Корзникова Е. А.
Бокий Д.И.
Дмитриев С. В.

НЕЛИНЕЙНАЯ ДИНАМИКА ГЕКСАГОНАЛЬНОЙ РЕШЕТКИ

Корзникова Е. А., Бокий Д.И., Дмитриев С. В.

НЕЛИНЕЙНАЯ ДИНАМИКА ГЕКСАГОНАЛЬНОЙ РЕШЕТКИ

Монография

Санкт-Петербург
Наукоемкие технологии
2018

УДК 541.6
ББК 22.31
К 66

Рецензенты:
Савин Александр Васильевич – доктор физико-математических наук, Институт химической физики им. Н.Н. Семенова РАН.
Екомасов Евгений Григорьевич – доктор физико-математических наук, профессор, Башкирский государственный университет.

К 66 Корзникова Е. А., Бокий Д. И., Дмитриев С. В. Нелинейная динамика гексагональной решетки: монография. – СПб: Наукоемкие технологии, 2018. – 114 с.

ISBN 978-5-6041427-1-4

В монографии показано, что двумерные ауксетические структуры с кубической нелинейностью могут поддерживать существование дискретных бризеров; возбуждение одномерных бушей достаточно большой амплитуды совместно с однородным растяжением двумерной решетки с кубической нелинейностью может приводить к ее трансформации в ауксетик, а также то, что в результате модуляционной неустойчивости некоторых одномерных бушей возможна самопроизвольная пространственная локализация энергии в виде дискретных бризеров.

Монография предназначена для научных работников, преподавателей, аспирантов и магистрантов, работающих в области физики конденсированного состояния.

УДК 541.6
ББК 22.31

Издание осуществлено при финансовой поддержке Российского Научного фонда, грант № 16-12-10175

ISBN 978-5-6041427-1-4

Оглавление

Введение

В последние десятилетия внимание ученых привлекают так называемые «отрицательные» материалы, например, **ауксетики** (то есть материалы с отрицательным коэффициентом Пуассона) [1], материалы с отрицательным коэффициентом теплового расширения [2], трехмерные материалы с отрицательной сжимаемостью в одном или даже двух направлениях [3], среды с отрицательным показателем преломления [4] и др. Аномальные свойства таких материалов интересны как с чисто научной точки зрения, так и ввиду того, что они могут лечь в основу новых технологий.

В настоящей работе внимание будет уделено ауксетикам, которые при приложении одноосной растягивающей нагрузки испытывают растяжение как вдоль приложенной силы, так и в **поперечном** направлении. Однако на практике мы чаще имеем дело с материалами, которые при растяжении (положительная деформация) уменьшаются в поперечном направлении (отрицательная деформация) так, что их коэффициент Пуассона, определяемый как отношение поперечной деформации ε_T к продольной ε_L, взятое со знаком минус,

$$\nu = -\frac{\varepsilon_T}{\varepsilon_L}, \tag{1}$$

оказывается положительным. Следует сказать, что существование ауксетиков не противоречит базовым законам физики. Термодинамически устойчивый **изотропный** материал может иметь коэффициент Пуассона в пределах $-1 < \nu < 1$ в двумерном и

$-1 < \nu < 0{,}5$ в трехмерном случаях. Для анизотропных материалов отсутствуют теоретические ограничения на величину коэффициента Пуассона и он зависит от выбора как оси растяжения, так и выбора направления для измерения поперечной деформации. По этой причине анизотропный материал может быть **частичным ауксетиком**, то есть иметь $\nu < 0$ при выборе одних направлений и быть обыкновенным материалом с положительным ν для других направлений. Несмотря на отсутствие теоретического запрета на существование ауксетиков, на практике они встречаются не часто. С другой стороны, монокристаллы нередко бывают частичными ауксетиками [5], становясь обычными материалами в поликристаллическом состоянии.

Необычные свойства материалов связаны с особенностями их структуры. Есть несколько классических примеров конструкций, для которых ауксетическое поведение интуитивно понятно. На рис. 1 показаны (а) стержневая конструкция и (б) система жестких квадратов, соединенных так, что они могут поворачиваться в ходе деформации. Видно, что при растяжении в горизонтальном направлении размер конструкций в поперечном направлении также увеличивается, то есть их коэффициент Пуассона отрицателен.

