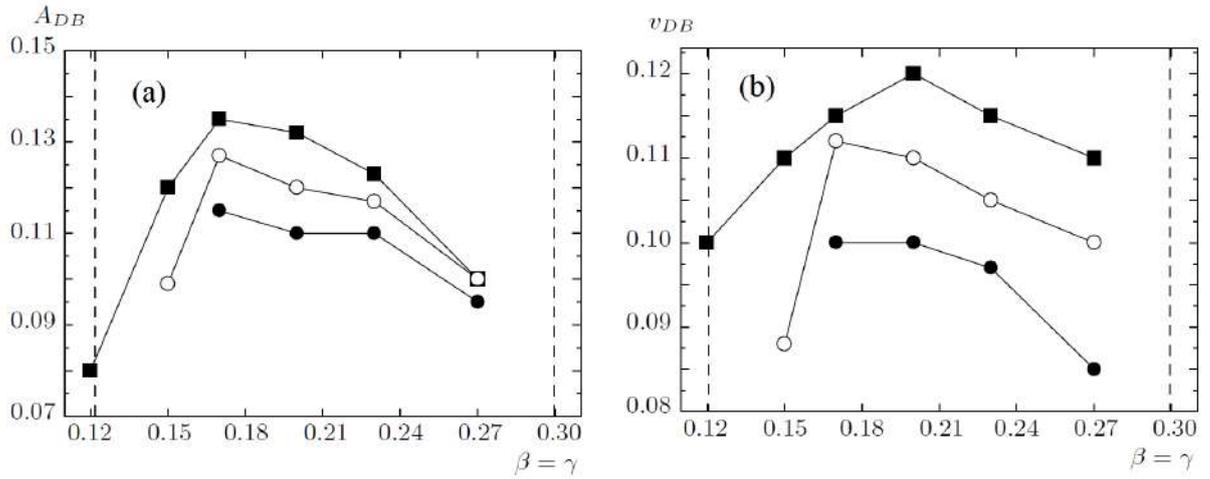


Рисунок 3.35 — Как функции параметра $\beta = \gamma$ показаны зависимости (а) A_{DB} и (б) v_{DB} с параметрами $A = 0.14$, $\delta = 0.05$, $x_0 = 0$, $B = 0.009, 0.012$ и 0.015 (квадраты, светлые точки и темные точки соответственно). Вертикальные пунктирные линии отмечают границы области параметров, где удается инициировать ДБ.

Проанализируем влияние параметров анзаца (3.55) на свойства получаемых ДБ. Соответствующие результаты приведены на рисунках 3.33, 3.34 и 3.35.

На рисунке 3.33(а) для трех значений параметра $B = -0.01, 0$ и 0.01 построена амплитуда неподвижных ДБ как функция $\beta = \gamma$ (светлые точки, темные точки и квадраты соответственно). На рисунке 3.33(б), наоборот, зафиксированы три значения параметров $\beta = \gamma = 0.20, 0.23$ и 0.27 (светлые точки, темные точки и квадраты соответственно), а по оси абсцисс отложен параметр B . Остальные параметры равны: $A = 0.14$, $\delta = 0$, $x_0 = 0$. Вертикальные пунктирные линии отмечают границы области параметров, где удается инициировать ДБ.

На рисунке 3.34 показано то же, что и на рисунке 3.33, но для $A = 0.15$, и на (а) вместо $B = -0.01, 0$ и 0.01 рассмотрено $B = -0.015, 0$ и 0.015 .

На рисунке 3.35 анализируется как от параметров $\beta = \gamma$ зависят (а) A_{DB} и (б) v_{DB} при следующих значениях остальных параметров: $A = 0.14$, $\delta = 0.05$, $x_0 = 0$, $B = 0.009, 0.012$ и 0.015 (квадраты, светлые точки и темные точки соответственно).

Как видно из рисунков 3.33, 3.34 и 3.35, многие кривые имеют максимумы. Максимальным значениям амплитуды ДБ соответствуют оптимальные параметры анзаца (3.55), поскольку при таких параметрах меньшая доля энергии,

переданной решетке в момент $t = 0$ расходуется на излучение и, соответственно, большая доля остается в локализованной форме в виде ДБ.

Таким образом, для треугольной решетки с потенциалом Морзе, на основании физических представлений, предложен анзац для запуска движущихся ДБ (3.55). Анзац содержит ряд параметров с ясным физическим смыслом. Проведены численные расчеты, показавшие влияние параметров анзаца на свойства получаемых ДБ.

Полученные результаты могут быть использованы для анализа столкновения ДБ в треугольных решетках.

3.6 Щелевой дискретный бризер с ангармонизмом жесткого типа в двумерном биатомном кристалле

Результаты, представленные в данном разделе, были опубликованы в работе [71].

Рассматривается треугольная решетка с потенциалом Морзе, определенного выражением (2.3) с такими же параметрами: $A = 1$, $r_m = 1$, $\beta = 5$. При радиусе обрезки потенциала $5r_m$ равновесное межчастичное расстояние равно $a = 0,9881329$. Расчетная ячейка включает 192×192 частиц с периодическими граничными условиями.

Мы рассматриваем модель биатомного двумерного плотноупакованного кристалла стехиометрического состава A_3B . Без ограничения общности масса легких атомов считается равной единице, m_1 . Масса тяжелых атомов $m_2 = 10m_1$. Модель кристаллической решетки показана на рисунке 3.36(a), где зеленый цвет соответствует тяжелым атомам, а желтый - легким атомам.

В уравнениях движения атомов на периферии расчетной ячейки был добавлен член, описывающий вязкость, чтобы избежать влияния малоамплитудных волн, излучаемых дискретными бризерами, из-за неточности начальных условий.

В кристалле можно реализовывать три типа ДНКМ, схематично показанных на рисунке 3.36(b-d). Анализ амплитудно-частотных характеристик ДНКМ показал, что обе моды с движущимися легкими атомами, демонстрируют жест-

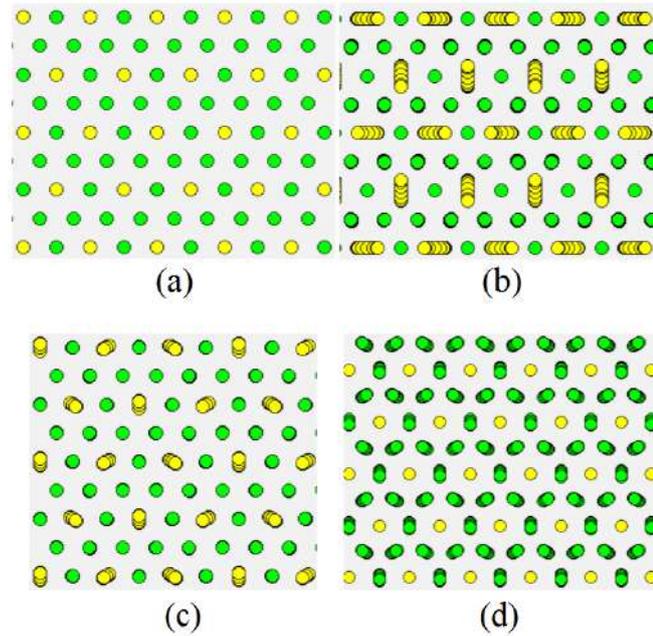


Рисунок 3.36 — (а) Двумерный двухатомный кристалл стехиометрии A_3B на основе треугольной решетки. Стробоскопическая картина движения атомов, по делокализованным колебательным мод в двухатомной решетке с движущимися легкими (b,c) и тяжелыми (d) атомами.

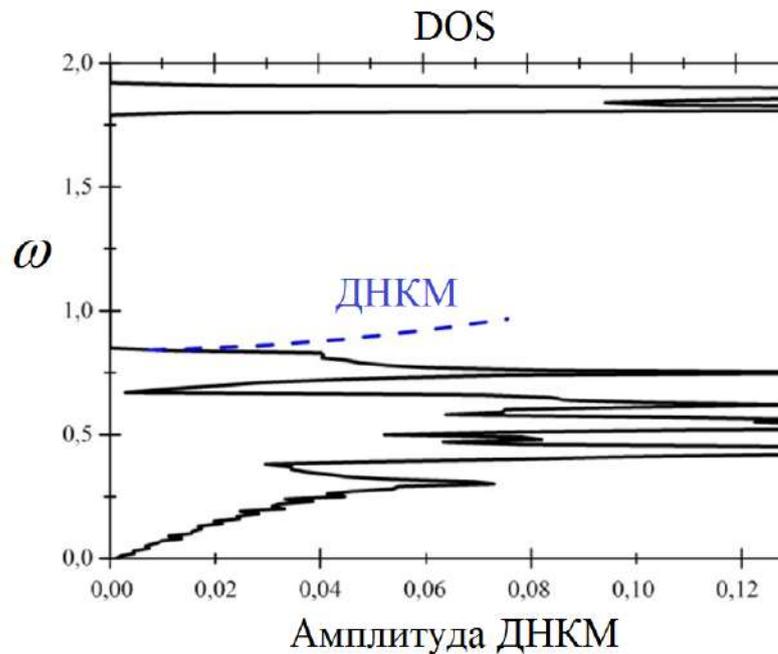


Рисунок 3.37 — Плотность фононных состояний (черная сплошная линия) и частота как функция амплитуды для делокализованной колебательной моды, показанной на рисунке 3.36(d) (синяя пунктирная линия).

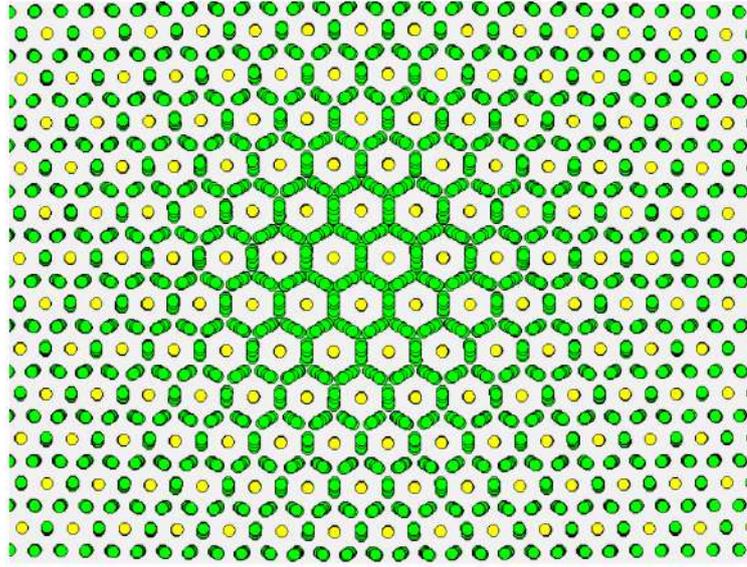


Рисунок 3.38 — Стробоскопическая картина движения атомов вблизи ДБ, полученного наложением колоколообразной локализирующей функции на ДНКМ, изображенную на рисунке 3.36(d). Смещения атомов увеличены в 7 раз для наглядности. ДБ возбуждался со следующими параметрами: $A = 0,06$; $\beta = 0,18$; $\delta = 0,011$; $\gamma = 0,162$. Энергия ДБ равна 62,56. Частота ДБ 0,844.

кий тип нелинейности с частотой, находящейся в верхней части фононного спектра. ДНКМ, показанная на рисунке 3.36(d), в которой колеблются тяжелые атомы, показывает растущую с амплитудой частоту в пределах запрещенной зоны (см. рисунок 3.37). Видно, что частота моды отщепляется от нижнего края щели фононного спектра и лежит в щели. Это обстоятельство позволяет осуществить попытку возбуждения ДБ на основе последней ДНКМ. Следует отметить, что запуск ДНКМ в кристалле может привести к модификации его упругих свойств [213] и проявлению модуляционной неустойчивости, являющейся причиной возбуждения хаотических ДБ [10].

Для возбуждения ДБ на ДНКМ накладывалась экспоненциально локализованная колоколообразная функция. Центр колоколообразной функции располагался в точке, равноудаленной от трех соседних колеблющихся атомов. Если координаты этой точки равны (x_0, y_0) , то амплитуда колебаний атома с координатами (x, y) на расстоянии $R = \sqrt{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2}$ от центра дискретного бризера могут быть выражены как [214]

$$T(R) = \frac{A_T}{\cosh(\beta R)}, \quad (3.56)$$

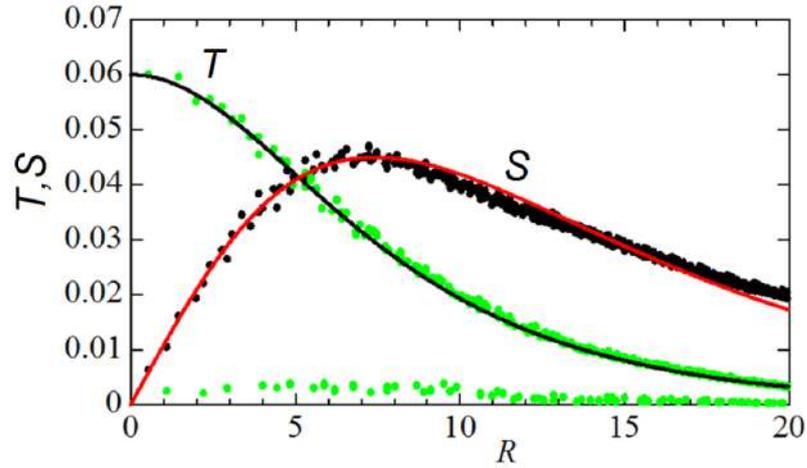


Рисунок 3.39 — Зависимости амплитуд колебаний T и смещений центров колебаний S от расстояния от центра ДБ R . Сплошными линиями показаны зависимости, изначально заданные выражениями (3.56) и (3.57). Точки показывают численный результат после 10 периодов колебаний ДБ. ДБ возбуждался со следующими параметрами: $A = 0,06$; $\beta = 0,18$; $\delta = 0,011$; $\gamma = 0,162$. Энергия ДБ равна 62,56. Частота ДБ 0,844.

где A_T - амплитуда колоколообразной функции, а β определяет степень её локализации.

Смещение центров колебаний можно определить выражением

$$S(R) = \frac{A_S R}{\cosh(\gamma R)}, \quad (3.57)$$

где A_S - амплитуда функции, а γ определяет степень её локализации.

Из-за асимметрии формы потенциала Морзе центры колебаний атомов смещаются радиально от точки (x_0, y_0) , что учитывает выражение (3.57). Аналитически в [214] с помощью линейной теории упругости было показано, что статическое поле радиальных смещений атомов, вызванных дискретными бризерами в двумерном кристалле на больших расстояниях, убывает как $1/R$, т.е. достаточно медленно.

Стробоскопическая картина движения атомов для ДБ, возбужденного на тяжелых атомах с помощью колоколообразной локализирующей функции, примененной к делокализованной колебательной моде, показана на рисунке 3.38. Бризер имеет радиальную симметрию и имеет радиус около десяти межатомных расстояний в каждом направлении. Структура ДБ аналогична структуре ДБ в моноатомном 2D кристалле, описанного в [214]. Часть кристалла вокруг

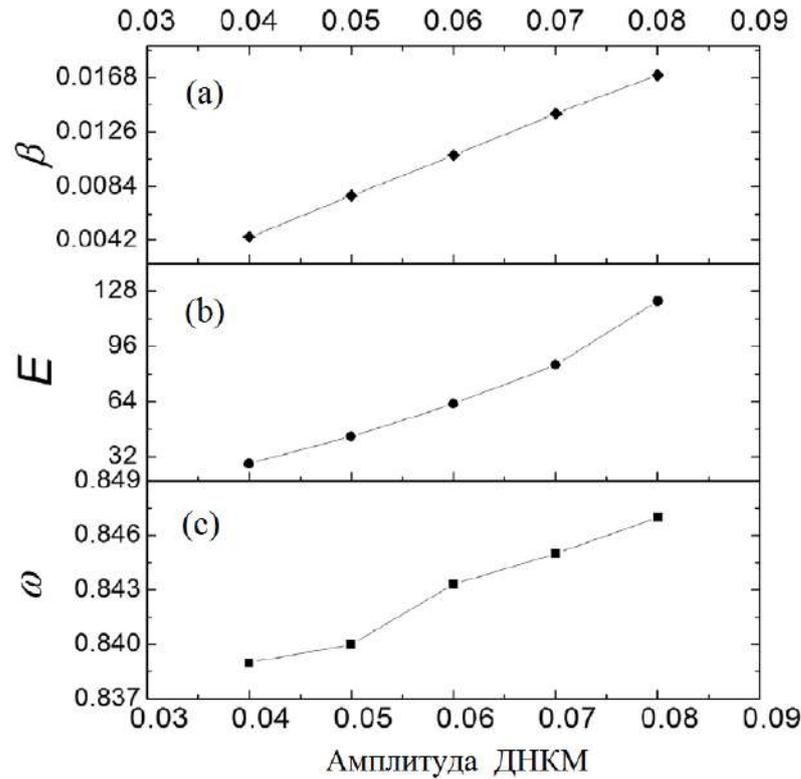


Рисунок 3.40 — Зависимость параметра локализации ДБ, β , энергии, E , и частоты, ω , от амплитуды ДБ.

ядра ДБ частично подавляет тепловое расширение атомов, что увеличивает вклад жесткого ядра потенциала Морзе в нелинейную динамику решетки, обеспечивая существование ДБ.

Свойства ДБ, а именно зависимости амплитуды колебаний T и смещений центров колебаний S от расстояния от центра ДБ R представлены на рисунке 3.39. Точками показан численный результат после 10 периодов колебаний ДБ, а линиями - начальные условия, определяемые функциями (3.56) и (3.57). Набор зеленых точек, близких к нулевому уровню, соответствует практически неподвижным легким атомам. Отличие численных результатов от значений начальных функций увеличивается с ростом амплитуды ДБ.

Важной особенностью полученного ДБ является локализация колебаний на тяжелых атомах решетки. Предыдущие исследования ДБ в двухатомных решетках были сосредоточены на бризерах на основе легких атомов с мягким типом нелинейности. Возбуждение ДНКМ, в которой участвуют тяжелые атомы решетки, обеспечивает жесткий тип нелинейности. Это допускает существование щелевого ДБ с жесткой нелинейностью. Таким образом, можно сделать

вывод, что применение новых методов возбуждения ДБ приводит к новым типам ДБ, о которых ранее в литературе не сообщалось.

Зависимость энергии E , частоты ω и параметра локализации δ от амплитуды ДБ представлена на рисунке 3.40. Все три функции демонстрируют монотонно возрастающий характер. Время жизни ДБ составляет около ста периодов колебаний и следует отметить, что исследуемый объект фактически является квазибризером. Концепция квазибризера была предложена в [43]. Этот динамический объект, в отличие от ДБ, может характеризоваться не единственной частотой колебаний и иметь ограниченное время жизни.

Новый подход к возбуждению ДБ в рамках метода молекулярной динамики был успешно применен к двумерной биатомной решетке стехиометрии A_3B . Была определена ДНКМ с колебанием только тяжелых атомов решетки при неподвижных легких атомах с частотой, ответвляющейся от нижнего края щели фононного спектра и растущая с амплитудой. Полученный ДБ по структуре колебаний атомов аналогичен бризеру в моноатомном кристалле, о котором сообщалось ранее в [214], однако его частота лежит не выше фононного спектра, а в щели спектра. Новый тип ДБ имеет достаточно слабую степень пространственной локализации, вовлекает в движение значительное количество атомов и концентрирует сравнительно большую энергию.

Другим важным выводом является актуальность поиска и применения новых методов возбуждения ДБ. Полученная новая конфигурация ДБ вряд ли могла быть реализована каким-либо другим ранее использовавшимся методом задания начальных условий.

3.7 Выводы по главе 3

В разделе 3.1 показано, что развитие модуляционной неустойчивости ДНКМ с частотами выше фононного спектра приводит к спонтанному возникновению хаотических ДБ в треугольной β -ФПУ решетке. С уменьшением амплитуды ДНКМ время жизни хаотических ДБ возрастает. Это связано с тем, что при малых амплитудах ДНКМ (превышающих однако порог неустойчивости)

фоновые малоамплитудные колебания имеют меньшую амплитуду и в меньшей степени влияют на динамику хаотических ДБ.

В разделе 3.2 описан ряд (квази)-ДБ треугольной решетки β -ФПУ с частотами, ответвляющимися от верхнего края фононной полосы. Нульмерные и одномерные ДБ были получены путем наложения функции локализации на ДНКМ треугольной решетки с частотами выше фононной полосы.

Был приведен один пример ДБ с частотой, выходящей из фононной полосы при относительно большой амплитуде, см. рисунок 3.24(b). Этот бризер получается путем возбуждения ДНКМ цепи $[x, 0, -x, 0]$ в плотноупакованном ряду частиц. Бризер существует только при относительно большой амплитуде и имеет очень короткое время жизни из-за быстро развивающейся неустойчивости. Возможно, существуют другие короткоживущие бризеры на основе ДНКМ треугольной решетки с частотами, возникающими из фононного спектра при больших амплитудах [203]. Примеры таких ДБ приведены для ОЦК-металлов в работе [58].

Мы не пытались найти точные решения для ДБ в этой работе, но их, вероятно, можно найти с помощью итерационных или других методов, например, обобщенного метода минимальной невязки [215] или асимптотического анализа, использовавшегося в работе [216].

Некоторые ДБ в двумерных решетках могут перемещаться [114; 117; 217] и в одной из будущих работ следует рассмотреть проблему подвижности ДБ, представленных в этой работе.

При попытке построить аналогичные ДБ в треугольных решетках с разными потенциалами, например, для решетки α - β -ФПУ или решетки Морзе, следует начать с анализа частотно-амплитудных зависимостей ДНКМ, перечисленных в работе [203]. Все ДНКМ, описанные в этой статье, существуют в треугольных решетках с любым типом потенциала, но такие свойства, как частоты ДНКМ, зависят от потенциала. ДНКМ с частотами выше фононной полосы являются кандидатами на получение ДБ на их основе путем наложения локализирующих функций по аналогии с тем, как это было сделано в данной работе.

В треугольной решетке с локальным потенциалом возможны щелевые ДБ [216], которые не рассматривались в нашей работе, но их можно описать

с использованием того же подхода, и это планируется сделать в будущей работе.

Используя подход, представленный в данной работе, можно найти полный список ДБ в металлах с ГЦК, ОЦК и ГПУ структурой, а также в других кристаллах с более сложной структурой. И здесь начинать нужно с получения всех возможных ДНКМ с частотами выше фононного спектра, на которые потом будут накладываться локализирующие функции с целью получения ДБ.

С использованием одно- и двухкомпонентных ДНКМ, полученных для цепочки (одномерной решетки) в работе [3], были идентифицированы новые типы одномерных ДБ в двумерной треугольной решетке с потенциалом β -ФПУ (раздел 3.3) и с потенциалом Леннард-Джонса (раздел 3.4). Полученные ДБ локализованы в плотноупакованном ряду треугольной решетки. Один из одномерных ДБ, основанный на ДНКМ с волновым вектором на границе зоны Бриллюэна, был описан ранее для ГЦК-металлов [145], а все другие одномерные ДБ, насколько нам известно, являются новыми. Как и следовало ожидать, одномерные ДБ на основе однокомпонентных ДНКМ демонстрируют периодические во времени колебания. С другой стороны, ДБ на основе двухкомпонентных ДНКМ аперриодичны из-за обмена энергией между двумя компонентами.

В разделе 3.5 предложен физически обоснованный анзац (3.55) для запуска движущихся ДБ в треугольной решетке. Даны рекомендации по выбору параметров анзаца. Представлены свойства движущихся ДБ в треугольной решетке Морзе. Возможно, что данный анзац может применяться для запуска движущихся ДБ вдоль плотноупакованных атомных рядов трехмерных кристаллов, но данное предположение нуждается в проверке.

Настоящее исследование открывает путь для исследования новых одномерных ДБ в различных кристаллах, включая ГЦК, ОЦК и ГПУ металлы.

В разделе 3.6 с использованием метода молекулярной динамики в двумерной биатомной решетке стехиометрии A_3B был успешно возбужден новый тип ДБ. ДБ основан на ДНКМ с колебанием только тяжелых атомов решетки при неподвижных легких атомах. ДБ был получен наложением на ДНКМ локализирующей функции радиальной симметрии (3.56). Кроме того, были учтены результаты работы [214], где было показано, что ДБ в двумерных решетках вызывают статические смещения центров колебаний атомов, убывающие с расстоянием R от центра ДБ как $1/R$. С этой целью использовался дополнитель-

ный анзац (3.57). ДБ имеет жесткий тип нелинейности с частотой, лежащей в щели фононного спектра. По своей структуре полученный ДБ аналогичен бриззеру в моноатомном кристалле, о котором сообщалось ранее в [214]. Новый тип ДБ имеет достаточно слабую степень пространственной локализации, вовлекает в движение значительное количество атомов и концентрирует сравнительно большую энергию.

Данное исследование показывает важность поиска новых методов возбуждения ДБ в нелинейных решетках.

Глава 4. ДНКМ трехмерных решеток

4.1 Влияние жесткости межатомных связей на свойства ДНКМ в ГЦК решетке Морзе

Как уже отмечалось, ДНКМ существуют для любых амплитуд колебаний и любых межатомных потенциалов. Важно знать, как свойства ДНКМ зависят от параметров межатомных потенциалов. В данном разделе мы проанализируем влияние жесткости потенциала Морзе на свойства однокомпонентных ДНКМ в ГЦК-решетке. В частности, будут рассчитаны частоты, кинетическая и потенциальная энергии, механические напряжения, создаваемые ДНКМ и влияние ДНКМ на упругие постоянные решетки. Амплитудно-частотные зависимости, полученные для кристалла Морзе, будут сопоставлены с аналогичными зависимостями, полученными ранее для ГЦК меди с использованием многочастичного потенциала, построенного по методу погруженного атома (потенциала ЕАМ).

4.1.1 ГЦК решетка Морзе и её макроскопические свойства

В этом разделе описывается ГЦК кристалл Морзе и его макроскопические характеристики, а также однокомпонентные ДНКМ, полученные ранее Щербининым [218] на основании теории бушей нелинейных нормальных мод [1–3].

ГЦК решетка может быть представлена объединением четырех простых кубических решеток с параметром решетки a . Решетки сдвинуты друг относительно друга на векторы $(0,0,0)$, $a(0,1,1)$, $a(1,0,1)$, $a(1,1,0)$.

Свойства ДНКМ анализируются с использованием метода молекулярной динамики, основанного на классическом парном межатомном потенциале Морзе [219; 220]

$$\phi(r) = D[(1 - e^{-\alpha(r-\xi)})^2 - 1], \quad (4.1)$$

где ϕ - потенциальная энергия взаимодействия между двумя частицами, r - расстояние между частицами, D - энергия связи, ξ - равновесное расстояние между частицами, а α определяет жесткость связи. В этом исследовании будут использоваться безразмерные переменные. 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 третьего параметра потенциала, а именно α , на свойства ДНКМ будет подробно проанализировано ниже. Будем рассматривать два значения: $\alpha = 4$ и $\alpha = 7$. Сравнение потенциальных функций, заданных уравнением (4.1), для этих значений показано на рисунке 4.1. Видно, что с увеличением α кривизна потенциала вблизи минимума увеличивается, и потенциал становится короткодействующим.

Радиус обрезки потенциала $R_c = 10$ используется для обоих значений α . Параметр равновесной решетки равен $a = 1.2747824383$ для $\alpha = 4$ и $a = 1.4020817309$ для $\alpha = 7$. По мере увеличения α параметр решетки a стремится к $\sqrt{2}$, а межатомное расстояние $\rho = a/\sqrt{2}$ приближается к 1.

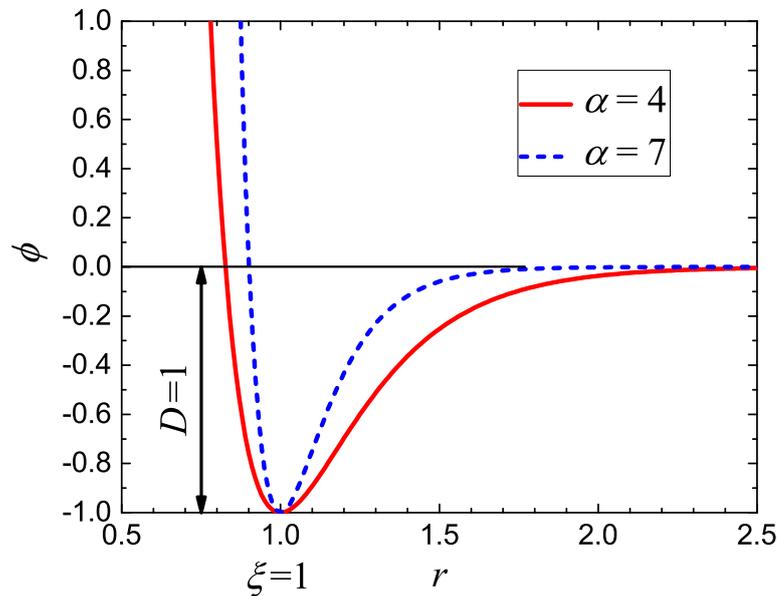


Рисунок 4.1 — Потенциал Морзе (4.1) для $\alpha = 4$ (сплошная красная линия) и $\alpha = 7$ (пунктирная синяя линия). Энергия связи $D = 1$, равновесное межатомное расстояние $\xi = 1$.

Как станет ясно позже, все ДНКМ можно моделировать с помощью расчетной ячейки, состоящей из $2 \times 2 \times 2$ кубических трансляционных ячеек ГЦК-

решетки с общим числом частиц 32. На расчетную ячейку накладываются периодические граничные условия.

Гамильтониан ГЦК-решетки представляет собой сумму кинетической (K) и потенциальной (P) энергий

$$H = E_{\text{kin}} + E_{\text{pot}} = \frac{m}{2} \sum_i (\dot{\mathbf{r}}_i, \dot{\mathbf{r}}_i) + \sum_{i>j} \phi(|\mathbf{R}_{i,j}|), \quad (4.2)$$

где $\mathbf{r}_i = (r_{i,x}, r_{i,y}, r_{i,z})$ - радиус-вектор i -й частицы, точкой обозначается дифференцирование радиус-вектора по времени, а $\mathbf{R}_{i,j} = \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i$.

Уравнения движения Гамильтона, полученные из уравнения (4.2), следующие:

$$\begin{aligned} m\ddot{r}_{i,x} &= - \sum_{i>j} F_{i,j} R_{i,j,x}, \\ m\ddot{r}_{i,y} &= - \sum_{i>j} F_{i,j} R_{i,j,y}, \\ m\ddot{r}_{i,z} &= - \sum_{i>j} F_{i,j} R_{i,j,z}, \end{aligned} \quad (4.3)$$

где

$$F_{i,j} = \frac{\phi'(|\mathbf{R}_{i,j}|)}{|\mathbf{R}_{i,j}|}. \quad (4.4)$$

Для моделирования был разработан оригинальный программный код, написанный на алгоритмическом языке C++. Симплектический метод Штормера шестого порядка [48] с шагом по времени 0,001 используется для интегрирования уравнений движения (4.3).

Составляющие тензора механических напряжений в решетке можно считать следующим образом

$$\begin{aligned}
 \sigma_{xx} &= -\frac{1}{V} \sum_{i>j} F_{i,j} R_{i,j,x}^2, \\
 \sigma_{yy} &= -\frac{1}{V} \sum_{i>j} F_{i,j} R_{i,j,y}^2, \\
 \sigma_{zz} &= -\frac{1}{V} \sum_{i>j} F_{i,j} R_{i,j,z}^2, \\
 \tau_{xy} &= -\frac{1}{V} \sum_{i>j} F_{i,j} R_{i,j,x} R_{i,j,y}, \\
 \tau_{xz} &= -\frac{1}{V} \sum_{i>j} F_{i,j} R_{i,j,x} R_{i,j,z}, \\
 \tau_{yz} &= -\frac{1}{V} \sum_{i>j} F_{i,j} R_{i,j,y} R_{i,j,z}.
 \end{aligned} \tag{4.5}$$

где V - объем расчетной ячейки.

Компоненты тензора напряжений связаны с компонентами тензора деформаций согласно закону Гука

$$\begin{bmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \tau_{xy} \\ \tau_{xz} \\ \tau_{yz} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ C_{31} & C_{32} & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ C_{41} & C_{42} & C_{43} & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ C_{51} & C_{52} & C_{53} & C_{54} & C_{55} & C_{56} \\ C_{61} & C_{62} & C_{63} & C_{64} & C_{65} & C_{66} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{zz} \\ \gamma_{xy} \\ \gamma_{xz} \\ \gamma_{yz} \end{bmatrix}, \tag{4.6}$$

где $C_{ij} = C_{ji}$ - константы жесткости. Будут анализироваться только диагональные константы жесткости.

$$\begin{aligned}
C_{11} &= \frac{1}{V} \sum_{i>j} G_{i,j} R_{i,j,x}^4, \\
C_{22} &= \frac{1}{V} \sum_{i>j} G_{i,j} R_{i,j,y}^4, \\
C_{33} &= \frac{1}{V} \sum_{i>j} G_{i,j} R_{i,j,z}^4, \\
C_{44} &= \frac{1}{V} \sum_{i>j} G_{i,j} R_{i,j,x}^2 R_{i,j,y}^2, \\
C_{55} &= \frac{1}{V} \sum_{i>j} G_{i,j} R_{i,j,x}^2 R_{i,j,z}^2, \\
C_{66} &= \frac{1}{V} \sum_{i>j} G_{i,j} R_{i,j,y}^2 R_{i,j,z}^2,
\end{aligned} \tag{4.7}$$

где

$$G_{i,j} = \frac{\phi_n''(|\mathbf{R}_{i,j}|)}{|\mathbf{R}_{i,j}|^2} - \frac{\phi_n'(|\mathbf{R}_{i,j}|)}{|\mathbf{R}_{i,j}|^3}. \tag{4.8}$$

Возбуждение ДНКМ приводит к периодическому изменению во времени внутренних напряжений и упругих постоянных. Будут анализироваться усредненные за период колебаний напряжения и константы жесткости,

$$\langle \sigma_{ij} \rangle = \frac{1}{T} \int_0^T \sigma_{ij}(t) dt, \quad \langle C_{ij} \rangle = \frac{1}{T} \int_0^T C_{ij}(t) dt. \tag{4.9}$$

Аналогичным образом кинетическая и потенциальная энергии расчетной ячейки в расчете на частицу усредняются по периоду колебаний:

$$\langle E_{\text{kin}} \rangle = \frac{1}{NT} \int_0^T E_{\text{kin}}(t) dt, \quad \langle E_{\text{pot}} \rangle = \frac{1}{NT} \int_0^T E_{\text{pot}}(t) dt, \tag{4.10}$$

где $N = 32$ - количество частиц в расчетной ячейке.

Начальные условия для возбуждения каждой из двенадцати однокомпонентных ДНКМ будут задаваться, как описано в разделе [4.1.2](#).

4.1.2 Однокомпонентные ДНКМ ГЦК решетки

ДНКМ для ГЦК-решетки были получены в более ранней работе [218] с использованием теории бушей нелинейных нормальных мод [1; 3]. Здесь мы воспроизводим их для полноты и ясности изложения.

ДНКМ могут быть возбуждены путем задания начальных смещений согласно схемам, представленным на рисунке 4.2 с нулевыми начальными скоростями. В однокомпонентных ДНКМ, рассматриваемых в этом исследовании, все начальные векторы смещения либо равны нулю, либо имеют одинаковую величину A , которая является амплитудой ДНКМ. Компоненты смещения Δx и Δy показаны на плоскости x, y стрелками, а Δz точками (положительные), крестики (отрицательные) или пустыми кружками (ноль). Все ненулевые компоненты перемещений имеют одинаковую величину. Если частица имеет только одну ненулевую компоненту вектора смещения, то она равна A (ДНКМ 2, 4, 7 и 10). Если частица имеет две ненулевые компоненты вектора смещения, то они равны $A/\sqrt{2}$ (ДНКМ 5, 8, 9 и 12). Для частицы, имеющей три ненулевые компоненты вектора смещения, они равны $A/\sqrt{3}$ (ДНКМ 1, 3, 6 и 11).

Трансляционная ячейка для ДНКМ 1, 2 и 3 включает $2 \times 2 \times 2$ кубических трансляционных ячеек ГЦК-решетки. Для всех остальных ДНКМ трансляционная ячейка имеет пространственный период, равный одной трансляционной ячейке ГЦК решетки.

4.1.3 Последовательность выполняемых расчетов

Возбуждая ДНКМ и интегрируя уравнения движения (4.3), находим временную эволюцию компонентов смещения $\Delta x(t)$, $\Delta y(t)$, и $\Delta z(t)$. Поскольку все ДНКМ являются точными периодическими во времени решениями, достаточно интегрировать по одному периоду колебаний. Таким образом, можно определить временной период ДНКМ, T , и круговую частоту ДНКМ, $\omega = 2\pi/T$.

Кроме того, были рассчитаны компоненты напряжения и упругие постоянные, а также кинетическая и потенциальная энергии вычислительной ячейки

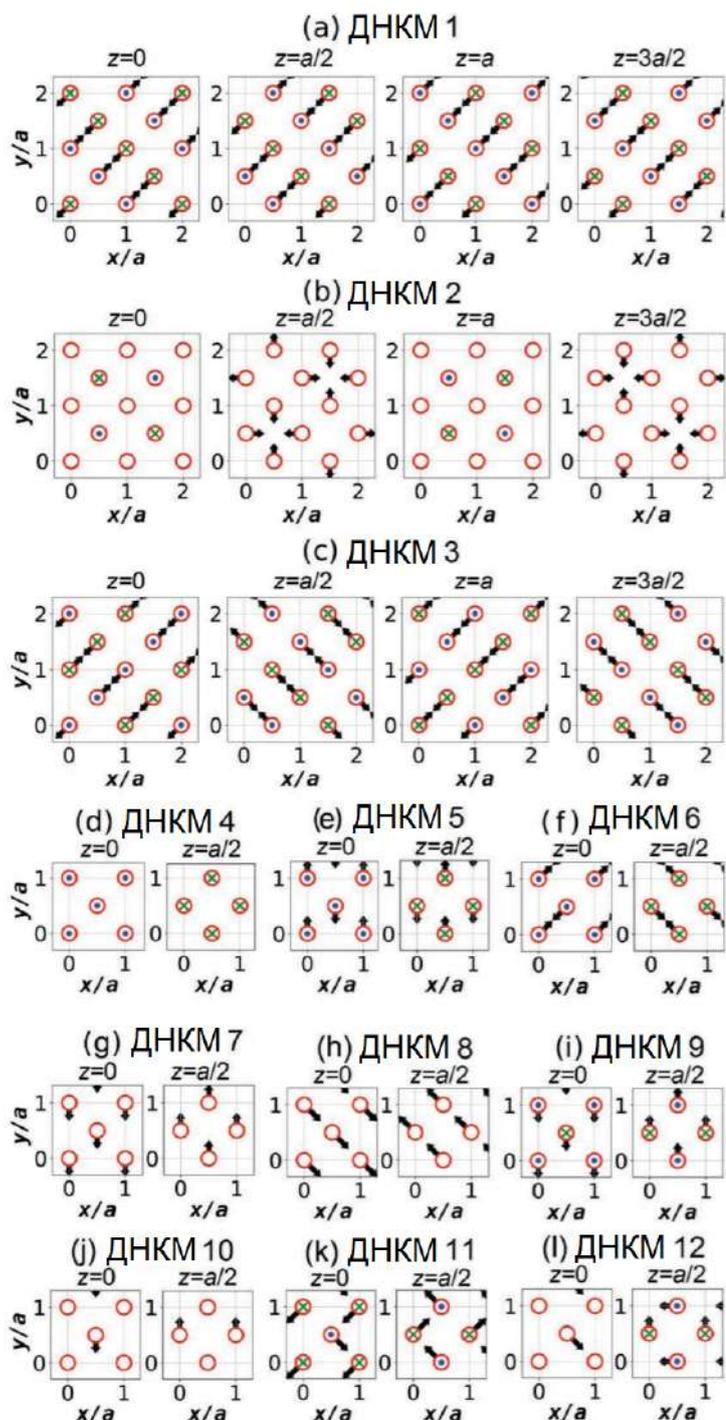


Рисунок 4.2 — (а-л) Начальные смещения частиц, используемые для возбуждения ДНКМ от 1 до 12 соответственно. Все частицы имеют нулевую начальную скорость. Смещения показаны в плоскостях, параллельных плоскости x, y , с координатой z , указанной на каждой панели. Все ненулевые векторы смещения имеют одинаковую длину A . Смещения Δx и Δy показаны на плоскости x, y стрелками, а Δz - точками (положительное значение), крестиком (отрицательное значение) или пустыми кружками (ноль). Все ненулевые компоненты перемещений имеют одинаковую величину.

в расчете на одну частицу, усредненные за период колебания ДНКМ, с использованием формул (4.9) и (4.10).

Обратим внимание на то, что для не слишком малых амплитуд колебаний ДНКМ модуляционно неустойчивы [4–13]. Однако эта неустойчивость не успевает проявиться в течение нескольких периодов колебаний, смоделированных в данном исследовании.

Опишем результаты моделирования. Будут проанализированы дисперсионные кривые, полученные для ГЦК решетки, они будут сопоставлены с амплитудно-частотными характеристиками ДНКМ, и, наконец, будет рассмотрено влияние ДНКМ на энергию и механические свойства решетки.

4.1.4 Дисперсионные кривые фононов для ГЦК-решетки

Важно знать расположение частот ДНКМ по отношению к фононному спектру ГЦК-решетки. В частности, ДНКМ с частотами выше фононной полосы представляют интерес для изучения ДБ [13; 24; 35; 55; 125; 146]. В данной работе рассчитан частотный спектр фононных волн малой амплитуды.

Кубические трансляционные ячейки ГЦК-решетки пронумерованы индексами m , n и k . Каждая ячейка содержит четыре частицы. Задача для нахождения собственных нормальных колебательных мод была сформулирована путем рассмотрения собственного вектора с двенадцатью компонентами, которые представляют собой смещения частиц в (m, n, k) -й трансляционной ячейке: $\mathbf{e} = (\Delta x_1, \Delta y_1, \Delta z_1, \dots, \Delta x_4, \Delta y_4, \Delta z_4)$.

Фононные волны принимаются в стандартной форме

$$\mathbf{w}_n = A\mathbf{e} \exp[i(q_x m + q_y n + q_z k - \omega t)], \quad (4.11)$$

где A - амплитуда, \mathbf{e} - нормированный собственный вектор ($|\mathbf{e}| = 1$), i - мнимая единица, $q_x, q_y, q_z \in [-\pi, \pi]$ - безразмерные волновые числа, а ω - частота. Подставляя уравнение (4.11) в линеаризованные уравнения движения (4.3) получаем 12-мерную задачу на собственные значения, которая решается с использованием алгоритма Якоби [221].