Анализу механических и акустических свойств таких конструкций посвящено большое количество работ [6, 7]. В частности, было показано, что стержневые системы в зависимости от их конфигурации и способа соединения стержней способны не только демонстрировать ауксетические свойства, но и выступать в качестве фильтров частот [6] или приводить к явлению фокусировки упругих волн [7]. Подавляющее число работ посвящено изучению динамики таких систем в режиме малых перемещений, когда возможна линеаризация уравнений движения.

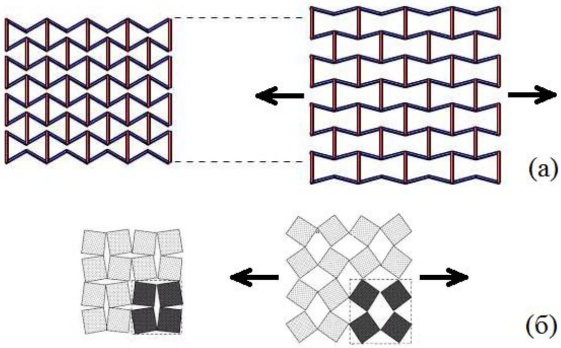


Рис. 1. Примеры ауксетических структур. (а) Стержневая конструкция. (б) Система жестких квадратов, соединенных так, что они могут поворачиваться в ходе деформации.

При высокоамплитудных внешних воздействиях или при значительных деформациях материал проявляет нелинейные свойства. Особый интерес представляют задачи, где нелинейные эффекты накладываются на аномальные упругие свойства материала. Волны солитонного типа, распространяющиеся в ауксетических пластинах, были проанализированы в рамках механики сплошной среды [8]. Нелинейные эффекты в двумерных решетках исследовались в работах [9-11].

Среди нелинейных колебательных мод в решетках особое положение занимают делокализованные коротковолновые моды, называемые одномерными бушами (ОБ) [12]. ОБ – это точные решения нелинейных уравнений движения решетки, продиктованные ее симметрией, вне зависимости от типа взаимодействия между частицами решетки и вне зависимости от амплитуды. С ростом амплитуд этих мод все большую роль начинают играть эффекты геометрической и/или физической нелинейности.

Другой тип нелинейных колебательных мод – это пространственно локализованные моды, называемые дискретными бризерами (ДБ) [13]. Частоты их колебаний лежат вне спектра малоамплитудных бегущих волн, поэтому ДБ не теряют свою энергию на возбуждение таких волн и могут иметь очень большое время жизни. Свойства ДБ в двумерных кристаллах с гексагональной решеткой изучались в работах [14-22].

Доказательство возможности возбуждения ДБ в ауксетических структурах, а также установление нового механизма появления ауксетических свойств у нелинейной решетки за счет возбуждения ОБ совместно с приложением однородного растяжения представляют научный интерес. Установленный факт взаимосвязи между нелинейными колебаниями решетки и ее аномальными упругими свойствами может иметь прикладное значение, поскольку в руках инженеров появляется новый канал управления упругими свойствами материала.

Глава 1. Обзор литературы

1.1. Ауксетики, дискретные бризеры и буши нормальных мод: этимология, историческая справка, достижения и проблемы

Начнем с этимологии основных используемых терминов.

Термин «ауксетик» (по-английски auxetic) происходит от греческого слова «αὐξητικός» (ауксетикос), что означает «стремящийся расшириться». Имеется в виду, что упругий материал при растяжении в одном направлении растет в поперечном размере, то есть имеет отрицательный коэффициент Пуассона. Термин придумал проф. Эванс, внесший значительный вклад в изучение ауксетиков [23].

Термин «дискретный бризер» (ДБ) (по-английски discrete breather) означает, во-первых, то, что он может существовать только в дискретной (и нелинейной) среде и происходит от английского слова «breath», что переводится как «дыхание», отражая периодичность колебаний ДБ, подобно периодическому процессу дыхания (см. обзоры [24,25]). Отметим, что наравне с термином «discrete breather» в англоязычной литературе используется эквивалентный термин «intrinsic localized mode», то есть «внутренняя локализованная мода». Данный термин подчеркивает, что локализация колебаний происходит бездефектной решетке, оттеняя принципиальное отличие ДБ от колебательных мод, локализованных на топологических дефектах.

Термин «буш нормальных мод» происходит от английского слова «bush», то есть «куст». Теория бушей нормальных мод была разработана в статьях [26,27]. Буши мод – это инвариантные многообразия, соответствующие подгруппам группы симметрии Гамильтониана изучаемой физической системы. Их можно рассматривать как обобщение понятия нормальных мод для случая нелинейных систем с дискретной симметрией, в частности, нелинейных решеток. В данной работе будут рассматриваться только одномерные буши (ОБ), то есть те, амплитуда которых определяется лишь одним параметром.

1.1.1. Ауксетики

Существует немало обзоров по ауксетикам, отражая высокий интерес к этим материалам со стороны научного сообщества и промышленности, упомянем лишь один из них, озаглавленный «Триумф поперечной мысли» [28]. Отрицательное значение коэффициента Пуассона, по-видимому, впервые было зарегистрировано для монокристалла железного колчедана, в конце 1920-х годов. Макроскопические ауксетики впервые были реализованы в 1982 году в виде рукотворных сотовых структур из силиконовой резины и алюминиевых сот. На сегодняшний день зарегистрировано примерно 400 кристаллов, являющимися частичными ауксетиками, при этом около 300 из них имеют кубическую симметрию [5, 29-38]. Все эти структуры упруго анизотропны. Примером изотропного макроскопического ауксетика является пена из вогнутых элементов, см. Рис. 2 (б), в сравнении с пеной из выпуклых элементов, показанной на Рис. 2 (а) и являющейся обычным упругим телом. Данный пример показывает, что необычные упругие свойства ауксетиков связаны с особенностью их структуры. Представленные пены являются трехмерной реализацией структур, показанных на Рис. 2 (в, г). На (в) имеем структуру из выпуклых сот с обычными упругими свойствами, а на (г) топологически эквивалентные соты вогнуты, что придает им ауксетические свойства.

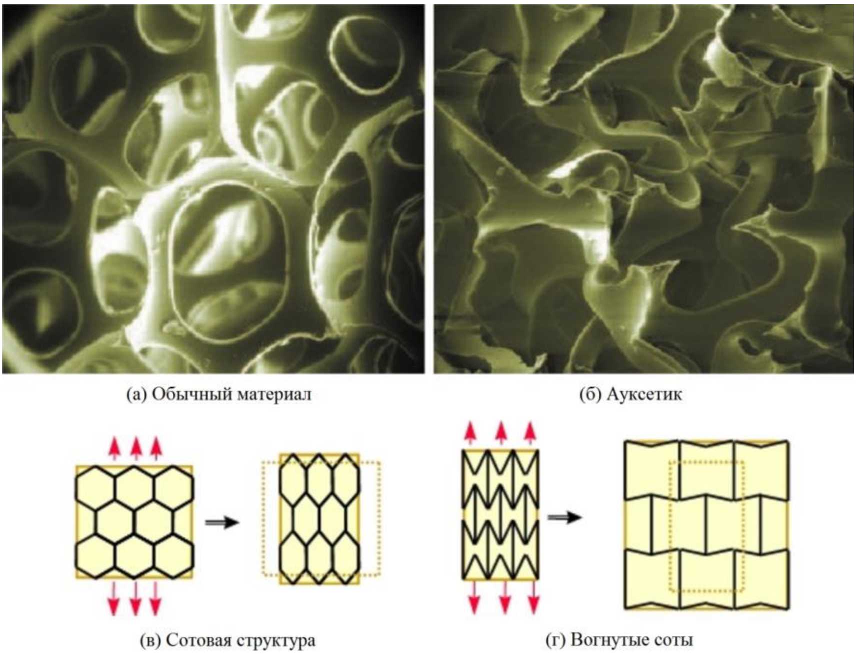


Рис. 2. (а) Пена с обычными упругими свойствами (выпуклые элементы структуры). (б) Вогнутая ауксетическая пена. (в) Сотовая структура с обычными упругими свойствами. (г) Ауксетические вогнутые соты [28].

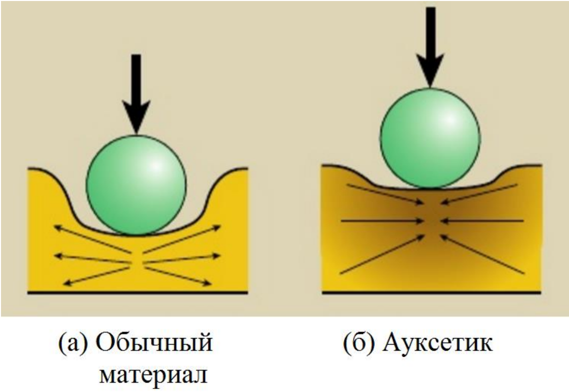


Рис. 3. Поведение (а) обычного материала и (б) ауксетика при индентировании [28].