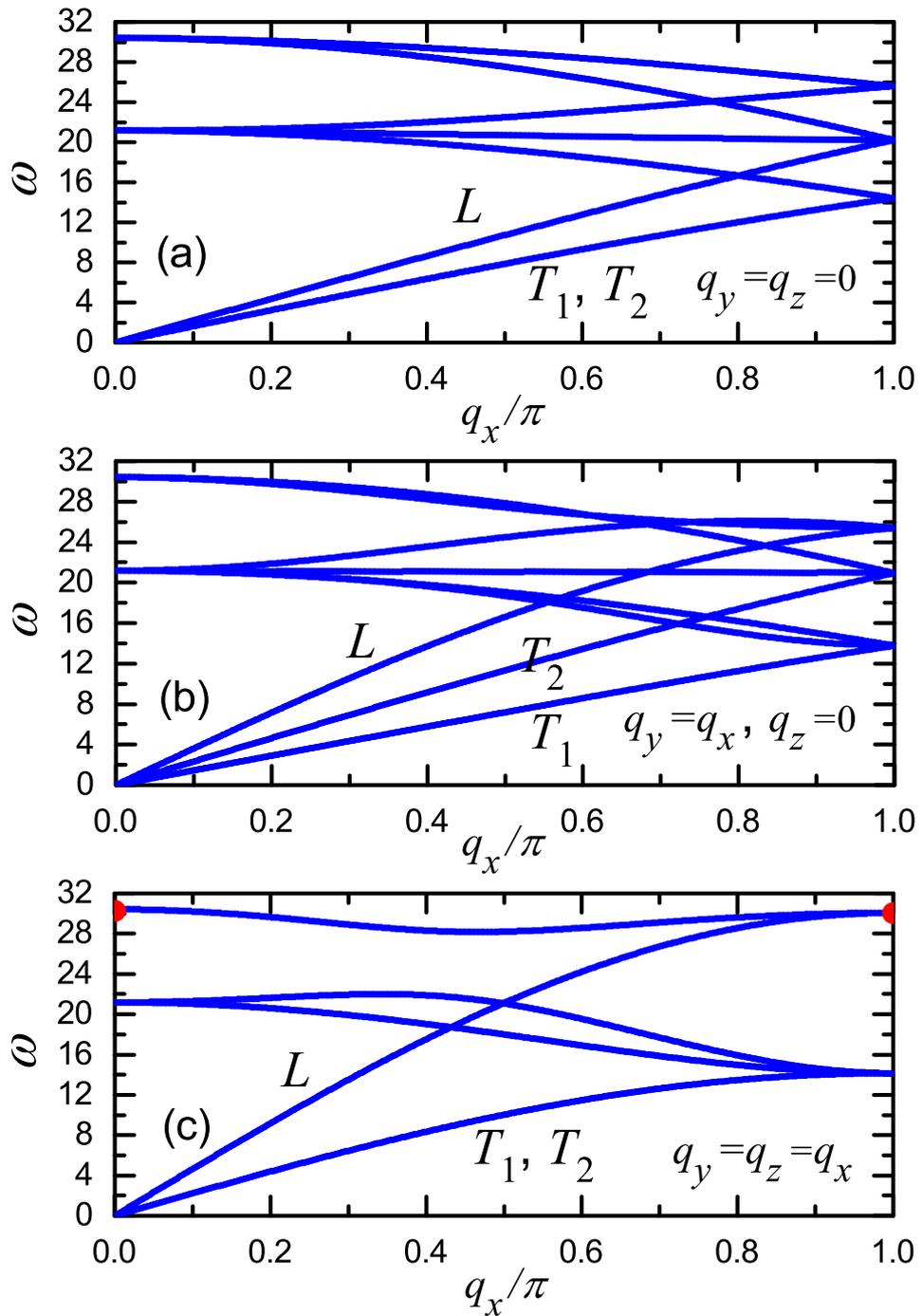


Рисунок 4.3 — Дисперсионные кривые для ГЦК кристалла вдоль кристаллографических направлений (a) [001], (b) [011] и (c) [111]. Параметр жесткости потенциала Морзе $\alpha = 7$.

Таблица 6 — 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 $q_x = q_y = q_z = 0$	ω_{\max} в точке $q_x = q_y = q_z = \pi$	$\rho = a/\sqrt{2}$
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

Решая задачу на собственные значения для набора волновых чисел, можно получить дисперсионные кривые, показанные на рисунке 4.3. Все дисперсионные кривые сложены вдвое, поскольку трансляционная элементарная ячейка в наших расчетах не является примитивной трансляционной ячейкой. Дисперсионные кривые представлены для трех линий в первой зоне Бриллюэна: (а) $q_x \in [0, \pi]$, $q_y = q_z = 0$; (b) $q_x = q_y \in [0, \pi]$, $q_z = 0$; и (с) $q_x = q_y = q_z \in [0, \pi]$. Другими словами, рассматриваются фононные волны, распространяющиеся вдоль кристаллографических направлений (а) $[001]$, (b) $[011]$ и (с) $[111]$.

Имеются три ветви дисперсионных кривых, из них одна для продольных (L) волн и две для поперечных волн (T_1, T_2), имеющих разную поляризацию. На рисунке 4.3 видно, что дисперсионные кривые для T_1 и T_2 совпадают на (а) и (с), но отличаются на (b).

Фононы с максимальной частотой могут иметь разные волновые числа в зависимости от жесткости межчастичного потенциала α , как показано в таблице 6. Для $\alpha = 4$ максимум достигается при $q_x = q_y = q_z = 0$, а для $\alpha \geq 5$ максимум достигается при $q_x = q_y = q_z = \pi$. Эти две точки отмечены красными кружками на рисунке 4.3(с).

4.1.5 Амплитудно-частотные характеристики ДНКМ

Амплитудно-частотные характеристики для ДНКМ в решетке Морзе приведены на рисунке 4.4(а,б) для параметра жесткости потенциала Морзе $\alpha = 4$ и 7 соответственно. Для сравнения, результат для ГЦК меди, полученный в ра-

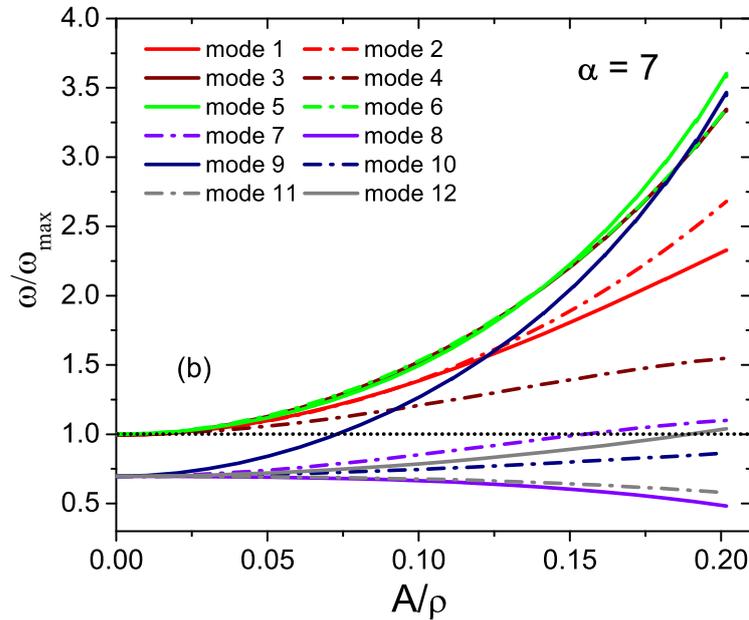
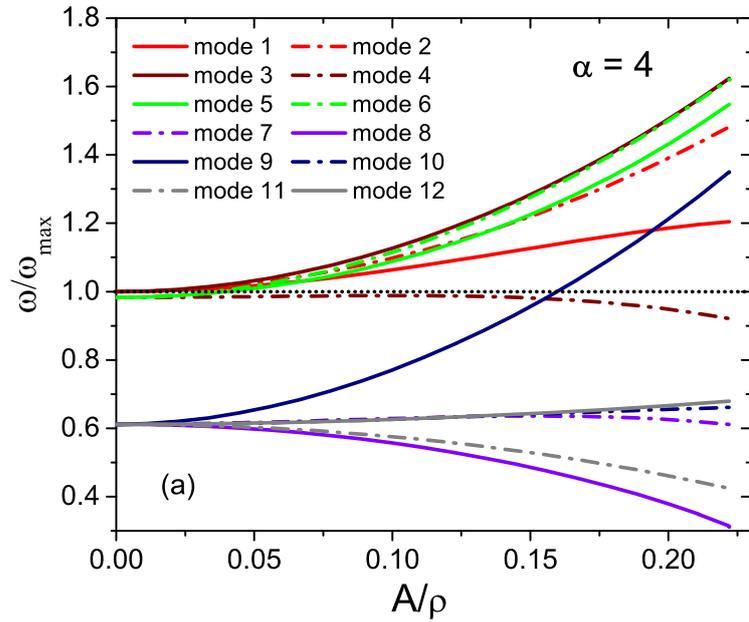


Рисунок 4.4 — Амплитудно-частотные характеристики двенадцати ДНКМ в решетке Морзе для (а) $\alpha = 4$ и (б) $\alpha = 7$. Горизонтальные пунктирные линии показывают максимальную частоту фононного спектра. Амплитуда ДНКМ нормирована на расстояние между частицами ρ , а частота ДНКМ - на максимальную фононную частоту ω_{\max} .

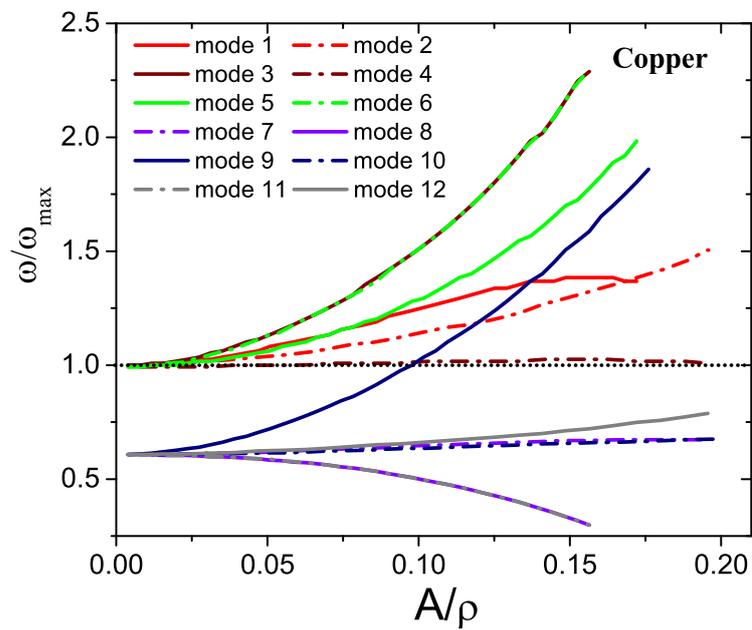


Рисунок 4.5 — Амплитудно-частотные характеристики для двенадцати ДНКМ в ГЦК меди, полученная в работе [218]] с использованием межатомных потенциалов ЕАМ, разработанных Чжоу и др. [222]. Амплитуда ДНКМ нормирована на расстояние между частицами ρ , а частота ДНКМ - на максимальную фононную частоту ω_{\max} .

боте [218] с использованием многочастичного межатомного потенциала ЕАМ, разработанного Чжоу и др. [222], представлен на рисунке 4.5.

На рисунках 4.4 и 4.5 пунктирными горизонтальными линиями показаны максимальные частоты фононов. Хотя может показаться, что при малых амплитудах ДНКМ с 1 по 6 имеют ту же частоту, что и максимальная частота фононов, но это не так. Первые три ДНКМ в пределе малой амплитуды становятся фононом с волновыми числами $q_x = q_y = q_z = \pi$, а ДНКМ с 4 по 6 становятся фононом с волновыми числами $q_x = q_y = q_z = 0$. Вот почему, согласно таблице 6, ДНКМ 1-3 на рисунке 4.4(а) при $\alpha = 4$ отщепляются от верхнего края фононной полосы, но ДНКМ 4-6 при малых амплитудах лежат внутри фононной полосы, хотя и близко к ее верхнему краю. На рисунке 4.4(б) для $\alpha = 7$ ситуация обратная (см. таблицу 6): при малых амплитудах ДНКМ 4-6 имеют более высокие частоты, чем ДНКМ 1-3.

Обратим внимание, что частоты ДНКМ с 7 по 12 выходят из одной точки, расположенной значительно ниже верхнего края фононной полосы.

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, например, ДНКМ 7 для $\alpha = 4$ на рисунке 4.4(а).

Сравнивая панели (а) и (б) на рисунке 4.4, можно сделать вывод, что для большего значения α частота увеличивается с амплитудой быстрее или уменьшается медленнее. В частности, частота ДНКМ 4 на (а) уменьшается, но на (б) увеличивается с ростом A .

Амплитудно-частотные характеристики для ДНКМ в меди, показанные на рисунке 4.5, ближе к тем, которые получены для решетки Морзе с $\alpha = 4$, а не $\alpha = 7$. Действительно, частоты ДНКМ 1 и ДНКМ 4 на 4.4(а) демонстрируют тенденцию к смягчению при больших A , аналогичную тому, что наблюдается для меди. Кроме того, в меди ДНКМ 1, 2 и 3 имеют более высокие частоты при низких амплитудах, чем ДНКМ 4, 5 и 6, как в случае решетки Морзе с $\alpha = 4$.

В целом, поведение амплитудно-частотных характеристик в основном определяется симметрией ДНКМ, а не межатомными потенциалами, поскольку у результатов для парных потенциалов Морзе с существенно различным пара-

метром α и даже для многочастичного потенциала ЕАМ, наблюдается много общего.

4.1.6 Энергия ДНКМ

В линейных решетках усредненная по времени кинетическая и потенциальная энергии равны. Отклонение этих двух энергий друг от друга характеризует ангармонизм нелинейных колебаний.

На рисунках 4.6 и 4.7 кинетическая и потенциальная энергии вычислительной ячейки в расчете на один атом, усредненные за период колебаний, согласно формуле (4.10), представлены как функции амплитуды для двенадцати ДНКМ. Угловые скобки для краткости опущены. Результаты для $\alpha = 4$ ($\alpha = 7$) показаны сплошными (пунктирными) линиями. Кинетическая (потенциальная) энергия показана черными (красными) кривыми.

Большинство ДНКМ имеют кинетическую энергию, превышающую потенциальную, за исключением ДНКМ 8 и 11. Этот результат коррелирует с частотно-амплитудными зависимостями для ДНКМ, показанными на рисунке 4.4, где можно видеть, что ДНКМ 8 и 11 проявляют мягкий ангармонизм. Кроме того, ДНКМ с быстро растущей кривой частота-амплитуда демонстрируют гораздо более быстрое увеличение энергии с увеличением амплитуды, как это видно на панелях для ДНКМ 3, 5, 6 и 9 на рисунках 4.6 и 4.7. ДНКМ с мягким ангармонизмом имеют меньшую энергию, например ДНКМ 8, 10, 11 и 12, см. рисунок 4.7.

4.1.7 Механический отклик решетки на возбуждение ДНКМ

Поскольку решетка ограничена периодическими граничными условиями, возбуждение ДНКМ приводит к появлению внутренних механических напряжений. Возбуждение ДНКМ влияет также на жесткость решетки. Компоненты тензора напряжений и константы жесткости колеблются во времени с периодом,

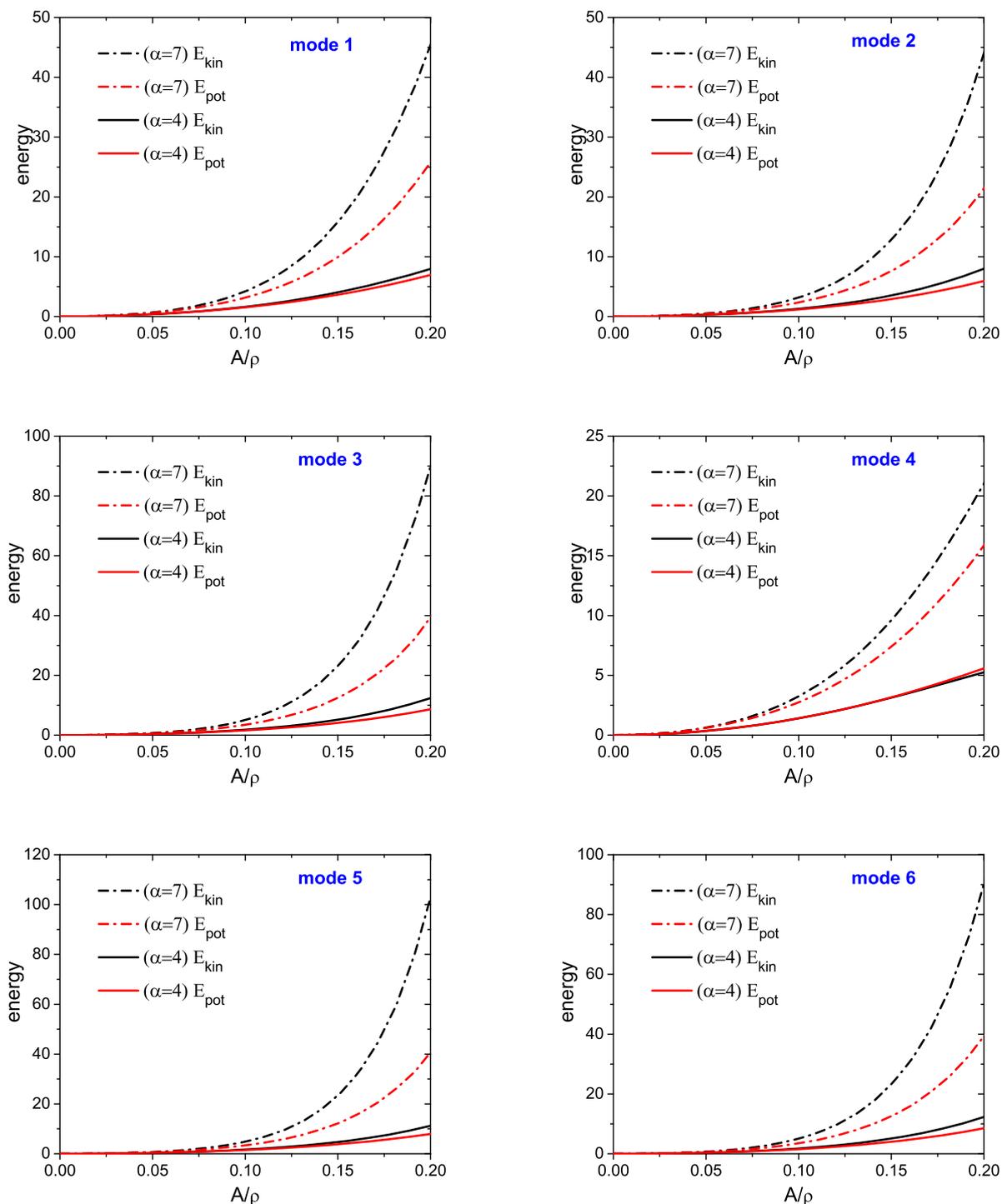


Рисунок 4.6 — Кинетическая и потенциальная энергии расчетной ячейки на атом, усредненные за период колебаний, как функции амплитуды для ДНКМ с 1 по 6 (угловые скобки, обозначающие осреднение, для краткости опущены). Результаты для $\alpha = 4$ ($\alpha = 7$) показаны сплошными (пунктирными) линиями.

Кинетическая (потенциальная) энергия показана черными (красными) кривыми.

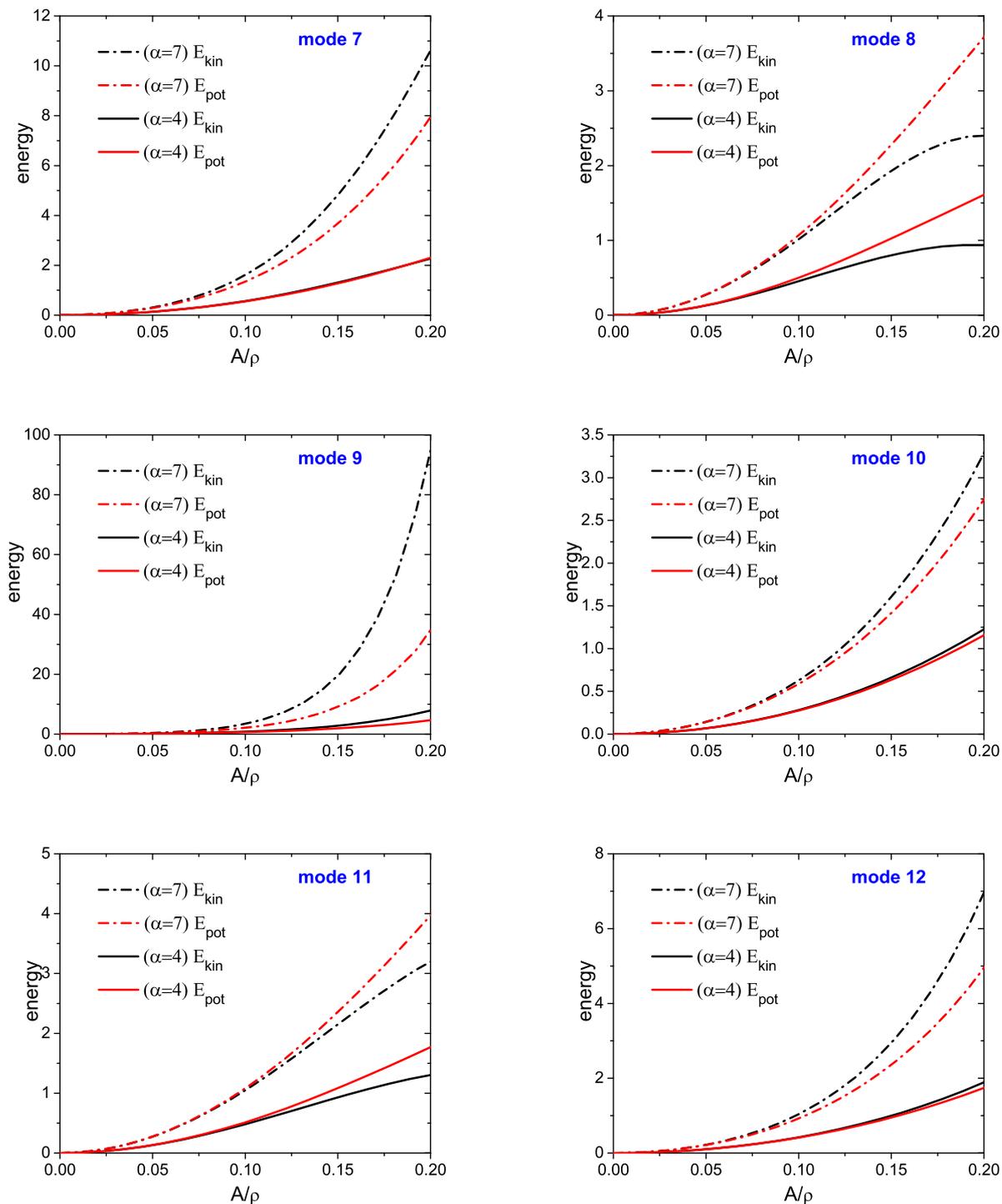


Рисунок 4.7 — Кинетическая и потенциальная энергии расчетной ячейки на атом, усредненные за период колебаний, как функции амплитуды для ДНКМ с 7 по 12 (угловые скобки для краткости опущены). Результаты для $\alpha = 4$ ($\alpha = 7$) показаны сплошными (пунктирными) линиями. Кинетическая (потенциальная) энергия показана черными (красными) кривыми.

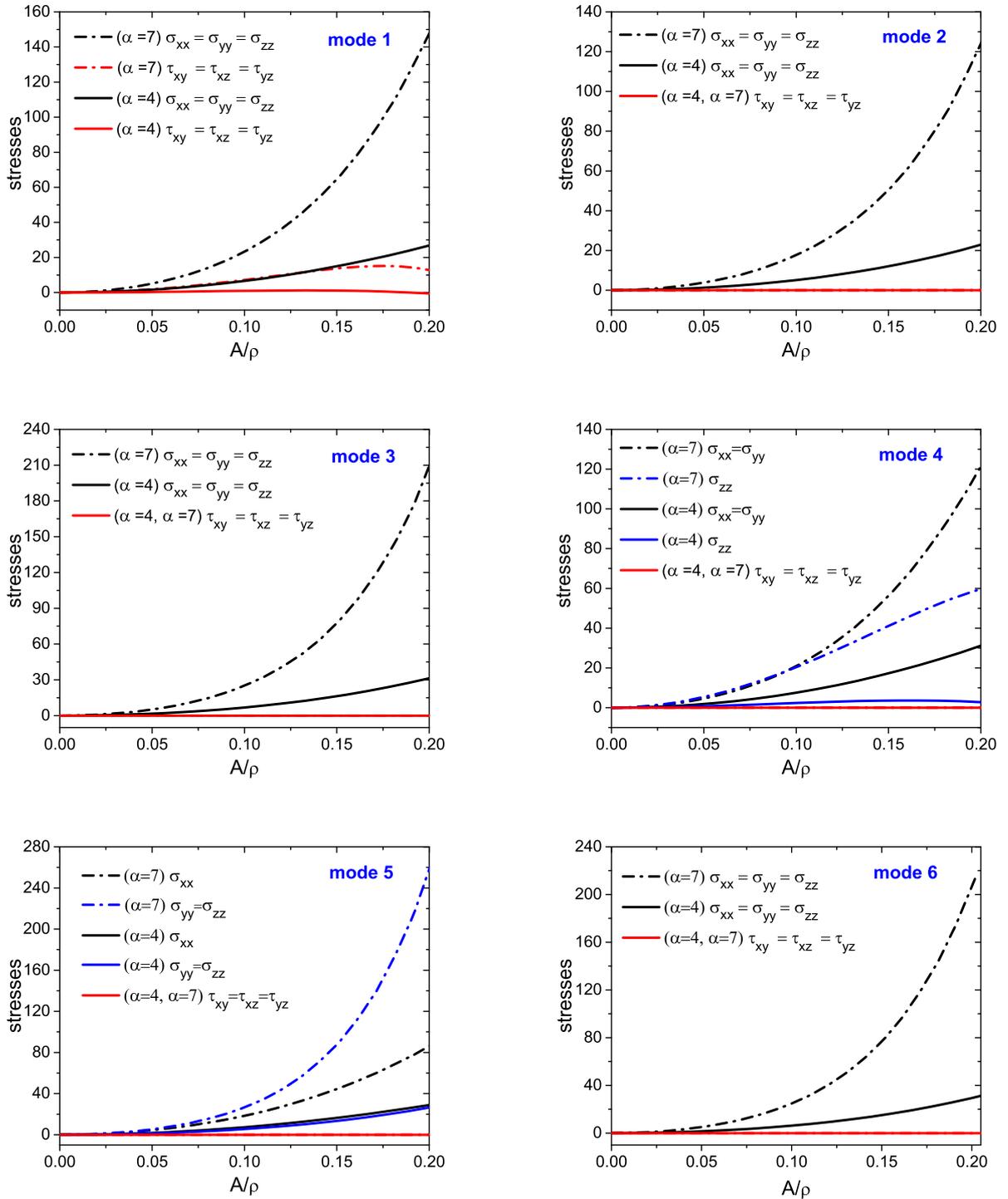


Рисунок 4.8 — Компоненты напряжения, усредненные за период колебаний, как функции амплитуды для ДНКМ с 1 по 6 (угловые скобки для краткости опущены). Результаты для $\alpha = 4$ ($\alpha = 7$) показаны сплошными (пунктирными) линиями.

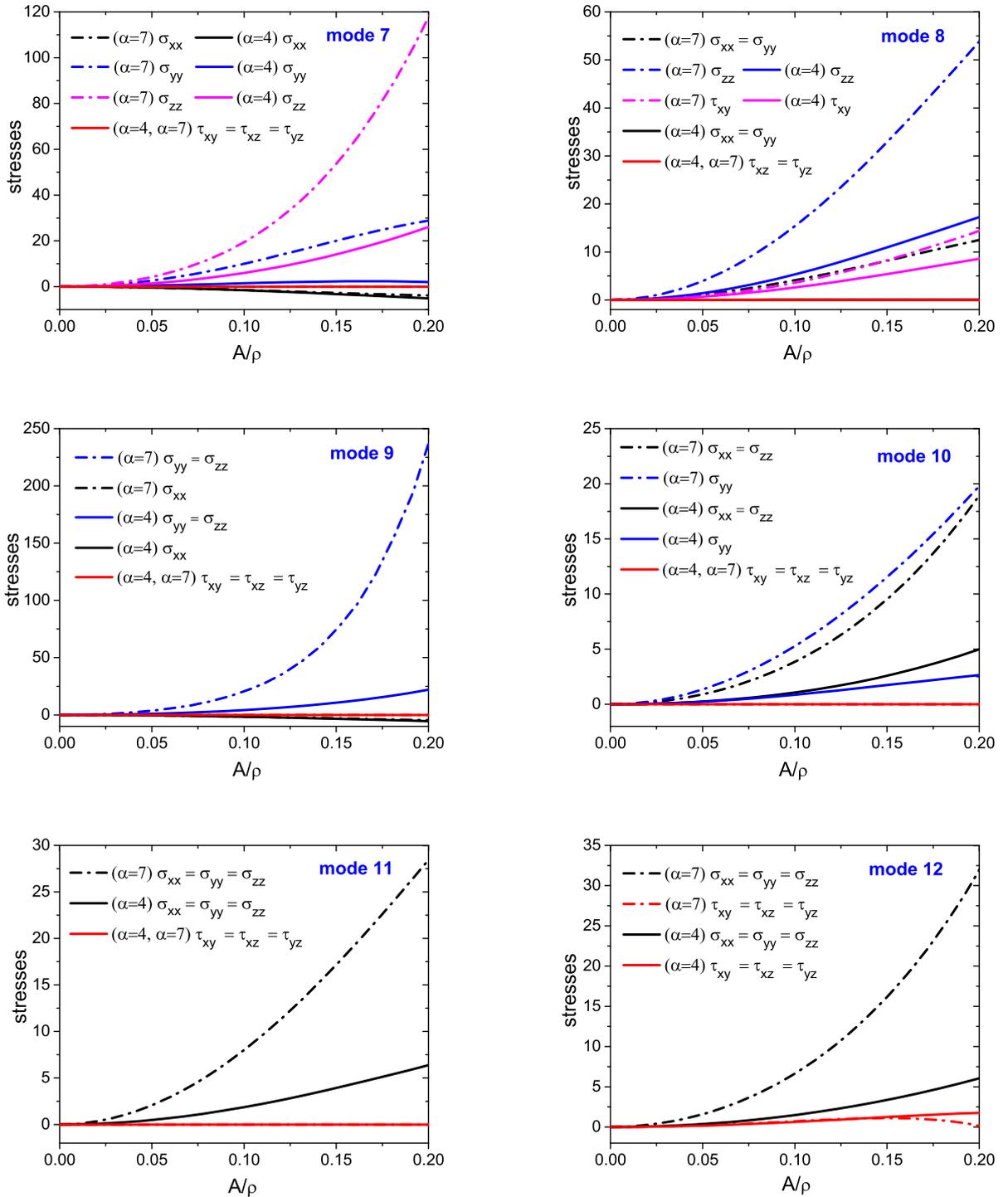


Рисунок 4.9 — Компоненты напряжения, усредненные за период колебаний, как функции амплитуды для ДНКМ с 7 по 12 (угловые скобки для краткости опущены). Результаты для $\alpha = 4$ ($\alpha = 7$) показаны сплошными (пунктирными) линиями.

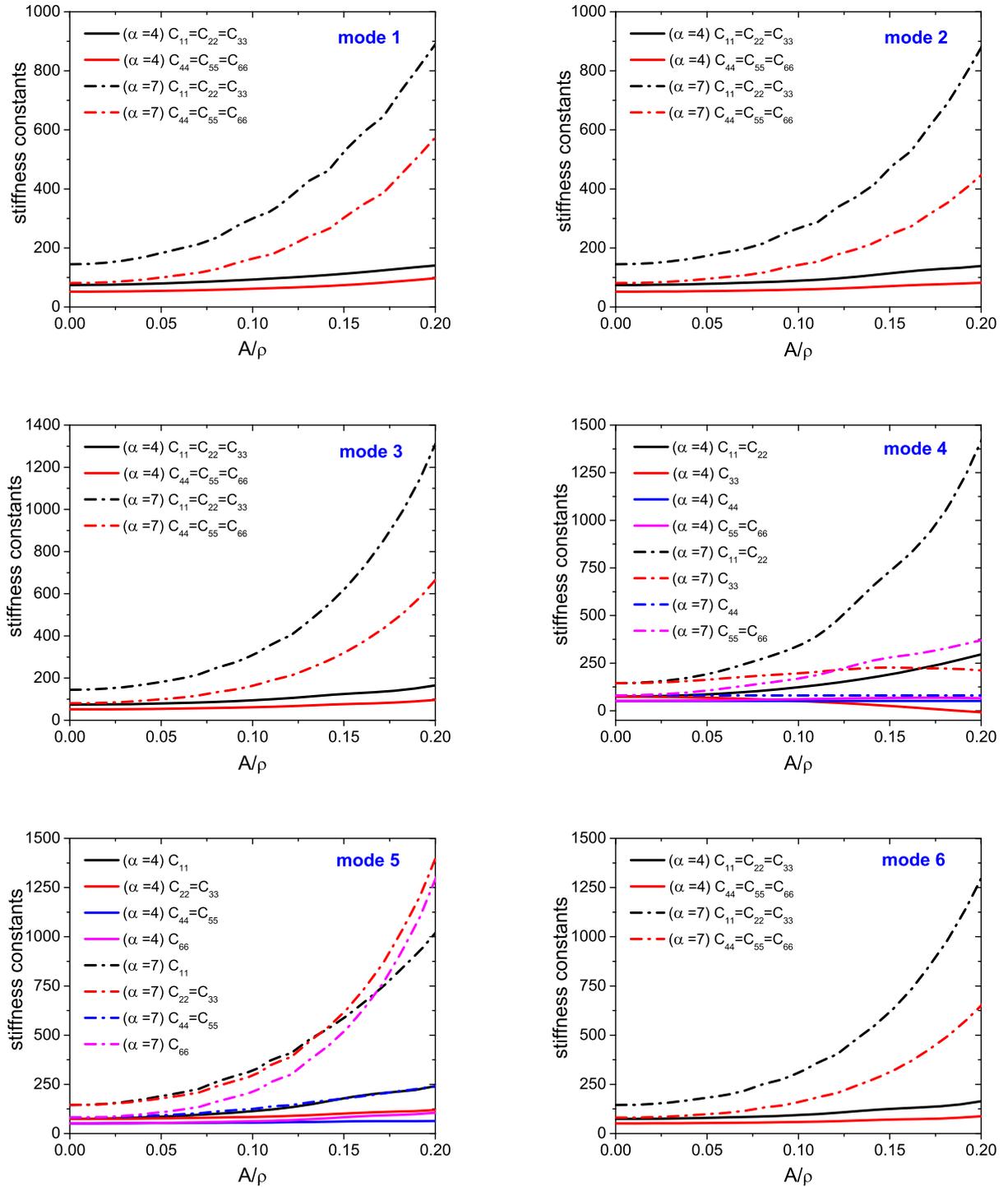


Рисунок 4.10 — Константы жесткости, усредненные за период колебаний, как функции амплитуды для ДНКМ с 1 по 6 (угловые скобки для краткости опущены). Результаты для $\alpha = 4$ ($\alpha = 7$) показаны сплошными (пунктирными) линиями.

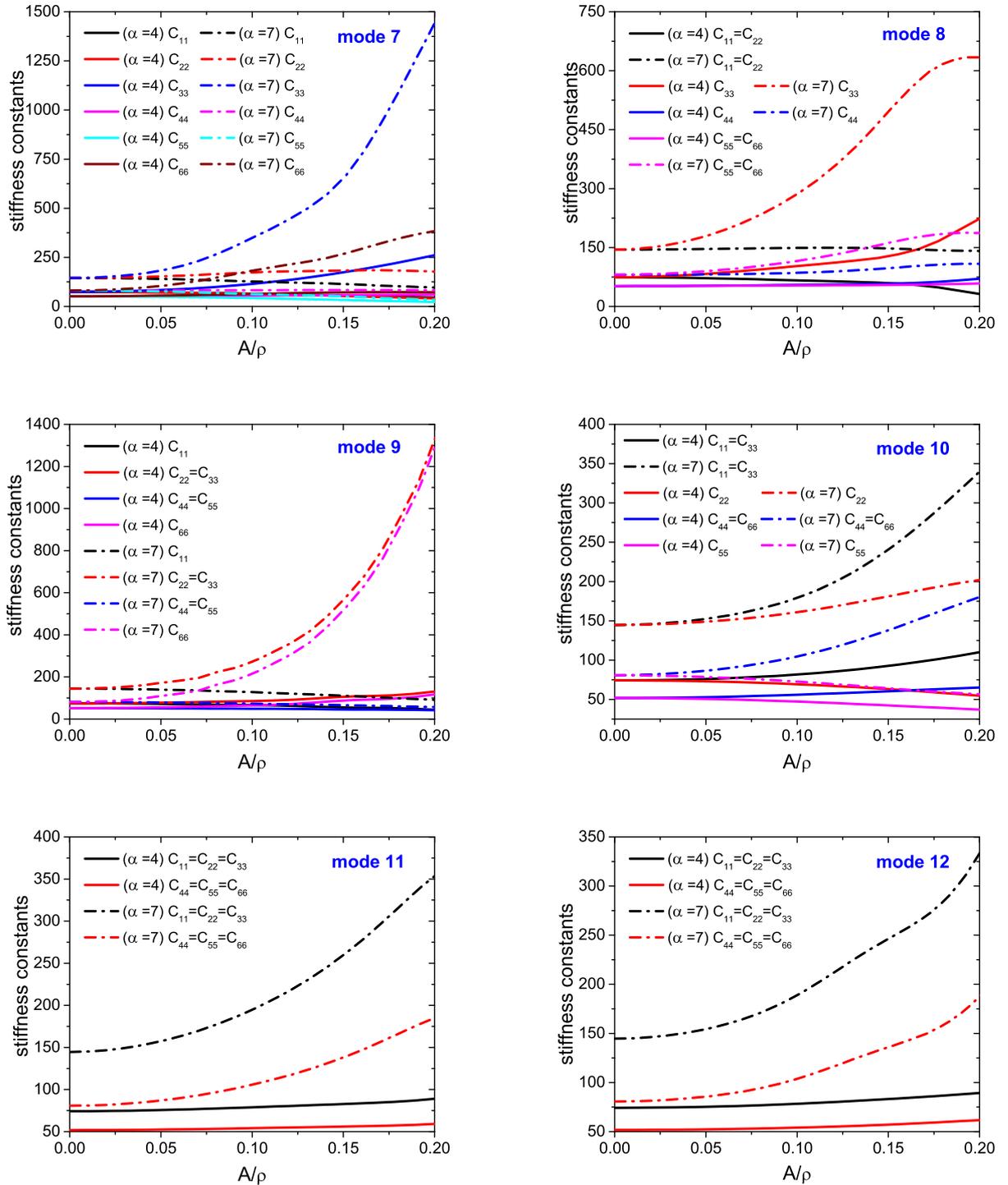


Рисунок 4.11 — Константы жесткости, усредненные за период колебаний, как функции амплитуды для ДНКМ с 7 по 12 (угловые скобки для краткости опущены). Результаты для $\alpha = 4$ ($\alpha = 7$) показаны сплошными (пунктирными) линиями.

равным половине периода ДНКМ, и мы будем анализировать усредненные за период значения, определенные уравнением (4.9).

Зависимости осредненных по времени компонент напряжений и констант жесткости от амплитуды ДНКМ показаны на рисунках 4.8 и 4.9 и рисунках 4.10 и 4.11 соответственно сплошными (штрихпунктирными) линиями для $\alpha = 4$ ($\alpha = 7$). Угловые скобки, обозначающие средние значения, для краткости опускаются.

Все кривые на рисунках 4.8 и 4.9 и рисунках 4.10 и 4.11 начинают расти с нулевой производной, что означает, что появление напряжений и изменение констант жесткости из-за ДНКМ являются нелинейными эффектами, которые не наблюдаются при малых амплитудах.

Симметрия ДНКМ определяет количество неравных компонент напряжения и взаимосвязь между различными константами жесткости.

Сравнение рисунков 4.8 и 4.9 с рисунками 4.10 и 4.11 показывает корреляцию между составляющими напряжения и константами жесткости. Например, для высокосимметричных ДНКМ 1, 2, 3, 6, 11 и 12 нормальные и касательные напряжения равны, $\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \sigma_{zz}$, $\tau_{xy} = \tau_{xz} = \tau_{yz}$; а для констант жесткости выполняются равенства $C_{11} = C_{22} = C_{33}$ и $C_{44} = C_{55} = C_{66}$. Обратим внимание, что C_{ii} для $i = 1, 2$ и 3 характеризует жесткость по отношению к растяжению-сжатию, а для $i = 4, 5$ и 6 по отношению к сдвигу.

Для других мод с более низкой симметрией сохраняется корреляция между нормальными напряжениями σ_{xx} , σ_{yy} , σ_{zz} и константами упругости C_{11} , C_{22} , and C_{33} . В частности, для ДНКМ 4, $\sigma_{xx} = \sigma_{yy} \neq \sigma_{zz}$ и $C_{11} = C_{22} \neq C_{33}$. Для ДНКМ 5 $\sigma_{xx} \neq \sigma_{yy} = \sigma_{zz}$ и $C_{11} \neq C_{22} = C_{33}$. Для ДНКМ 7 $\sigma_{xx} \neq \sigma_{yy} \neq \sigma_{zz}$ и $C_{11} \neq C_{22} \neq C_{33}$. For ДНКМ 8 $\sigma_{xx} = \sigma_{yy} \neq \sigma_{zz}$ и $C_{11} = C_{22} \neq C_{33}$. Для ДНКМ 9 $\sigma_{xx} \neq \sigma_{yy} = \sigma_{zz}$ и $C_{11} \neq C_{22} = C_{33}$. Для ДНКМ 10 $\sigma_{xx} = \sigma_{zz} \neq \sigma_{yy}$ и $C_{11} = C_{33} \neq C_{22}$.

С другой стороны, для ДНКМ с низкой симметрией соотношение между касательными напряжениями не всегда коррелирует с константами жесткости, потому что в некоторых случаях константы жесткости могут быть неравными, в то время как все напряжения сдвига равны нулю. Фактически, для ДНКМ 4, 5, 9 и 10 $\tau_{xy} = \tau_{xz} = \tau_{yz} = 0$, но среди C_{44} , C_{55} , и C_{66} равны только две константы жесткости. Для ДНКМ 7, $\tau_{xy} = \tau_{xz} = \tau_{yz} = 0$, но C_{44} , C_{55} и C_{66} все разные.

Для ДНКМ 8, $C_{44} \neq C_{55} = C_{66}$ и $\tau_{xy} \neq \tau_{xz} = \tau_{yz}$. Только в этом случае наблюдается корреляция между касательными напряжениями и упругими постоянными.

Большинство ДНКМ создают положительные (сжимающие) нормальные напряжения. Исключение составляют низкосимметричные ДНКМ 7 и 9 с небольшой отрицательной составляющей σ_{xx} . Для ДНКМ 3, 5, 6 и 9 наблюдается быстрый рост нормальных напряжений и упругих постоянных с амплитудой ДНКМ; все эти моды демонстрируют сильный ангармонизм жесткого типа, то есть быстрое увеличение частоты с амплитудой, как показано на рисунке 4.4. ДНКМ, демонстрирующие ангармонизм мягкого типа или медленный рост частоты с амплитудой, также демонстрируют медленное увеличение нормальных напряжений и упругих постоянных с амплитудой, например ДНКМ 8, 10, 11 и 12.