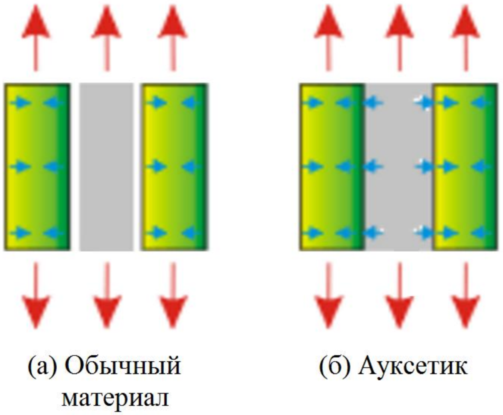


Рис. 4. Поведение при растяжении вдоль волокон (а) обычного композиционного материала и (б) композита с ауксетической матрицей [39].

Необычные свойства ауксетиков будят инженерную мысль в стремлении найти им применение. На рис. 3 показано как по-разному реагирует (а) обычный материал и (б) ауксетик на индентирование. В первом случае сжатие в вертикальном направлении приводит к растяжению в горизонтальном, то есть, материал «уходит» из-под индентора. Во втором случае наблюдаем обратную картину, когда материал собирается под индентором, повышая сопротивление его проникновению.

На Рис. 4 сопоставлено поведение при растяжении вдоль волокон (а) обычного композиционного материала и (б) композита с ауксетической матрицей [39]. В первом случае наблюдается тенденция к отслоению матрицы от волокон, во втором, за счет распухания ауксетической матрицы при растяжении, отслоение подавляется. В композите ауксетиком может быть не матрица, а волокна. Если представить себе процесс вытягивания отдельного ауксетического волокна из композита, то легко себе представить, что при приложении к волокну растягивающего усилия, оно будет разбухать в поперечнике и сохранять лучшее сцепление с матрицей. Волокно из обычного материала, наоборот, при вытягивании сжималось бы в поперечном размере, отрываясь от матрицы.

Различие в знаке коэффициента Пуассона у обычных материалов и ауксетиков наглядно проявляется при изгибе пластины моментом М (см. Рис. 5). При таком изгибе у обычного материала выше срединной поверхности пластины происходит растяжение в одном направлении и, следовательно, сжатие в поперечном, что приводит к образованию седловой поверхности с отрицательной гауссовой кривизной. У пластины из ауксетика выше срединной поверхности материал сжат в обоих направлениях и образуется поверхность с положительной гауссовой кривизной.

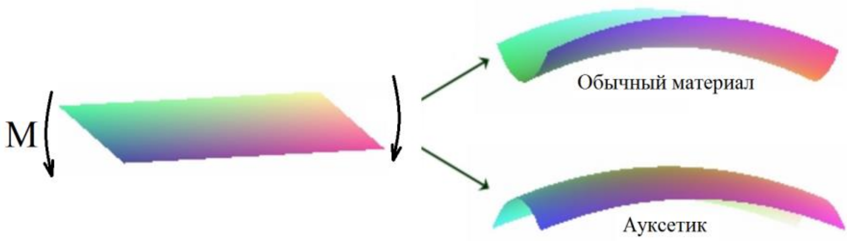


Рис. 5. Различие в поведении при изгибе моментом M пластины из обычного материала (образуется седловая поверхность) и ауксетика (образуется поверхность с положительной гауссовой кривизной) [39].

Важно отметить, что упругость и, следовательно, ауксетическое поведение не зависит от масштаба структурных элементов. Деформация может происходить на макро-, микро- или даже молекулярном уровне. Это означает, что можно рассматривать не только ауксетические материалы, но и ауксетические макроскопические структуры.

В последние годы большой интерес исследователей во всем мире привлекают двумерные кристаллы, среди которых наиболее изученными являются графен (моноатомный слой углерода с гексагональной структурой) и графан (углеводородное соединение CH, представляющее собой полностью наводороженный графен).

Эти материалы, благодаря уникальному набору свойств, имеют большой потенциал применения в различных нанотехнологиях.

Оказывается, что однородно деформированный в плоскости графен является полным ауксетиком в некоторой области компонент плоской деформации [40]. Данная область закрашена на Рис. 6.

Интересно, что ауксетические свойства могут проявляться совместно с отрицательным тепловым расширением [2] и/или отрицательной сжимаемостью упругого тела в определенном направлении под действием гидростатического давления [3].

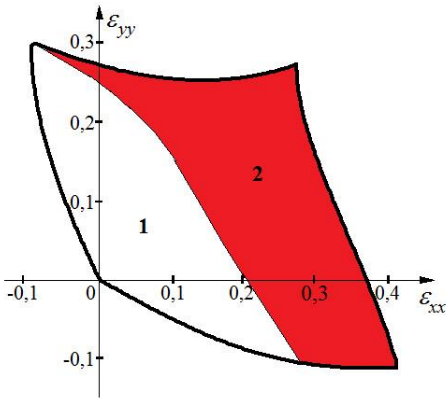


Рис. 6. Область устойчивости плоского листа графена, подверженного деформации растяжения-сжатия в плоскости [40]. Направление *x* (*y*) совпадает с направлением зигзаг (кресло). В области 1 графен имеет один или оба положительных коэффициента Пуассона, а в закрашенной области 2 графен является полным ауксетиком, то есть оба коэффициента Пуассона отрицательны.

В качестве слабо исследованной проблемы назовем поведение ауксетиков при возбуждении в них нелинейных колебаний. Кроме того, возникает естественный вопрос, могут ли нелинейные колебания структур с обычными упругими характеристиками превратить их в ауксетики? В настоящей монографии делается вклад в изучение этих вопросов на примере двумерных нелинейных решеток, построенных на основе гексагональной решетки точечных масс.

1.1.2. Дискретные бризеры

Изучение ДБ началось с работы Долгова [41], опубликованной 30 лет назад. Им было показано, что цепочка частиц, взаимодействующих посредством нелинейных связей, допускает существование пространственно локализованных колебательных мод. До этой работы считалось, что локализованные колебания возможны только вблизи дефектов решеток. В последующих работах, ставших классическими, существование ДБ было строго доказано, и было показано, что они могут быть устойчивыми [42-44]. Более поздние результаты по изучению ДБ в нелинейных решетках различного типа и различной размерности, а также в реальных физических системах, отражены в обзорах [13,24,25].

На Рис. 7 приводятся примеры ДБ в одномерной цепочке точечных масс, взаимодействующих посредством полиномиального потенциала с кубической нелинейностью по результатам работы [45]. Показаны разница перемещений двух соседних узлов как функции номера узла. ДБ центрирован (а) между двух соседних узлов (мода Пейджа [46]) и (б) на одном узле (мода Сиверса-Такено [42]). Перемещения спадают экспоненциально быстро с удалением от центра ДБ. Частота ДБ лежит выше фононного спектра цепочки.

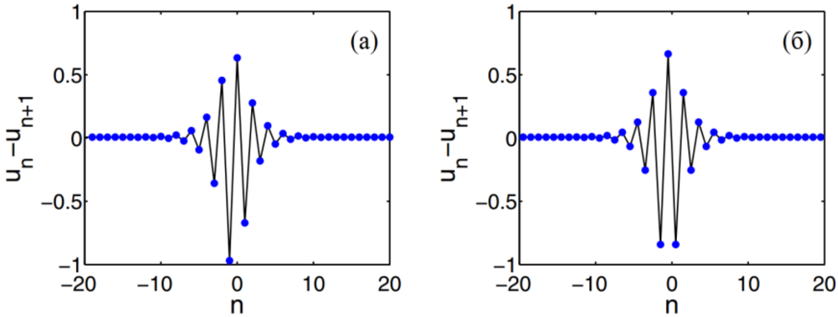


Рис. 7. Примеры ДБ в одномерной цепочке точечных масс, взаимодействующих посредством полиномиального потенциала с кубической нелинейностью [45]. ДБ центрирован (а) между двух соседних узлов и (б) на одном узле.