4.2 ДНКМ ОЦК решетки

Настоящая работа посвящена изучению нескольких ДНКМ в ОЦК-металлах ванадий и ниобий. Наложение на ДНКМ локализирующих функций со сферической симметрией позволит найти новые типы ДБ (см. раздел 5.2).

Результаты данного раздела опубликованы в работе [58].

4.2.1 Постановка задачи и описание компьютерной модели

Компьютерное моделирование выполняется с использованием пакета молекулярной динамики LAMMPS [223; 224]. Межатомные взаимодействия для ОЦК ванадия и ниобия описываются межатомными потенциалами, разработанными Менделевым и др. [49] и Феллингером и др. [50] соответственно. Из условия минимума потенциальной энергии, в результате релаксации структуры, был установлен равновесный параметр ОЦК-решетки при нулевой температуре. Для V он равен $a_V = 3,02987 \text{ \AA}$, а для Nb - $a_{Nb} = 3,30790 \text{ \AA}$. Расчетная ячейка со-

держит $14 \times 14 \times 14$ кубических трансляционных ячеек ОЦК-решетки, каждая из которых включает по 2 атома, и, таким образом, общее количество атомов в ячейке составляет 5488. Такого размера расчетной ячейки достаточно для анализируемых ДБ в данной работе, потому что они имеют достаточно высокую степень пространственной локализации и ДБ, помещенная в центр ячейки с периодическими граничными условиями, практически не взаимодействует со своими периодическими изображениями. Моделирование проводится для ансамбля NVE (постоянное количество атомов, объем и энергия). Температурные колебания не учитываются. Уравнения движения решаются численно с использованием алгоритма Верле 4-го порядка с шагом по времени 0,5 фс. Фононные спектры рассматриваемых металлов рассчитываются с помощью подпрограммы, установленной в пакете LAMMPS.

В этом исследовании рассматривается проблема построения однокомпонентных ДНКМ в ОЦК решетке и расчет для них частотно-амплитудных зависимостей. В следующей главе будет осуществлен поиск пространственно локализованных колебательных мод с относительно большим временем жизни, т. е. квазибризеров [43].

Мы ищем ДНКМ с трансляционной ячейкой, которая включает кубические трансляционные ячейки $2 \times 2 \times 2$ ОЦК-решетки. Начальные условия задаются применением начальных смещений атомов $\Delta r_n = (\Delta x_n, \Delta y_n, \Delta z_n)$ по определенным схемам, $n = 1, \dots, N$, где N - количество атомов в расчетной ячейке. Для однокомпонентных ДНКМ, рассматриваемых в данном исследовании, длина векторов смещения, $|\Delta r_n|$, равна либо 0, либо A для всех атомов, где A - амплитуда моды. Начальные скорости всех атомов равны нулю, $\Delta \dot{r}_n = 0$. Затем вычисляется частота ДНКМ как функция ее амплитуды A .

4.2.2 Результаты моделирования и обсуждение

Существует строгий метод поиска всех возможных ДНКМ для решетки, основанный на рассмотрении преобразований точечной симметрии, поддерживаемых решеткой [1–3]. Здесь мы не стремимся получить все возможные ДНКМ, количество которых может быть очень большим. Мы ограничиваем-

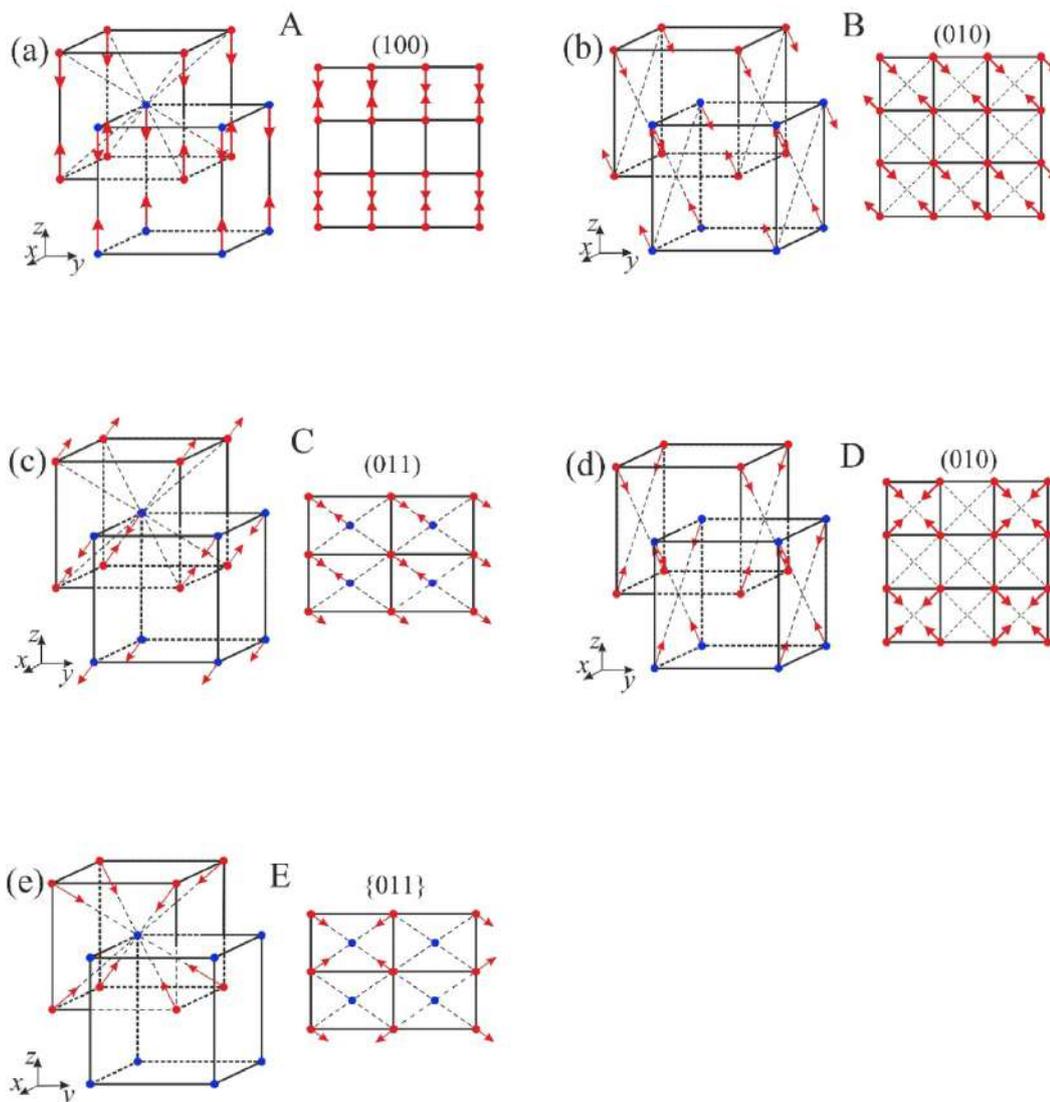


Рисунок 4.12 — (а-е) Начальные смещения атомов, использованные для возбуждения пяти однокомпонентных ДНКМ в ОЦК решетке. Слева даны трехмерные изображения, а справа нанесены атомные смещения репрезентативной плоскости. Для наглядности ОЦК решетка разбита на две простые кубические подрешетки, показанные красными и синими точками. В тексте колебательные моды, изображенные на панелях с (а) по (е), называются ДНКМ от А до Е соответственно.

ся только однокомпонентными ДНКМ с периодической ячейкой, включающей $2 \times 2 \times 2$ кубических трансляционных ячейки ОЦК-решетки. Мы используем эвристический подход для поиска некоторых из таких ДНКМ. Подбирая начальные перемещения 16 примитивных кубических подрешеток, мы ищем случаи, когда наблюдается периодическое движение подрешеток. Таким образом, мы смогли найти пять однокомпонентных ДНКМ, но могут существовать и другие.

На рисунке 4.12(a-e) представлены начальные схемы смещения пяти однокомпонентных ДНКМ, обозначенных как А-Е, соответственно. Для каждой моды слева мы показываем трехмерное изображение, а справа - смещения атомов в представительной атомной плоскости. ОЦК-решетка представлена как объединение двух простых кубических решеток, показанных красными и синими точками. Все пять ДНКМ являются точными решениями уравнений движения атомов, продиктованных симметрией ОЦК-решетки. Этот факт был подтвержден наблюдением за динамикой мод. Возбуждение ДНКМ приводит к периодическим колебаниям атомов, сохраняющим во времени исходную картину. Сделаем несколько комментариев. Существуют однокомпонентные ДНКМ, отличные от пяти мод, представленных на рисунке 4.12, но здесь мы не стремимся рассматривать все возможные однокомпонентные ДНКМ. ДНКМ обычно неустойчивы, если их амплитуда превышает пороговое значение [65; 68]. Время жизни ДНКМ меньше для большей амплитуды, потому что скорость развития неустойчивости (показатель критической экспоненты) увеличивается с ростом амплитуды. Мы анализируем свойства ДНКМ в течение их времени жизни, до того, как они будут разрушены из-за неустойчивости.

Опишем более подробно ДНКМ, показанные на рисунке 4.12. ДНКМ на панелях с (a) по (e), будут обозначаться буквами от А до Е соответственно. В моде А, показанной на (a), все атомы колеблются вдоль оси z . В моде В все атомы колеблются вдоль линии $x = z$ с $\Delta y_n(t) = 0$. В моде С все атомы колеблются так, что в любой момент времени t выполняется $|\Delta x_n(t)| = |\Delta y_n(t)| = |\Delta z_n(t)|$. Другими словами, все атомы колеблются вдоль кристаллографического направления [111]. В моде D половина атомов колеблется вдоль линии $x = z$, а другая половина - вдоль $x = -z$ с $\Delta y_n(t) = 0$ в обоих случаях. В моде Е движутся только атомы одной простой кубической подрешетки (для определенности красная подрешетка), а атомы второй подрешетки находятся в состоянии покоя. Движу-

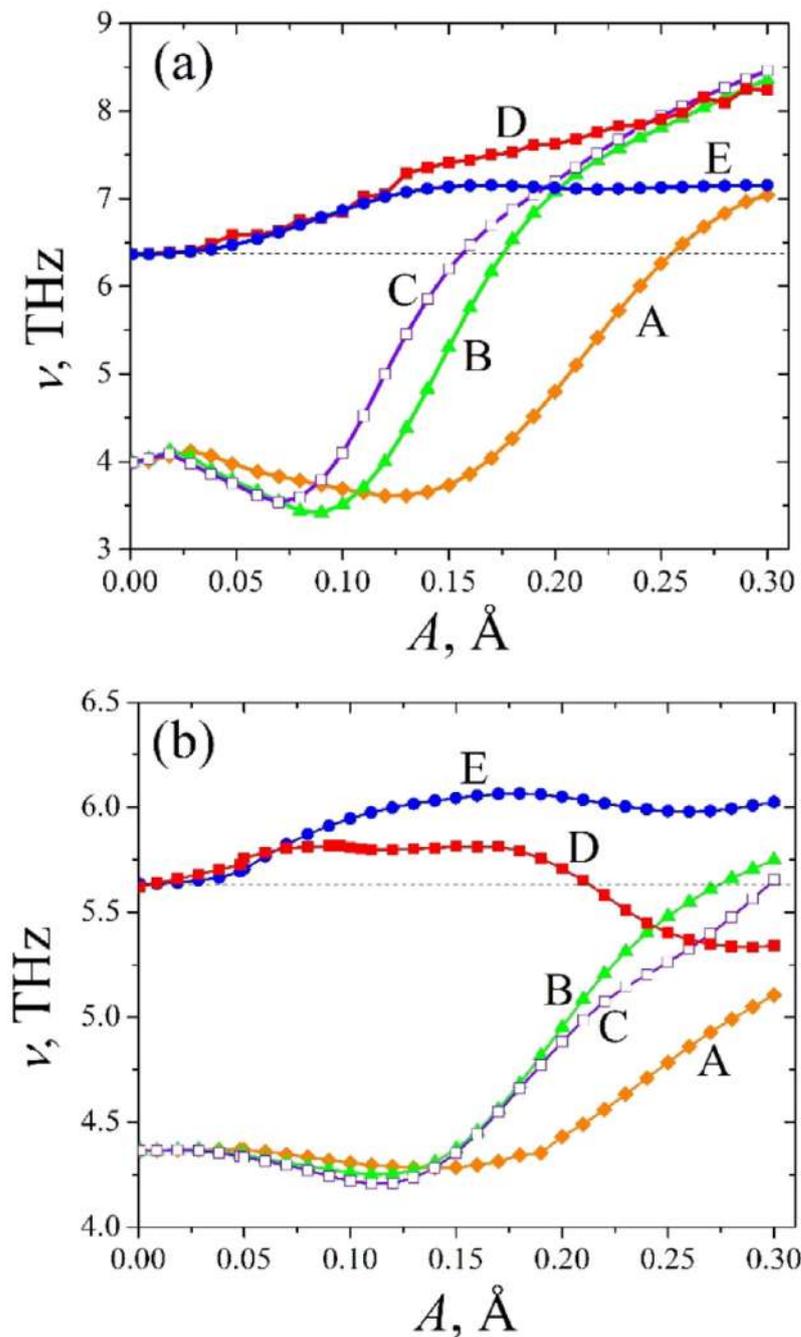


Рисунок 4.13 — Частота как функция начальной амплитуды для пяти ДНКМ, показанных на рисунке 4.12 для (a) V и (b) Nb. Горизонтальные пунктирные линии показывают верхний край фононного спектра. Буквы от А до Е связывают результаты с модами, показанными на рисунке 4.12(а-е), соответственно.

щиеся атомы колеблются вдоль $[111]$ кристаллографических направлений, так что в любой момент времени t будет $|\Delta x_n(t)| = |\Delta y_n(t)| = |\Delta z_n(t)|$.

Для дальнейшего анализа важно рассчитать амплитудно-частотные зависимости для исследуемых ДНКМ. Этот результат представлен на рисунке 4.13 для (а) V и (б) Nb, где абсцисса обозначает начальную амплитуду ДНКМ. Горизонтальные штриховые линии показывают верхний край фононного спектра. Видно, что моды А, В и С для малых амплитуд имеют одинаковую частоту, равную 4 ТГц в V и 4,4 ТГц в Nb, которые находятся в пределах фононных спектров. С увеличением амплитуды частоты ДНКМ А, В и С увеличиваются и становятся разными. В V частоты ДНКМ В и С выходят из фононного спектра начиная с амплитуды около 0,15 Å. ДНКМ А имеет частоты выше фононного спектра для амплитуд выше 0,25 Å. В Nb ДНКМ А, В и С остаются в фононном спектре даже для больших амплитуд. Частоты ДНКМ D и E в обоих металлах совпадают для малых амплитуд и равны максимальной фононной частоте (6,4 ТГц для V и 5,6 ТГц для Nb). Частоты этих мод увеличиваются с амплитудой, оставаясь выше фононного спектра, за исключением частоты ДНКМ D в Nb для амплитуд выше 0,2 Å.

4.3 Выводы по главе 4 и направления дальнейших исследований

В данной работе проанализированы различные свойства двенадцати однокомпонентных ДНКМ ГЦК решетки Морзе (см. рисунок 4.2), описанные ранее в работе [218], в зависимости от параметра жесткости потенциала Морзе α . Среди них амплитудно-частотные характеристики ДНКМ (рисунок 4.4), сопоставленные с кривыми дисперсии фононов (рисунок 4.3), усредненные по времени кинетическая и потенциальная энергии расчетной ячейки на атом (рисунок 4.6), усредненные по времени компоненты напряжения (рисунок 4.8) и константы жесткости решетки (рисунок 4.10).

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 6.

Этот результат показывает, что для разных значений параметра жесткости потенциала Морзе α разные ДНКМ имеют частоты выше фононной полосы, что имеет большое значение при анализе возможных типов ДБ в ГЦК кристаллах. Обратим внимание, что различные типы ДБ могут быть получены путем наложения функций локализации на ДНКМ, которые имеют частоту вне фононной полосы [55; 58; 225]. 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.

Анализ усредненных по времени кинетической и потенциальной энергии ДНКМ, представленных на рисунках 4.6 и 4.7, показал, что для ДНКМ кинетическая энергия больше потенциальной, за исключением ДНКМ 8 и 11. Это можно объяснить мягким ангармонизмом ДНКМ 8 и 11, как видно из рисунка 4.4. ДНКМ с быстро растущими частотно-амплитудными кривыми показывают быстрое увеличение энергии с амплитудой, например, ДНКМ 3, 5, 6 и 9, в то время как ДНКМ 8, 10, 11 и 12 с мягким ангармонизмом имеют меньшую энергию.

Механический отклик решетки также коррелирует с амплитудно-частотными характеристиками ДНКМ. Большинство ДНКМ создают положительные (сжимающие) нормальные напряжения. Исключение составляют низкосимметричные ДНКМ 7 и 9 с небольшой отрицательной составляющей σ_{xx} . Быстрый рост нормальных напряжений и упругих постоянных с амплитудой ДНКМ наблюдается для ДНКМ 3, 5, 6 и 9, которые демонстрируют сильный жесткий ангармонизм, как видно из рисунка 4.4. ДНКМ, демонстрирующие мягкий ангармонизм или медленный рост частоты с амплитудой, одновременно демонстрируют медленный рост нормальных напряжений и упругих постоянных с амплитудой, например ДНКМ 8, 10, 11 и 12.

Хаотические ДБ возникают в решетках в результате модуляционной неустойчивости ДНКМ с частотой вне фононной полосы [4–12]. Согласно представленным здесь результатам, ДНКМ с 1 по 6 являются хорошими кандидатами для создания хаотических ДБ, и это следует проверить в будущих работах.

С помощью моделирования методом молекулярной динамики были построены пять однокомпонентных ДНКМ для ОЦК-решетки. Полученные ДНКМ являются точными решениями уравнений движения атомов, продиктованными симметрией решетки, существующими независимо от типа межатомного потенциала и амплитуды.

Амплитудно-частотные зависимости были рассчитаны для пяти ДНКМ в двух ОЦК-металлах, ванадии и ниобии. Как следует из рисунка 4.13(b), самая высокая частота ДНКМ 6,1 ТГц наблюдается в Nb для моды E и находится всего на 9% выше верхнего края фононного спектра. В V самые высокие частоты ДНКМ находятся на уровне 8,5 ТГц (для мод B, C и D), что на 33% выше фононного спектра (см. рисунок 4.13(a)).

Данные о частотах ДНКМ будут использованы при анализе свойств основанных на них ДБ.

Проделанная работа и полученные результаты способствуют более глубокому пониманию нелинейной динамики ГЦК и ОЦК решеток и открывают путь для изучения новых типов ДБ в этих решетках.

Глава 5. ДБ трехмерных решеток

В данной главе мы переходим к получению и анализу свойств новых типов ДБ в трехмерных решетках.

5.1 ДБ в ГПУ металлах

Сначала будут рассмотрены нульмерные движущиеся ДБ в бериллии цирконии, а затем двумерные ДБ в ванадии и ниобии.

5.1.1 Движущиеся ДБ в бериллии и цирконии

Результаты данного раздела были опубликованы в работе [70; 87].

В настоящее время бериллий рассматривается как материал первой стенки токамака - строящегося экспериментального термоядерного реактора ИТ-ЭР [226]. В результате реакции термоядерного синтеза образуются высокоэнергетические частицы, взаимодействующие непосредственно с первой стенкой. С другой стороны, бериллий планируется использовать в качестве умножителя нейтронов для увеличения числа нейтронов, возникающих при синтезе дейтерия и трития при попадании этих нейтронов на ядра бериллия. В таких условиях высокоэнергетические частицы вызывают значительные смещения атомов из положений равновесия, что, в свою очередь, может привести к возбуждению высокоамплитудных ДБ.

Целью данного раздела является выявление условий существования и характеристик покоящихся и движущихся ДБ в чистых ГПУ металлах - бериллии и цирконии, в широком диапазоне амплитуд.

Представим детали моделирования.

Молекулярно-динамические расчеты проводились с использованием пакета программ LAMMPS [223] с межатомными потенциалами взаимодействия

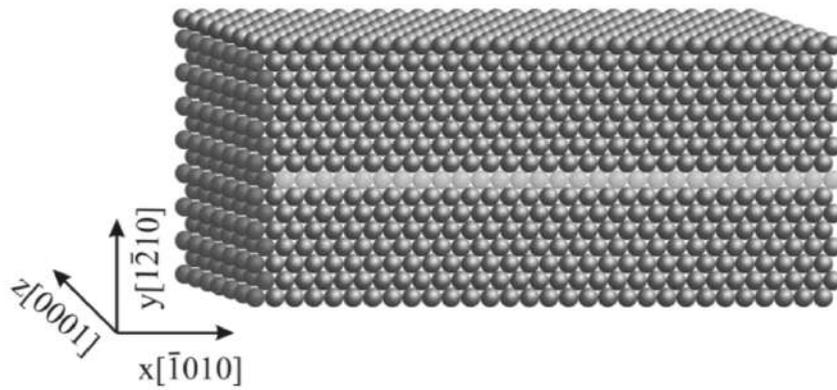


Рисунок 5.1 — Схематическое изображение расчетной ячейки. Показаны координатные оси и ориентация кристаллографических направлений вдоль координатных осей. Светлым показан атомный ряд в котором запускался движущийся ДБ с использованием анзаца (3.55).

для бериллия и циркония, построенными на основе метода погруженного атома (ЕАМ-потенциалы). Для моделирования использовалась расчетная ячейка с размерами $30 \times 10 \times 10$ атомных плоскостей, что соответствует размерам $68.58 \times 39.59 \times 38.86 \text{ \AA}$ для Be и $96.93 \times 55.96 \times 54.53 \text{ \AA}$ для Zr, при этом, ячейка включала 12000 атомов. Ориентация кристаллографических направлений ячейки показана на рисунке 5.1. Периодические граничные условия накладывались на расчетную ячейку в трех координатных направлениях. Расчеты проводились с использованием NVE термодинамического ансамбля (постоянство числа атомов, объема и энергии).

Следуя работе [34], ДБ возбуждались в плотноупакованном атомном ряду, имеющем в ГПУ решетке кристаллографическое направление $[\bar{1}010]$ (выделен светлым на рисунке 5.1). Атомы плотноупакованного ряда были занумерованы индексом n . Начальные условия для возбуждения ДБ основаны на применении анзаца 3.55 описанного в работе [75]. Анзац содержит следующие параметры: частота ДБ ω , она должна лежать выше фононного спектра кристалла, амплитуда ДБ A , амплитуда статических смещений атомов B , δ определяет разность фаз колебаний соседних атомов, параметры β , γ задают степень пространственной локализации ДБ. При этом скорость ДБ зависит от параметра δ , и при $\delta = 0$ имеем ДБ с нулевой скоростью. От знака δ зависит направление движения ДБ.

Перейдем к описанию результатов моделирования.

По результатам молекулярно-динамических расчетов были построены зависимости амплитуд колебания атомов T_n и статических смещений атомов S_n ,

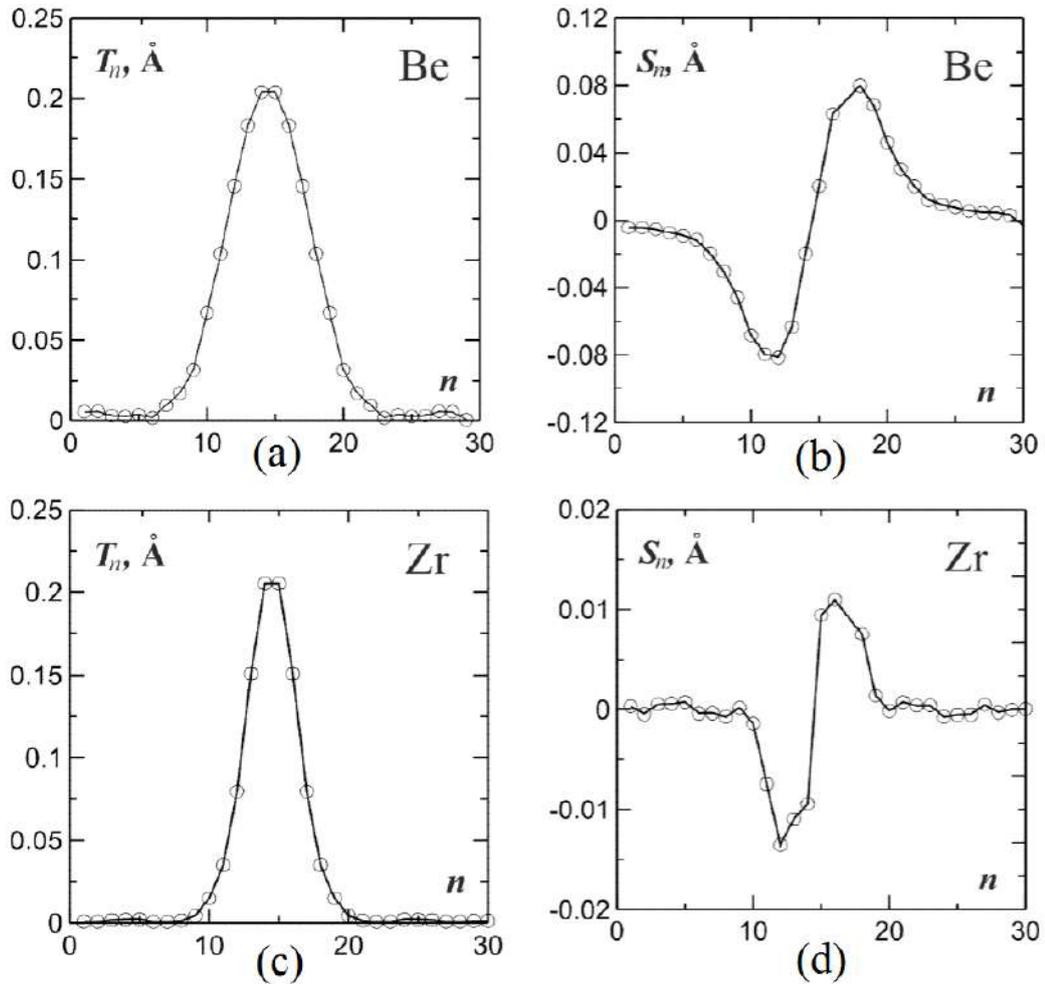


Рисунок 5.2 — (a,b) Амплитуды колебания и (c,d) статические смещения атомов ДБ в бериллии и цирконии соответственно. Для возбуждения ДБ использовался анзац 3.55 со следующими параметрами: для бериллия $A = 0.3 \text{ \AA}$, $B = 0.1 \text{ \AA}$, $\beta = 0.6$, $\gamma = 0.7$, $x_0 = 1/2$, $\delta = 0$ и для циркония $A = 0.4 \text{ \AA}$, $B = 0.016 \text{ \AA}$, $\beta = 0.7$, $\gamma = 0.8$, $x_0 = 1/2$, $\delta = 0$. ДБ показаны в момент времени $t = 5$ пс.

см. рисунок 5.2. Из графиков видно, что в бериллии ДБ локализован примерно на 12 атомах, а в цирконии на 8. Из рисунка 5.2(b) и (d) хорошо видно, что статические смещения атомов в цирконии значительно меньше, чем в бериллии, для примерно одинаковых амплитуд колебания атомов. Отсюда заключаем, что в цирконии локальный потенциал, создаваемый атомами для плотноупакованного ряда где бежит ДБ сильнее, чем в бериллии.

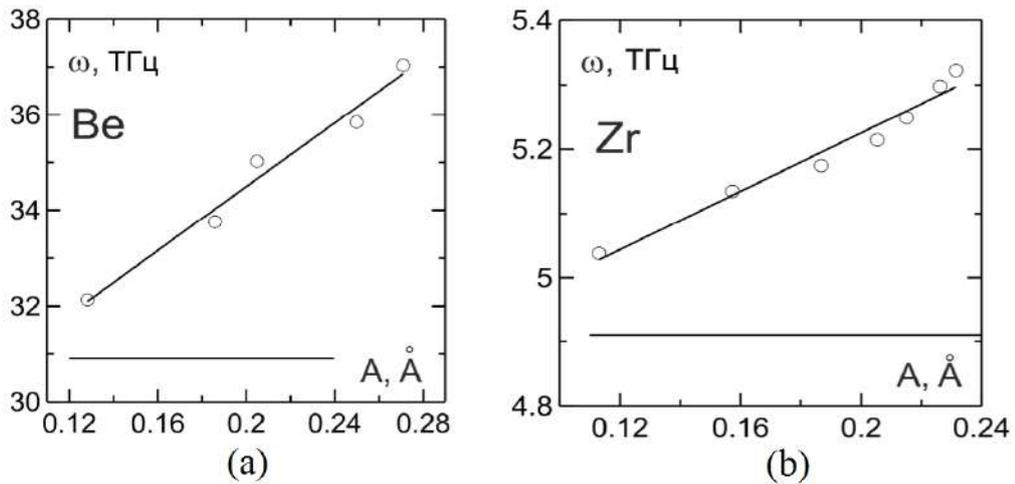


Рисунок 5.3 — Амплитудно-частотные зависимости для ДБ в (а) бериллии и (b) цирконии. Параметры анзаца 3.55 для (а) бериллия $A = 0.15-0.35 \text{ \AA}$, $B = 0.1 \text{ \AA}$, $\beta = 0.6$, $\gamma = 0.7$, $\delta = 0$ и (b) для циркония $A = 0.2-0.5 \text{ \AA}$, $B = 0.016 \text{ \AA}$, $\beta = 0.7$, $\gamma = 0.8$, $\delta = 0$.

На рисунке 5.3 показана амплитудно-частотная характеристика неподвижного ДБ в (а) Be и (b) Zr. Горизонтальная прямая показывает нижнюю границу фононного спектра. Замечаем, что частота ДБ находится выше фононного спектра металла, при этом ДБ демонстрируют жесткий тип нелинейности, когда частота ДБ увеличивается с амплитудой. Амплитуды неподвижных ДБ лежат в интервалах от 0.12 до 0.28 Å для бериллия и от 0.11 до 0.24 Å для циркония. При этом параметры анзаца 3.55, используемые для возбуждения ДБ составляли для бериллия: $A = 0.15-0.35 \text{ \AA}$, $B = 0.1 \text{ \AA}$, $\beta = 0.6$, $\gamma = 0.7$, $\delta = 0$ и для циркония: $A = 0.2-0.5 \text{ \AA}$, $B = 0.016 \text{ \AA}$, $\beta = 0.7$, $\gamma = 0.8$, $\delta = 0$. Кроме того, из графиков на рисунке 5.3 видно, что частота колебания атомов в ДБ значительно выше у бериллия по сравнению с цирконием. Это, в первую очередь связано с тем, что атомная масса бериллия на порядок ниже, чем циркония.

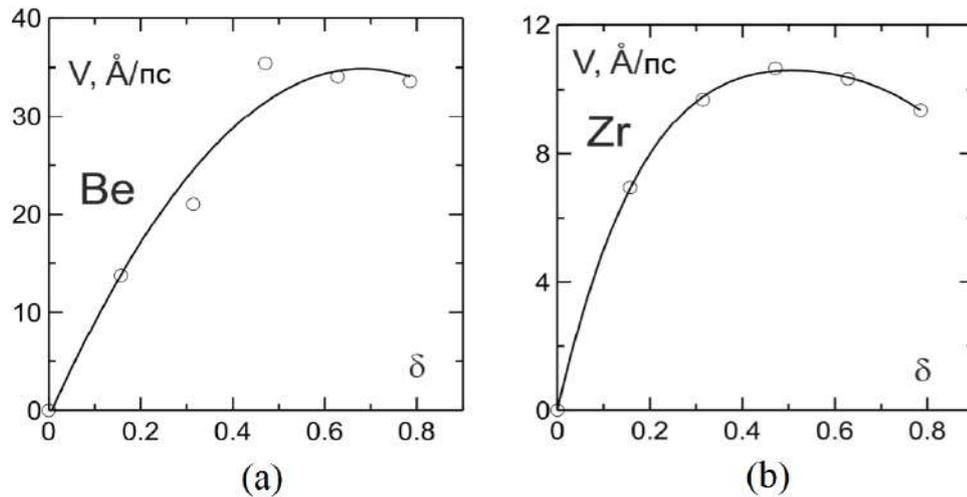


Рисунок 5.4 — Скорость движения ДБ в (а) Be и (б) Zr в зависимости от параметра анзаца 3.55 δ . Остальные параметры анзаца следующие: для (а) бериллия $A = 0.3 \text{ \AA}$, $B = 0.1 \text{ \AA}$, $\beta = 0.6$, $\gamma = 0.7$ и для (б) циркония $A = 0.4 \text{ \AA}$, $B = 0.016 \text{ \AA}$, $\beta = 0.7$, $\gamma = 0.8$.

На рисунке 5.4 построены зависимости скорости ДБ от параметра анзаца δ в (а) Be и (б) Zr. Максимально возможная скорость движения ДБ в бериллии равна 35 \AA/пс , а в цирконии 10 \AA/пс .

Итак, методом молекулярной динамики изучены движущиеся ДБ в ГПУ металлах Be и Zr. Найдены зависимости частоты ДБ от его амплитуды, см. рисунок 5.3. При этом частота колебания ДБ в бериллии значительно выше, чем в цирконии, поскольку атомы бериллия намного легче атомов циркония. Максимальная скорость движения ДБ в Be составила 35 \AA/пс (3.5 км/с), а в Zr 10 \AA/пс (1.0 км/с). Интересно сопоставить эти скорости со скоростями звука, которые составляют в бериллии 12.9 км/с , а в цирконии 4.65 км/с . Следовательно, максимальная скорость ДБ в бериллии (цирконии) составляет 27% (22%) от скорости звука.

5.1.2 Двумерный ДБ в титане

Результаты данного раздела были опубликованы в работе [69].

Трехмерная ГПУ-решетка образуется путем определенной укладки двумерных треугольных решеток. ДНКМ, поддерживаемые треугольной решеткой,

были полученных Чечиным и Рябовым в работе [203]; восемь однокомпонентных ДНКМ представлены на рисунке 2.5. Вектора перемещений имеют длину D_0 , от которой зависит начальная амплитуда ДНКМ.

Здесь мы пытаемся возбудить восемь ДНКМ треугольной решетки в одной плоскости ГПУ-титана.

Опишем детали компьютерного эксперимента.

Мы рассматриваем ГПУ-титан, моделируемый с использованием многочастичных межатомных потенциалов, полученных с помощью метода погруженного атома (ЕАМ потенциал) [227] в рамках программного пакета LAMMPS [223]. Расчетная ячейка включает 20 базисных плоскостей по 12×12 атомов в каждой плоскости. Параметры решетки титана: $a = 2,951 \text{ \AA}$, $c = 4,684 \text{ \AA}$. Используются периодические граничные условия. Тепловые флуктуации в систему не вносятся.

Начальные условия задаются применением начальных перемещений к атомам в одной базисной плоскости по схеме одной из восьми ДНКМ, показанных на рисунке 2.5. Начальные смещения атомов во всех остальных базисных плоскостях равны нулю, кроме того, равны нулю начальные скорости всех атомов в расчетной ячейке.

Амплитудно-частотные характеристики восьми ДНКМ двумерной решетки Морзе приведены на рисунке 2.8. Видно, что в исследованном диапазоне D_0 только ДНКМ 2, 3, 5 и 7 имеют частоты выше верхнего края фононного спектра, обозначенного горизонтальной пунктирной линией.

Разумеется, потенциал Морзе - это не ЕАМ потенциал титана, но можно ожидать, что амплитудно-частотные характеристики ДНКМ отражают их структуру, и что смена потенциала повлияет на величины частот колебаний, но относительные частоты различных ДНКМ изменятся не сильно.

В нашем моделировании были проанализированы все восемь ДНКМ треугольной решетки, показанные на рисунке 2.8. Только три из них произвели долгоживущие двумерные ДБ. Это ДНКМ 2, 5 и 7. Неудивительно, что ДНКМ 1, 4, 6 и 8 не привели к долгоживущей колебательной моде, поскольку в двумерной решетке Морзе они имеют частоты внутри фононной полосы. ДНКМ 3 имеет частоту выше фононной полосы в двумерной решетке Морзе только при достаточно большой амплитуде колебаний. Следует отметить, что ДНКМ при возбуждении в двумерной треугольной решетке не взаимодействует с другими

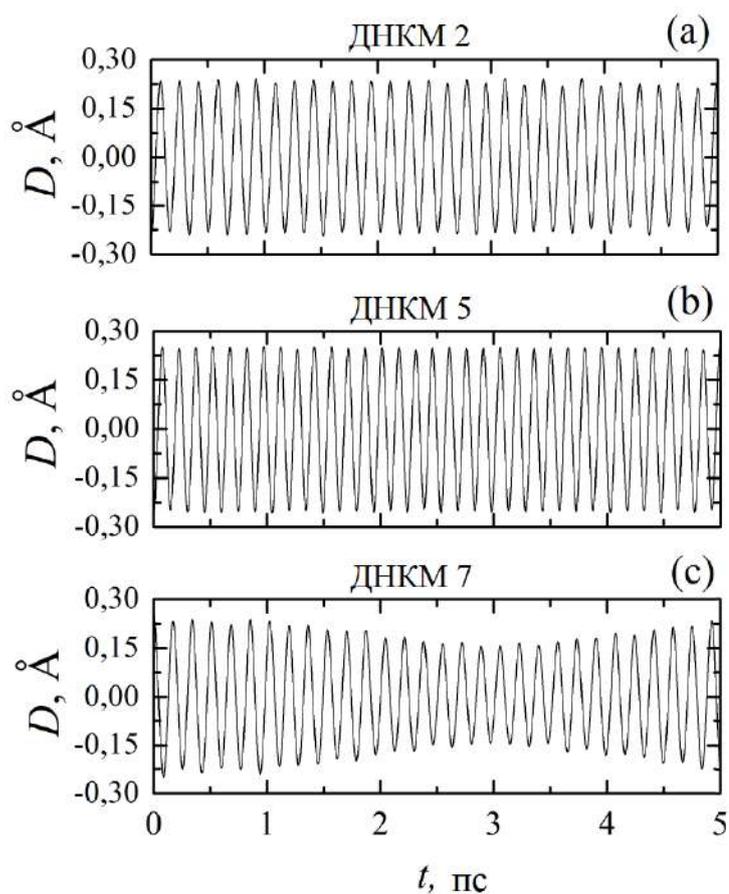


Рисунок 5.5 — Смещения из положения равновесия как функции времени для движущихся атомов в (а) ДНКМ 2, (б) ДНКМ 5 и (с) ДНКМ 7.

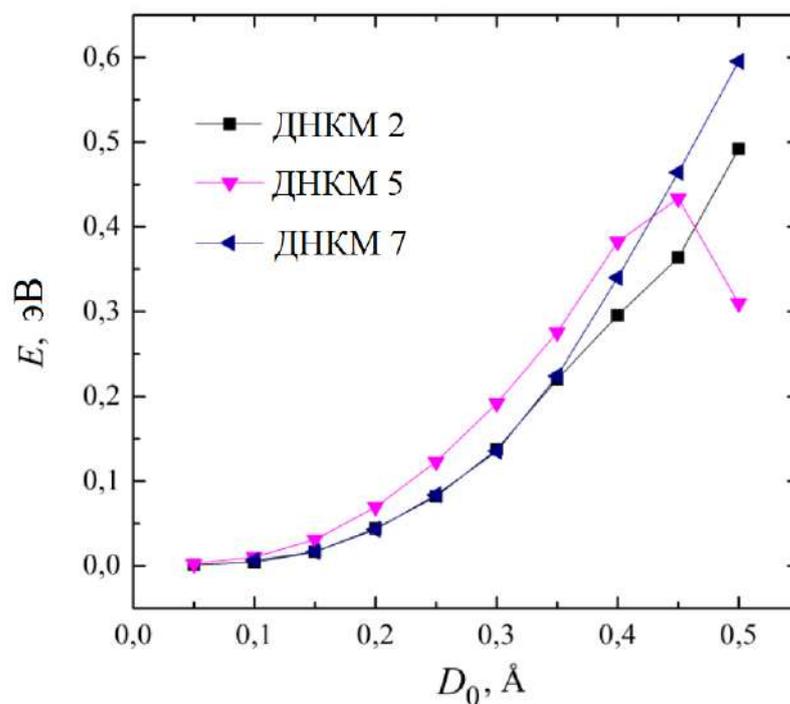


Рисунок 5.6 — Полная (кинетическая плюс потенциальная) энергия на атом для ДНКМ 2, 5 и 7 как функции начального смещения атомов. Только атомы центральной плоскости двумерного ДБ приняты во внимание.

колебательными модами и постоянно сохраняет свою энергию во времени. С другой стороны, при возбуждении ДНКМ в одной базисной плоскости ГПУ-решетки часть ее энергии отдается соседним атомным плоскостям, что и является причиной распада ДНКМ 3, имеющей частоту выше фононного спектра двумерной решетки Морзе только при достаточно большой амплитуде.

На рисунке 5.6 полная (кинетическая плюс потенциальная) энергия на атом для одной базисной плоскости где возбужден ДБ построена для ДНКМ 2, 5 и 7 как функция начальных смещений атомов, D_0 . Видно, что максимальная энергия на атом примерно равна 0,5 эВ, а максимальное начальное смещение составляет около 0,5 Å. При больших начальных смещениях наблюдается сильное излучение энергии от возбужденной базисной плоскости.

Итак, молекулярно-динамические расчеты с использованием многочастичных межатомных потенциалов показали, что три из восьми ДНКМ треугольной решетки (а именно ДНКМ 2, 5 и 7) производят долгоживущие двумерные ДБ в кристалле титана. Двумерный ДБ делокализован в двух пространственных измерениях и локализован в третьем, так что атомы только одной плоскости имеют большие амплитуды колебаний. С удалением от этой плоскости амплитуды колебания атомов экспоненциально быстро уменьшаются. Частоты вновь обнаруженных ДБ лежат выше малоамплитудного фононного спектра титана и растут с ростом амплитуды.

Было бы интересно проанализировать возможность существования подобных двумерных ДБ в чистых ГЦК металлах поскольку они тоже сложены из плотноупакованных треугольных двумерных решеток. Наши результаты открывают путь к поиску новых типов ДБ в чистых металлах.

5.2 Сферически локализованные ДБ в ОЦК-металлах V и Nb

Настоящая работа посвящена получению нульмерных ДБ путем наложения на ДНКМ ОЦК решетки (см. раздел 5.2) локализуемых функций со сферической симметрией. Применение этой процедуры позволит найти новые типы ДБ.

Результаты данного раздела опубликованы в работе [58].

5.2.1 Постановка задачи и описание компьютерной модели

Компьютерное моделирование выполняется с использованием пакета молекулярной динамики LAMMPS [223; 224]. Межатомные взаимодействия для ОЦК ванадия и ниобия описываются межатомными потенциалами, разработанными Менделевым и др. [49] и Феллингером и др. [50] соответственно. Из условия минимума потенциальной энергии, в результате релаксации структуры, был установлен равновесный параметр ОЦК-решетки при нулевой температуре. Для V он равен $a_V = 3,02987 \text{ \AA}$, а для Nb - $a_{Nb} = 3,30790 \text{ \AA}$. Расчетная ячейка содержит $14 \times 14 \times 14$ кубических трансляционных ячеек ОЦК-решетки, каждая из которых включает по 2 атома, и, таким образом, общее количество атомов в ячейке составляет 5488. Такого размера расчетной ячейки достаточно для анализируемых ДБ в данной работе, потому что они имеют достаточно высокую степень пространственной локализации и ДБ, помещенная в центр ячейки с периодическими граничными условиями, практически не взаимодействует со своими периодическими изображениями. Моделирование проводится для ансамбля NVE (постоянное количество атомов, объем и энергия). Температурные колебания не учитываются. Уравнения движения решаются численно с использованием алгоритма Верле 4-го порядка с шагом по времени 0,5 фс. Фононные спектры рассматриваемых металлов рассчитываются с помощью подпрограммы, установленной в пакете LAMMPS.

В этом исследовании рассматривается проблема построения пространственно локализованных колебательных мод с относительно большим временем жизни, т. е. квазибризеров [43], которые мы будем называть здесь дискретными бризерами. Эта проблема будет решена путем наложения на ДНКМ функции локализации вида

$$\Delta \mathbf{R}_n = \frac{\Delta \mathbf{r}_n}{\cosh(\beta |\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_0|)}, \quad (5.1)$$

где $\Delta \mathbf{R}_n$ - начальный вектор смещения n -го атома, $\Delta \mathbf{r}_n$ - начальный вектор смещения атома в рассматриваемой ДНКМ, \mathbf{r}_n - радиус-вектор n -й точки решетки, \mathbf{r}_0 - положение центра локализирующей функции, параметр β определяет степень пространственной локализации ДБ. Мы всегда принимаем $\mathbf{r}_0 = \mathbf{0}$, хотя, в принципе, можно рассматривать другие точки высокой симметрии ОЦК-решетки в качестве местоположения центра локализирующей функции. Рассматривая

различные значения параметра β , находим такое, которое дает максимальное время жизни (квази)-ДБ.

5.2.2 Дискретные бризеры в V и Nb

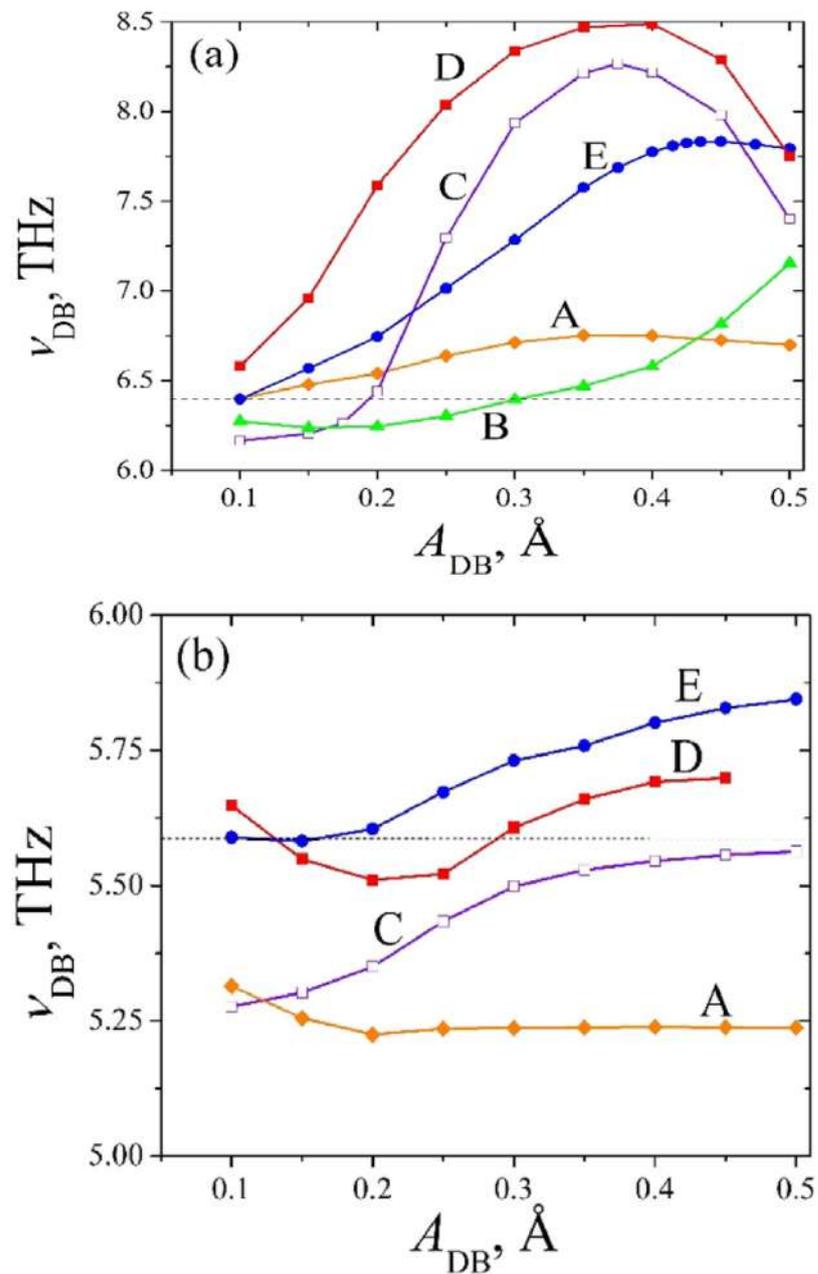


Рисунок 5.7 — Частота ДБ как функция амплитуды ДБ на (a) для V и на (b) для Nb для ДБ, построенных на основе различных ДНКМ. Горизонтальная пунктирная линия показывает верхний край фононного спектра.

Таблица 7 — Параметры ДБ с максимальным временем жизни в V и Nb на основе пяти исследованных ДНКМ: амплитуда ДБ A , параметр локализации β , частота ДБ ν и максимальное время жизни t_{\max} .

ДНКМ	A (Å)		β (Å ⁻¹)		ν (ТГц)		t_{\max} (пс)	
	V	Nb	V	Nb	V	Nb	V	Nb
A	0.3	0.25	1.5	0.8	6.71	5.44	235	1.5
B	0.5	0.5	1.2	1.5	6.81	5.02	14	0.15
C	0.25	0.4	1.5	1.5	7.29	5.57	270	2.5
D	0.25	0.15	1.2	1.5	8.04	5.64	58	2.5
E	0.25	0.2	1.2	1.5	7.01	5.65	26	4.1

Следуя процедуре, описанной в разделе 5.2.1, мы пытаемся возбудить ДБ, налагая функцию локализации (5.1) на пять ДНКМ, описанных в разделе 4.2.2. Для разных амплитуд ДНКМ ищем параметр β в (5.1), при котором время жизни локализованных колебаний максимально.

В таблице 7 для ДБ с максимальным временем жизни t_{\max} представлены их параметры: амплитуда ДБ A , параметр локализации β и частота ДБ ν . Обратим внимание, что амплитуда ДБ определяется как максимальное отклонение от решеточного положения центрального атома ДБ. На рисунке 5.7 частота ДБ как функция амплитуды ДБ показана для ДБ на основе различных ДНКМ, на (a) для V и на (b) для Nb. Горизонтальные линии показывают верхний край фононного спектра.

Сначала опишем свойства ДБ в V. Очень долгоживущие ДБ были построены на основе ДНКМ A и C со временами жизни 235 и 270 пс соответственно. Другие ДНКМ в V также порождают ДБ с относительно большим временем жизни, минимальное значение 14 пс, наблюдаемое для ДНКМ B. С частотой колебаний около 7 ТГц, за это самое короткое время жизни ДБ успевает совершить около 100 колебаний. ДБ с наибольшим временем жизни 270 пс совершает около 1900 колебаний. Долгоживущие ДБ имеют амплитуды около 0,25-0,3 Å, за исключением ДБ, основанного на ДНКМ B, имеющего амплитуду 0,5 Å. Естественно, что во всех случаях долгоживущие ДБ имеют частоты выше фононного спектра. Наибольшую степень пространственной локализации имеют ДБ на основе ДНКМ A и C, для них $\beta = 1,5$, в остальных случаях $\beta = 1,2$.

Результаты для V интересны в том смысле, что нет четкой корреляции между частотой ДБ и его временем жизни. Обычно можно ожидать, что ДБ с частотами, значительно превышающими максимальную фононную частоту,

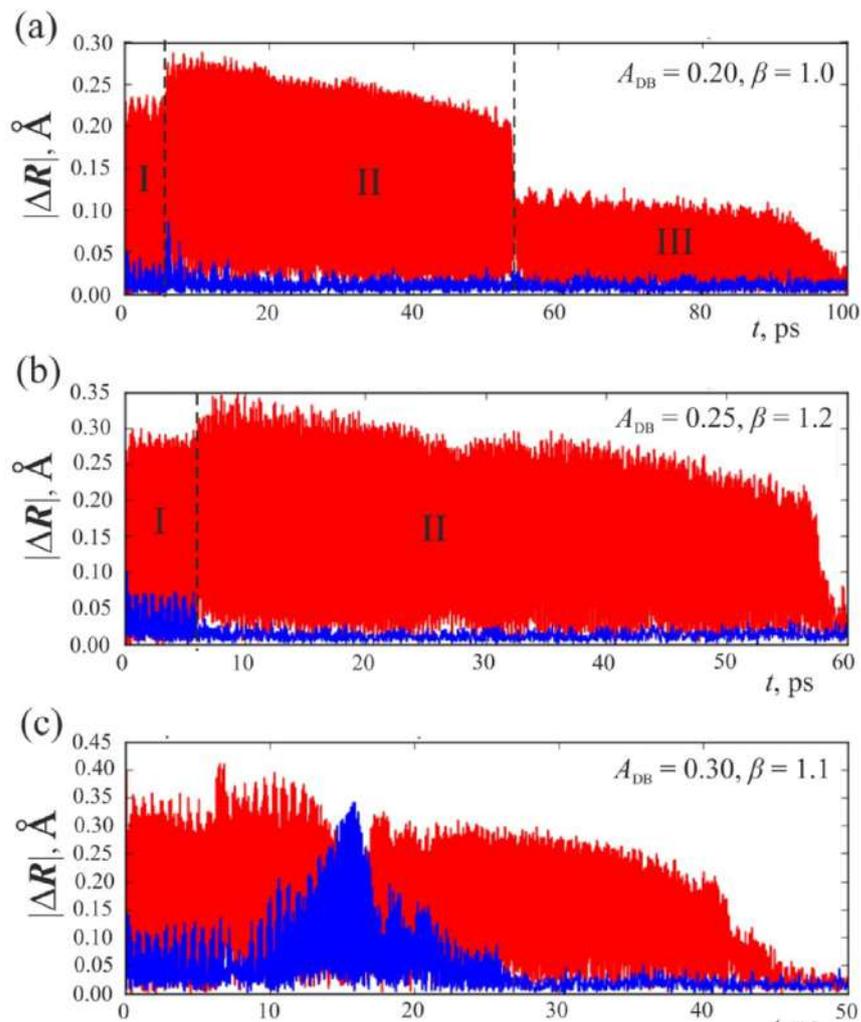


Рисунок 5.8 — Расстояние центрального атома (красная линия) и соседнего к центральному атому (синяя линия) от их решеточных положений как функции времени для ДБ, первоначально возбужденных в V на основе ДНКМ D для трех значений амплитуды ДНКМ: (a) 0.2, (b) - 0.25, и (c) - 0.3 Å. На (a) можно увидеть три режима, отмеченные римскими цифрами I, II и III. Первоначально возбужденный ДБ на основе ДНКМ D существует в режиме I, а затем самопроизвольно трансформируется в ДБ на основе ДНКМ C (режим II), который позже трансформируется в ДБ на основе ДНКМ A (режим III). На (b) виден самопроизвольный переход от режима I к режиму II. На (c) режим I сохраняется, но центр ДБ перемещается к атому, находящемуся рядом с центральным, а затем обратно.

должны иметь большее время жизни, поскольку такие ДБ должны иметь более слабое взаимодействие с фононными модами. Однако из результатов, представленных на рисунке 5.7(a), видно, что ДБ на основе ДНКМ А имеет частоту немного выше фононного спектра, но его время жизни очень велико по сравнению с временем жизни ДБ на основе ДНКМ D и E, имеющих более высокую частоту, см. также таблицу 7.

Теперь перейдем к свойствам ДБ в Nb. Сравнение параметров ДБ в V и Nb, представленных в таблице 7, показывает, что максимальное время жизни ДБ в Nb на один-два порядка меньше, чем в V. Этот результат неудивителен, учитывая тот факт, что частоты ДНКМ А, В и С в Nb находятся в пределах фононного спектра во всем исследованном диапазоне амплитуд, см. рисунке 4.13(b). Частота ДНКМ D немного выше фононного спектра для амплитуд менее $0,2 \text{ \AA}$ и находится в пределах спектра для больших амплитуд. Только ДНКМ E имеет частоты, лежащие значительно выше фононного спектра, и в этом случае максимальное время жизни ДБ является самым длинным среди ДБ, основанных на различных ДНКМ, но все же оно составляет всего $4,1 \text{ пс}$ (см. последнюю строку таблицы 7). При частоте колебаний около 5 ТГц ДБ совершает всего 2 или 3 колебания за время жизни $0,5 \text{ пс}$ и около 20 колебаний за время жизни $4,1 \text{ пс}$.

Аналогичное объяснение очень короткого времени жизни ДБ в Nb можно вывести из результатов, представленных на рисунке 5.7(b), где частота ДБ как функция амплитуды ДБ показана для ДБ с максимальным временем жизни на основе различных ДНКМ. Здесь результат для ДБ на основе ДНКМ В даже не представлен, потому что максимальное время жизни ДБ очень мало, см. вторую строку таблицы 7.

Все особенности амплитудно-частотных зависимостей ДНКМ и ДБ связаны с особенностями межатомных потенциалов, но связь между ними остается тонкой.

В некоторых случаях ДБ в V демонстрируют нетривиальную динамику. Например, на рисунке 5.8 мы изображаем расстояние центрального атома (красная линия) и соседнего с ним атома (синяя линия) от их решеточных положений как функции времени для ДБ в V, первоначально возбужденных на основе ДНКМ D для трех значений амплитуды ДНКМ: (a) $0,2$, (b) $0,25$ и (c) $0,3 \text{ \AA}$. На (a) можно выделить три разных режима, обозначенных как I, II и III. Перво-

начально возбужденный ДБ на основе ДНКМ D существует в режиме I и при $t = 6$ пс самопроизвольно трансформируется в ДБ на основе ДНКМ C (режим II), который при $t = 54$ пс преобразуется в ДБ на основе ДНКМ A (режим III). На рисунке 5.8(b) переход от режима I к режиму II имеет место при $t = 6$ пс, но режим III не реализуется. В случае, представленном на рисунке 5.8(c), режим I наблюдается в течение времени жизни ДБ до $t = 42$ пс. Однако за интервал времени от 10 до 16 пс центр ДБ перемещается к соседнему атому, а затем обратно. Ранее обмен энергией между ДБ, расположенными на относительно коротком расстоянии, был описан в алмазе [22] и в ионном кристалле типа NaCl [151].

На основании проделанных расчетов и полученных результатов можно сделать следующие выводы.

Новые типы ДБ со сферической локализацией были получены путем наложения функции локализации (5.1) на ДНКМ с частотами выше фононного спектра. Установлено, что межатомный потенциал оказывает существенное влияние на время жизни ДБ. Например, в V максимальное время жизни ДБ на основе различных ДНКМ составляет от 14 до 270 пс (от 100 до 1900 периодов колебаний), а в Nb максимальное время жизни ДБ составляет от 0,5 до 4,1 пс (от 2 до 20 периодов колебаний). Причина, по которой ДБ в двух исследованных металлах имеют такое разное время жизни, связана с более высокой степенью нелинейности жесткого типа в V по сравнению с Nb. Как отмечалось ранее на основе рисунка 4.12(b), самая высокая частота ДНКМ 6,1 ТГц наблюдается в Nb для моды E и находится всего на 9% выше верхнего края фононного спектра. В V самые высокие частоты ДНКМ находятся на уровне 8,5 ТГц (для мод B, C и D), что на 33% выше фононного спектра (см. рисунок 4.13(a)). То же можно сказать и о частотах ДБ в этих двух металлах: в V частота ДБ дальше от верхнего края фононной полосы, чем в Nb (см. рисунок 5.7). Естественно ожидать, что дискретные бризеры с частотами, более удаленными от фононного спектра, будут слабее взаимодействовать с фононами и, следовательно, будут иметь большее время жизни.

Обнаружено, что ДБ могут самопроизвольно изменять характер колебаний. ДБ также могут совершать блуждающее движение при смещении центра ДБ от одного атома к соседнему и затем обратно.

В конечном итоге результаты, представленные в данной работе, помогут установить роль дискретных бризеров в формировании физических свойств кристаллов.

В продолжение этого исследования можно проанализировать двухкомпонентные ДНКМ, и, если они имеют частоты выше фононного спектра, можно попытаться получить ДБ, наложив локализирующие функции. Также интересно изучить ДБ сферической симметрии в других ОЦК-металлах и попытаться понять, почему время жизни ДБ может так сильно различаться в зависимости от межатомного потенциала. Первостепенное значение имеет проведение первопринципного моделирования для ДНКМ, которое возможно с учетом относительно небольшой трансляционной ячейки таких колебательных мод. Металлы с другими решетками, например, ГЦК и ГПУ, также должны быть проанализированы.

5.3 Перенос энергии дискретными бризерами в ионном кристалле со структурой NaCl

Рассматривается щелочно-галлоидный кристалл с ионным типом химической связи, имеющий структуру типа NaCl, см. рисунок 5.9(а).

Кристалл имеет параметр решетки a . Эта структура состоит из двух ГЦК-решеток, сдвинутых относительно друг друга на вектор $(a/2, 0, 0)$, в точках одной из которых расположены легкие атомы, а точки другой заняты тяжелыми атомами, как показано на рисунке 5.9(а).

Каждый из атомов имеет восемь соседей противоположного типа, расположенных на вершинах правильного октаэдра. Каждая кубическая трансляционная ячейка состоит из четырех легких и четырех тяжелых атомов. Взаимодействие атомов описывается парными потенциалами, учитывающими кулоновское взаимодействие, отталкивание Борна-Майера и дисперсионное взаимодействие [20]. Атомная масса легкого (тяжелого) компонента принималась равной 10 (100) г/моль. Расчетная ячейка с наложенными периодическими граничными условиями включает $14 \times 14 \times 14$ кубических периодических ячеек кристалла.

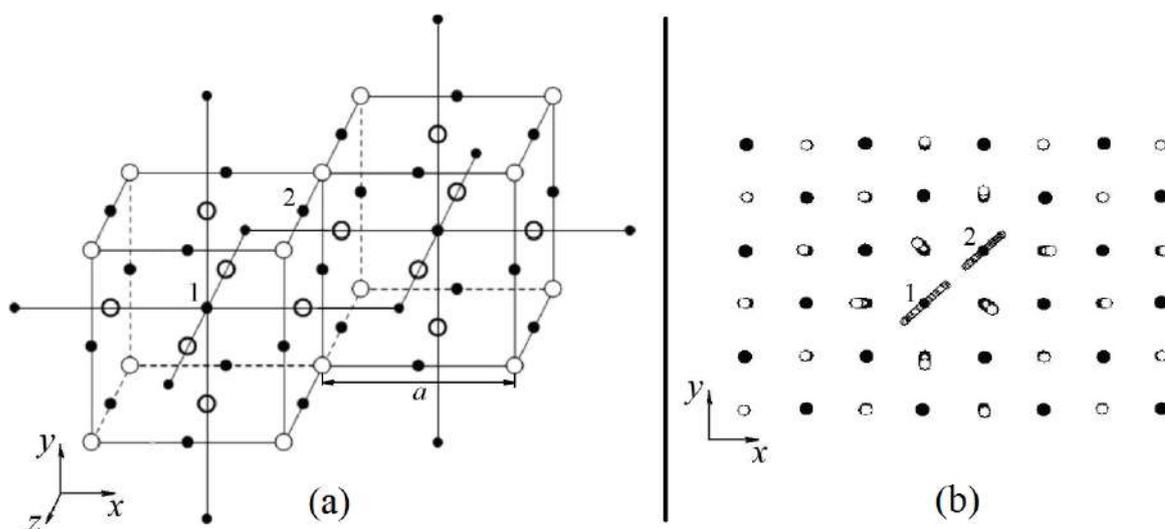


Рисунок 5.9 — (а) Кристаллическая структура типа NaCl. Легкие (тяжелые) атомы показаны темными (светлыми) символами. Параметр решетки равен a . Анионная и катионная ГЦК подрешетки смещены относительно друг друга на вектор $(a/2, 0, 0)$. (б) Стробоскопическая картина движения атомов, показывающая два ДБ, находящихся в точках 1 и 2, показанных на (а). Два легких атома колеблются в противофазе в направлении $[110]$.

Каждая ячейка содержит 8 атомов, так что общее количество атомов в расчетной ячейке равно 21952.

Пара ДБ возбуждалась путем смещения атомов 1 и 2, отмеченных на рисунке 5.9(а), из положений равновесия вдоль векторов $(-0,3, -0,3, 0)$ и $(0,3, 0,3, 0)$ соответственно. Компоненты вектора даны в ангстремах. Остальные атомы изначально находятся в своих равновесных положениях. Начальная скорость всех атомов равна нулю.

Во-первых, для ясности изложения мы воспроизводим результаты, представленные в работах [20; 151]. Плотность фононных состояний кристалла представлена на рисунке 5.10(а). Видна широкая щель в фононном спектре, возникающая из-за большой разницы атомных весов анионов и катионов. ДБ в рассматриваемом модельном кристалле сильно локализована на одном легком атоме. Атом может колебаться в одном из высокосимметричных направлений $[001]$, $[110]$ или $[111]$. ДБ с колебаниями атомов вдоль $[001]$ и $[011]$ легко возбудить начальными смещениями легких атомов, но в случае поляризации $[111]$ в [228] разработана более сложная процедура, поскольку простой метод не работает.

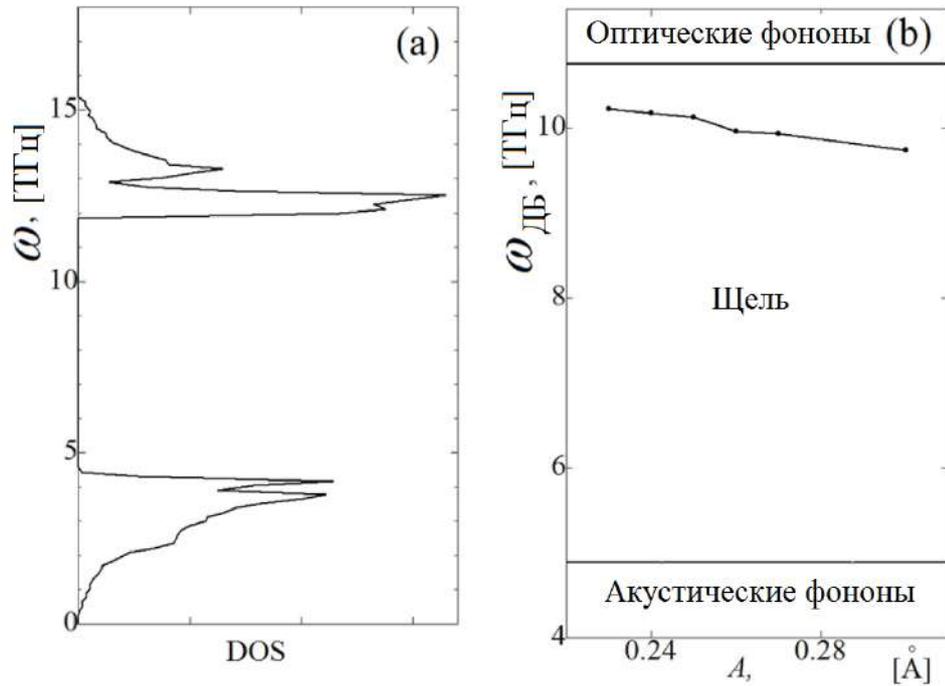


Рисунок 5.10 — (а) Плотность фоновных состояний рассматриваемого модельного кристалла. Видна широкая щель, возникающая из-за большой разницы атомных весов анионов и катионов. (б) Частота ДБ как функция амплитуды, лежащая в щели фоновного спектра.

На рисунке 5.10(b) показана частота ДБ поляризации [011] как функция его амплитуды. Частота лежит в пределах щели фоновного спектра и уменьшается с увеличением амплитуды ДБ.

Динамика пары ДБ, возбужденной в позициях 1 и 2 [обозначены на рисунке 5.9(a)], представлена на рисунках 5.11(a) и (b) соответственно. В этом случае ДБ колеблются в противофазе вдоль направления [110], как это видно из рисунка 5.11(c), где показана разность фаз колебаний атомов 1 и 2. Отметим, что время нормировано на период колебаний ДБ θ . Компонента смещения по оси z для этих двух атомов практически равна нулю.

На рисунке 5.12 построено то же, что и на рисунке 5.11, но для случая, когда ДБ 1 и 2 колеблются с разностью фаз, отличной от π . В этом случае отчетливо виден квазипериодический обмен энергией между двумя ДБ. Эта пара ДБ возбуждалась приложением начальных сдвигов $(-0,31, -0,31, 0)$ и $(0,29, 0,29, 0)$ в ангстремах к атомам 1 и 2 соответственно.

Следующим нашим шагом будет анализ динамики большего количества взаимодействующих ДБ. На рисунке 5.13 цепочка из 10 легких атомов вдоль направления [110] обозначены буквами (a), (b),..., (j). Первоначально возбужда-

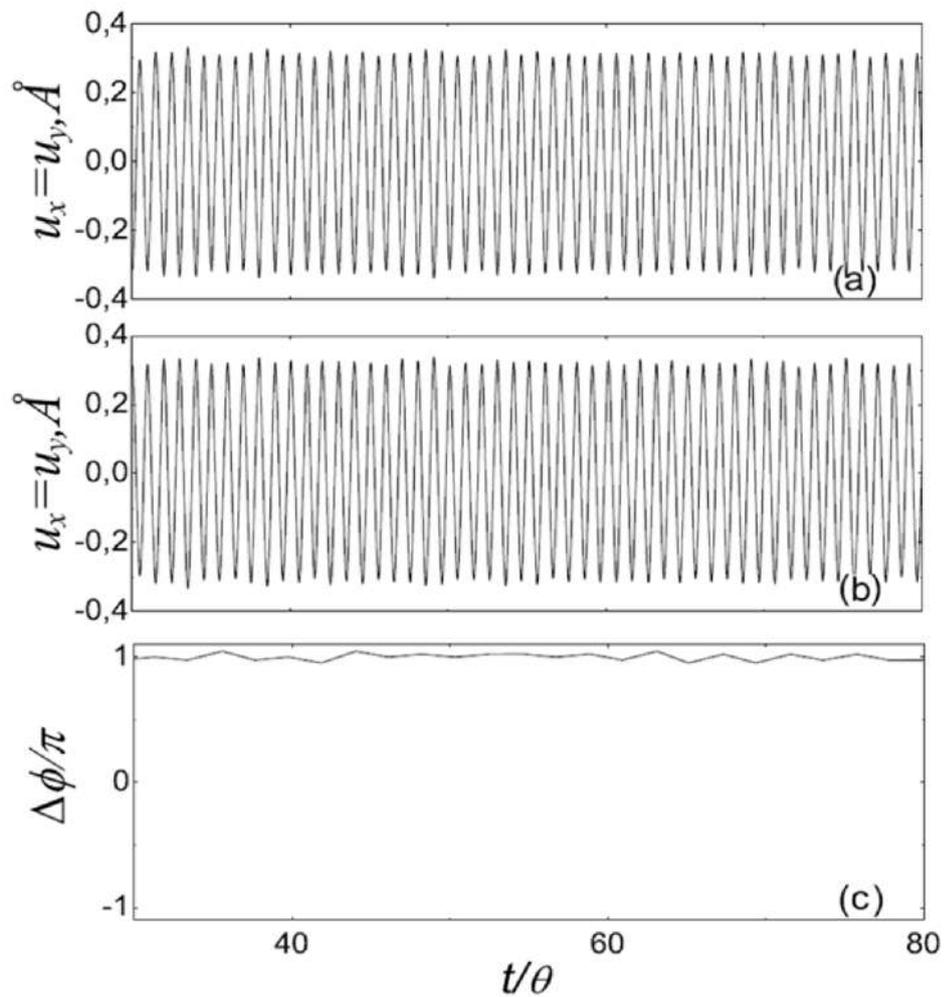


Рисунок 5.11 — (а), (б) Смещения атомов 1 и 2 соответственно [отмечены на рисунке 5.9(а)] как функции времени, нормированного на период колебаний ДБ θ . (с) Разность фаз колебаний атомов 1 и 2, показывающая, что они колеблются в противофазе.

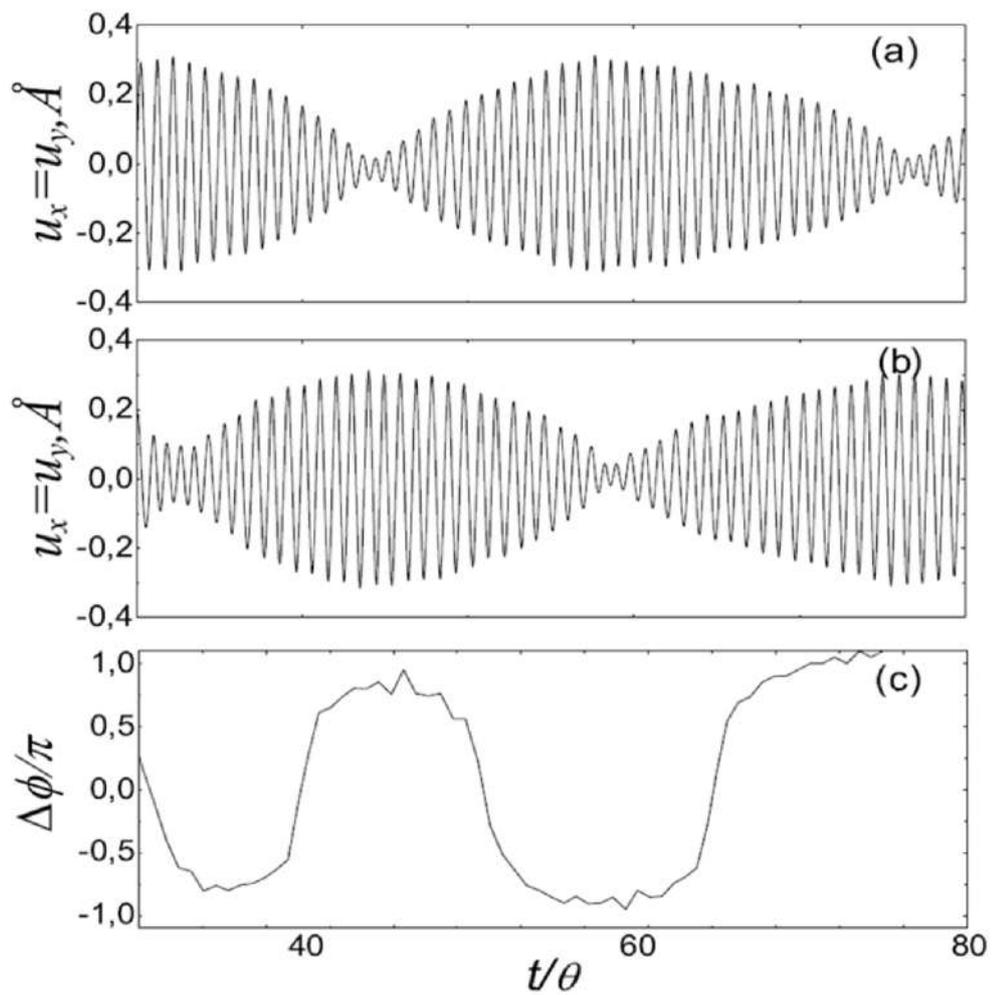


Рисунок 5.12 — То же, что и на рисунке 5.11, но для случая, когда атомы 1 и 2 колеблются с разностью фаз, отличной от π . Разность фаз колебания атомов квазипериодически изменяется от $-\pi$ до π , и это изменение коррелирует с обменом энергией между ДБ.

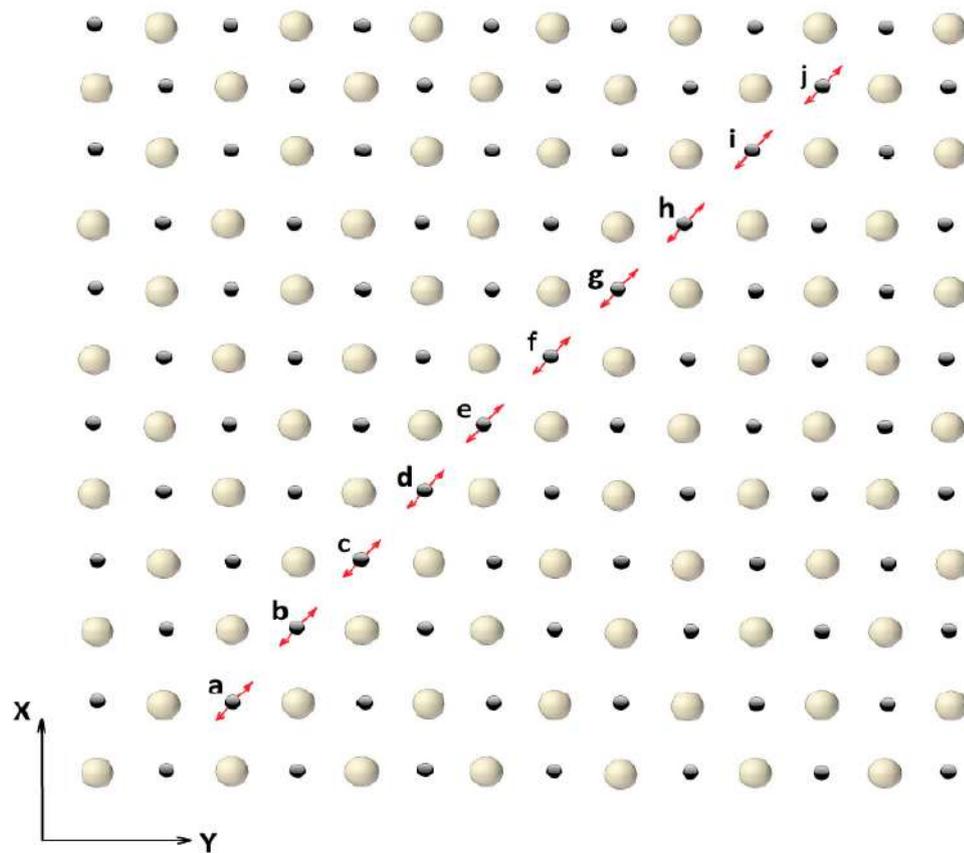


Рисунок 5.13 — Цепочка десяти легких атомов вдоль направления $[110]$, обозначенные как (a), (b),..., (j). Первоначально возбуждаются ДБ на двух парах атомов (a), (b) и (c), (d).

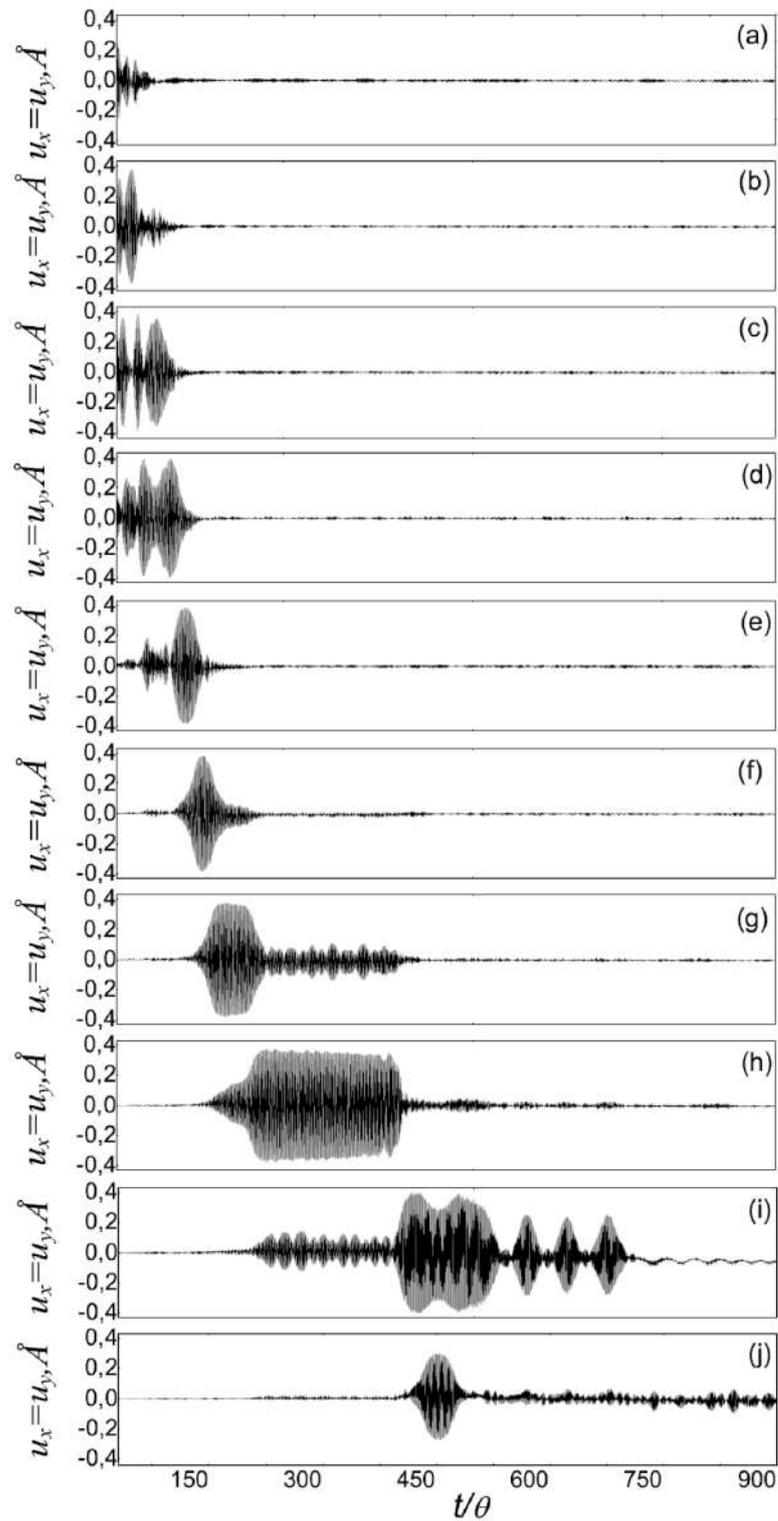


Рисунок 5.14 — (а-ж) Смещения атомов, обозначенных на рисунке 5.13 как (а), (б),..., (ж) соответственно, как функции времени. Первоначально возбуждались только атомы (а), (б), (с) и (д).

лись две пары ДБ на атомах (a), (b) и (c), (d) с применением начальных сдвигов $(-0,3, -0,3, 0)$, $(0,3, 0,3, 0)$, $(-0,31, -0,31, 0)$, и $(0,29, 0,29, 0)$ соответственно. Компоненты вектора даны в ангстремах. Обратим внимание, что другие атомы имели нулевые начальные смещения и все атомы имели нулевые начальные скорости.

Смещения в зависимости от времени показаны на рисунке 5.14(a-j) для атомов, обозначенных буквами (a)-(j) на рисунке 5.13 соответственно. Видно, что первоначально возбужденные атомы (a), (b), (c) и (d) перестают двигаться после $150t/\theta$, но их энергия отдается другим легким атомам цепочки. Даже атом j, который находится на расстоянии шести узлов от атома (d), возбуждается примерно при $500t/\theta$.

Из результатов, представленных на рисунке 5.14, следует, что возможен не только обмен энергией между возбужденными ДБ в кластерах ДБ, но и может наблюдаться возбуждение ДБ на атомах, которые изначально не были возбуждены. Таким образом, в настоящей работе выявлен новый механизм транспорта энергии, осуществляемый путем возбуждения новых ДБ за счет энергии существующих ДБ.

5.4 Выводы по главе 5

В разделе 5.1.1 методом молекулярной динамики были изучены движущиеся ДБ в ГПУ металлах Be и Zr. Найдены зависимости частоты ДБ от амплитуды, см. рисунок 5.3. При этом частота колебания ДБ в бериллии значительно выше, чем в цирконии, поскольку атомы бериллия намного легче атомов циркония. Максимальная скорость движения ДБ в Be составила $35 \text{ \AA}/\text{пс}$ ($3.5 \text{ км}/\text{с}$), а в Zr $10 \text{ \AA}/\text{пс}$ ($1.0 \text{ км}/\text{с}$). Скорость звука в бериллии равна $12.9 \text{ км}/\text{с}$, а в цирконии $4.65 \text{ км}/\text{с}$. Следовательно, максимальная скорость ДБ в бериллии (цирконии) составляет 27% (22%) от скорости звука.

В разделе 5.1.2 были проведены молекулярно-динамические расчеты с использованием многочастичных межатомных потенциалов, которые показали, что три из восьми ДНКМ треугольной решетки (а именно ДНКМ 2, 5 и 7 из представленных на рисунке 2.5) производят долгоживущие двумерные ДБ

в кристалле титана. Двумерный ДБ делокализован в двух пространственных измерениях и локализован в третьем, так что атомы только одной плоскости имеют большие амплитуды колебаний. С удалением от этой плоскости амплитуды колебания атомов экспоненциально быстро уменьшаются. Частоты вновь обнаруженных ДБ лежат выше фононного спектра титана и растут с ростом амплитуды.

В разделе 5.2 в ОЦК металлах V и Nb были получены новые типы ДБ со сферической локализацией путем наложения функции локализации на ДНКМ с частотами выше фононного спектра. Установлено, что межатомный потенциал оказывает существенное влияние на время жизни ДБ. Например, в V максимальное время жизни ДБ на основе различных ДНКМ составляет от 14 до 270 пс (от 100 до 1900 периодов колебаний), а в Nb максимальное время жизни ДБ составляет от 0,5 до 4,1 пс (от 2 до 20 периодов колебаний). Причина, по которой ДБ в двух исследованных металлах имеют такое разное время жизни, связана с более высокой степенью нелинейности жесткого типа в V по сравнению с Nb. Как отмечалось ранее на основе рисунка 4.12(b), самая высокая частота ДНКМ 6,1 ТГц наблюдается в Nb для моды E и находится всего на 9% выше верхнего края фононного спектра. В V самые высокие частоты ДНКМ находятся на уровне 8,5 ТГц (для мод B, C и D), что на 33% выше фононного спектра (см. рисунок 4.13(a)). То же можно сказать и о частотах ДБ в этих двух металлах: в V частота ДБ дальше от верхнего края фононного спектра, чем в Nb (см. рисунок 5.7). Естественно ожидать, что дискретные бризеры с частотами, более удаленными от фононного спектра, будут слабее взаимодействовать с фононами и, следовательно, будут иметь большее время жизни. Обнаружено, что ДБ могут самопроизвольно изменять характер колебаний. ДБ также могут совершать блуждающее движение при смещении центра ДБ от одного атома к соседнему и затем обратно.