Была установлена причина существования ДБ, состоящая в том, что частота ДБ лежит вне спектра малоамплитудных бегущих волн. Выход частоты ДБ за пределы спектра линейных колебаний происходит потому, что частота нелинейных колебаний зависит от амплитуды. Следовательно, дискретные бризеры являются сугубо нелинейными колебательными модами. Кроме того, ДБ могут существовать только в дискретных средах. Поэтому, несмотря на то, что они могут иметь некоторые сходные черты с континуальными солитонами, отождествлять эти объекты нельзя.

Итак, дискретность и нелинейность среды являются двумя необходимыми условиями существования ДБ. Многочисленные исследования показали, что во многих случаях они же являются и достаточными условиями, при этом размерность решетки, конкретный вид нелинейных межчастичных взаимодействий влияют лишь на параметры ДБ, но не на принципиальную возможность их существования.

Первые математические работы по изучению ДБ были выполнены для одномерных цепочек [41-44,46]. Затем были исследованы двумерные и трехмерные решетки [47-52]. Большое число работ выполнено и для изучения ДБ в реальных кристаллах [13].

ДБ также были найдены и изучены в графене и графане [14-22, 53]. Например, в работе [18], с использованием сложной процедуры поиска начальных условий, в графене был возбужден ДБ с жестким типом нелинейности и частотой выше бесщелевого фононного спектра. В [22] исследовалась структура ДБ в графене и доказана их неустойчивость. В статье [19] было показано, что ДБ могут существовать в углеродных нанотрубках, которые можно рассматривать как лист графена, свернутый в трубку.

В интересном исследовании Щимады с соавторами [20] было показано, что если углеродную нанотрубку растянуть вдоль оси более чем на 6% и возбудить в ней ДБ, то ДБ может инициировать возникновение дефекта 5-7-5-7 (см. рис. 8). Тем самым было показано, что ДБ могут вносить вклад в трансформацию структуры наноматериалов.

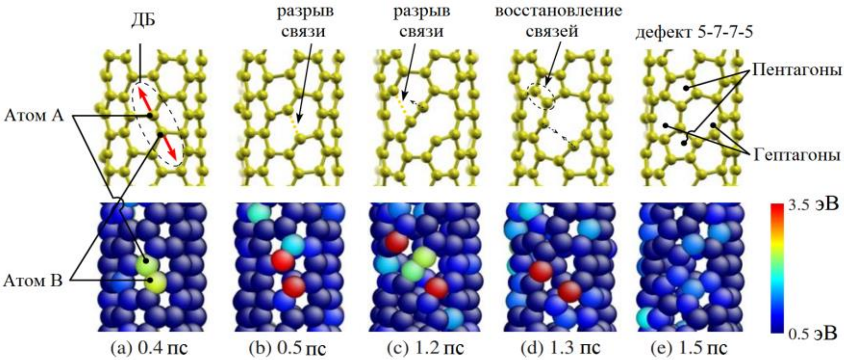


Рис. 8. Трансформация структуры углеродной нанотрубки, растянутой на 10%, инициированная ДБ. Верхний ряд показывает положения атомов углерода в различные моменты времени (указаны внизу), а нижний ряд дает распределение энергии согласно шкале справа [20].

Принципиально иной тип ДБ можно возбудить в графене, если предварительно приложить к нему однородную упругую деформацию так, чтобы появилась щель (запрещенная зона) в его фононном спектре. В этих условиях может существовать щелевой ДБ (с частотами в щели спектра) с мягким типом нелинейности [53], что проиллюстрировано на Рис. 9. На (а) показана стробоскопическая картина движения атомов в окрестности ДБ. Видно, что большую амплитуду имеют два атома, соединенные валентной связью и совершающие колебания в противофазе в направлении «кресло». На (б) приводится плотность фононных состояний деформированного графена, разложенная на колебания в плоскости листа (заштриховано) и перпендикулярно плоскости (не заштриховано) (верхняя абсцисса). Зависимость частоты ДБ от амплитуды A показана штриховой линией (нижняя абсцисса).