При изучении взаимодействия двух пар близко расположенных ДБ в ионном кристалле со структурой NaCl в разделе 5.3 было показано, что возможен обмен энергией между возбужденными ДБ в кластерах ДБ, и, кроме того, может наблюдаться возбуждение ДБ на атомах, которые изначально не были возбуждены. Таким образом, выявлен новый механизм транспорта энергии, осуществляемый путем возбуждения новых ДБ за счет энергии существующих ДБ.

Глава 6. Решетки с топологическими дефектами

В заключительной главе будут рассмотрены решетки с топологическими дефектами. В частности, будет изучено влияние межатомных потенциалов на движение сверхзвуковых краудионов, рассмотрено взаимодействие движущихся ДБ с вакансией и проанализирована двумерная бистабильная решетка с целью объяснения природы темных треков в кристаллах слюды мусковита.

6.1 Влияние межатомных потенциалов на массоперенос сверхзвуковыми 2-краудионами

Результаты данного раздела были опубликованы в работе [64].

Межузельный атом, помещенный в плотноупакованный атомный ряд, называется краудионом. Краудионы очень эффективны в массопереносе в кристаллических решетках, поскольку они являются подвижными солитоноподобными объектами с очень низкой энергией миграции.

Недавно было продемонстрировано, что одиночный межузельный атом может двигаться вдоль плотноупакованного атомного ряда со сверхзвуковой скоростью в двух различных режимах: либо как классический 1-краудион, либо как 2-краудион. Отличие состоит в том, что в последнем случае два атома движутся с большой скоростью одновременно, а в первом случае только один атом имеет большую скорость, передавая ее по эстафете следующим атомам. Было показано, что 2-краудиону требуется меньшая энергия для инициирования массообмена, и он перемещается на большее расстояние, если он имеет ту же энергию, что и 1-краудион.

Материалы имеют разные свойства, потому что межатомные взаимодействия между различными атомами различны. Важно сравнить эффективность массопереноса 2-краудионами в разных материалах. В настоящей работе показано, что важнейшей характеристикой межатомных потенциалов, влияющей на длину пробега краудиона, является энергия межатомной связи при расстоянии между двумя атомами, равном половине равновесного межатомного расстоя-

ния. Этот вывод обосновывается условием самофокусировки распространения сверхзвуковых краудионов, то есть скорость столкновения атомов не должна превышать значения, когда они сближаются на расстояние менее половины межатомного расстояния.

В настоящей работе мы продолжаем анализ динамики сверхзвуковых краудионов [229–233], анализируя влияние межатомных потенциалов на их длину пробега. Двумерная треугольная решетка рассматривается для ускорения моделирования и с учетом того, что результаты, полученные ранее для 2D [231] и 3D [232] решеток Морзе, находятся в очень хорошем качественном согласии и различаются только количественно. Кроме того, краудионы в двумерных треугольных решетках рассматривались применительно к кристаллу слюды мусковита, где нелинейные возбуждения могут распространяться в одноатомном слое калия [113; 234]. В качестве примера рассмотрен массоперенос 1- и 2-краудионами в двумерной треугольной решетке с потенциалами Морзе и Борна-Майера.

6.1.1 Описание модели и используемых потенциалов

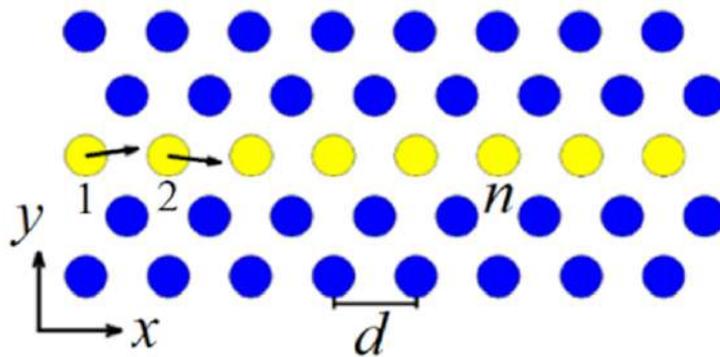


Рисунок 6.1 — Атомы треугольной решетки на плоскости xy . Ось x направлена вдоль плотноупакованного атомного ряда, d - межатомное расстояние или диаметр атома. Атомы в одном плотноупакованном ряду (показаны более светлым) нумеруются индексом n . Показаны начальные условия для инициирования 2-краудиона: атомы 1 и 2 имеют начальные скорости с составляющими $(V_0, \epsilon V_0)$ и $(V_0, -\epsilon V_0)$, где $\epsilon \ll V_0$.

Рассматривается треугольная двумерная решетка с межатомным расстоянием d . Как показано на рисунке 6.1, ось x ориентирована в направлении плот-

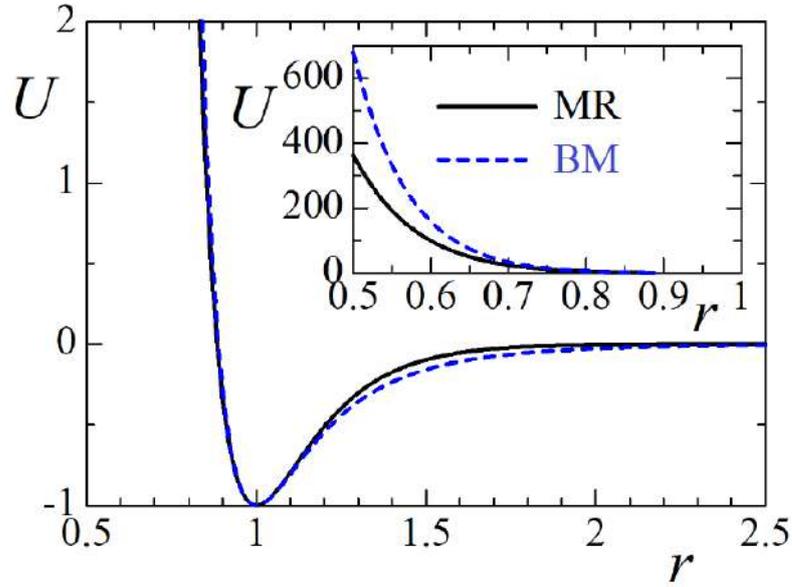


Рисунок 6.2 — Потенциалы Морзе и Борна-Майера показаны сплошной и пунктирной линиями соответственно. На вставке показана отталкивательная часть потенциалов. Параметры потенциалов выбираются таким образом, чтобы удовлетворять условиям (6.3)-(6.5) при $r_{\min} = 1$.

ной упаковки. Рассмотрены два парных межатомных потенциала. Потенциал Морзе

$$U_{\text{MR}}(r) = D \left(e^{-2\alpha(r-r_m)} - 2e^{-\alpha(r-r_m)} \right). \quad (6.1)$$

Здесь U_{MR} - это потенциальная энергия двух взаимодействующих атомов, r - расстояние между ними, α , D и r_m - параметры потенциала. $U_{\text{MR}}(r)$ имеет минимум при $r = r_m$, D - это глубина потенциала (энергия связи), α определяет жесткость межатомной связи.

Потенциал Борна-Майера имеет вид

$$U_{\text{BM}}(r) = B \left(e^{-(r-r_c-1)/\beta} - 2/(r-r_c)^6 \right). \quad (6.2)$$

Здесь параметры обозначены через β , B и r_c . Первый определяет жесткость связи, второй - глубину потенциала, а третий - равновесное межатомное расстояние. Параметры двух потенциалов были выбраны таким образом, чтобы

$$U_{\text{MR}}(r_{\min}) = U_{\text{BM}}(r_{\min}) = -1, \quad (6.3)$$

$$\frac{dU_{\text{MR}}}{dr}(r_{\min}) = \frac{dU_{\text{BM}}}{dr}(r_{\min}) = 0, \quad (6.4)$$

$$\frac{d^2U_{\text{MR}}}{dr^2}(r_{\min}) = \frac{d^2U_{\text{BM}}}{dr^2}(r_{\min}), \quad (6.5)$$

где без ограничения общности полагаем $r_{\min} = 1$. Из уравнений (6.3)-(6.5) следует, что оба потенциала имеют минимум при $r_{\min} = 1$, а в точке минимума оба потенциала имеют одинаковое значение -1 и одинаковое значение второй производной. Физически это означает, что равновесное межатомное расстояние для обоих потенциалов равно 1 , энергия связи обоих потенциалов равна 1 , и они оба имеют одинаковую жесткость при малых отклонениях от равновесного расстояния. Эти условия достигаются при $D = r_m = 1$, $\alpha = 6$ для потенциала Морзе и $B = 0,98091338226$, $\beta = 0,0716924$ и $r_c = -0,02142746$ для потенциала Борна-Майера. Масса атома в обоих кристаллах $= 1$, чего всегда можно добиться правильным выбором единицы времени. Радиус обрезки потенциалов составляет $5r_m$. Тогда равновесное межатомное расстояние в решетке Морзе $d = 0,9955675$, а в решетке Борна-Майера $d = 0,9908151$. Потенциалы Морзе и Борна-Майера показаны на рисунке 6.2 сплошной и штриховой линиями соответственно. На вставке показана отталкивательная часть потенциалов. Видно, что притягивающие части потенциалов ($r > 1$) близки друг к другу, а отталкивательные части ($r < 1$) заметно расходятся. При изучении краудионов важна отталкивательная часть потенциала, так как межузельный атом производит локальное сжатие.

Уравнения движения атомов интегрировались методом Штормера шестого порядка точности [48] с шагом по времени $\tau = 10^{-3}$. Тепловые колебания не вводились, т. е. моделирование проводилось при температуре 0 К. Использовались периодические граничные условия.

1-краудион инициировался путем придания начальной скорости одиночному атому $(V_0, \epsilon V_0)$, где V_0 - начальная скорость вдоль плотноупакованного ряда атомов, ориентированного вдоль оси x , а $\epsilon \ll V_0$. Малая компонента вектор скорости в поперечном направлении добавлен для анализа самофокусировки краудиона. Начальные условия для инициирования 2-краудиона показаны на рисунке 6.3: атомы 1 и 2 имеют начальные скорости с составляющими $(V_0, \epsilon V_0)$ и $(V_0, -\epsilon V_0)$, где $\epsilon \ll V_0$. Было принято значение $\epsilon = 10^{-6}$. Энергия, сообщаемая системе возбуждением краудионов, равна кинетической энергии возбужденных атомов,

$$E_0 = NMV_0^2/2, \quad (6.6)$$

где $N = 1$ и 2 для 1- и 2-краудионов соответственно. Напомним, что в наших расчетах масса атома равна $M = 1$.

6.1.2 Условие самофокусировки при движении сверхзвуковых краудионов

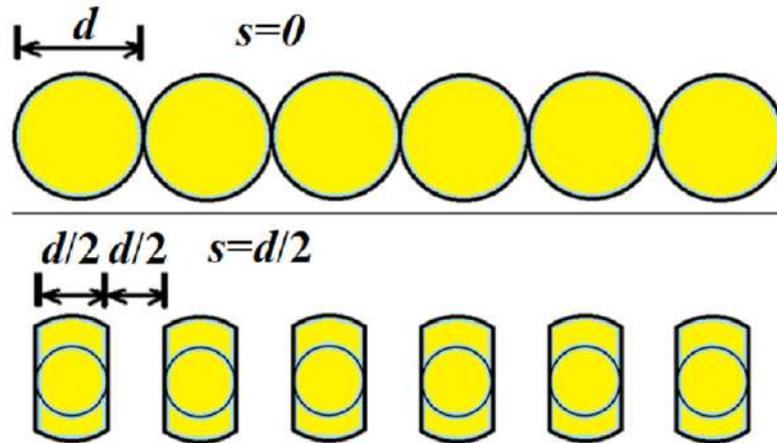


Рисунок 6.3 — К обсуждению самофокусирующихся атомных столкновений в плотноупакованной цепочке атомов. Атомы имеют диаметр d и между ними нет пространства ($s = 0$). Эффективный диаметр атомов зависит от скорости их столкновения. Критерий самофокусирующихся столкновений можно сформулировать так: скорость их столкновений не должна превышать значения, при котором центры атомов сближаются более чем на половину их диаметра ($s = d/2$).

Когда сверхзвуковой краудион движется вдоль плотно упакованного атомного ряда, атомы сталкиваются с большой скоростью. Их столкновения могут быть самофокусирующимися или дефокусирующимися.

Задача о самофокусирующихся столкновениях в цепочке твердых шаров решена в [235]. Шары диаметром d расположены в прямолинейном ряду на расстоянии s друг от друга. Предположим, что первый шар запущен не строго вдоль цепочки шаров, а под некоторым углом θ . Точные геометрические расчеты показывают, что если $d > s$, то последовательность столкновений будет самофокусирующейся, то есть направление вектора скорости следующих шаров будет экспоненциально быстро приближаться к оси цепочки. При нарушении этого условия столкновения будут дефокусирующимися, то есть сколь угодно малое начальное отклонение вектора скорости от оси цепочки будет экспоненциально возрастать при последующих столкновениях.

Для равновесного кристалла в плотноупакованном ряду атомы диаметра d имеют межатомное расстояние d , а расстояние s между ними равно нулю (см. рисунок 6.3, верхняя панель). Атомы не являются твердыми шарами, и их эффективный диаметр зависит от скорости столкновения и тем меньше, чем выше скорость столкновения. С учетом критерия самофокусирующихся столкновений твердых шаров критерий самофокусирующихся столкновений атомов можно сформулировать следующим образом: скорость столкновения не должна превышать значения, при котором центры атомов сближаются более чем на половину своего диаметра (см. рисунок 6.3, нижняя панель):

$$d_{\min} > \frac{d}{2}. \quad (6.7)$$

Это условие самофокусировки для атомов, в отличие от условия для твердых шаров, не является строгим, но оно достаточно хорошо работает, по крайней мере, для парных взаимодействий Морзе, как показано в работе [232].

Имея в виду условие самофокусировки (6.7), обсудим теперь влияние межатомных потенциалов на динамику краудиона. На вставке к рисунку 6.2 видно, что отталкивательные части потенциалов Морзе и Борна-Майера заметно различаются. Поскольку атомы в самофокусирующихся столкновениях могут сближаться максимум на половину атомного диаметра (в нашем случае $d = 1$), заметим, что для $U_{\text{MR}}(d/2) = 363$, а для $U_{\text{BM}}(d/2) = 680$, что почти в два раза больше. Это означает, что атомы в решетке Борна-Майера могут иметь почти в два раза большую энергию, не нарушая условия самофокусировки. Имея это в виду, можно ожидать, что решетка Борна-Майера может поддерживать самофокусирующиеся краудионы с более высокой энергией и, следовательно, распространяющиеся на большие расстояния. В следующем разделе эта гипотеза будет подтверждена численными данными.

6.1.3 Влияние межатомных потенциалов на массоперенос сверхзвуковыми 2-краудионами

Движение краудиона - это периодическое столкновение атомов. Если частота столкновений атомов выше фононного спектра, то излучение фононов

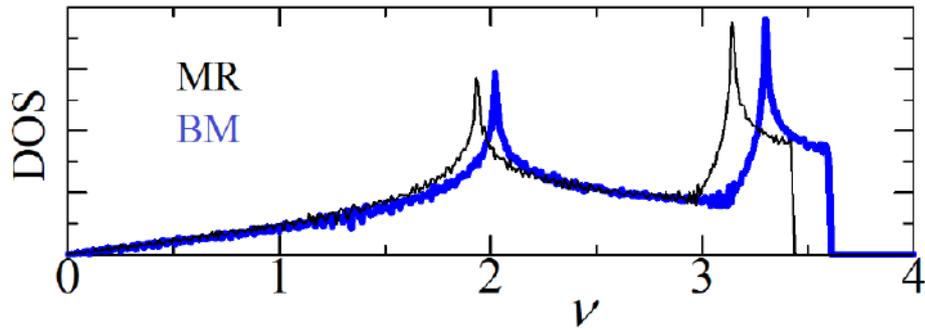


Рисунок 6.4 — Плотность фононных состояний для двумерной треугольной решетки: тонкая черная кривая для потенциала Морзе, толстая синяя кривая для потенциала Борна-Майера.

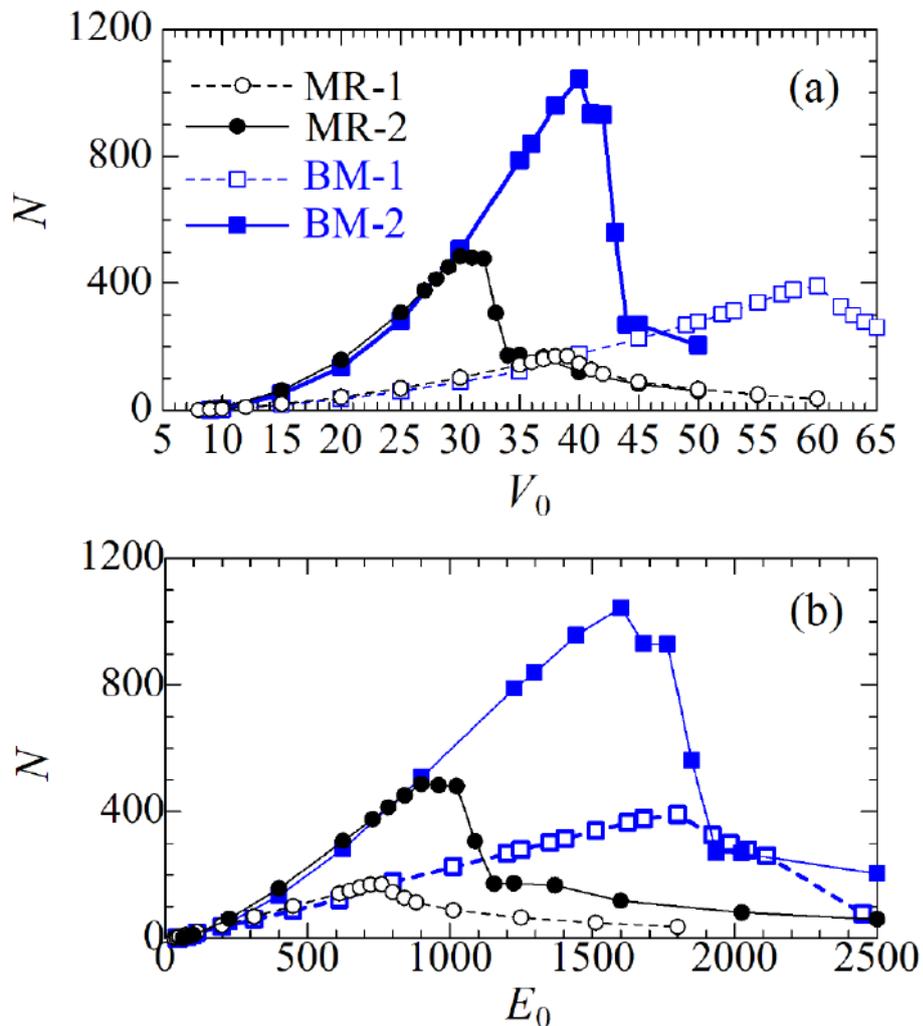


Рисунок 6.5 — Длина пробега краудиона в межатомных расстояниях в зависимости от (a) начальной скорости возбужденных атомов V_0 и (b) начальной энергии возбужденных атомов E_0 . Незакрашенные и покрашенные кружки используются для 1- и 2-краудионов соответственно, движущимся в кристалле Морзе. Незакрашенные и покрашенные квадраты соответствуют 1- и 2-краудионам, движущимся в кристалле Борна-Майера.

движущимся краудионом будет минимальным и потери энергии будут происходить в основном за счет образования ударных волн. Вот почему важно сравнить максимальную фононную частоту для решеток Морзе и Борна-Майера. Плотность фононных состояний (DOS) для двух рассматриваемых решеток представлена на рисунке 6.4. Видно, что максимальные фононные частоты решеток близки: 3,43 для решетки Морзе и 3,60 для решетки Борна-Майера. Это означает, что условия безызлучательного распространения сверхзвуковых краудионов для обеих решеток близки.

Основной результат данного исследования представлен на рисунке 6.5, где длина пробега краудиона, измеренная в единицах межатомных расстояний, N , показана как функция (а) начальной скорости V_0 возбужденных атомов и (б) начальной энергии E_0 , переданной системе. Результаты для потенциала Борна-Майера (Морзе) представлены квадратами (кружками). Пустые символы использованы для 1-краудиона, а заполненные - для 2-краудиона. Для краткости мы используем обозначения MR-1 и MR-2 для 1- и 2-краудионов в решетке Морзе и, аналогично, BM-1 и BM-2 для 1- и 2-краудионов в решетке Борна-Майера.

Зависимость $N(E_0)$ практически линейна для энергий $E_0 < E^*$, где $E^* = 750$ для MR-1, $E^* = 900$ для MR-2, $E^* = 1800$ для BM-1 и $E^* = 1600$ для BM-2. При $E_0 > E^*$ длина пробега краудионов значительно уменьшается. Это связано с тем, что при $E_0 > E^*$ нарушается условие самофокусирующего распространения (6.7). Хорошо видно, что во всех случаях 2-краудионы имеют в 2-2,5 раза большую длину пробега, чем 1-краудионы, запущенные с той же начальной энергией E_0 . Интересно, что для начальной скорости $V_0 < 39$ для 1-краудиона и для $V_0 < 30$ для 2-краудиона результаты, полученные с двумя разными межатомными потенциалами, очень близки. Однако при больших начальных скоростях и 1-, и 2-краудионы преодолевают большие расстояния в решетке Борна-Майера. Это происходит потому, что для потенциала Борна-Майера, как указывалось в разделе 6.1.2, энергия $U_{\text{BM}}(0,5) = 680$ значительно больше, чем $U_{\text{MR}}(0,5) = 363$, см. вставку на рисунке 6.2. Это означает, что в решетке Борна-Майера выполняется условие самофокусировки для более высоких энергий столкновений. Имея более высокие начальные энергии самофокусирующего распространения, краудионы преодолевают большие расстояния в решетке Борна-Майера.

6.2 Взаимодействие движущегося ДБ с вакансией

Результаты данного раздела были опубликованы в работе [75].

6.2.1 Постановка компьютерного эксперимента

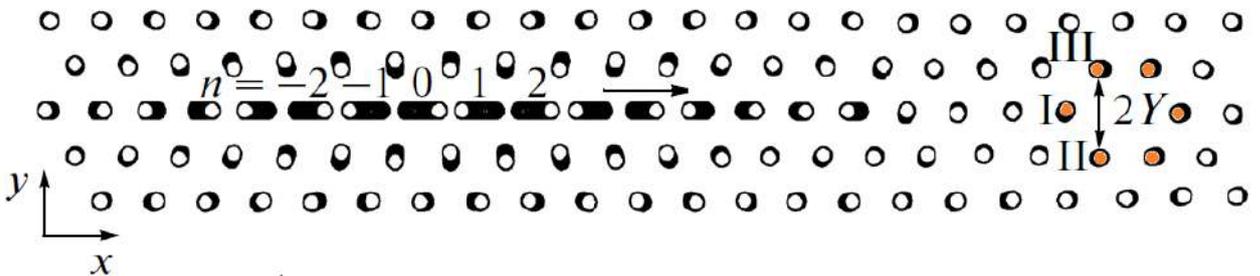


Рисунок 6.6 — Стробоскопическая картина движения атомов в модельном двумерном кристалле Морзе, показывающая ДБ, движущийся вдоль плотноупакованного атомного ряда к вакансии, расположенной в этом же ряду. Смещения атомов увеличены в 4 раза. Атомы, окружающие вакансию, показаны красным цветом. Три ближайших атома к вакансии обозначены римскими цифрами I, II и III. Потенциальный барьер для миграции атома I на вакантное место определяется путем изучения временной эволюции расстояния $2Y$ между атомами II и III.

Рассмотрим двумерную модель плотноупакованного кристалла, моделируемого с использованием компьютерной ячейки из 160×160 атомов с периодическими граничными условиями. Атомы имеют две степени свободы, представляющие компоненты вектора смещения в плоскости кристалла. В центре ячейки возбуждается ДБ, а на периферии вводится вязкое трение для поглощения малоамплитудных колебаний, излучаемых ДБ.

Взаимодействие атомов в кристалле описывается парным потенциалом Морзе, который определен выражением (2.3) с параметрами $A = 1$, $r_m = 1$ и $\beta = 5$. Масса частиц $m = 1$. Возьмем радиус обрезки потенциала $5r_m$. В этом случае равновесное межатомное расстояние равно $a = 0,9881329$.

Атомы в плотноупакованном ряду нумеруются индексом n , как показано на рисунке 6.6. Начальные условия для движущегося ДБ определяются с помощью анзаца (3.55), предложенного в работе [35]. Начальные перемещения задаются только атомам одного плотноупакованного ряда. Все атомы, кроме атомов в рассматриваемом плотноупакованном ряду, имеют нулевые начальные смещения и скорости. Здесь мы представим анзац (3.55) в несколько иных обозначениях:

$$x_n(t) = S_n^0 + T_n^0 \cos[\omega t + \phi_0 + \delta(n - x_0)], \quad y_n = 0, \quad \dot{y}_n = 0, \quad (6.8)$$

где

$$S_n^0 = \frac{-B(n - x_0)}{\cosh[\gamma(n - x_0)]}, \quad T_n^0 = \frac{(-1)^n A}{\cosh[\beta(n - x_0)]}. \quad (6.9)$$

Здесь A - амплитуда ДБ, B - амплитуда статических смещений центров колеблющихся атомов, параметры β и γ задают степень пространственной локализации ДБ, x_0 - начальное положение ДБ. При $x_0 = 0$ ДБ находится на центре атома, а при $x_0 = 1/2$ - по середине между двумя соседними атомами. Функции S_n^0 и T_n^0 в (6.9) описывают смещения центров и амплитуды колебаний атомов соответственно. Отметим, что скорость ДБ зависит от разности фаз δ , так что $\delta = 0$ соответствует неподвижному ДБ.

Результаты моделирования представлены функциями

$$S_n = (x_{n, \max} + x_{n, \min})/2, \quad T_n = (x_{n, \max} - x_{n, \min})/2. \quad (6.10)$$

где $x_{n, \max}$ и $x_{n, \min}$ - это соответственно максимальное и минимальное значения квазипериодической функции $x_n(t)$, описывающей движение n -го атома в плотноупакованном атомном ряду.

Рисунок 6.6 иллюстрирует постановку численных экспериментов. Показана стробоскопическая картина движения атомов в модельном двумерном кристалле. Виден ДБ, движущийся слева направо вдоль плотно упакованного атомного ряда по направлению к вакансии. Атомы, окружающие вакансию, окрашены красным. Римскими цифрами обозначены три ближайших соседних к вакансии атома. Потенциальный барьер для миграции атома I на вакантное место оценивается путем изучения временной эволюции расстояния $2Y$ между атомами II и III.

Проведено численное моделирование взаимодействия ДБ с вакансией для различных значений параметра δ . Отметим, что скорость ДБ является почти линейной функцией δ , которую можно аппроксимировать как $V_{\text{ДВ}} = 41\delta$.

6.2.2 Полученные результаты

На рисунке 6.7 представлены два примера взаимодействия ДБ с вакансией, где показаны функции T_n , рассчитанные для различных моментов времени с шагом $\Delta t = 5,07$ (сдвинуты по вертикальной оси снизу вверх). Положение вакансии показано вертикальной пунктирной линией. Параметры формул (6.9), использованные для задания начальных условий, были следующими: (а) $A = 0,2565$, $B = 0,015$, $\beta = \gamma = 0,25$, $\omega = 19,52$, $x_0 = 1/2$, $\delta = 0,02\pi$; б) то же, за исключением $\delta = 0,04\pi$. Таким образом, единственное отличие состоит в том, что скорость ДБ на рисунке 6.7(а) в два раза меньше, чем на рисунке 6.7(б). В первом случае ДБ почти упруго отталкивается от вакансии, а во втором случае ДБ рассеивается на вакансии. Установлено, что ДБ, инициированные с $\delta \leq 0,035\pi$ ($V_{\text{ДВ}} \leq 4,51$), испытывают упругое отталкивание от вакансии, а ДБ с $\delta \geq 0,04\pi$ ($V_{\text{ДВ}} \geq 5,15$) рассеиваются на вакансии. Остальные параметры в формулах (6.9) при задании начальных условий не менялись.

Мы также исследовали вопрос о том, влияет ли наличие ДБ на высоту потенциального барьера для ближайшего атома I (рисунок 6.6) для занятия вакантного узла решетки. Чтобы ответить на этот вопрос, мы проанализировали поведение расстояния $2Y$ между атомами II и III в зависимости от времени. Очевидно, что увеличение этого расстояния облегчило бы переход атома I на вакантное место. Более того, согласно известным расчетам, даже симметричное колебательное изменение зазора между атомами II и III относительно его равновесного значения увеличивает вероятность преодоления потенциального барьера при наличии возмущений, вызванных взаимодействием ДБ с дефектами решетки [201]. При этом свободная энергия системы (т.е. атомов, окружающих вакансию) уменьшается за счет увеличения колебательной энтропии атомов, что отражает статистическую природу этого явления и носит достаточно общий характер.

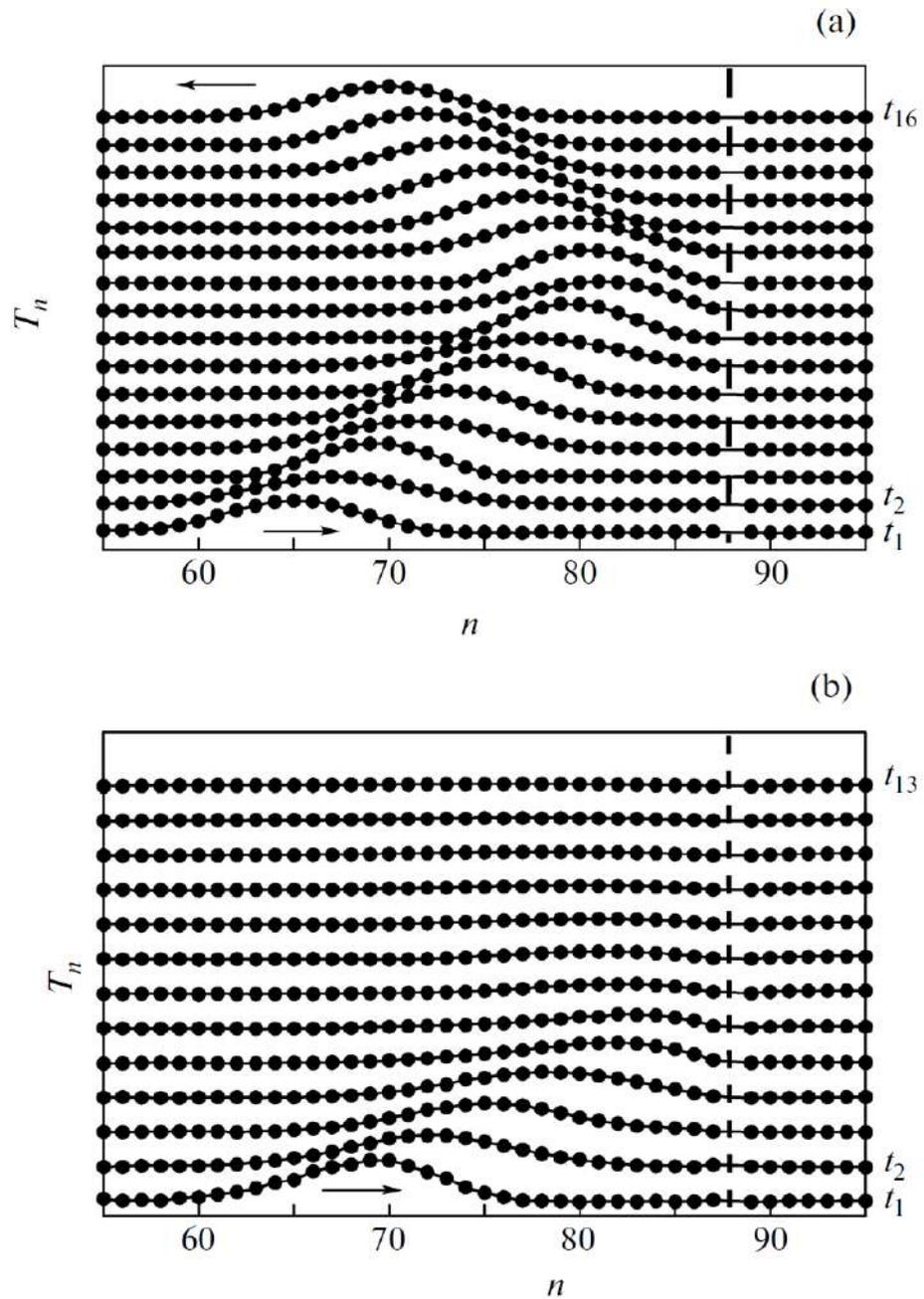


Рисунок 6.7 — Примеры взаимодействия ДБ с вакансией, положение которой показано вертикальной штриховой линией. Параметры возбуждения ДБ приведены в тексте. Скорость ДБ на (а) вдвое меньше, чем на (б); наблюдается (а) почти упругое отталкивание ДБ от вакансии и (б) рассеяние ДБ на вакансии.

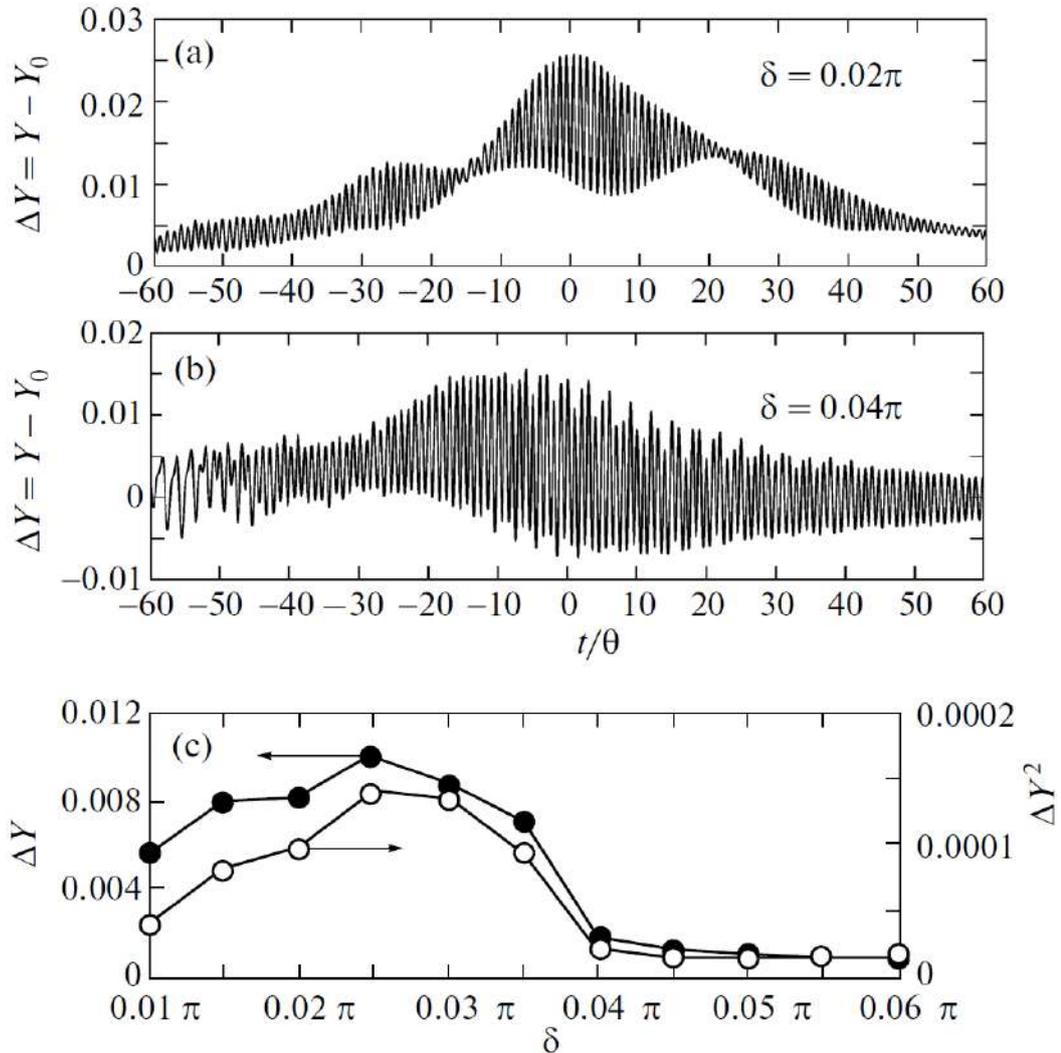


Рисунок 6.8 — Изменение расстояния Y (см. рисунок 6.6) от его равновесного значения Y_0 в зависимости от времени (выраженного в единицах периода колебаний ДБ θ) в случаях (а) упругого отражения от вакансии и (б) рассеяния на ней; (с) среднее значение $\langle \Delta Y \rangle$ расстояния между атомами II и III и его среднеквадратичное отклонение $\langle \Delta Y^2 \rangle$ от равновесного значения, рассчитанное за время взаимодействия с вакансией, в зависимости от параметра δ .

Расчет свободной энергии активации миграции вакансии в условиях ее взаимодействия с ДБ выходит за рамки настоящей работы, но основная идея, лежащая в основе уменьшения этой энергии, может быть проиллюстрирована геометрически. На рисунке 6.8 представлены графики зависимости $\Delta Y(t/\theta) = Y(t/\theta) - Y_0$, где Y_0 - равновесное полурасстояние между атомами II и III, θ - период колебаний ДБ для ДБ с (а) $\delta = 0,02\pi$ и (б) $\delta = 0,04\pi$ (как и на рисунках 6.7(а) и (б) соответственно). Отметим, что в случае упругого отражения ДБ от вакансии [рисунок 6.8(а)] $\Delta Y(t) > 0$ для числа периодов колебаний ДБ порядка 10^2 . В случае рассеяния ДБ при взаимодействии с вакансией [рисунок 6.8(б)] $\Delta Y(t)$ колеблется вокруг нуля примерно 10^2 периодов колебаний. В обоих случаях активационный барьер для миграции вакансий эффективно снижается. Однако, как будет показано ниже, это уменьшение более эффективно в случае отталкивания ДБ от вакансии.

Определим среднее и среднеквадратичное значения $\Delta Y(t)$ за период времени $2T$:

$$\langle \Delta Y \rangle = \frac{1}{2T} \int_{-T}^T \Delta Y(t) dt, \quad \langle \Delta Y^2 \rangle = \frac{1}{2T} \int_{-T}^T \Delta Y^2(t) dt. \quad (6.11)$$

Здесь время отсчитывается от момента достижения максимального значения $\Delta Y(t)$, которое считается моментом столкновения ДБ с вакансией. Пределы интегрирования определяются значением $T = 80\theta$ (где θ - период колебаний ДБ) и соответствуют промежутку времени, в течение которого $\Delta Y(t)$ значительно отклоняется от нуля.

На рисунке 6.8(с) представлены зависимости $\langle \Delta Y \rangle$ (черные кружки) и $\langle \Delta Y^2 \rangle$ (светлые кружки) от параметра δ . Как видно, и $\langle \Delta Y \rangle$, и $\langle \Delta Y^2 \rangle$ велики в области упругого отталкивания и падают в области ДБ-рассеяния на вакансии. Большое значение $\langle \Delta Y \rangle$ означает увеличение расстояния между атомами II и III в момент взаимодействия ДБ с вакансией и, следовательно, снижение барьера для миграции вакансии. Наиболее эффективное снижение этого барьера наблюдается при упругом отталкивании ДБ от вакансии. Однако наличие ненулевого среднеквадратичного отклонения $\langle \Delta Y^2 \rangle$ даже в случае рассеяния ДБ на вакансии приводит к достаточно эффективному снижению активационного барьера миграции вакансий [201].

Таким образом, 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 10^2 периодов колебаний ДБ. Анализ расстояния $2Y$ между атомами II и III (см. рисунок 6.6) 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 [201]. Однако это уменьшение более эффективно в случае отталкивания ДБ от вакансии.

6.3 О возможной связи между треками в кристаллах слюды с фазовыми переходами в бистабильной решетке

Данный раздел посвящен анализу модели Френкеля-Конторовой с несоответствующим периодом решетки и локального потенциала с целью возможного объяснения природы темных треков, наблюдаемых в кристаллах слюды мусковита.

6.3.1 Постановка проблемы

В 60-х годах прошлого века Майк Рассел обратил внимание исследователей на темные следы, видимые невооруженным глазом в кристаллах слюды мусковита (см. рисунок 6.9), и предположил, что по крайней мере некоторые из них могут быть созданы высокоэнергетическими элементарными частицами, пришедшими из глубокого космоса [236—239]. Установлено, что треки декорированы избыточным содержанием атомов железа, образующих магнетит Fe_3O_4 [240]. По мере развития наших знаний о локализованных движущихся

возбуждениях кристаллической решетки, различные квазичастицы (краудионы, дискретные бризеры и кводоны) были проверены на способность оставлять такие треки [30; 113; 189; 217; 240—244]. Краудион - это межузельный атом, который может двигаться с дозвуковой или даже сверхзвуковой скоростью вдоль плотноупакованных атомных рядов в кристалле [231—233; 245—248]. Дискретный бризер - это колебательная мода большой амплитуды в бездефектной решетке с частотой колебаний вне фононного спектра кристалла. Последнее является одним из основных условий его существования и обеспечивает невзаимодействие с решеточными фононами [18; 144; 230]. В некоторых случаях дискретные бризеры могут перемещаться по кристаллу с максимальной скоростью до половины скорости звука.

Термин кводон не имеет строгого определения. Впервые он был введен Майком Расселом для обозначения гипотетической квазичастицы, способной двигаться в кристалле. Гипотеза о связывании треков в слюде с движением элементарных частиц или кводонов выглядит довольно привлекательно, но следует признать, что появление треков должно быть связано со структурными изменениями, ответственными за неравномерное распределение атомов железа и их диффузию в сторону треков. В то же время ни краудионы, ни дискретные бризеры не вызывают структурных изменений при движении по кристаллической решетке. Кроме того, длина пробега этих локализованных состояний при наличии тепловых флуктуаций и дефектов решетки не может достигать порядка десятков сантиметров (см. рисунок 6.9).

Трудно предположить существование таких микроскопических локализованных возбуждений в реальных кристаллах, которые способны преодолевать макроскопические расстояния при наличии различных возмущений. Следовательно, необходимо предложить такой механизм распространения, когда локализованное возбуждение (1) приводит к изменению кристаллической структуры, и (2) может распространяться на большие расстояния при соответствующих условиях. Хорошо известно, что солитоноподобные возбуждения, удовлетворяющие обоим вышеуказанным условиям, могут распространяться в бистабильных диссипативных средах, например, во время мартенситных превращений в кристаллах при изменении напряжения и/или температуры [249; 250]. Таким образом, движущаяся волна переключения преобразует высокоэнергетическую структуру в другую низкоэнергетическую, а энергия, выделяемая при этом пре-

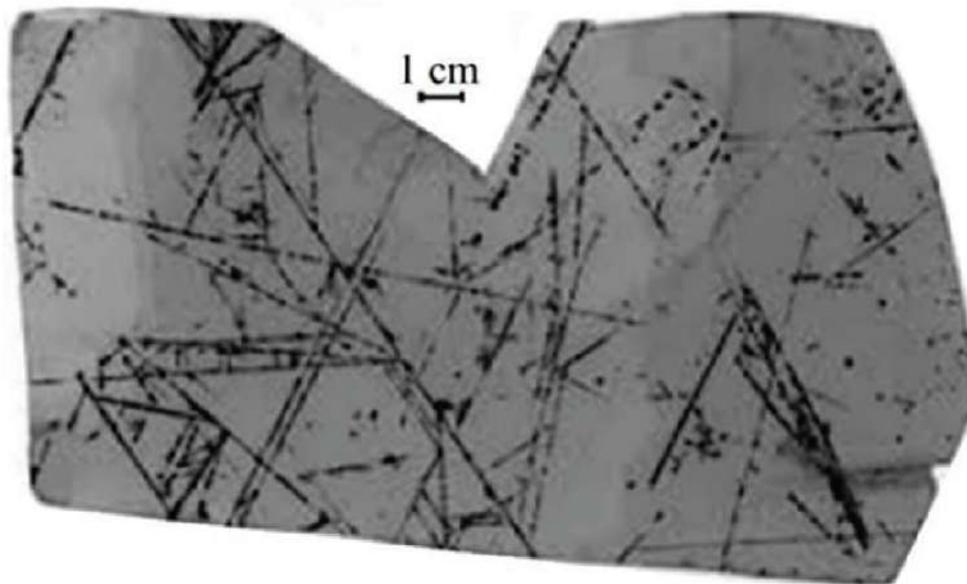


Рисунок 6.9 — Темные следы, видимые невооруженным глазом в прозрачных кристаллах слюды мусковита (взято из работы [240]). Имеется набор треков с углом между ними 60° , что определяется гексагональной симметрией кристалла. По словам Майка Рассела, треки с другой ориентацией могут быть созданы космическими частицами высоких энергий или другими возбуждениями.

образовании, обеспечивает практически неограниченное распространение такой волны даже в условиях диссипации энергии.

Слюда мусковит имеет довольно сложный химический состав и кристаллическую структуру, как показано на рисунке 6.10 [240]. Однако есть все основания полагать, что наиболее интересные события происходят в одноатомном слое атомов калия, образующих двумерную треугольную решетку. Атомы калия в кристаллической структуре несут положительный заряд, примерно равный заряду протона. В этом слое теоретически возможно существование краудионов и дискретных бризеров.

Для изучения их динамики ранее использовалась простая двумерная модель Френкеля-Конторовой, в которой атомы двумерной треугольной решетки (атомы калия) взаимодействуют с ближайшими соседями и с двумерным локальным потенциалом, моделирующим влияние других атомов, окружающих моноатомный слой калия [113; 234; 251]. Предполагалось, что атомы калия не могут покинуть свою плоскость, то есть имеют две степени свободы. В этой модели локальный потенциал имеет набор минимумов в виде треугольной решетки

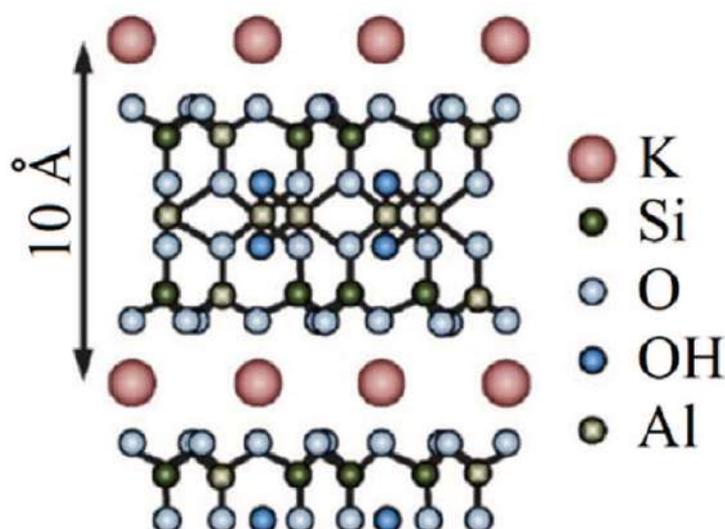


Рисунок 6.10 — Атомная структура слюды мусковита ($\text{KAl}_2(\text{Si}_3\text{AlO}_{10})(\text{OH})_2$).

Атомы калия, точнее ионы K^+ (самые крупные на рисунке), образуют двумерную треугольную решетку, перпендикулярную плоскости рисунка.

Кристалл имеет слоистую структуру и легко расслаивается за счет разрушения кулоновских взаимодействий между положительно заряженным слоем атомов калия и отрицательно заряженным слоем алюмосиликата.

ки, шаг которой принимался равным равновесному межатомному расстоянию решетки калия. Это предположение исключало бистабильность в кристалле. Однако, как нам подсказал проф. Арчилла (J.F.R. Archilla) в частном общении, из простых физических соображений ясно, что вероятность точного совпадения этих двух геометрических параметров (шаг локального потенциала и равновесное межатомное расстояние калиевой решетки) в реальном кристалле слюды мусковита равна нулю.

В этом разделе мы рассматриваем локальный потенциал с набором минимумов, которые образуют не треугольную, а гексагональную решетку, а шаг решетки отличается от равновесного межатомного расстояния в двумерной треугольной решетке атомов, которые взаимодействуют через парный потенциал Морзе. Эти условия обеспечивают бистабильность системы, что допускает существование различных фаз.

6.3.2 Двумерная модель кристалла слюды

Моделирование выполняется методом молекулярной динамики с использованием двумерной треугольной решетки, которая имитирует поведение монокристаллического слоя калия в слюде на качественном уровне. Позиции атомов задаются радиус-вектором $r_{i,j} = (ai + (a/2)j, (a\sqrt{3}/2)j)$, где a - равновесное межатомное расстояние решетки калия. Индексы i и j указывают номер атома в двумерной решетке.

Межатомные взаимодействия описываются с помощью классического парного потенциала Морзе

$$V(r) = A\{\exp[-2\beta(r - r_m)] - 2\exp[-\beta(r - r_m)]\}, \quad (6.12)$$

где r - расстояние между рассматриваемой парой атомов, A - энергия разрыва связи (глубина потенциала) и β определяет жесткость связи. Функция $V(r)$ имеет минимум при $r = r_m$. Без ограничения общности можно считать, что $A = 1$, $r_m = 1$ и масса атома $m = 1$. Для дальнейших расчетов выберем $\beta = 5$ и радиус обрезки потенциала $5r_m$. В этом случае равновесное межатомное расстояние $a = 0,9881329$. Обратим внимание, что все расчеты выполняются в безразмерных единицах энергии, расстояния и времени.

На атомы двумерной треугольной решетки действует двумерный локальный потенциал $U(x,y)$, определяемый выражением

$$U(x,y) = \frac{2\gamma}{9} \left\{ \frac{3}{2} + \cos \left[2\pi \left(\frac{x}{b} + \frac{y}{b\sqrt{3}} + \frac{2}{3} \right) \right] + \cos \left[2\pi \left(\frac{2y}{b\sqrt{3}} + \frac{1}{3} \right) \right] + \cos \left[2\pi \left(\frac{x}{b} - \frac{y}{b\sqrt{3}} + \frac{1}{3} \right) \right] \right\}, \quad (6.13)$$

где γ - глубина потенциала, а b - размер трансляционной ячейки потенциала. Трансляционная ячейка содержит два потенциальных минимума, поэтому минимумы образуют гексагональную, а не треугольную решетку, как показано на рисунке 6.11. Гексагональную решетку минимумов можно разложить на две треугольные подрешетки. (m, n) -й минимум первой подрешетки имеет радиус-вектор $r_{m,n}^{(1)} = (bm + (b/2)n, (b\sqrt{3}/2)n)$, а радиус-вектор (m, n) -го минимума второй подрешетки $r_{m,n}^{(2)} = (bm + (b/2)n, (b\sqrt{3}/2)n + (1/\sqrt{3})b)$. В предлагаемой

модели количество минимумов локального потенциала вдвое превышает количество атомов в двумерной решетке.

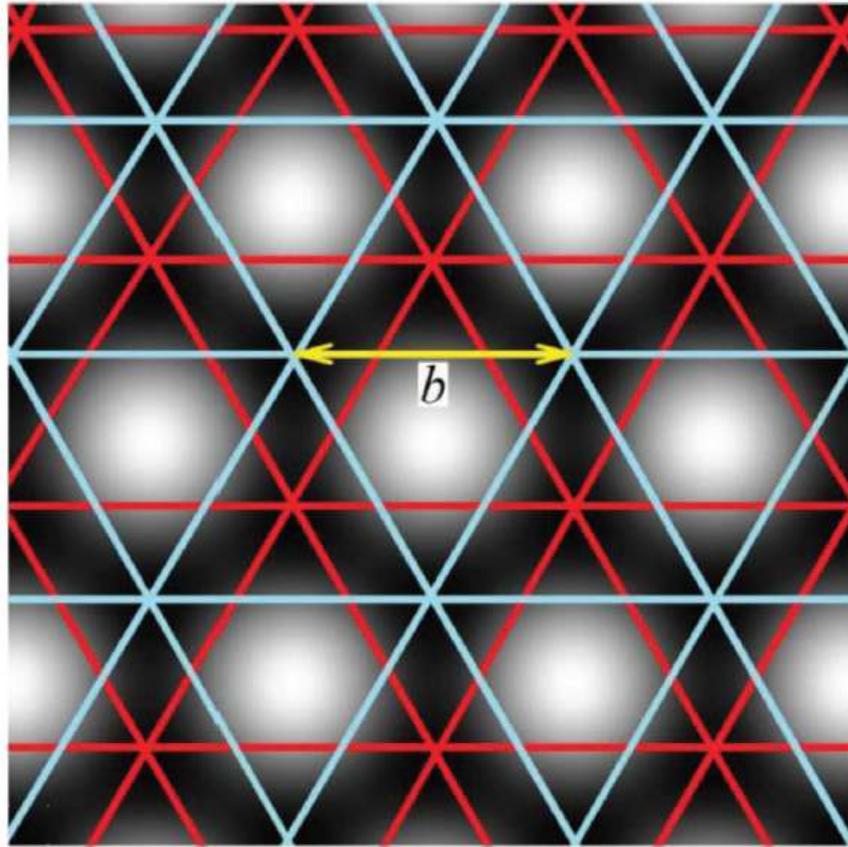


Рисунок 6.11 — Двумерный локальный потенциал, полученный с помощью выражения (6.13). Черным (белым) цветом показаны области минимальной (максимальной) потенциальной энергии. Минимумы потенциальной энергии образуют гексагональную решетку, которую можно разделить на две треугольные подрешетки, показанные линиями разного цвета. Расстояние между ближайшими точками треугольной подрешетки равно b .

Модель, аналогичная описанной выше, ранее использовалась в работах [252; 253]. Однако следует отметить, что авторы [252] предполагали, что каждый атом взаимодействует только со своими ближайшими соседями посредством линейных упругих связей (пружин). Такие связи не могут разорваться и, таким образом, плохо отражают реальные межатомные взаимодействия, которые ослабевают на больших расстояниях. Чтобы внести нелинейность в межатомные взаимодействия, авторы [253] использовали потенциал Леннарда-Джонса. В настоящей работе используется потенциал Морзе (6.12), поскольку он имеет дополнительный параметр для управления жесткостью связи, хотя здесь мы не анализируем влияние этого параметра.

Шаг решетки локальных минимумов потенциала выбран равным $b = (14/13)a$. Последнее означает, что на 14 атомов в одном ряду приходится 13 минимумов потенциала. Очевидно, что вдоль границ расчетной ячейки, содержащей 14×14 атомов или 13×13 расстояний между минимумами локального потенциала, ожидается появление линий дислокаций несоответствия.

Наличие двух эквивалентных подрешеток локальных минимумов потенциала и несовпадение шага решетки минимумов потенциала и межатомного расстояния определяют бистабильность системы. Периодические граничные условия накладываются по двум направлениям. Шаг по времени $\tau = 0,001$ безразмерных единиц используется для численного интегрирования уравнений движения. Поскольку рассматривается двумерная треугольная решетка, атомы могут двигаться только вдоль плоскости решетки.

В этом исследовании выполняются два типа моделирования.

1. Осуществляется пошаговое увеличение глубины локального потенциала γ от 0 до 10 с последующей релаксацией в течение 10 единиц времени после каждого приращения γ . После этого выполняется аналогичное пошаговое уменьшение глубины локального потенциала с 10 до 0. Размер расчетной ячейки выбран равным 42×42 атомов или 39×39 расстояний между минимумами локального потенциала, т.е. ячейка включала в себя 3×3 трансляционных блока дислокаций несоответствия. Для релаксации структуры в уравнения движения вводился вязкий член $\delta \dot{r}_{i,j}$, где δ - коэффициент вязкости, а точка обозначает дифференцирование по времени. Коэффициент вязкости был пропорционален максимальному модулю вектора силы, действующей на атомы решетки, $\delta = 10F_{i,j}^{\max}$. Значение δ остается небольшим при деформации решетки и увеличивается при структурных преобразованиях. После релаксации вычисляется потенциальная энергия системы, приходящаяся на один атом E . Анализируются структурные изменения по мере увеличения и уменьшения глубины локального потенциала.

2. Анализируется структурная устойчивость доменных стенок между двумя фазами. Для этого используется расчетная ячейка, содержащая 168×168 атомов или 156×156 расстояний между минимумами местного потенциала, т.е. ячейка включает 12×12 трансляционных блоков дислокаций несоответствия. Используется термодинамический ансамбль NVE (количество атомов, объем и энергия в системе постоянны). В этом случае коэффициент вязкости δ равен нулю. Атомам задаются случайные смещения из положений равновесной решетки

(что эквивалентно воздействию температуры), а затем анализируется динамика системы при различных величинах этих смещений. При этом глубина потенциала устанавливается равной $\gamma = 5,5$, что будет обосновано ниже.

Далее представим результаты моделирования.

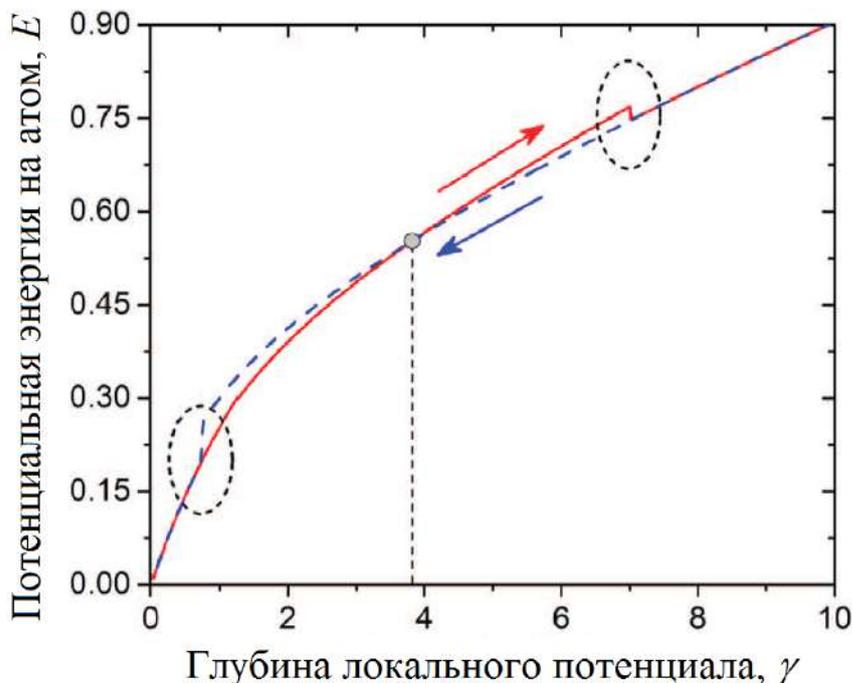


Рисунок 6.12 — Потенциальная энергия, приходящаяся на один атом, E , как функция глубины локального потенциала γ . Серая пунктирная линия показывает пересечение кривых в точке $\gamma = 3,8$.

6.3.3 Влияние глубины локального потенциала

Потенциальная энергия, приходящаяся на один атом после релаксации, как функция увеличения и уменьшения глубины локального потенциала γ , представлена на рисунке 6.12. Хорошо видно, что увеличение γ приводит к монотонному росту потенциальной энергии E , но при $\gamma = 6,95$ происходит резкое падение E . Далее наблюдается только рост E с увеличением γ . Уменьшение γ приводит к монотонному уменьшению потенциальной энергии с резким падением при $\gamma = 0,76$.

Эволюция структурная системы при увеличении и последующем уменьшении γ показана на рисунках 6.13 и 6.14 соответственно. Для удобства визуаль-

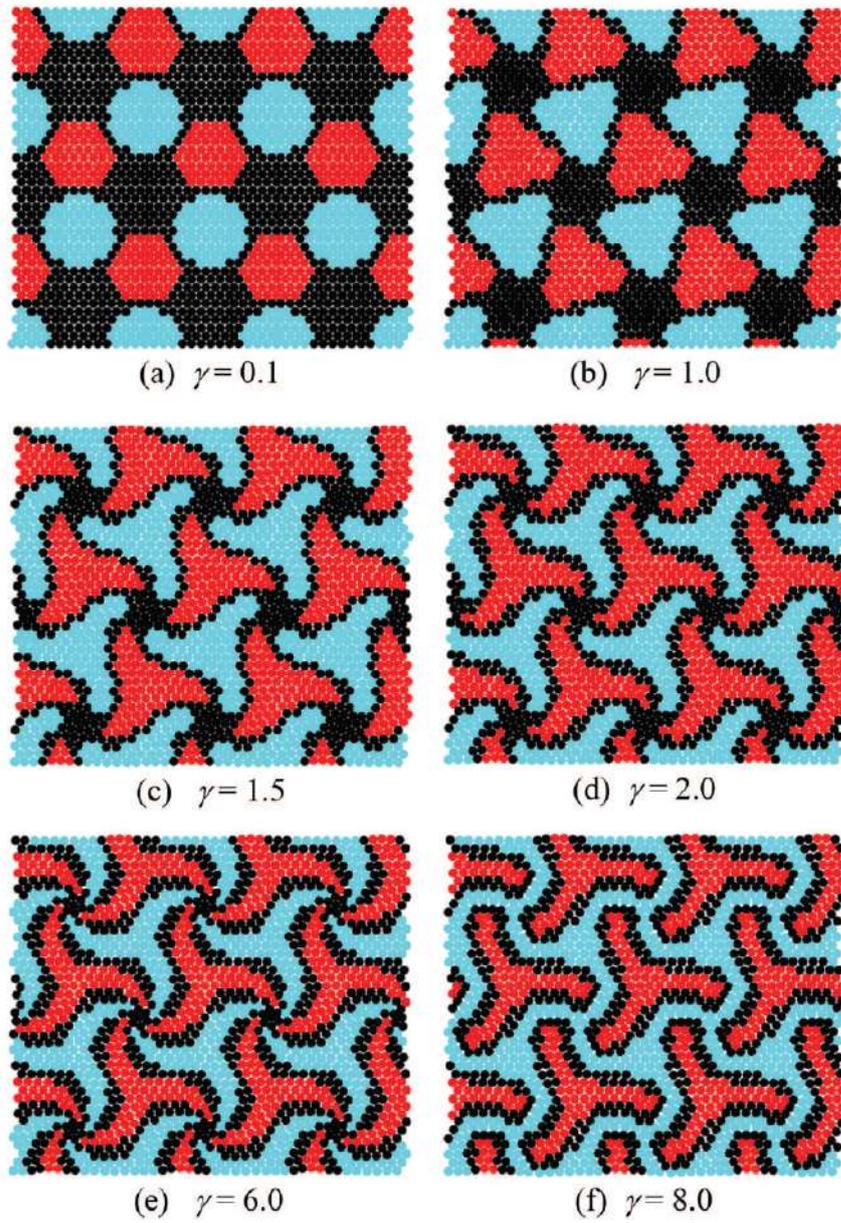


Рисунок 6.13 — Эволюция структуры системы с увеличением глубины локального потенциала. Атомы окрашены в соответствии с их близостью к минимумам локального потенциала (см. описание в тексте).

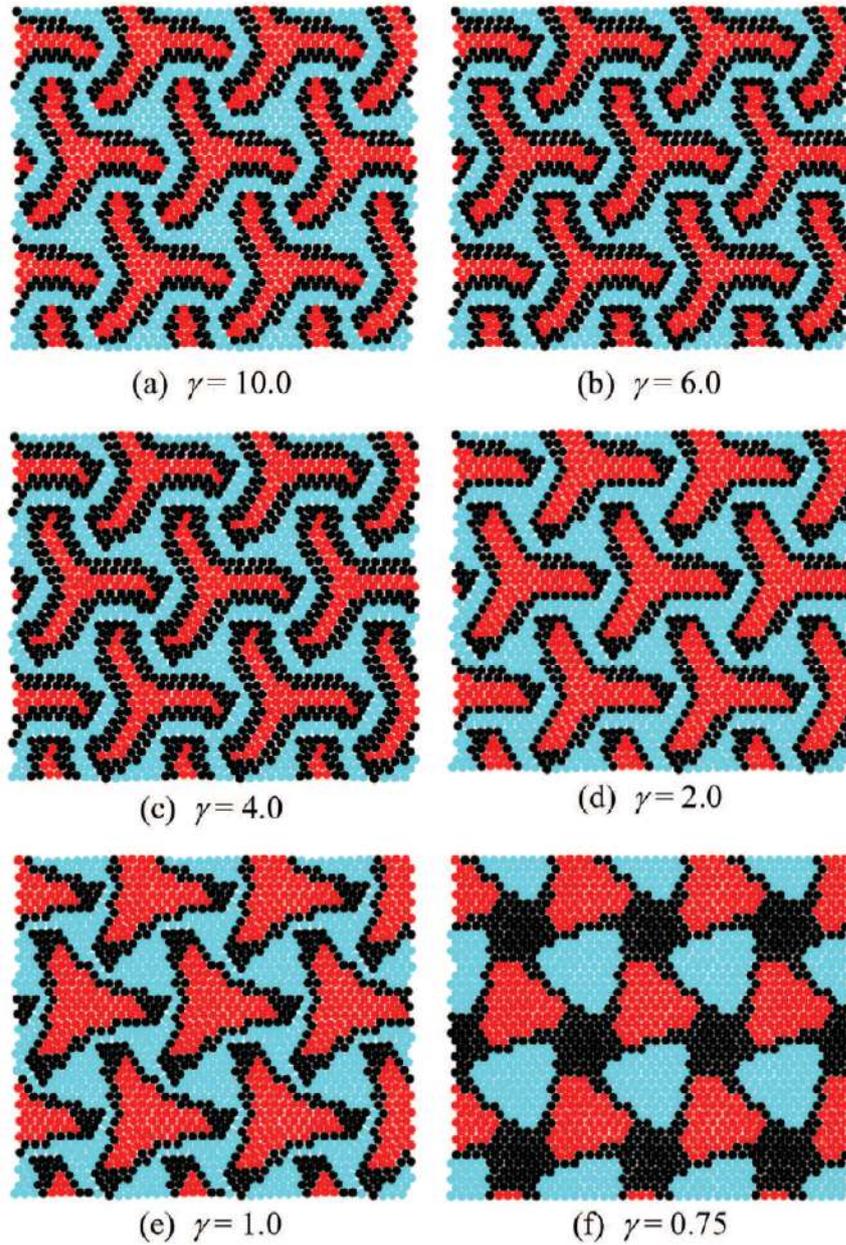


Рисунок 6.14 — То же, что на рисунке 6.13, но для пошагового уменьшения глубины локального потенциала. Атомы окрашены в соответствии с их близостью к минимумам локального потенциала (см. описание в тексте).

ного восприятия атомы окрашены в соответствии с их близостью к минимумам локального потенциала треугольной решетки. Красный (синий) цвет используется для атомов, которые близки к минимумам локального потенциала, обозначенным красными (синими) линиями на рисунке 6.11. Все остальные атомы, не близкие ни к какому минимуму, показаны черным. Атом считается близким к минимуму, если расстояние между ними не превышает $d \times a$, где значение коэффициента d находится в диапазоне $0,15 \leq d \leq 0,25$ и выбран таким образом, чтобы отчетливо визуализировать сеть дислокаций несоответствия. Таким образом, атомы, окрашенные в красный и синий цвета, имеют относительно низкую потенциальную энергию, поскольку они близки к минимумам локального потенциала, в то время как атомы, окрашенные в черный цвет, имеют более высокую энергию и расположены на дислокациях несоответствия.

При малых значениях $\gamma \leq 0,1$ (см. Рис. 5а) сеть дислокаций несоответствия формируется пересечением горизонтальных линий дислокаций и линий, наклоненных по отношению к ним на $\pm 60^\circ$. Эти линии дислокаций пересекаются, образуя черные области (плохое совпадение атомов с минимумами локального потенциала). С увеличением γ происходит постепенное закручивание линий дислокаций в одну сторону вблизи точек их пересечения, см. рисунок 6.13(b). Отметим, что такое закручивание линий дислокации возможно как по часовой стрелке, так и против часовой стрелки. Дальнейшее увеличение γ приводит к дальнейшему закручиванию узлов пересечения дислокаций и появлению кривизны линий дислокации, как показано на рисунках 6.13(b-e). При достижении значения $\gamma = 6,95$ в системе происходит фазовый переход, и дислокации несоответствия становятся непересекающимися линиями, которые замыкаются петлями, см. рисунок 6.13(e). Этот фазовый переход сопровождается выделением потенциальной энергии (см. соответствующий спад на рисунке 6.12).

Эволюция структуры при уменьшении параметра γ с 10.0 до 1.0 представлена на рисунках 6.14(a-e). Как видно, в этом диапазоне дислокации несоответствия сохраняют форму непересекающихся петель. Обратное превращение в систему с пересекающимися дислокациями происходит только при $\gamma = 0,76$ (см. рисунок 6.14(e)). Это фазовое превращение, как и в предыдущем случае, сопровождается падением потенциальной энергии, как ясно показано на рисунке 6.12.

Таким образом, в диапазоне $0,76 \leq \gamma \leq 6,95$ в системе могут сосуществовать две фазы. В первой фазе дислокации несоответствия пересекаются друг с другом, и система имеет меньшую энергию при $\gamma < 3,8$. На втором этапе они образуют непересекающиеся петли, и система характеризуется повышенной потенциальной энергией при $\gamma > 3,8$.

Полученные выше численные результаты позволяют предположить следующий механизм образования треков в кристаллах слюды. Предположим, что монослой калия находится в бистабильном состоянии с относительно высокой энергией. Внешнее воздействие, такое как радиоактивный распад изотопа ^{40}K или бомбардировка высокоэнергетическими частицами, пришедшими из далекого космоса, может инициировать фазовый переход в состояние с более низкой энергией. Мы предполагаем, что новая фаза может существовать только в относительно узкой полосе (доли миллиметра шириной) по аналогии с узкими мартенситными пластинами, образующимися в ряде металлов и сплавов [249; 250]. Возникновение этой новой фазы представляет собой нелинейный волновой процесс, поддерживаемый высвобождением энергии, связанной с переходом в состояние с более низкой энергией. Следовательно, такой переход не ограничен в пространстве, и волна переключения может пробегать макроскопические расстояния. Поскольку свойства новой фазы отличаются от свойств остальной части кристалла, эта фаза может стать центром поглощения дифосфата с использованием атомов железа, что со временем снизит прозрачность преобразованной области и, таким образом, станет макроскопическим треком, видимым невооруженным глазом.

6.3.4 Структурная устойчивость доменных стенок

Чтобы подтвердить предложенный механизм образования треков, важно проверить, могут ли области этих двух фаз сосуществовать при конечных температурах. Исходная структура, содержащая горизонтальные домены как с пересекающимися, так и с непересекающимися дислокациями несоответствия, получается с помощью процедуры релаксации и показана на рисунке 6.15(а). Домены разделены стенками, которые обозначены желтыми линиями. Верхняя

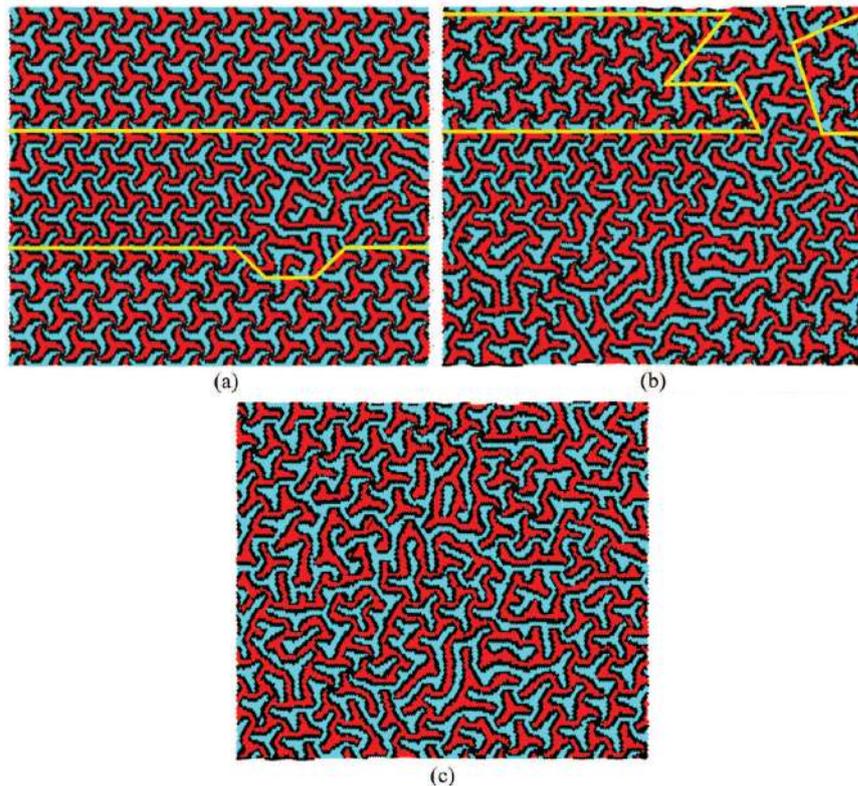


Рисунок 6.15 — (a) Исходная равновесная структура, которая включает в себя фазовые домены с пересечением дислокаций несоответствия и без пересечений. Доменные границы обозначены желтыми линиями. Та же структура при (b) $t = 320$ и (c) $t = 800$ после возмущения атомных позиций с амплитудой 3×10^{-4} . Атомы окрашены в соответствии с их близостью к минимумам локального потенциала (см. описание в тексте).

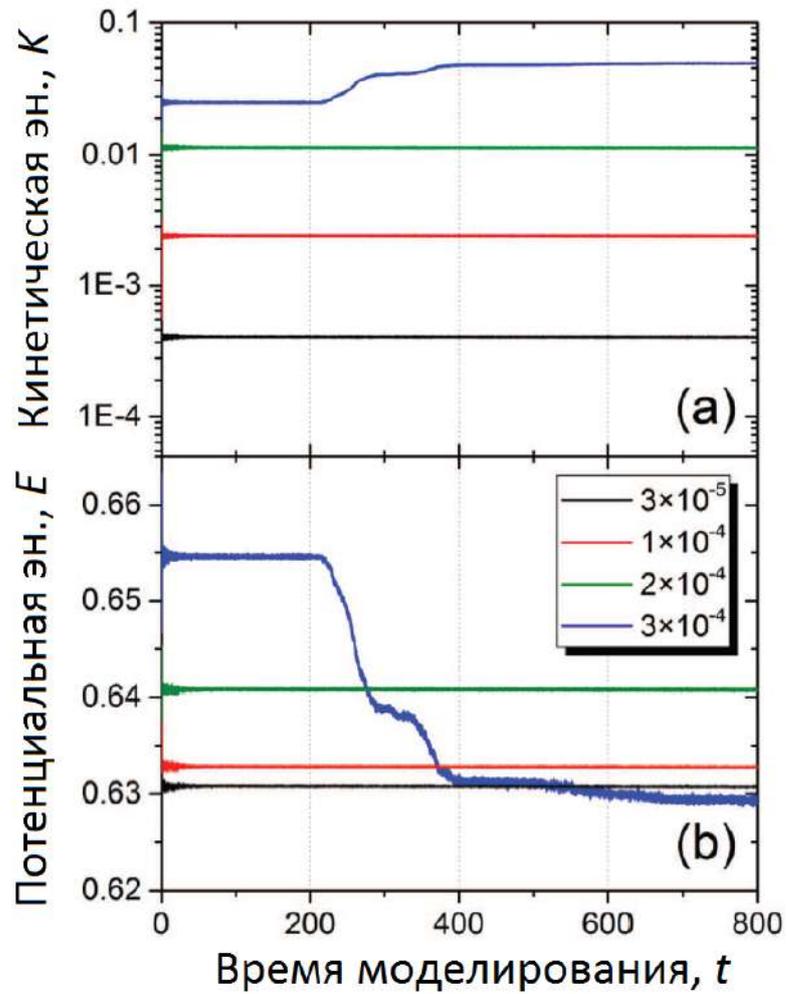


Рисунок 6.16 — Временная эволюция (а) кинетической и (б) потенциальной энергии на атом в системе, показанной на рисунке 6.15(а), после введения случайных начальных смещений атомов различной амплитуды.

доменная стенка прямая, а нижняя имеет дефект в виде ступеньки. Обратим внимание, что структура, показанная на рисунке 6.15(а), моделирует бесконечное количество доменов в форме горизонтальных полос ввиду использования периодических граничных условий. Эта равновесная структура затем возмущается, заданием атомам случайных начальных смещений различной амплитуды.

На рисунке 6.16 показано изменение во времени (а) кинетической и (б) потенциальной энергии, приходящейся на атом, при использовании возмущений положений атомов разной амплитуды. Как видно, увеличение амплитуды возмущения приводит к увеличению кинетической энергии. Аналогичное поведение наблюдается для потенциальной энергии. Для трех исследованных возмущений амплитуды 3×10^{-5} , 1×10^{-4} и 2×10^{-4} , преобразования потенциальной энергии в кинетическую не происходит. Это преобразование, которое является индикатором фазового превращения, наблюдается после инкубационного периода для наибольшей амплитуды возмущения, 3×10^{-4} .

Временная эволюция структуры, возмущенной с амплитудой 3×10^{-4} , представлена на рисунках 6.15(b,c). При $t = 320$ нижняя часть области с пересекающимися дислокациями практически полностью трансформировалась в структуру с более низкой энергией без пересечений дислокаций, а верхняя область только начала свою трансформацию, см. рисунок 6.15(b). Это фазовое превращение практически завершено во всей расчетной ячейке к моменту времени $t = 800$, за исключением нескольких небольших островков с пересекающимися дислокациями несоответствия, как показано на рисунке 6.15(c). Более быстрое движение нижней области по сравнению с верхней связано с наличием начального дефекта в виде ступеньки, что значительно ускоряет процесс фазового превращения.

Таким образом, области с пересекающимися и непересекающимися дислокациями несоответствия могут сосуществовать, когда возмущение в системе ниже определенного порогового значения. В случае превышения этого значения происходит инициирование фазового превращения. Следует подчеркнуть, что в представленных выше расчетах диссипация энергии не принимается во внимание. Следовательно, увеличение кинетической энергии (которая является мерой температуры) в системе приводит к фазовому превращению, которое продолжается до тех пор, пока не образуется только одна фаза в вычислительной ячейке. Другими словами, в нашей модели нет препятствий, которые могли

бы остановить рост одной фазы и обеспечить сосуществование двух фаз одновременно. В действительности, однако, всегда существует конкуренция между высвобождением энергии из-за фазового превращения и диссипацией энергии. В этом случае волна трансформации (переключения) может распространяться по относительно узкой линии, аналогичной наблюдаемой при мартенситных фазовых превращениях в металлах.

6.3.5 Обсуждение результатов раздела 6.3 и заключительные замечания

В разделе 6.3 предложена двумерная модель для качественного описания поведения моноатомного слоя калия в кристалле слюды мусковита. Эта модель отличается от ранее исследованных в ссылках [113; 234; 251]. Два основных отличия заключаются в следующем: (i) локальный потенциал имеет набор минимумов, образующих гексагональную решетку с числом минимумов, вдвое превышающим количество атомов калия, и (ii) неравенство равновесного межатомного расстояния решетки калия и расстояния между минимумами локального потенциала. В результате описываемый модельный кристалл проявляет бистабильность и делает возможным сосуществование двух фаз с разными потенциальными энергиями.

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.

В то же время рассматриваемая модель не учитывает некоторые особенности строения слюды и свойства монослоя калия. Во-первых, атомы калия могут двигаться не только в плоскости, но и в направлении, перпендикулярном этой плоскости. Во-вторых, атомы калия заряжены положительно, поэтому следует учитывать кулоновское отталкивание между ними. В-третьих, межатомные потенциалы асимметричны, а это означает, что жесткость межатомного взаимодействия изменяется по-разному при отклонении от равновесного положения решетки. Следовательно, при изменении знака рассогласования шагов решеток поведение фаз может отличаться. В случае, обсуждаемом в этой статье, межатомное расстояние было меньше, чем расстояние между локальными минимумами локального потенциала примерно на 7%, при этом монослой калия был сжат в плоскости локальным потенциалом. Однако это несоответствие может быть другой величины и даже противоположным по знаку. Анализ влияния величины и знака параметра несоответствия шагов решеток является интересной темой для рассмотрения в будущем.

Мы надеемся, что эта работа послужит стимулом для дальнейших исследований, направленных на объяснение удивительного явления - темных треков в кристаллах слюды мусковита.

6.4 Выводы по главе 6

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 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 преодолеть

вать большие расстояния в режиме самофокусирующего распространения, см. рисунок 6.5. Это исследование также показало, что 2-краудионы имеют в 2-2,5 раза большую длину пробега, чем 1-краудионы с той же начальной энергией. Это явление было объяснено в работах [229—233] 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 10^2 периодов колебаний ДБ. Анализ расстояния $2Y$ между атомами II и III (см. рисунок 6.6) 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 [201]. Однако это уменьшение более эффективно в случае отталкивания ДБ от вакансии.

На основании результатов, полученных в разделе 6.3, 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 появляться 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. Движение волны переключения не ограничено в пространстве, и она 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.

Заключение

Основные результаты работы заключаются в следующем.

1. Для квадратной решетки с потенциалом β -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 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, 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 β -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 (циркони) 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 β -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.

Благодарности

Написание докторской диссертации является важным этапом в научно-исследовательской деятельности каждого ученого, в связи с чем, хочется выразить огромную благодарность людям, без которых преодолеть этот этап было бы практически невозможно:

д.ф.-м.н., проф. Дмитриеву Сергею Владимировичу, научному руководителю кандидатской диссертации, научному консультанту настоящей диссертационной работы, человеку, без помощи и поддержки которого эта работа не была бы закончена и не смогла бы увидеть свет;

д.ф.-м.н., проф. Старостенкову Михаилу Дмитриевичу, учителю и коллеге, заведующему кафедрой физики и председателю диссертационного совета Д 212.004.04 на базе АлтГТУ, где автор проходил соискание ученой степени кандидата физико-математических наук, сдал кандидатские экзамены по специальности и в 2015 году защитил кандидатскую диссертацию;

д.т.н., проф. Федорову Олегу Васильевичу, д.ф.-м.н. Корзниковой Елене Александровне, к.ф.-м.н. Бебихову Юрию Владимировичу, к.ф.-м.н. Якушеву Илье Анатольевичу и многим другим ребятам, являющимися близкими друзьями, коллегами, соавторами и, фактически, проводниками по настоящему этапу жизненного пути.

Отдельно благодарю своих родителей и семью, которые постоянно оказывали всестороннюю поддержку, особенно супругу к.ф.-м.н. Семёнову Марию Николаевну, которая не понаслышке знает о трудной и кропотливой работе над диссертацией.

Также хочется отметить, что настоящая работа в различные периоды времени выполнялась при поддержке: гранта Российского фонда фундаментальных исследований № 18-32-00171 (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).

Список сокращений и условных обозначений

- ГПУ решетка** - Гексагональная плотноупакованная решетка
ГЦК решетка - Гранецентрированная кубическая решетка
ДБ - Дискретный бризер
ДНКМ - Делокализованная нелинейная колебательная мода
ОЦК решетка - Объемноцентрированная кубическая решетка
Потенциал ФПУ - Потенциал Ферми-Паста-Улама
Потенциал ЕАМ - потенциал метода погруженного атома (embedded atom method)

Список литературы

1. *Sakhnenko V. P., Chechin G. M.* Symmetrical selection rules in nonlinear dynamics of atomic systems // Phys. Dokl. — 1993. — Т. 38. — С. 219.
2. *Sakhnenko V. P., Chechin G. M.* Bushes of modes and normal modes for nonlinear dynamical systems with discrete symmetry // Phys. Dokl. — 1994. — Т. 39. — С. 625.
3. *Chechin G. M., Sakhnenko V. P.* Interactions between normal modes in nonlinear dynamical systems with discrete symmetry. Exact results // Physica D. — 1998. — Т. 117. — С. 43.
4. *Burlakov V. M., Kiselev S.* Molecular-dynamics simulation of the decay kinetics of uniform excitation of an anharmonic 1D chain // Sov. Phys. JETP. — 1991. — Т. 72. — С. 854.
5. *Mirnov V. V., Lichtenberg A. J., Guclu H.* Chaotic breather formation, coalescence, and evolution to energy equipartition in an oscillatory chain // Physica D. — 2001. — Т. 157. — С. 251.
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. — 2000. — Т. 61. — С. 2471.
7. *Kosevich Y. A., Lepri S.* Modulational instability and energy localization in anharmonic lattices at finite energy density // Phys. Rev. B. — 2000. — Т. 61. — С. 299.
8. Localization and equipartition of energy in the β -FPU chain: Chaotic breathers / T. Cretegny [и др.] // Physica D. — 1998. — Т. 121. — С. 109.
9. *Tang B., Deng K.* Discrete breathers and modulational instability in a discrete ϕ^4 nonlinear lattice with next-nearest-neighbor couplings // Physica D. — 2017. — Т. 88. — С. 2417.
10. Instability of vibrational modes in hexagonal lattice / E. A. Korznikova [и др.] // Eur. Phys. J. B. — 2017. — Т. 90. — С. 23.

11. Modulational instability and nano-scale energy localization in ferromagnetic spin chain with higher order dispersive interactions / L. Kavitha [и др.] // J. Magn. Magn. Mat. — 2016. — Т. 404. — С. 91.
12. Nonlinear nano-scale localized breather modes in a discrete weak ferromagnetic spin lattice / L. Kavitha [и др.] // J. Magn. Magn. Mat. — 2016. — Т. 401. — С. 394.
13. Chaotic breathers of two types in a two-dimensional Morse lattice with an on-site harmonic potential / K. Ikeda [и др.] // Physica D. — 2007. — Т. 225. — С. 184—196.
14. *Dolgov A. S.* On localization of oscillations in nonlinear crystal structure // Sov. Phys. Solid State. — 1986. — Т. 28. — С. 907.
15. *Sievers A. J., Takeno S.* Intrinsic localized modes in anharmonic crystals // Phys. Rev. Lett. — 1988. — Т. 61. — С. 970.
16. *Flach S., Willis C. R.* Discrete breathers // Phys. Rep. — 1998. — Т. 295. — С. 181.
17. *Flach S., Gorbach A. V.* Discrete breathers – Advances in theory and applications // Phys. Rep. — 2008. — Т. 467. — С. 1.
18. Discrete breathers in crystals / S. V. Dmitriev [и др.] // Phys. Usp. — 2016. — Т. 59. — С. 446.
19. *Kiselev S. A., Sievers A. J.* Generation of intrinsic vibrational gap modes in three-dimensional ionic crystals // Phys. Rev. B. — 1997. — Т. 55. — С. 5755.
20. *Khadeeva L. Z., Dmitriev S. V.* Discrete breathers in crystals with NaCl structure // Phys. Rev. B. — 2010. — Т. 81. — С. 214306.
21. Computational investigation of intrinsic localization in crystalline Si / N. K. Voulgarakis [и др.] // Phys. Rev. B. — 2004. — Т. 69. — С. 113201.
22. Localized vibrational modes in diamond / R. T. Murzaev [и др.] // Phys. Lett. A. — 2017. — Т. 381. — С. 1003.
23. Discrete breathers in alpha-uranium / R. T. Murzaev [и др.] // Eur. Phys. J. B. — 2016. — Т. 89. — С. 168.
24. Transverse discrete breathers in unstrained graphene / E. Barani [и др.] // Eur. Phys. J. B. — 2017. — Т. 90. — С. 38.

25. Intrinsic localized modes observed in the high-temperature vibrational spectrum of NaI / M. E. Manley [и др.] // Phys. Rev. B. — 2009. — Т. 79. — С. 134304.
26. Symmetry-breaking dynamical pattern and localization observed in the equilibrium vibrational spectrum of NaI / M. E. Manley [и др.] // Sci. Rep. — 2011. — Т. 1. — С. 4.
27. Flach S., Kladko K. Moving discrete breathers? // Physica D. — 1999. — Т. 127. — С. 61—72.
28. Kopidakis G., Aubry S., Tsironis G. P. Targeted energy transfer through discrete breathers in nonlinear systems // Phys. Rev. Lett. — 2001. — Т. 87. — С. 165501.
29. Aubry S., Cretegny T. Mobility and reactivity of discrete breathers // Physica D. — 1998. — Т. 119. — С. 34—46.
30. Archilla J. F. R., Doi Y., Kimura M. Pterobreathers in a model for a layered crystal with realistic potentials: Exact moving breathers in a moving frame // Phys. Rev. E. — 2019. — Т. 100. — С. 022206.
31. Yoshimura K., Doi Y. Moving discrete breathers in a nonlinear lattice: Resonance and stability // Wave Motion. — 2007. — Т. 45. — С. 83—99.
32. Doi Y., Yoshimura K. Construction of nonlinear lattice with potential symmetry for smooth propagation of discrete breather // Nonlinearity. — 2020. — Т. 33. — С. 5142.
33. Doi Y., Yoshimura K. Symmetric potential lattice and smooth propagation of tail-free discrete breathers // Phys. Rev. Lett. — 2016. — Т. 117. — С. 014101.
34. Prediction of high-frequency intrinsic localized modes in Ni and Nb / M. Haas [и др.] // Phys. Rev. B. — 2011. — Т. 84. — С. 144303.
35. Moving discrete breathers in a monoatomic two-dimensional crystal / A. A. Kistanov [и др.] // JETP Lett. — 2014. — Т. 99. — С. 353.
36. Page J. B. Asymptotic solutions for localized vibrational modes in strongly anharmonic periodic systems // Phys. Rev. B. — 1990. — Т. 41. — С. 7835.

37. *MacKay R. S., Aubry S.* Proof of existence of breathers for time-reversible or Hamiltonian networks of weakly coupled oscillators // Nonlinearity. — 1994. — T. 7. — C. 1623.
38. *Bambusi D.* Exponential stability of breathers in Hamiltonian networks of weakly coupled oscillators // Nonlinearity. — 1996. — T. 9. — C. 433.
39. *Yoshimura K.* Stability of discrete breathers in nonlinear Klein-Gordon type lattices with pure anharmonic couplings // J. Math. Phys. — 2012. — T. 53. — C. 102701.
40. *Livi R., Spicci M., MacKay R. S.* Breathers on a diatomic FPU chain // Nonlinearity. — 1997. — T. 10. — C. 1421.
41. *Alfimov G. L., Brazhnyi V. A., Konotop V. V.* On classification of intrinsic localized modes for the discrete nonlinear Schrodinger equation // Physica D. — 2004. — T. 194. — C. 127.
42. *Yoshimura K.* Existence and stability of localized modes in one-dimensional nonlinear lattices // AIP Conf. Proc. — 2012. — T. 1474. — C. 59.
43. *Chechin G. M., Dzhelauhova G. S., Mehonoshina E. A.* Quasibreathers as a generalization of the concept of discrete breathers // Phys. Rev. E. — 2006. — T. 74. — C. 036608.
44. *Manley M. E.* Impact of intrinsic localized modes of atomic motion on materials properties // Acta Mater. — 2010. — T. 58. — C. 2926.
45. Formation of a new dynamical mode in α -uranium observed by inelastic X-ray and neutron scattering / M. E. Manley [и др.] // Phys. Rev. Lett. — 2006. — T. 96. — C. 125501.
46. Intrinsically localized vibrations and the mechanical properties of alpha-uranium / M. E. Manley [и др.] // J. Alloy. Compd. — 2007. — T. 444. — C. 129.
47. Pinning frequencies of the collective modes in alpha-uranium / B. Mihaila [и др.] // Phys. Rev. Lett. — 2006. — T. 96. — C. 076401.
48. *Бахвалов Н. С.* Численные методы (анализ, алгебра, обыкновенные дифференциальные уравнения). — М.:Наука, 1975. — 632 с.

49. Simulation of the interaction between Fe impurities and point defects in V / M. I. Mendeleev [и др.] // *Phys. Rev. B.* — 2007. — Т. 76. — С. 214105.
50. *Fellinger M., Park H., Wilkins J. W.* Simulation of the interaction between Fe impurities and point defects in V // *Phys. Rev. B.* — 2010. — Т. 81. — С. 144119.
51. *Savin A. V., Kivshar Y. S., Hu B.* Suppression of thermal conductivity in graphene nanoribbons with rough edges // *Phys. Rev. B.* — 2010. — Т. 82. — С. 195422.
52. *Mathematical Modeling of Physical Processes in Metals and Ordered Alloys / A. Semenov [и др.] // Smart Innovation, Systems and Technologies.* — 2022. — Т. 247. — С. 437—449.
53. Self-diffusion in melts of Ni-Al and Ti-Al systems: molecular dynamics study / G. M. Poletaev [и др.] // *Letters on Materials.* — 2021. — Т. 11, № 4. — С. 438—441.
54. Spatially localized oscillations in low-stability states of metal systems / R. T. Murzaev [и др.] // *Russian Physics Journal.* — 2021. — Т. 64, № 2. — С. 293—301.
55. Discrete breathers in a triangular β -Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou lattice / R. I. Babicheva [и др.] // *Physical Review E.* — 2021. — Т. 103, № 5. — С. 052202.
56. Interaction of supersonic 2-crowdions in fcc platinum / A. M. Bayazitov [и др.] // *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering.* — 2020. — Т. 1008, № 1. — С. 012068.
57. Properties of one-dimensional nonlinear vibrational modes in triangular lattice with Lennard-Jones interactions / I. Sunagatova [и др.] // *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering.* — 2020. — Т. 1008. — С. 012073.
58. Spherically localized discrete breathers in bcc metals V and Nb / K. A. Krylova [и др.] // *Comp. Mater. Sci.* — 2020. — Т. 180. — С. 109695.
59. Influence of Carbon and Oxygen Impurities on Migration Velocity of Grain-boundary Triple Junctions in FCC Metals / G. M. Poletaev [и др.] // *Russian Physics Journal.* — 2020. — Т. 62, № 10. — С. 1840—1845.

60. Linking tracks in mica crystals with phase transitions in a bistable lattice / K. A. Krylova [и др.] // European Physical Journal B. — 2020. — Т. 93, № 2. — С. 23.
61. Supersonic crowdion clusters in 2D Morse lattice / I. A. Shepelev [и др.] // Physics Letters, Section A: General, Atomic and Solid State Physics. — 2020. — Т. 384, № 1. — С. 126032.
62. Modeling the formation of free volume at grain boundaries and triple junctions during nickel crystallization / G. M. Poletaev [и др.] // Letters on Materials. — 2020. — Т. 10, № 3. — С. 299—302.
63. New types of one-dimensional discrete breathers in a two-dimensional lattice / A. Semenov [и др.] // Letters on Materials. — 2020. — Т. 10. — С. 185—188.
64. Effect of interatomic potentials on mass transfer by supersonic 2-crowdions / E. A. Korznikova [и др.] // Letters on Materials. — 2019. — Т. 9, № 4. — С. 386—390.
65. Stability of delocalized nonlinear vibrational modes in graphene lattice / D. U. Abdullina [и др.] // European Physical Journal B. — 2019. — Т. 92, № 11. — С. 249.
66. Dynamics of a three-component delocalized nonlinear vibrational mode in graphene / S. A. Shcherbinin [и др.] // Phys. Solid State. — 2019. — Т. 61, № 11. — С. 2139—2144.
67. Effect of grain boundary segregations on martensitic transformation temperatures in NiTi bi-crystals / R. I. Babicheva [и др.] // Letters on Materials. — 2019. — Т. 9, № 2. — С. 162—167.
68. Stability of in-plane delocalized vibrational modes in triangular Morse lattice / D. U. Abdullina [и др.] // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. — 2018. — Т. 447, № 1. — С. 012060.
69. Two-dimensional discrete breathers in hcp titanium / O. V. Bachurina [и др.] // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. — 2018. — Т. 447, № 1. — С. 012033.
70. Properties of Moving Discrete Breathers in Beryllium / O. V. Bachurina [и др.] // Physics of the Solid State. — 2018. — Т. 60, № 5. — С. 989—994.

71. Hard-type anharmonicity gap discrete breather in 2D biatomic crystal / A. S. Semenov [и др.] // *Letters on Materials*. — 2017. — Т. 7, № 3. — С. 327—331.
72. *Semenov A. S., Bebikhov Y. V., Kistanov A. A.* Simulation of energy transport in crystal with NaCl structure assisted by discrete breathers // *Letters on Materials*. — 2017. — Т. 7, № 2. — С. 77—80.
73. *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 // *Letters on Materials*. — 2015. — Т. 5, № 1. — С. 11—14.
74. *Kistanov A. A., Semenov A. S., Dmitriev S. V.* Properties of moving discrete breathers in a monoatomic two-dimensional crystal // *Journal of Experimental and Theoretical Physics*. — 2014. — Т. 119, № 4. — С. 766—771.
75. Interaction of propagating discrete breathers with a vacancy in a two-dimensional crystal / A. A. Kistanov [и др.] // *Technical Physics Letters*. — 2014. — Т. 40, № 8. — С. 657—661.
76. Пространственно локализованные колебания в слабоустойчивых состояниях металлических систем / Р. Т. Мурзаев [и др.] // *Известия высших учебных заведений. Физика*. — 2021. — Т. 64. — С. 91—99.
77. Хаотические дискретные бризеры в треугольной решетке Ферми-Паста-Улама / А. Семёнов [и др.] // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. — 2021. — Т. 18. — С. 459—469.
78. Исследование ударных волн в графене методом молекулярной динамики / И. А. Шепелев [и др.] // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. — 2020. — Т. 17. — С. 188—194.
79. Влияние примесных атомов углерода и кислорода на скорость миграции тройных стыков границ наклона в ГЦК-металлах / Г. М. Полетаев [и др.] // *Известия высших учебных заведений. Физика*. — 2019. — Т. 62. — С. 83—87.
80. Динамика трехкомпонентной делокализованной нелинейной колебательной моды в графене / С. А. Щербинин [и др.] // *Физика твердого тела*. — 2019. — Т. 61. — С. 2163—2168.

81. Моделирование методом Монте-Карло процесса диффузионной сварки двух металлов через прокладку / И. П. Лобзенко [и др.] // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. — 2019. — Т. 16. — С. 47—54.
82. Моделирование структуры жаропрочных сплавов ВКНА-25 и ЭП975 методом Монте-Карло / А. Р. Халиков [и др.] // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. — 2019. — Т. 16. — С. 429—436.
83. Динамика сверхзвуковых 2-краудионов в нелинейных двумерных решетках / И. Р. Сунагатова [и др.] // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. — 2019. — Т. 16. — С. 482—488.
84. *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. — С. 501—510.
85. Свойства движущихся дискретных бризеров в бериллии / О. В. Бачурина [и др.] // *Физика твердого тела*. — 2018. — Т. 60. — С. 978—983.
86. Некоторые характеристики одномерных делокализованных нелинейных колебательных мод треугольной решетки с Морзевским взаимодействием / М. Н. Семёнова [и др.] // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. — 2018. — Т. 15. — С. 257—264.
87. Исследование дискретных бризеров в ГПУ металлах бериллии и цирконии / А. С. Семёнов [и др.] // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. — 2015. — Т. 12. — С. 26—30.
88. Исследование дискретных бризеров в ГПУ металлах бериллии и цирконии / А. С. Семёнов [и др.] // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. — 2015. — Т. 12. — С. 26—30.
89. Взаимодействие движущихся дискретных бризеров с вакансией в двумерном кристалле / А. А. Кистанов [и др.] // *Письма в Журнал технической физики*. — 2014. — Т. 40. — С. 58—65.

90. *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. — С. 869—875.
91. *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. — С. 223—227.
92. *Кистанов А. А., Семёнов А. С.* Столкновение движущихся дискретных бризеров в двумерном моноатомном кристалле // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. — 2014. — Т. 11. — С. 241—244.
93. Неподвижные и движущиеся дискретные бризеры в ГПУ металле Co / А. А. Кистанов [и др.] // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. — 2014. — Т. 11. — С. 322—325.
94. Взаимодействие движущихся дискретных бризеров в ГПУ металле Mg / А. А. Кистанов [и др.] // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. — 2014. — Т. 11. — С. 572—577.
95. Experimental demonstration of excitation and propagation of intrinsic localized modes in a mass-spring chain / Y. Watanabe [и др.] // Phys. Lett. A. — 2018. — Т. 382. — С. 1957.
96. Discrete breathers in a forced-damped array of coupled pendula: Modeling, computation, and experiment / J. Cuevas [и др.] // Phys. Rev. Lett. — 2009. — Т. 102. — С. 224101.
97. Moving breathers in a chain of magnetic pendulums / F. M. Russell [и др.] // Phys. Rev. B. — 1997. — Т. 55. — С. 6304.
98. Experimental and numerical observation of dark and bright breathers in the band gap of a diatomic electrical lattice / F. Palmero [и др.] // Phys. Rev. E. — 2019. — Т. 99. — С. 032206.
99. *Gomez-Rojas A., Halevi P.* Discrete breathers in an electric lattice with an impurity: Birth, interaction, and death // Phys. Rev. E. — 2018. — Т. 97. — С. 022225.

100. *Chechin G. M., Shcherbinin S. A.* Delocalized periodic vibrations in nonlinear LC and LCR electrical chains // Commun. Nonlinear Sci. — 2015. — Т. 22. — С. 244.
101. *Sato M., Hubbard B. E., Sievers A. J.* Nonlinear energy localization and its manipulation in micromechanical oscillator arrays // Rev. Mod. Phys. — 2006. — Т. 78. — С. 137.
102. Optical manipulation of intrinsic localized vibrational energy in cantilever arrays / M. Sato [и др.] // Europhys. Lett. — 2004. — Т. 66. — С. 318.
103. Observation of locked intrinsic localized vibrational modes in a micromechanical oscillator array / M. Sato [и др.] // Phys. Rev. Lett. — 2003. — Т. 90. — С. 441021.
104. *Trias E., Mazo J. J., Orlando T. P.* Discrete breathers in nonlinear lattices: Experimental detection in a Josephson array // Phys. Rev. Lett. — 2000. — Т. 84. — С. 741.
105. Observation of breathers in Josephson ladders / P. Binder [и др.] // Phys. Rev. Lett. — 2000. — Т. 84. — С. 745.
106. Wave propagation in a strongly nonlinear locally resonant granular crystal / K. Vorotnikov [и др.] // Physica D. — 2018. — Т. 365. — С. 27.
107. Nonlinear coherent structures in granular crystals / C. Chong [и др.] // J. Phys.: Condens. Matter. — 2017. — Т. 29. — С. 413003.
108. *Savin A. V., Sunagatova I. R., Dmitriev S. V.* Rotobreathers in a chain of coupled elastic rotators // Phys. Rev. E. — 2021. — Т. 104. — С. 034207.
109. Rich example of geometrically induced nonlinearity: From rotobreathers and kinks to moving localized modes and resonant energy transfer / P. G. Kevrekidis [и др.] // Phys. Rev. E. — 2004. — Т. 70. — С. 066627.
110. *Рейсленд Д.* Физика фононов. — М.:Мир, 1975. — 366 с.
111. *Займан Д.* Электроны и фононы. Теория явлений переноса в твердых телах. — М.:ИЛ, 1962. — 488 с.
112. *Борн М., Кунь Х.* Динамическая теория кристаллических решеток. — М.:ИЛ, 1958. — 488 с.

113. *Bajars J., Eilbeck J. C., Leimkuhler B.* Nonlinear propagating localized modes in a 2D hexagonal crystal lattice // *Physica D.* — 2015. — Т. 8. — С. 301—302.
114. *Marin J. L., Eilbeck J. C., Russell F. M.* Localized moving breathers in a 2D hexagonal lattice // *Phys. Lett. A.* — 1998. — Т. 248. — С. 225.
115. *Bajars J., Eilbeck J. C., Leimkuhler B.* Numerical simulations of nonlinear modes in mica: Past, present and future // *Springer Series in Materials Science.* — 2015. — Т. 221. — С. 35—67.
116. *Szeftel J., Huang G., Konotop V.* On the existence of moving breathers in one-dimensional anharmonic lattice // *Physica D.* — 2003. — Т. 181. — С. 215—221.
117. Head-on and head-off collisions of discrete breathers in two-dimensional anharmonic crystal lattices / *A. A. Kistanov [и др.]* // *Eur. Phys. J. B.* — 2014. — Т. 87. — С. 211.
118. *Bajars J., Eilbeck J., Leimkuhler B.* Two-dimensional mobile breather scattering in a hexagonal crystal lattice // *Phys. Rev. E.* — 2021. — Т. 103. — С. 022212.
119. *Браун О. М., Кившарь Ю. С.* Модель Френкеля-Конторовой, Концепции, методы, приложения. — М.:Физматлит, 2008. — 536 с.
120. Effect of discrete breathers on the specific heat of a nonlinear chain / *M. Singh [и др.]* // *J. Nonlinear Sci.* — 2021. — Т. 31. — С. 12.
121. *Christodoulidi H., Tsallis C., Bountis T.* Fermi-Pasta-Ulam model with long range interactions: Dynamics and thermostatics // *Europhys. Lett.* — 2014. — Т. 108. — С. 40006.
122. *Christodoulidi H., Bountis A., Drossos L.* The effect of long-range interactions on the dynamics and statistics of 1D Hamiltonian lattices with on-site potential // *The European Physical Journal Special Topics.* — 2018. — Т. 227. — С. 563.
123. *Wang J., Dmitriev S. V., Xiong D.* Thermal transport in long-range interacting Fermi-Pasta-Ulam chains // *Phys. Rev. Research.* — 2020. — Т. 2. — С. 013179.

124. Wavelet imaging of transient energy localization in nonlinear systems at thermal equilibrium: The case study of NaI crystals at high temperature / A. Riviere [и др.] // Phys. Rev. B. — 2019. — Т. 99. — С. 024307.
125. Highly symmetric discrete breather in a two-dimensional Morse crystal / E. A. Korznikova [и др.] // JETP Lett. — 2016. — Т. 103. — С. 277.
126. *Kiselev S. A., Bickham S. R., Sievers A. J.* Anharmonic gap modes in a perfect one-dimensional diatomic lattice for standard two-body nearest-neighbor potentials // Phys. Rev. B. — 1993. — Т. 48. — С. 13508.
127. Energy transfer in strained graphene assisted by discrete breathers excited by external ac driving / I. Evazzade [и др.] // Phys. Rev. B. — 2017. — Т. 95. — С. 035423.
128. *Khadeeva L. Z., Dmitriev S. V., Kivshar Y. S.* Discrete breathers in deformed graphene // JETP Lett. — 2011. — Т. 94. — С. 539.
129. *Doi Y., Nakatani A.* Numerical study on unstable perturbation of intrinsic localized modes in graphene // Journal of Solid Mechanics and Materials Engineering. — 2012. — Т. 6. — С. 71.
130. Excitation of intrinsic localized modes in a graphene sheet / Y. Yamayose [и др.] // Europhys. Lett. — 2007. — Т. 80. — С. 40008.
131. Discrete breather on the edge of the graphene sheet with the armchair orientation / E. A. Korznikova [и др.] // JETP Lett. — 2012. — Т. 96. — С. 222.
132. *Baimova J. A., Dmitriev S. V., Zhou K.* Discrete breather clusters in strained graphene // Europhys. Lett. — 2012. — Т. 100. — С. 36005.
133. *Korznikova E. A., Baimova J. A., Dmitriev S. V.* Effect of strain on gap discrete breathers at the edge of armchair graphene nanoribbons // Europhys. Lett. — 2013. — Т. 102. — С. 60004.
134. Delocalized nonlinear vibrational modes of triangular lattices / A. Fraile [и др.] // Chaos Solitons Fractals. — 2016. — Т. 87. — С. 262.
135. *Kimura M., Mitani A., Doi S.* Existence and stability of intrinsic localized modes in a finite FPU chain placed in three-dimensional space // Letters on Materials. — 2016. — Т. 6, № 1. — С. 22—26.

136. Delocalized nonlinear vibrational modes in graphene: Second harmonic generation and negative pressure / E. A. Korznikova [и др.] // *Phys. Status Solidi B*. — 2019. — Т. 256. — С. 1800061.
137. Nonlinear localized modes in two-dimensional hexagonally-packed magnetic lattices / C. Chong [и др.] // *New J. Phys.* — 2021. — Т. 23. — С. 043008.
138. Nonlinear excitations in magnetic lattices with long-range interactions / M. Moleron [и др.] // *New Journal of Physics*. — 2019. — Т. 21. — С. 063032.
139. Discrete breathers in hydrogenated graphene / B. Liu [и др.] // *J. Phys. D*. — 2013. — Т. 46. — С. 305302.
140. Properties of discrete breathers in graphane from ab initio simulations / G. M. Chechin [и др.] // *Phys. Rev. B*. — 2014. — Т. 90. — С. 045432.
141. Ab initio simulation of gap discrete breathers in strained graphene / I. P. Lobzenko [и др.] // *Phys. Solid State*. — 2016. — Т. 58. — С. 633–639.
142. Discrete breathers in carbon and hydrocarbon nanostructures / J. A. Baimova [и др.] // *Rev. Adv. Mater. Sci.* — 2015. — Т. 42. — С. 68.
143. *Medvedev N. N., Starostenkov M. D., Manley M. E.* Energy localization on the Al sublattice of Pt3Al with L12 order // *J. Appl. Phys.* — 2013. — Т. 114. — С. 213506.
144. Surface discrete breathers in Pt3Al intermetallic alloy / P. V. Zakharov [и др.] // *Surf. Sci.* — 2019. — Т. 679. — С. 1.
145. *Bachurina O. V.* Linear discrete breather in fcc metals // *Comp. Mater. Sci.* — 2019. — Т. 160. — С. 217.
146. *Bachurina O. V.* Plane and plane-radial discrete breathers in fcc metals // *Model. Simul. Mater. Sc.* — 2019. — Т. 27. — С. 055001.
147. Gap discrete breathers in strained boron nitride / E. Barani [и др.] // *Phys. Lett. A*. — 2017. — Т. 381. — С. 3553.
148. Discrete magnetic breathers in monoaxial chiral helimagnet / I. G. Bostrem [и др.] // *Chelyabinsk Physical and Mathematical Journal*. — 2020. — Т. 5. — С. 1941.

149. Lattice dynamics of NaI studied by inelastic neutron scattering: Absence of thermally induced discrete breathers / M. Kempa [и др.] // Phys. Rev. B. — 2014. — Т. 89. — С. 054308.
150. Thermally populated intrinsic localized modes in pure alkali halide crystals / A. J. Sievers [и др.] // Phys. Rev. B. — 2013. — Т. 88. — С. 104305.
151. *Kistanov A. A., Dmitriev S. V.* Energy exchange between discrete breathers in crystal with NaCl structure // Tech. Phys. Lett. — 2013. — Т. 39. — С. 618—620.
152. Anomalous decay of the slow emission component in doped alkali halides / B. Gaveau [и др.] // Luminescence. — 2001. — Т. 92. — С. 311.
153. *Mihokova E., Schulman L. S. J.* Discrete breathers and the anomalous decay of luminescence // J. Phys. A: Math. Theor. — 2010. — Т. 43. — С. 183001.
154. *Mihokova E., Schulman L. S. J.* Noisy breathers and temperature-dependent luminescence decay // Luminescence. — 2009. — Т. 129. — С. 1878.
155. *Yu G., Wang X., Tao Z.* Resonant emission of solitons from impurity-induced localized waves in nonlinear lattices // Phys. Rev. E. — 2011. — Т. 83. — С. 026605.
156. Observation of a new excitation in bcc 4He by inelastic neutron scattering / T. Markovich [и др.] // Phys. Rev. Lett. — 2002. — Т. 88. — С. 195301.
157. Long range annealing of defects in germanium by low energy plasma ions / J. Archilla [и др.] // Physica D. — 2015. — Т. 297. — С. 56.
158. *Zhang L., Tang G., Ma X.* Long range effect of ion irradiation on diffusion // Phys. Lett. A. — 2010. — Т. 374. — С. 2137—2139.
159. *Liang W., Vanacore G. M., Zewail A. H.* Observing (non)linear lattice dynamics in graphite // Proc. Natl. Acad. Sci. — 2014. — Т. 111. — С. 5491—5496.
160. *Dubinko V. I., Selyshchev P. A., Archilla J. F. R.* Reaction-rate theory with account of the crystal anharmonicity // Phys. Rev. E. — 2011. — Т. 83. — С. 041124.
161. Properties of moving discrete breathers in beryllium / O. V. Bachurina [и др.] // Phys. Solid State. — 2018. — Т. 60. — С. 989.

162. Moving discrete breathers in bcc metals V, Fe and W / R. T. Murzaev [и др.] // *Comp. Mater. Sci.* — 2015. — Т. 98. — С. 88.
163. Interaction of discrete breathers with primary lattice defects in bcc Fe / D. A. Terentyev [и др.] // *Model. Simul. Mater. Sc.* — 2015. — Т. 23. — С. 085007.
164. Discrete-breather-assisted charge transport along DNA-like molecular wires / A. P. Chetverikov [и др.] // *Phys. Rev. E.* — 2019. — Т. 100. — С. 052203.
165. *Velarde M. G., Ebeling W., Chetverikov A. P.* Thermal solitons and solectrons in 1D anharmonic lattices up to physiological temperature // *Int. J. Bifurc. Chaos.* — 2008. — Т. 18. — С. 3815.
166. *Chetverikov A. P., Ebeling W., Velarde M. G.* Nonlinear soliton-like excitations in two-dimensional lattices and charge transport // *Eur. Phys. J.: Special Topics.* — 2013. — Т. 222. — С. 2531.
167. *Chetverikov A. P., Ebeling W., Velarde M. G.* On the temperature dependence of fast electron transport in crystal lattices // *Eur. Phys. J. B.* — 2015. — Т. 88. — С. 202.
168. *Velarde M. G.* From polaron to solectron: The addition of nonlinear elasticity to quantum mechanics and its possible effect upon electric transport // *J. Comput. Appl. Math.* — 2010. — Т. 233. — С. 1432.
169. *Xiong D., Saadatmand D., Dmitriev S. V.* Crossover from ballistic to normal heat transport in the phi4 lattice: If nonconservation of momentum is the reason what is the mechanism? // *Phys. Rev. E.* — 2017. — Т. 96. — С. 042109.
170. Effect of discrete breathers on macroscopic properties of the Fermi-Pasta-Ulam chain / E. A. Korznikova [и др.] // *Eur. Phys. J. B.* — 2020. — Т. 93. — С. 123.
171. *Indenbom V. L., Chernov V. M.* Determination of characteristics for the interaction between point defects and dislocations from internal friction experiments // *Phys. Status Solidi (a).* — 1972. — Т. 14. — С. 347.
172. *Pokropivny V. V., Skorokhod V. V., Pokropivny A. V.* Adhesive phenomena at the -Fe interface during nanoindentation, stretch and shock // *Model. Simul. Mater. Sc.* — 1997. — Т. 5. — С. 579.

173. *Natsik V. D., Smirnov S. N.* Dislocations and crowdions in two-dimensional crystals. Part III: Plastic deformation of the crystal as a result of defect movement and defect interaction with the field of elastic stresses // *Low Temp. Phys.* — 2016. — T. 42. — C. 207.
174. *Kiritani M.* Similarity and difference between fcc, bcc and hcp metals from the view point of point defect cluster formation // *J. Nucl. Mater.* — 2000. — T. 276. — C. 41.
175. *Salehinia I., Bahr D. F.* The impact of a variety of point defects on the inception of plastic deformation in dislocation-free metals // *Scripta Mater.* — 2012. — T. 66. — C. 339.
176. *Korbel A., Bochniak W.* Stratified plastic flow in metals // *Int. J. Mech. Sci.* — 2017. — T. 128. — C. 269.
177. *Mehrer H.* *Diffusion in Solids.* — Berlin : Springer-Verlag, 2007. — 651 c.
178. *Sand A. E., Dudarev S. L., Nordlund K.* High-energy collision cascades in tungsten: Dislocation loops structure and clustering scaling laws // *Europhys. Lett.* — 2013. — T. 103. — C. 46003.
179. Characterisation of radiation damage in W and W-based alloys from 2 MeV self-ion near-bulk implantations / X. Yi [и др.] // *Acta Mater.* — 2015. — T. 92. — C. 163.
180. *Zhang Z., Yabuuchi K., Kimura A.* Defect distribution in ion-irradiated pure tungsten at different temperatures // *J. Nucl. Mater.* — 2016. — T. 480. — C. 207.
181. Microstructural evolution of pure tungsten neutron irradiated with a mixed energy spectrum / T. Koyanagi [и др.] // *J. Nucl. Mater.* — 2017. — T. 490. — C. 66.
182. Ion-irradiation induced clustering in W-Re-Ta, W-Re and W-Ta alloys: An atom probe tomography and nanoindentation study / A. Xu [и др.] // *Acta Mater.* — 2017. — T. 124. — C. 71.
183. Thermal conductivity and tensile response of phosphorene nanosheets with vacancy defects / B. Liu [и др.] // *J. Phys. Chem. C.* — 2017. — T. 121. — C. 13876.

184. Self-trapped interstitial-type defects in iron / D. A. Terentyev [и др.] // Phys. Rev. Lett. — 2008. — T. 100. — C. 145503.
185. *Paneth H. R.* The mechanism of self-diffusion in alkali metals // Phys. Rev. — 1950. — T. 80. — C. 708.
186. *Derlet P. M., Nguyen-Manh D., Dudarev S. L.* Multiscale modeling of crowdion and vacancy defects in body-centered-cubic transition metals // Phys. Rev. B. — 2007. — T. 76. — C. 054107.
187. *Kosevich A. M., Kovalev A. S.* The supersonic motion of a crowdion. The one-dimensional model with nonlinear interaction between the nearest neighbours // Solid State Commun. — 1973. — T. 12. — C. 763.
188. *Davydov A. S., Zolotariuk A. V.* Subsonic and supersonic solitons in nonlinear molecular chains // Phys. Scripta. — 1984. — T. 30. — C. 426.
189. Ultradiscrete kinks with supersonic speed in a layered crystal with realistic potentials / J. F. R. Archilla [и др.] // Phys. Rev. E. — 2015. — T. 91. — C. 022912.
190. *Kosevich Y. A., Khomeriki R., Ruffo S.* Supersonic discrete kink-solitons and sinusoidal patterns with "magic" wave number in anharmonic lattices // Europhys. Lett. — 2004. — T. 66. — C. 21.
191. *Osetsky Y. N., Bacon D. J., Serra A.* Thermally activated glide of small dislocation loops in metals // Phil. Mag. Lett. — 1999. — T. 79. — C. 273.
192. Self-interstitials in V and Mo / S. Han [и др.] // Phys. Rev. B. — 2002. — T. 66. — C. 220101.
193. *Abe H., Sekimura N., Yang Y.* Stability and mobility of defect clusters in copper under displacement cascade conditions // J. Nucl. Mater. — 2003. — T. 323. — C. 220.
194. *Dudarev S. L.* Coherent motion of interstitial defects in a crystalline material // Philos. Mag. — 2003. — T. 83. — C. 3577.
195. *Terentyev D. A., Malerba L., Hou M.* Dimensionality of interstitial cluster motion in bcc-Fe // Phys. Rev. B. — 2007. — T. 75. — C. 104108.
196. Creeping motion of self interstitial atom clusters in tungsten / W. H. Zhou [и др.] // Sci. Rep. — 2014. — T. 4. — C. 5096.

197. Transport, dissociation and rotation of small self-interstitial atom clusters in tungsten / W. H. Zhou [и др.] // J. Nucl. Mater. — 2014. — Т. 453. — С. 202.
198. Modeling of self-localized vibrations and defect formation in solids / A. V. Hizhnyakov [и др.] // Nucl. Instrum. Methods B. — 2013. — Т. 303. — С. 91.
199. Theory and molecular dynamics simulations of intrinsic localized modes and defect formation in solids / V. Hizhnyakov [и др.] // Phys. Scr. — 2014. — Т. 89. — С. 044003.
200. Embedded-atom potential for Fe and its application to self-diffusion on Fe(100) / H. Chamati [и др.] // Surf. Sci. — 2006. — Т. 600. — С. 1793.
201. *Dubinko V. I., Dubinko A. V.* Modification of reaction rates under irradiation of crystalline solids: Contribution from intrinsic localized modes // Nucl. Instrum. Methods B. — 2013. — Т. 303. — С. 133.
202. High electrical conductivity in nonlinear model lattice crystals mediated by thermal excitation of solitons / A. P. Chetverikov [и др.] // Eur. Phys. J. B. — 2014. — Т. 87. — С. 153.
203. Delocalized nonlinear vibrational modes of triangular lattices / D. S. Ryabov [и др.] // Nonlinear Dyn. — 2020. — Т. 102. — С. 2793.
204. *Chechin G. M., Ryabov D. S., Shcherbinin S. A.* Nonlinear vibrational modes in graphene: group-theoretical results // Letters on Materials. — 2016. — Т. 6. — С. 9–15.
205. *Korznikova E. A., Dmitriev S. V.* Moving wrinkle in graphene nanoribbons // J. Phys. D: Appl. Phys. — 2014. — Т. 47. — С. 345307.
206. Mechanical properties of bulk carbon nanostructures: effect of loading and temperature / J. Baimova [и др.] // Phys. Chem. Chem. Phys. — 2014. — Т. 16. — С. 19505.
207. *Zimmermann J., Pavone P., Cuniberti G.* Vibrational modes and low-temperature thermal properties of graphene and carbon nanotubes: Minimal force-constant model // Phys. Rev. B. — 2008. — Т. 78. — С. 045410.
208. *Nika D. L., Balandin A. A.* Phonons and thermal transport in graphene and graphene-based materials // Rep. Progr. Phys. — 2017. — Т. 80. — С. 036502.

209. *Rossler T., Page J. B.* Optical creation of vibrational intrinsic localized modes in anharmonic lattices with realistic interatomic potentials // *Phys. Rev. B.* — 2000. — T. 62. — C. 11460.
210. *Chetverikov A. P., Ebeling W., Velarde M. G.* Dissipative solitons and complex currents in active lattices // *Int. J. Bifurc. Chaos.* — 2006. — T. 16. — C. 1613.
211. *Ugural A. C., Fenster S. K.* Advanced strength and applied elasticity, 4th ed. — Englewood Cliffs, N.J. : Prentice Hall, 2003. — 544 c.
212. *Chechin G. M., Ryabov D. S., Zhukov K. G.* Stability of low-dimensional bushes of vibrational modes in the Fermi-Pasta-Ulam chains // *Physica D.* — 2005. — T. 203. — C. 121.
213. Auxeticity from nonlinear vibrational modes / S. V. Dmitriev [и др.] // *Phys. Status Solidi B.* — 2016. — T. 253. — C. 1310—1317.
214. Highly symmetric discrete breather in a two-dimensional Morse crystal / E. A. Korznikova [и др.] // *JETP Lett.* — 2016. — T. 103. — C. 277.
215. *Watanabe Y., Izumi S.* Two-dimensional intrinsic localized mode solutions in hexagonal Fermi-Pasta-Ulam lattice // *J. Phys. Soc. Jpn.* — 2021. — T. 90. — C. 014003.
216. *Wattis J. A. D., Alzaidi A. S. M.* Asymptotic analysis of breather modes in a two-dimensional mechanical lattice // *Physica D.* — 2020. — T. 401. — C. 132207.
217. *Marin J. L., Russell F. M., Eilbeck J. C.* Breathers in cuprate-like lattices // *Phys. Lett. A.* — 2001. — T. 281. — C. 21.
218. Delocalized nonlinear vibrational modes in fcc metals / S. A. Shcherbinin [и др.] // *Commun. Nonlinear Sci.* — 2022. — T. 104. — C. 106039.
219. *Morse P. M.* Diatomic molecules according to the wave mechanics. II. Vibrational levels // *Phys. Rev.* — 1929. — T. 34. — C. 57—64.
220. *Girifalco L. A., Weizer G. V.* Application of the Morse potential function to cubic metals // *Phys. Rev.* — 1959. — T. 114. — C. 687.
221. *Golub G. H., Vorst H. A.* Eigenvalue computation in the 20th century // *J. Comput. Appl. Math.* — 2000. — T. 123. — C. 35—65.

222. Atomic scale structure of sputtered metal multilayers / X. W. Zhou [и др.] // *Acta Mater.* — 2001. — Т. 49. — С. 4005.
223. <http://lammmps.sandia.gov>. —
224. *Plimpton S.* Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics // *J. Comput. Phys.* — 1995. — Т. 117. — С. 1–19.
225. *Dmitriev S. V.* Discrete breathers in crystals: Energy localization and transport // *Journal of Micromechanics and Molecular Physics.* — 2016. — Т. 01. — С. 1630001.
226. *Clark R. E. H., Reiter D. H.* Nuclear fusion research: understanding plasma-surface interactions. — Berlin : Springer, 2005. — 370 p.
227. Classical potential describes martensitic phase transformations between the α , β , and ω titanium phases / R. G. Hennig [и др.] // *Phys. Rev. B.* — 2008. — Т. 78. — С. 054121.
228. *Kistanov A. A., Baimova Y. A., Dmitriev S. V.* A molecular dynamics study of [111]-polarized gap discrete breathers in a crystal with NaCl-type structure // *Technical Physics Letters.* — 2013. — Т. 38. — С. 676–679.
229. Scenarios of mass transfer in fcc copper: the role of point defects / A. M. Bayazitov [и др.] // *IOP Conf. Series: Mater. Sci. Eng.* — 2018. — Т. 447. — С. 012040.
230. Mass transfer in Frenkel-Kontorova chain initiated by molecule impact / A. Moradi Marjaneh [и др.] // *Phys. Rev. E.* — 2018. — Т. 98. — С. 023003.
231. *Dmitriev S. V., Korznikova E. A., Chetverikov A. P.* Supersonic N-crowdions in a two-dimensional Morse crystal // *J. Exp. Theor. Phys.* — 2018. — Т. 126. — С. 347.
232. Highly enhanced transport by supersonic N-crowdions / S. V. Dmitriev [и др.] // *Phys. Status Solidi RRL.* — 2017. — Т. 11. — С. 1700298.
233. Breathing subsonic crowdion in Morse lattices / A. P. Chetverikov [и др.] // *Comput. Condens. Matter.* — 2017. — Т. 13. — С. 59.
234. *Bajars J., Eilbeck J. C., Leimkuhler B.* Nonlinear propagating localized modes in a 2D hexagonal crystal lattice // in *Quodons in Mica*, Springer Series in Materials Science. — 2015. — Т. 221. — С. 35.

235. *Garber R. I., Fedorenko A. I.* Focusing of atomic collisions in crystals // *Sov. Phys. Usp.* — 1965. — Т. 7. — С. 479.
236. *Russell F. M.* Tracks in mica caused by electron showers // *Nature.* — 1967. — Т. 216. — С. 907–909.
237. *Russell F. M.* Duration of sensitive period for track recording in mica // *Nature.* — 1967. — Т. 217. — С. 51–52.
238. *Russell F. M.* Positive charge transport in layered crystalline solids // *Phys. Lett. A.* — 1988. — Т. 130. — С. 489–491.
239. *Russell F. M.* Identification and selection criteria for charged lepton tracks in mica // *Nucl. Tracks. Rad. Meas.* — 1988. — Т. 15. — С. 41–44.
240. *Russell F. M.* Quodons in Mica. Т. 221. — Cham : Springer, 2015.
241. Search for solitons in solids / D. Schloßer [и др.] // *Rad. Meas.* — 1994. — Т. 23. — С. 209–213.
242. *Russell F. M., Eilbeck J. C.* Evidence for moving breathers in a layered crystal insulator at 300 K // *Europhys. Lett.* — 2007. — Т. 78. — С. 10004.
243. Nonlinear waves in a model for silicate layers / J. F. R. Archilla [и др.] // *Chaos.* — 2018. — Т. 28. — С. 083119.
244. Infinite charge mobility in muscovite at 300 K / F. Russell [и др.] // *Europhys. Lett.* — 2017. — Т. 120. — С. 46001.
245. Crowdion mobility and self-focusing in 3D and 2D nickel / A. M. Iskandarov [и др.] // *Comput. Mater. Sci.* — 2009. — Т. 47. — С. 429.
246. Dynamics and stability of subsonic crowdion clusters in 2D Morse crystal / E. A. Korznikova [и др.] // *J. Exp. Theor. Phys.* — 2018. — Т. 127. — С. 1009.
247. Subsonic M,N-crowdions in 2D Morse crystal / E. A. Korznikova [и др.] // *IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng.* — 2018. — Т. 447. — С. 012030.
248. Low-energy channel for mass transfer in Pt crystal initiated by molecule impact / R. I. Babicheva [и др.] // *Comput. Mater. Sci.* — 2019. — Т. 163. — С. 248.
249. *Nishiyama Z.* Martensitic Transformation. — New York : Academic Press, 1978.

250. *Kashchenko M. P., Chashchina V. G.* Dynamic model of supersonic martensitic crystal growth // *Phys. Usp.* — 2011. — T. 54. — C. 331.
251. *Marin J. L., Eilbeck J. C., Russell F. M.* Localized moving breathers in a 2D hexagonal lattice // *Phys. Lett. A.* — 1998. — T. 248. — C. 225.
252. *Snyman J. A., Snyman H. C.* Computed epitaxial monolayer structures: III. Two-dimensional model: zero average strain monolayer structures in the case of hexagonal interfacial symmetry // *Surf. Sci.* — 1981. — T. 105. — C. 357.
253. Atomistic structure of the Cu(111)/ α -Al₂O₃(0001) interface in terms of interatomic potentials fitted to ab initio results / S. V. Dmitriev [и др.] // *Acta Mater.* — 2004. — T. 52. — C. 1959.

Список рисунков

- 1.1 (a) Нелинейный осциллятор с одной степенью свободы. (b) Уравнение движения осциллятора и его приближенное решение. (c) Схематическая зависимость силы упругости пружины от её удлинения. (d) Схематическая зависимость частоты осциллятора от амплитуды. 22
- 1.2 (a) Цепочка частиц массы m , взаимодействующих с ближайшими соседями посредством пружин жесткости k и с локальным потенциалом. (b) Локальный потенциал, заданный полиномом шестого порядка (1.5). Верхнему (нижнему) знаку потенциала соответствует жесткий (мягкий) тип нелинейности. 23
- 1.3 (a) Моноатомная решетка, её плотность фононных состояний и возможная амплитудно-частотная характеристика ДБ. (b) То же для биатомной решетки. Амплитудно-частотные характеристики ДБ с жестким (мягким) типом нелинейности показаны красным (синим). 25
- 1.4 Примеры ДБ в кристаллах, существование которых было показано в молекулярно-динамических [19–24; 139] и первопринципных расчетах [140–142], а в некоторых случаях и экспериментально [25; 26]. 32
- 2.1 Однокомпонентные ДНКМ треугольной решетки, полученные Рябовым [203] с использованием теории бушей нормальных нелинейных мод, разработанной Чечиным и Сахненко [1–3]. Показаны трансляционные ячейки 14 однокомпонентных ДНКМ. Точки треугольной решетки показаны красным цветом, начальные положения атомов - желтым, а траектории колеблющихся атомов - черными линиями. Синие линии отделяют трансляционные ячейки минимальной площади. Все начальные векторы смещения имеют одинаковую длину. В модах 3, 4, 5 и 7-13 есть частицы, имеющие нулевые начальные смещения, и они остаются в решеточных положениях все время. 42

- 2.2 Зависимость частоты от амплитуды для всех исследованных однокомпонентных ДНКМ при мягкой (а), (с) и жесткой (b), (d) ангармоничности. На панелях (а), (b) показаны результаты для мод от 0 до 6, а результаты для остальных мод показаны на (с) и (d). 44
- 2.3 Зависимость полной (кинетической плюс потенциальной) энергии, приходящейся на одну частицу, от амплитуды ДНКМ для мягкой (а), (с) и жесткой (b), (d) нелинейности. На панелях (а), (b) показаны результаты для мод от 0 до 6, а результаты для остальных мод показаны на (с) и (d). 45
- 2.4 Синхронизированные двухкомпонентные ДНКМ треугольной решетки, описанные в работе [203]. Для каждой из 21 ДНКМ показаны трансляционные ячейки. Точки треугольной решетки отмечены красным цветом, начальные положения атомов - желтым, а траектории колеблющихся атомов - черными линиями. 48
- 2.5 Восемь однокомпонентных ДНКМ, поддерживаемых треугольной решеткой, полученных Чечиным и Рябовым в работе [203]. Вектора перемещений имеют длину D_0 , которая определяет начальную амплитуду ДНКМ. Пунктирными линиями показаны трансляционные ячейки паттернов смещений частиц. ДНКМ с 1 по 8 на данном рисунке совпадают с ДНКМ 1, 9, 5, 3, 4, 6, 7 и 13 соответственно на рисунке 2.1. 50
- 2.6 (a-h) Расстояние от движущейся частицы до её равновесного решеточного положения в зависимости от времени для ДНКМ 1-8 соответственно. Начальное смещение частиц $D_0 = 0.1$ для всех ДНКМ. 51
- 2.7 Амплитуда ДНКМ A как функция начального смещения частиц D_0 для восьми однокомпонентных ДНКМ. Для симметричных ДНКМ 1, 2, 4 и 5 имеем $A = D_0$, в то время как для несимметричных ДНКМ 3, 6, 7 и 8 амплитуда колебаний A превышает величину начального смещения D_0 52
- 2.8 Амплитудно-частотные зависимости для восьми однокомпонентных ДНКМ. Верхняя граница фононного спектра решетки отмечена горизонтальной пунктирной линией. 53

- 2.9 Полная энергия системы в расчете на один атом как функция амплитуды ДНКМ. 54
- 2.10 Напряжения σ_{xx} и σ_{yy} , осредненные за период колебания ДНКМ как функции амплитуды ДНКМ. 55
- 2.11 Результаты анализа устойчивости ДНКМ 2. (а) Абсолютное значение смещения $|\Delta y|$ как функция времени для движущейся частицы. Три кривые показывают результаты для трех различных значений начальных смещений частиц, $D_0 = 0,03$, $0,04$ и $0,05$, как показано на рисунке. Прямые линии показывают наклоны, по которым рассчитывались показатели критических экспонент. (б) Показатель критической экспоненты как функция амплитуды начальных смещений частиц. Прямая линия показывает аппроксимацию методом наименьших квадратов. 56
- 2.12 Нумерация частиц индексами i и j , а также нумерация ближайших связей (синие линии) и связей со вторыми соседями (красные линии) в квадратной решетке. 59
- 2.13 Примеры дисперсионных кривых квадратной решетки β -ФПУ (построены квадраты частот как функции волновых чисел q и s). Кривые построены вдоль линий первой зоны Бриллюэна (а) $s = 0$, (б) $s = \pi$ и (с) $s = q$. Синие сплошные (красные пунктирные) кривые построены для $k_{nn} = 1$ ($k_{nn} = 3$). Частоты продольных колебаний с частотами ω_1 лежат выше частот поперечных колебаний ω_2 62
- 2.14 Десять первых однокомпонентных ДНКМ квадратной решетки. Стрелками показаны начальные перемещения частиц. Все векторы смещения имеют одинаковую длину, равную A , что является амплитудой ДНКМ. Трансляционные ячейки начальных смещений частиц показаны пунктирными линиями. 65
- 2.15 Оставшиеся шесть однокомпонентных ДНКМ квадратной решетки. Стрелками показаны начальные перемещения частиц. Все векторы смещения имеют одинаковую длину, равную A , что является амплитудой ДНКМ. Трансляционные ячейки начальных смещений частиц показаны пунктирными линиями. 66

- 2.16 Кругами показаны найденные численно частоты ДНКМ 1 (черный) и ДНКМ 6 (синий). Линии представляют собой аналитические оценки Eq. (2.20) и (2.25) соответственно. Результаты для $k_{nn} = 1$ 70
- 2.17 Амплитудно-частотные характеристики однокомпонентных ДНКМ квадратной решетки для случая $k_{nn} = 0.3$ 73
- 2.18 Амплитудно-частотные характеристики однокомпонентных ДНКМ квадратной решетки для случая $k_{nn} = 1$ 74
- 2.19 Амплитудно-частотные характеристики однокомпонентных ДНКМ квадратной решетки для случая $k_{nn} = 3$ 75
- 2.20 Волновые вектора ДНКМ в пределе малых амплитуд. Красным (синим) показаны моды с продольными (поперечными) колебаниями. Номера ДНКМ указаны в правом верхнем углу каждой панели. 78
- 2.21 Кинетическая (красные линии) и потенциальная (синие линии) энергии на частицу, осредненные за период колебания ДНКМ. Номер ДНКМ указан на каждой панели. Результат для $k_{nn} = 0.3$. 79
- 2.22 Компоненты тензора напряжений, осредненные за период колебания для шестнадцати однокомпонентных ДНКМ. Красными, синими пунктирными и зелеными кривыми показаны компоненты σ_{xx} , σ_{yy} и σ_{xy} , соответственно. Угловые скобки, обозначающие осреднение по времени, опущены для краткости. Результат для $k_{nn} = 0.3$ 81
- 2.23 Константы жесткости, осредненные за период колебания для шестнадцати однокомпонентных ДНКМ. Красными, синими пунктирными и зелеными кривыми показаны компоненты C_{11} , C_{22} и C_{33} , соответственно. Угловые скобки, обозначающие осреднение по времени, опущены для краткости. Результат для $k_{nn} = 0.3$ 83

- 2.24 Паттерны атомных колебаний в четырех однокомпонентных ДНКМ, имеющих смещения в плоскости. ДНКМ были получены Чечиним, Рябовым и Щербининым в работе [204]. Большие желтые кружки показывают точки идеальной гексагональной решетки, маленькие зеленые кружки показывают атомы углерода на расстоянии A от точек решетки, черные линии показывают линейные траектории колеблющихся частиц. Представленные картины колебаний продиктованы симметрией решетки; они являются точными решениями уравнений движения атомов независимо от межатомных потенциалов и для любого A . При $A > A^*$, где A^* - пороговое значение начальных смещений, эти колебательные моды неустойчивы. 85
- 2.25 Развитие модуляционной неустойчивости ДНКМ (a) I, (b) II, (c) III и (d) IV, возбужденных с величиной начального смещения $A = 0,06 \text{ \AA}$ на (a-c) и $A = 0,04 \text{ \AA}$ на (d). Показаны изменения во времени максимального по всем атомам расстояния от начальных траекторий колеблющихся атомов в плоскости xy , $|\Delta xy|$ (черная линия), и в направлении z , $|\Delta z|$ (красная линия). Обратим внимание, что для ординаты используется логарифмическая шкала. Пунктирными линиями показаны линейные приближения, из которых извлекаются показатели критических экспонент. 87
- 2.26 Панели (a-d) показывают результаты для ДНКМ от I до IV, соответственно. Показаны критические экспоненты для отклонения от начальных траекторий атомов в плоскости (черные точки) из плоскости (красные треугольники) в зависимости от начального смещения A . На (b) показатель критической экспоненты для второго (быстрого) режима отклонения в плоскости показан голубыми светлыми точками. . . 89
- 2.27 (a) Атомные колебания для ДНКМ с I по IV показаны путем построения графика смещения Δy для атома, колеблющегося вдоль оси y , как функции времени. Начальное смещение атомов во всех случаях $A = 0,1 \text{ \AA}$. (b) Частоты колебаний ДНКМ в зависимости от начального смещения A 91

- 2.28 Паттерны начальных смещений атомов (а) корневой моды и (b,c) однокомпонентных ДНКМ решетки графена, найденные Щербининым. Все вектора смещений на (а), (b) и (с) имеют длину A , B и C соответственно. Примитивная трансляционная ячейка (т.е. ячейка минимальной площади) трехкомпонентной ДНКМ содержит 12 атомов (показана прямоугольником). Координаты x и y нормированы на расстояние $d = \sqrt{3}\rho$, где $\rho = 1.418 \text{ \AA}$ - минимальное равновесное расстояние между атомами. 94
- 2.29 Временные зависимости амплитуд мод A , B и C , а также y -компонента перемещения атома 1, который отмечен на рисунке 2.28(а). Начальные перемещения атомов заданы в соответствии с паттерном, изображенным на рисунке 2.28(а) для случая при этом длины векторов перемещений выбраны равными $A = 0.1 \text{ \AA}$. В момент времени $t = 0$ имеем $B = 0$ и $C = 0$, но компоненты B и C неизбежно возбуждаются при возбуждении корневой моды. 95
- 2.30 Временные зависимости амплитуд (а) корневой и (b) однокомпонентных мод. При задании начальных условий задавалась суперпозиция трех мод, изображенных на рисунке 2.28(а-с), с амплитудами $A = 0.1$, $B = 0.933 \times 10^{-3}$ и $C = 0.5471 \times 10^{-2} \text{ \AA}$ соответственно. Такие начальные условия привели к периодическим колебаниям трехкомпонентной ДНКМ с периодом 0.031 пс и частотой 32.3 ТГц. Одному периоду колебания корневой моды, изображенной на (а), однокомпонентные моды, на (b), совершают два колебания на удвоенной частоте 64.6 ТГц, которая оказывается заметно выше максимальной частоты малоамплитудных фононных колебаний. 96

- 2.31 (а) Частота корневой моды, (b) полная энергия в расчете на атом и (с) осредненные за период колебания нормальные напряжения σ_{xx} и σ_{yy} , возникающие в графене, как функции амплитуды корневой моды A для периодической во времени трехкомпонентной ДНКМ. Для выбранной амплитуды A , амплитуды однокомпонентных мод B и C выбирались из таблицы 4. 99
- 2.32 Неустойчивость трехкомпонентной ДНКМ для двух различных амплитуд корневой моды (а) $A = 0.04$ и (b) $A = 0.06 \text{ \AA}$. Максимальные отклонения атомов от начальных траекторий в плоскости xy (Δr) показаны сплошными линиями, а по нормали (Δz) - пунктирными. Отрезки прямых имеющих наклон совпадающий с наклоном кривых $\Delta r(t)$ на отрезке времени, когда $\Delta z(t)$ достигает максимума. 100
- 3.1 Три ДНКМ треугольной решетки, имеющие частоты выше фононного спектра, взятые из работы [203]. Частицы изображены желтыми кружками, их траектории черными полосками. Частицы показаны в момент времени, когда они максимально удалены от положений равновесия. На (а) все частицы совершают колебания параллельно оси y с амплитудой A . На (b) все колеблющиеся частицы имеют амплитуду колебаний A , они движутся в направлениях перпендикулярных плотноупакованным рядам. Каждая четвертая частица находится в состоянии покоя. На (с) частицы, совершающие колебания вдоль оси x (оси y), имеют амплитуду колебаний A (B). 108
- 3.2 Изменение параметра локализации от времени. Время нормировано на период колебаний фононной моды с самой высокой частотой $T = 2\pi/\sqrt{6}$, который близок периоду дискретного бризера. Показаны кривые для (а) ДНКМ 2, (b) ДНКМ 4 и (с) ДНКМ $\gamma 2$. Синие, красные и черные линии соответствуют амплитудам ДНКМ: $A = 0,02, 0,03$ и $0,04$ 112

- 3.3 Зависимость максимальной полной (кинетической и потенциальной) энергии частиц от времени для (а) ДНКМ 2, (b) ДНКМ 4 и (с) ДНКМ $\gamma 2$. Синим, красным и черным цветом показаны результаты для $A = 0,02, 0,03$ и $0,04$ соответственно. . . 114
- 3.4 Распределение энергии по решетке, показывающее развитие модуляционной неустойчивости (а) ДНКМ 2, (b) ДНКМ 4 и (с) ДНКМ $\gamma 2$. Результат получен для $A = 0,03$. Слева (справа) показано распределение энергии по решетке в момент, когда $L = 0,8L_{\max}$ ($L = L_{\max}$). Черный (белый) цвет соответствует минимальной (максимальной) энергии. 115
- 3.5 Зависимость теплоемкости от времени для (а) ДНКМ 2, (b) ДНКМ 4 и (с) ДНКМ $\gamma 2$. Синим, красным и черным цветом показаны результаты для $A = 0,02, 0,03$ и $0,04$ соответственно. . . 118
- 3.6 Усредненное по периоду колебаний давление как функция времени для (а) ДНКМ 2, (b) ДНКМ 4 и (с) ДНКМ $\gamma 2$. Синим, красным и черным цветом показаны результаты для $A = 0,02, 0,03$ и $0,04$ соответственно. 119
- 3.7 Усредненные по периоду колебаний константы жесткости в зависимости от времени для (а) ДНКМ 2, (b) ДНКМ 4 и (с) ДНКМ $\gamma 2$. Константы жесткости отнесены к значениям в тепловом равновесии. Синяя и зеленая кривые показывают соответственно C_{11} и C_{12} . Результаты для $A = 0,02$ 120
- 3.8 Расчетная ячейка для треугольной решетки с шагом h , включающая $N_x \times N_y$ частиц, пронумерованных индексами $i = 1, 2, \dots, N_x$ и $j = 1, 2, \dots, N_y$. Положения равновесия частиц показаны желтыми кружками, а красные линии отделяют примитивные трансляционные ячейки. Частицы движутся в плоскости xy , имея две степени свободы - компоненты вектора перемещения $(u_{i,j}, v_{i,j})$. Каждая частица взаимодействует со своими шестью ближайшими соседями посредством потенциала β -ФПУ (3.2). Связи показаны только для одной трансляционной ячейки решетки, они обозначены как l_1, l_2 и l_3 122

- 3.9 Три ДНКМ треугольной решетки, рассматриваемые в данной работе: (а) однокомпонентная ДНКМ 2, (b) однокомпонентная ДНКМ 4 и (с) двухкомпонентная периодическая ДНКМ $\gamma 2$ [203]. 127
- 3.10 Зависимость p от A в уравнении (3.49), когда двухкомпонентная ДНКМ $\gamma 2$ становится периодической по времени. На вставке показаны коэффициенты полиномиальной аппроксимации численных данных методом наименьших квадратов. Горизонтальная пунктирная линия показывает условие синхронизации $p = \sqrt{3}$, справедливое для малых A 134
- 3.11 (а) Частота ω и (b) энергия, приходящаяся на одну частицу E как функции амплитуды для ДНКМ 2 (черные точки), ДНКМ 4 (красные точки) и ДНКМ $\gamma 2$ (синие квадраты). Горизонтальная пунктирная линия на (а) указывает верхний край фононного спектра, $\omega_{\max} = \sqrt{6} \approx 2.449$ [203]. 135
- 3.12 (а,b) Главные напряжения σ_1 и σ_2 соответственно как функции амплитуды ДНКМ для ДНКМ 2 (черные точки), ДНКМ 4 (красные точки), и ДНКМ $\gamma 2$ (синие квадраты). 136
- 3.13 (а,b) Коэффициенты Пуассона ν_{xy} и ν_{yx} соответственно как функции амплитуды ДНКМ для ДНКМ 2 (черные точки), ДНКМ 4 (красные точки), и ДНКМ $\gamma 2$ (синие квадраты). 136
- 3.14 (а,b) Модули Юнга E_{xx} и E_{yy} соответственно и (с) модуль сдвига G решетки как функции амплитуды ДНКМ для ДНКМ 2 (черные точки), ДНКМ 4 (красные точки) и ДНКМ $\gamma 2$ (синие квадраты). 137
- 3.15 (а) ДБ на основе ДНКМ 2 с центром между двумя частицами в горизонтальном плотноупакованном ряду (показан красным крестиком). Траектории частиц показаны черным. (b) Вертикальное смещение как функция времени для частицы, обозначенной стрелкой на (а). ДБ был возбужден с использованием функции локализации (3.50) с $A = 0.1$, $\beta_x = 0.8$ и $\beta_y = 0.7$. Смещения частиц увеличены в 3 раза. 139

- 3.16 ДБ, полученные наложением функции локализации (3.51) на ДНКМ 4 с амплитудой $A = 0.1$. В зависимости от расположения центра локализующей функции \mathbf{r}_0 , показанного красными крестами, получаются ДБ с осью симметрии (а) шестого, (б) третьего и (с) второго порядка. Устойчивые долгоживущие колебания наблюдаются для (а) $\beta = 0.830$, (б) $\beta = 0.730$ и (с) $\beta = 0.838$ (см. рисунок 3.17). Траектории частиц показаны черным. Смещения частиц увеличены в 3 раза. 142
- 3.17 (а-с) Смещения вдоль оси y частиц, отмеченных стрелками на рисунке 3.16(а-с), соответственно. 142
- 3.18 ДБ на основе ДНКМ $\gamma 2$. ДБ были получены путем наложения функции локализации (3.50) на ДНКМ $\gamma 2$ с амплитудой $A = 0.2$. Центр функции локализации показан красными крестиками. На (а) он расположен между двумя частицами, колеблющимися по горизонтали, а на (б), на частице, колеблющейся по горизонтали. Устойчивые долгоживущие колебания в обоих случаях наблюдаются при $\beta_x = 1.35$, $\beta_y = 1.10$. Траектории частиц показаны черным. Смещения частиц увеличены в 1,5 раза. 143
- 3.19 (а,б) Временные зависимости смещения по оси x частиц, отмеченных стрелками на рисунке 3.18(а,б), соответственно. . . . 144
- 3.20 Одномерные горизонтальные ДБ на основе (а) ДНКМ 2 и (б) ДНКМ $\gamma 2$, полученные наложением функции локализации (3.52) на ДНКМ с амплитудой $A = 0.1$. Долгоживущие колебания наблюдаются при (а) $\beta_x = 0.65$ и (б) $\beta_x = 0.79$. Траектории частиц показаны черным. Смещения частиц увеличены в 3 раза. . 145
- 3.21 (а,б) Смещения частиц, указанных стрелками на рисунке 3.20(а,б) соответственно, как функции времени. На (а) показано смещение вдоль оси y , а на (б) вдоль оси x 145
- 3.22 Одномерные вертикальные ДБ на основе (а) ДНКМ 2, (б) ДНКМ 4 и (с) ДНКМ $\gamma 2$, полученные путем наложения функции локализации (3.53) на ДНКМ с амплитудой $A = 0,1$. Долгоживущие колебания наблюдаются при (а) $\beta_x = 1.15$, (б) $\beta_x = 1.07$ и (с) $\beta_x = 0.687$. Траектории частиц показаны черным. Смещения частиц увеличены в 3 раза. 147

- 3.23 (а-с) Смещения как функции времени для частиц, указанных стрелками на рисунке 3.22(а-с) соответственно. На (а,б) частицы движутся вдоль оси y и на (с) вдоль оси x 148
- 3.24 Одномерные ДБ на основе ДНКМ цепочки, которые имеют периодические паттерны (а) $[x, -x]$ и (б) $[x, 0, -x, 0]$. ДБ возбуждаются заданием начальных смещений частицам плотноупакованного ряда в соответствии с этими паттернами. Пространственно локализованные колебания наблюдаются при (а) $x = A = 0,2$ и (б) $x = A = 0,8$. Траектории частиц показаны черным. Смещения частиц на (б) масштабированы с коэффициентом 0,5, чтобы предотвратить перекрытие траекторий частиц, колеблющихся с большими амплитудами. . . 149
- 3.25 (а,б) Смещения Δx как функции времени для частиц, указанных стрелками на рисунке 3.24(а,б) соответственно. 150
- 3.26 (а)-(д) Паттерны начальных смещений, используемые для возбуждения одномерных ДБ в треугольной решетке на основе однокомпонентных ДНКМ цепочки от 1 до 4 соответственно. Ось x направлена вдоль плотноупакованного атомного ряда, а ось y перпендикулярна оси x . Первоначально возбуждаются только атомы в одном плотноупакованном ряду (показаны желтым цветом). На (а) и (д) все атомы колеблются, на (б) и (с) некоторые атомы покоятся. Период колебательной моды на (а) равен 2, на (б) - 3, а на (с) и (д) - 4. Полуплоскости выше и ниже возбужденного атомного ряда в нулевой момент времени смещаются как твердые тела на Y и $-Y$ соответственно. 153
- 3.27 (а)-(д) Смещения частиц как функции времени для однокомпонентных ДНКМ с 1 по 4 соответственно. Начальное смещение частиц равно 0,2 для всех четырех ДНКМ. Показаны только смещения частиц, принадлежащих одной трансляционной ячейке. Кривые разного типа используются для разных частиц, как указано в верхней части рисунка. Номер ДБ указан для каждой кривой. 155

- 3.28 (а)-(с) Смещения частиц как функции времени для двухкомпонентных ДНКМ с 5 по 7 соответственно. Начальные смещения частиц равны (а) $x_1 = 0,15$, $x_2 = 0,05$, $x_3 = -0,2$; (б) $x_1 = 0,15$, $x_2 = 0,1$; (с) $x_1 = 0,15$, $x_2 = 0,1$ 156
- 3.29 (а) Амплитуда ДБ как функция времени. (б) Частота ДБ как функция амплитуды. (с) Энергия возбужденного плотноупакованного ряда в расчете на атом как функция амплитуды. (д) Сдвиг атомных полупространств от возбужденного атомного ряда как функция амплитуды. 157
- 3.30 Картина атомных колебаний стационарного ДБ, возбужденного с помощью анзаца (3.55) с параметрами $A = 0,3$, $B = 0$, $\beta = \gamma = 0,33$, $\delta = 0$, $x_0 = 0$ 159
- 3.31 (а) Положение центра ДБ и (б) амплитуда ДБ как функции времени для следующих параметров анзаца (3.55): $A = 0,3$, $B = 0$, $\beta = \gamma = 0,33$, $\delta = 0,05$, $x_0 = 0$ 160
- 3.32 Зависимость скорости ДБ от параметра δ анзаца (3.55). Другие параметры равны $A = 0,3$, $B = 0,012$, $\beta = \gamma = 0,27$, $x_0 = 0$ 160
- 3.33 (а) Зависимости амплитуд неподвижных ДБ от параметров анзаца (3.55) $\beta = \gamma$ для $B = -0,01$, 0 и $0,01$ (светлые точки, темные точки и квадраты соответственно). (б) Зависимости амплитуд неподвижных ДБ от параметра анзаца (3.55) B при $\beta = \gamma = 0,20$, $0,23$ и $0,27$ (светлые точки, темные точки и квадраты соответственно). Остальные параметры: $A = 0,14$, $\delta = 0$, $x_0 = 0$. Вертикальные пунктирные линии отмечают границы области параметров, где удается инициировать ДБ. 161
- 3.34 (а) Зависимости амплитуд неподвижных ДБ от параметров анзаца (3.55) $\beta = \gamma$ для $B = -0,015$, 0 и $0,015$ (светлые точки, темные точки и квадраты соответственно). (б) Зависимости амплитуд неподвижных ДБ от параметра анзаца (3.55) B при $\beta = \gamma = 0,20$, $0,23$ и $0,27$ (светлые точки, темные точки и квадраты соответственно). Остальные параметры: $A = 0,15$, $\delta = 0$, $x_0 = 0$. Вертикальные пунктирные линии отмечают границы области параметров, где удается инициировать ДБ. 161

- 3.35 Как функции параметра $\beta = \gamma$ показаны зависимости (а) A_{DB} и (b) v_{DB} с параметрами $A = 0.14$, $\delta = 0.05$, $x_0 = 0$, $B = 0.009$, 0.012 и 0.015 (квадраты, светлые точки и темные точки соответственно). Вертикальные пунктирные линии отмечают границы области параметров, где удается инициировать ДБ. 162
- 3.36 (а) Двумерный двухатомный кристалл стехиометрии A_3B на основе треугольной решетки. Стробоскопическая картина движения атомов, по делокализованным колебательным мод в двухатомной решетке с движущимися легкими (b,c) и тяжелыми (d) атомами. 164
- 3.37 Плотность фононных состояний (черная сплошная линия) и частота как функция амплитуды для делокализованной колебательной моды, показанной на рисунке 3.36(d) (синяя пунктирная линия). 164
- 3.38 Стробоскопическая картина движения атомов вблизи ДБ, полученного наложением колоколообразной локализующей функции на ДНКМ, изображенную на рисунке 3.36(d). Смещения атомов увеличены в 7 раз для наглядности. ДБ возбуждался со следующими параметрами: $A = 0,06$; $\beta = 0,18$; $\delta = 0,011$; $\gamma = 0,162$. Энергия ДБ равна 62,56. Частота ДБ 0,844. 165
- 3.39 Зависимости амплитуд колебаний T и смещений центров колебаний S от расстояния от центра ДБ R . Сплошными линиями показаны зависимости, изначально заданные выражениями (3.56) и (3.57). Точки показывают численный результат после 10 периодов колебаний ДБ. ДБ возбуждался со следующими параметрами: $A = 0,06$; $\beta = 0,18$; $\delta = 0,011$; $\gamma = 0,162$. Энергия ДБ равна 62,56. Частота ДБ 0,844. 166
- 3.40 Зависимость параметра локализации ДБ, β , энергии, E , и частоты, ω , от амплитуды ДБ. 167
- 4.1 Потенциал Морзе (4.1) для $\alpha = 4$ (сплошная красная линия) и $\alpha = 7$ (пунктирная синяя линия). Энергия связи $D = 1$, равновесное межчастичное расстояние $\xi = 1$ 173

- 4.2 (a-1) Начальные смещения частиц, используемые для возбуждения ДНКМ 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). Все ненулевые компоненты перемещений имеют одинаковую величину. 178
- 4.3 Дисперсионные кривые для ГЦК кристалла вдоль кристаллографических направлений (a) [001], (b) [011] и (c) [111]. Параметр жесткости потенциала Морзе $\alpha = 7$ 180
- 4.4 Амплитудно-частотные характеристики двенадцати ДНКМ в решетке Морзе для (a) $\alpha = 4$ и (b) $\alpha = 7$. Горизонтальные пунктирные линии показывают максимальную частоту фононного спектра. Амплитуда ДНКМ нормирована на расстояние между частицами ρ , а частота ДНКМ - на максимальную фононную частоту ω_{\max} 182
- 4.5 Амплитудно-частотные характеристики для двенадцати ДНКМ в ГЦК меди, полученная в работе [218] с использованием межатомных потенциалов ЕАМ, разработанных Чжоу и др. [222]. Амплитуда ДНКМ нормирована на расстояние между частицами ρ , а частота ДНКМ - на максимальную фононную частоту ω_{\max} 183
- 4.6 Кинетическая и потенциальная энергии расчетной ячейки на атом, усредненные за период колебаний, как функции амплитуды для ДНКМ с 1 по 6 (угловые скобки, обозначающие осреднение, для краткости опущены). Результаты для $\alpha = 4$ ($\alpha = 7$) показаны сплошными (пунктирными) линиями. Кинетическая (потенциальная) энергия показана черными (красными) кривыми. 186

- 4.7 Кинетическая и потенциальная энергии расчетной ячейки на атом, усредненные за период колебаний, как функции амплитуды для ДНКМ с 7 по 12 (угловые скобки для краткости опущены). Результаты для $\alpha = 4$ ($\alpha = 7$) показаны сплошными (пунктирными) линиями. Кинетическая (потенциальная) энергия показана черными (красными) кривыми. 187
- 4.8 Компоненты напряжения, усредненные за период колебаний, как функции амплитуды для ДНКМ с 1 по 6 (угловые скобки для краткости опущены). Результаты для $\alpha = 4$ ($\alpha = 7$) показаны сплошными (пунктирными) линиями. 188
- 4.9 Компоненты напряжения, усредненные за период колебаний, как функции амплитуды для ДНКМ с 7 по 12 (угловые скобки для краткости опущены). Результаты для $\alpha = 4$ ($\alpha = 7$) показаны сплошными (пунктирными) линиями. 189
- 4.10 Константы жесткости, усредненные за период колебаний, как функции амплитуды для ДНКМ с 1 по 6 (угловые скобки для краткости опущены). Результаты для $\alpha = 4$ ($\alpha = 7$) показаны сплошными (пунктирными) линиями. 190
- 4.11 Константы жесткости, усредненные за период колебаний, как функции амплитуды для ДНКМ с 7 по 12 (угловые скобки для краткости опущены). Результаты для $\alpha = 4$ ($\alpha = 7$) показаны сплошными (пунктирными) линиями. 191
- 4.12 (а-е) Начальные смещения атомов, использованные для возбуждения пяти однокомпонентных ДНКМ в ОЦК решетке. Слева даны трехмерные изображения, а справа нанесены атомные смещения репрезентативной плоскости. Для наглядности ОЦК решетка разбита на две простые кубические подрешетки, показанные красными и синими точками. В тексте колебательные моды, изображенные на панелях с (а) по (е), называются ДНКМ от А до Е соответственно. 195

- 4.13 Частота как функция начальной амплитуды для пяти ДНКМ, показанных на рисунке 4.12 для (а) V и (b) Nb. Горизонтальные пунктирные линии показывают верхний край фононного спектра. Буквы от А до Е связывают результаты с модами, показанными на рисунке 4.12(а-е), соответственно. 197
- 5.1 Схематическое изображение расчетной ячейки. Показаны координатные оси и ориентация кристаллографических направлений вдоль координатных осей. Светлым показан атомный ряд в котором запускался движущийся ДБ с использованием анзаца (3.55). 202
- 5.2 (а,b) Амплитуды колебания и (с,d) статические смещения атомов ДБ в бериллии и цирконии соответственно. Для возбуждения ДБ использовался анзац 3.55 со следующими параметрами: для бериллия $A = 0.3 \text{ \AA}$, $B = 0.1 \text{ \AA}$, $\beta = 0.6$, $\gamma = 0.7$, $x_0 = 1/2$, $\delta = 0$ и для циркония $A = 0.4 \text{ \AA}$, $B = 0.016 \text{ \AA}$, $\beta = 0.7$, $\gamma = 0.8$, $x_0 = 1/2$, $\delta = 0$. ДБ показаны в момент времени $t = 5 \text{ пс}$ 203
- 5.3 Амплитудно-частотные зависимости для ДБ в (а) бериллии и (b) цирконии. Параметры анзаца 3.55 для (а) бериллия $A = 0.15-0.35 \text{ \AA}$, $B = 0.1 \text{ \AA}$, $\beta = 0.6$, $\gamma = 0.7$, $\delta = 0$ и (b) для циркония $A = 0.2-0.5 \text{ \AA}$, $B = 0.016 \text{ \AA}$, $\beta = 0.7$, $\gamma = 0.8$, $\delta = 0$ 204
- 5.4 Скорость движения ДБ в (а) Ве и (b) Zr в зависимости от параметра анзаца 3.55 δ . Остальные параметры анзаца следующие: для (а) бериллия $A = 0.3 \text{ \AA}$, $B = 0.1 \text{ \AA}$, $\beta = 0.6$, $\gamma = 0.7$ и для (b) циркония $A = 0.4 \text{ \AA}$, $B = 0.016 \text{ \AA}$, $\beta = 0.7$, $\gamma = 0.8$ 205
- 5.5 Смещения из положения равновесия как функции времени для движущихся атомов в (а) ДНКМ 2, (b) ДНКМ 5 и (с) ДНКМ 7. 207
- 5.6 Полная (кинетическая плюс потенциальная) энергия на атом для ДНКМ 2, 5 и 7 как функции начального смещения атомов. Только атомы центральной плоскости двумерного ДБ приняты во внимание. 207

- 5.7 Частота ДБ как функция амплитуды ДБ на (а) для V и на (b) для Nb для ДБ, построенных на основе различных ДНКМ. Горизонтальная пунктирная линия показывает верхний край фононного спектра. 210
- 5.8 Расстояние центрального атома (красная линия) и соседнего к центральному атому (синяя линия) от их решеточных положений как функции времени для ДБ, первоначально возбужденных в V на основе ДНКМ D для трех значений амплитуды ДНКМ: (а) 0.2, (b) - 0.25, и (с) - 0.3 Å. На (а) можно увидеть три режима, отмеченные римскими цифрами I, II и III. Первоначально возбужденный ДБ на основе ДНКМ D существует в режиме I, а затем самопроизвольно трансформируется в ДБ на основе ДНКМ C (режим II), который позже трансформируется в ДБ на основе ДНКМ A (режим III). На (b) виден самопроизвольный переход от режима I к режиму II. На (с) режим I сохраняется, но центр ДБ перемещается к атому, находящемуся рядом с центральным, а затем обратно. . . . 212
- 5.9 (а) Кристаллическая структура типа NaCl. Легкие (тяжелые) атомы показаны темными (светлыми) символами. Параметр решетки равен a . Анионная и катионная ГЦК подрешетки смещены относительно друг друга на вектор $(a/2, 0, 0)$. (b) Стробоскопическая картина движения атомов, показывающая два ДБ, находящихся в точках 1 и 2, показанных на (а). Два легких атома колеблются в противофазе в направлении $[110]$. . . 216
- 5.10 (а) Плотность фононных состояний рассматриваемого модельного кристалла. Видна широкая щель, возникающая из-за большой разницы атомных весов анионов и катионов. (b) Частота ДБ как функция амплитуды, лежащая в щели фононного спектра. 217
- 5.11 (а), (b) Смещения атомов 1 и 2 соответственно [отмечены на рисунке 5.9(а)] как функции времени, нормированного на период колебаний ДБ θ . (с) Разность фаз колебаний атомов 1 и 2, показывающая, что они колеблются в противофазе. 218

- 5.12 То же, что и на рисунке 5.11, но для случая, когда атомы 1 и 2 колеблются с разностью фаз, отличной от π . Разность фаз колебания атомов квазипериодически изменяется от $-\pi$ до π , и это изменение коррелирует с обменом энергией между ДБ. 219
- 5.13 Цепочка десяти легких атомов вдоль направления [110], обозначенные как (a), (b),..., (j). Первоначально возбуждаются ДБ на двух парах атомов (a), (b) и (c), (d). 220
- 5.14 (a-j) Смещения атомов, обозначенных на рисунке 5.13 как (a), (b),..., (j) соответственно, как функции времени. Первоначально возбуждались только атомы (a), (b), (c) и (d). 221
- 6.1 Атомы треугольной решетки на плоскости xy . Ось x направлена вдоль плотноупакованного атомного ряда, d - межатомное расстояние или диаметр атома. Атомы в одном плотноупакованном ряду (показаны более светлым) нумеруются индексом n . Показаны начальные условия для инициирования 2-краудина: атомы 1 и 2 имеют начальные скорости с составляющими $(V_0, \epsilon V_0)$ и $(V_0, -\epsilon V_0)$, где $\epsilon \ll V_0$ 225
- 6.2 Потенциалы Морзе и Борна-Майера показаны сплошной и пунктирной линиями соответственно. На вставке показана отталкивательная часть потенциалов. Параметры потенциалов выбираются таким образом, чтобы удовлетворять условиям (6.3)-(6.5) при $r_{\min} = 1$ 226
- 6.3 К обсуждению самофокусирующихся атомных столкновений в плотноупакованной цепочке атомов. Атомы имеют диаметр d и между ними нет пространства ($s = 0$). Эффективный диаметр атомов зависит от скорости их столкновения. Критерий самофокусирующихся столкновений можно сформулировать так: скорость их столкновений не должна превышать значения, при котором центры атомов сближаются более чем на половину их диаметра ($s = d/2$). 228
- 6.4 Плотность фононных состояний для двумерной треугольной решетки: тонкая черная кривая для потенциала Морзе, толстая синяя кривая для потенциала Борна-Майера. 230

- 6.5 Длина пробега краудиона в межатомных расстояниях в зависимости от (а) начальной скорости возбужденных атомов V_0 и (б) начальной энергии возбужденных атомов E_0 . Незакрашенные и закрашенные кружки используются для 1- и 2-краудионов соответственно, движущимся в кристалле Морзе. Незакрашенные и закрашенные квадраты соответствуют 1- и 2-краудионам, движущимся в кристалле Борна-Майера. 230
- 6.6 Стробоскопическая картина движения атомов в модельном двумерном кристалле Морзе, показывающая ДБ, движущийся вдоль плотноупакованного атомного ряда к вакансии, расположенной в этом же ряду. Смещения атомов увеличены в 4 раза. Атомы, окружающие вакансию, показаны красным цветом. Три ближайших атома к вакансии обозначены римскими цифрами I, II и III. Потенциальный барьер для миграции атома I на вакантное место определяется путем изучения временной эволюции расстояния $2Y$ между атомами II и III. 232
- 6.7 Примеры взаимодействия ДБ с вакансией, положение которой показано вертикальной штриховой линией. Параметры возбуждения ДБ приведены в тексте. Скорость ДБ на (а) вдвое меньше, чем на (б); наблюдается (а) почти упругое отталкивание ДБ от вакансии и (б) рассеяние ДБ на вакансии. . 235
- 6.8 Изменение расстояния Y (см. рисунок 6.6) от его равновесного значения Y_0 в зависимости от времени (выраженного в единицах периода колебаний ДБ θ) в случаях (а) упругого отражения от вакансии и (б) рассеяния на ней; (с) среднее значение $\langle \Delta Y \rangle$ расстояния между атомами II и III и его среднеквадратичное отклонение $\langle \Delta Y^2 \rangle$ от равновесного значения, рассчитанное за время взаимодействия с вакансией, в зависимости от параметра δ . 236

- 6.9 Темные следы, видимые невооруженным глазом в прозрачных кристаллах слюды мусковита (взято из работы [240]). Имеется набор треков с углом между ними 60° , что определяется гексагональной симметрией кристалла. По словам Майка Рассела, треки с другой ориентацией могут быть созданы космическими частицами высоких энергий или другими возбуждениями. 240
- 6.10 Атомная структура слюды мусковита $(\text{KAl}_2(\text{Si}_3\text{AlO}_{10})(\text{OH})_2)$. Атомы калия, точнее ионы K^+ (самые крупные на рисунке), образуют двумерную треугольную решетку, перпендикулярную плоскости рисунка. Кристалл имеет слоистую структуру и легко расслаивается за счет разрушения кулоновских взаимодействий между положительно заряженным слоем атомов калия и отрицательно заряженным слоем алюмосиликата. 241
- 6.11 Двумерный локальный потенциал, полученный с помощью выражения (6.13). Черным (белым) цветом показаны области минимальной (максимальной) потенциальной энергии. Минимумы потенциальной энергии образуют гексагональную решетку, которую можно разделить на две треугольные подрешетки, показанные линиями разного цвета. Расстояние между ближайшими точками треугольной подрешетки равно b 243
- 6.12 Потенциальная энергия, приходящаяся на один атом, E , как функция глубины локального потенциала γ . Серая пунктирная линия показывает пересечение кривых в точке $\gamma = 3,8$ 245
- 6.13 Эволюция структуры системы с увеличением глубины локального потенциала. Атомы окрашены в соответствии с их близостью к минимумам локального потенциала (см. описание в тексте). 246
- 6.14 То же, что на рисунке 6.13, но для пошагового уменьшения глубины локального потенциала. Атомы окрашены в соответствии с их близостью к минимумам локального потенциала (см. описание в тексте). 247

- 6.15 (а) Исходная равновесная структура, которая включает в себя фазовые домены с пересечением дислокаций несоответствия и без пересечений. Доменные границы обозначены желтыми линиями. Та же структура при (b) $t = 320$ и (c) $t = 800$ после возмущения атомных позиций с амплитудой 3×10^{-4} . Атомы окрашены в соответствии с их близостью к минимумам локального потенциала (см. описание в тексте). 250
- 6.16 Временная эволюция (а) кинетической и (б) потенциальной энергии на атом в системе, показанной на рисунке 6.15(а), после введения случайных начальных смещений атомов различной амплитуды. 251

Список таблиц

- 1 Коэффициенты аппроксимации методом наименьших квадратов зависимости $\alpha = a + bD_0$ для восьми изученных ДНКМ. 58
- 2 Константы жесткости равновесной квадратной решетки, $C_{ij} = C_{ji}$, рассчитанные по формулам (3.11), для трех значений параметра жесткости связи между вторыми соседями k_{nn} 82
- 3 Потенциальная энергия, приходящаяся на один атом, разделенная на энергию валентных связей и энергию валентных углов для четырех исследованных ДНКМ, возбужденных с начальными смещениями атомов $A = 0,03 \text{ \AA}$. Энергия рассчитывалась в момент максимального отклонения атомов от положений равновесия. 92
- 4 Связь между амплитудами A , B и C , для которых трехкомпонентная ДНКМ графена оказывается периодической во времени. 98
- 5 Схемы начальных смещений частиц плотноупакованного ряда треугольной решетки в соответствии с ДНКМ цепочки, описанными в работе [212]. Дан один период смещений. 150
- 6 Максимальные частоты фононов в двух точках первой зоны Бриллюэна и равновесные межатомные расстояния ρ для различных значений параметра жесткости потенциала Морзе α . 181
- 7 Параметры ДБ с максимальным временем жизни в V и Nb на основе пяти исследованных ДНКМ: амплитуда ДБ A , параметр локализации β , частота ДБ ν и максимальное время жизни t_{\max} . 211