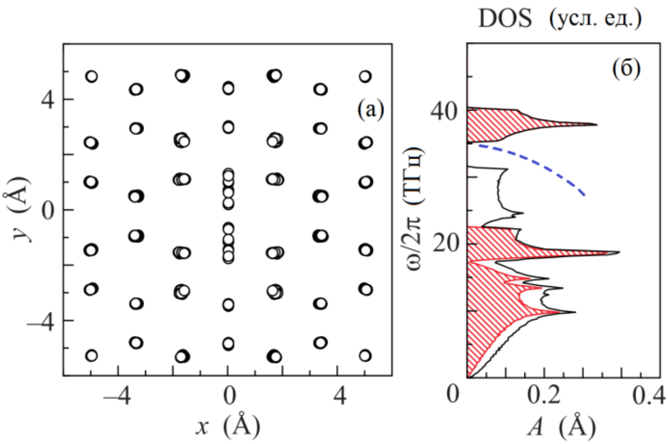


Рис. 9. (а) Стробоскопическая картина движения атомов в окрестности щелевого ДБ в графене, однородно деформированном так, чтобы появилась щель в его фононном спектре. (б) Плотность фононных состояний деформированного графена, разложенная на колебания в плоскости листа (заштриховано) и перпендикулярно плоскости (не заштриховано) (верхняя абсцисса). Штриховая кривая дает зависимость частоты ДБ от амплитуды A (нижняя абсцисса). Адаптировано из работы [53].

Отметим, что ДБ имеет частоты в щели спектра колебаний в плоскости графена, но могут входить в спектр колебаний перпендикулярно плоскости. Это связано с тем, что колебания в плоскости и из плоскости в двумерном кристалле графена слабо связаны [53].

Оказалось возможным возбуждение щелевых ДБ на краю растянутой графеновой наноленты [14,16]. Растяжение наноленты индуцирует щель в фононном спектре графена и дает возможность возбудить щелевой ДБ с мягким типом нелинейности, как показано на Рис. 10. Атомы на краю наноленты покрашены в голубой цвет. ДБ локализован на четырех атомах, остальные атомы имеют существенно меньшую амплитуду колебаний, экспоненциально убывающую с удалением от центра ДБ.

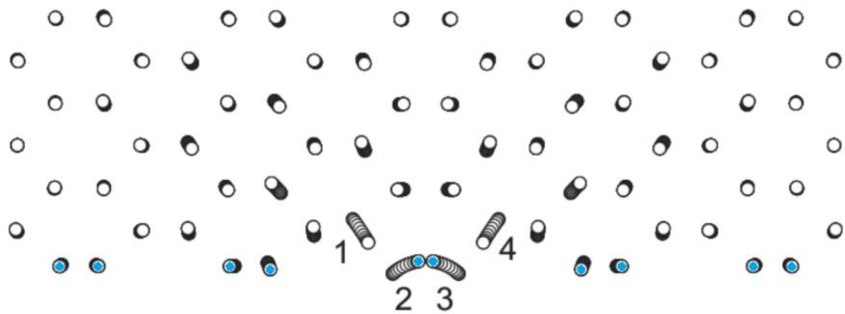


Рис. 10. Стробоскопическая картина движения атомов в окрестности ДБ в графеновой наноленте, однородно растянутой так, чтобы появилась щель в ее фононном спектре. Атомы на краю наноленты окрашены в голубой цвет. Адаптировано из работы [16].

В работе Хижнякова с соавторами [54] установлено существование ДБ с поперечными колебаниями атомов в недеформированном графене. Частота ДБ лежит выше фононного спектра колебаний перпендикулярно плоскости графена, но внутри спектра колебаний в плоскости. Частота ДБ растет с амплитудой (жесткий тип нелинейности).

В недавней работе появилось сообщение о существовании долгоживущих ДБ с колебаниями в плоскости листа в недеформированном графене [55]. Однако Дмитриев с соавторами утверждают, что ими была найдена дефектная колебательная мода, а не ДБ [56]. Оказалось, что потенциал Терсоффа, использованный в [55,56] допускает существования топологического дефекта, когда одна валентная связь в листе графена оказывается длиннее других. Пара атомов, соединенных такой дефектной связью, могут колебаться в противофазе на частоте выше фононного спектра и демонстрировать жесткий тип нелиненйности.

В особом ряду стоят первопринципные расчеты ДБ, которые как раз и были выполнены для двумерных материалов (графан [15,17,57] и графен [57,58]). Данный подход не использует предположений о межатомных потенциалах и в этом смысле является более точным, чем молекулярно-динамические расчеты, хотя он и требует значительно больших вычислительных ресурсов. Поэтому расчеты проводились на небольших расчетных ячейках, как показано на Рис. 11. На (а) и (в) даны стробоскопические картины движения атомов в окрестности щелевых ДБ в однородно деформированном графене и в графане, соответственно.

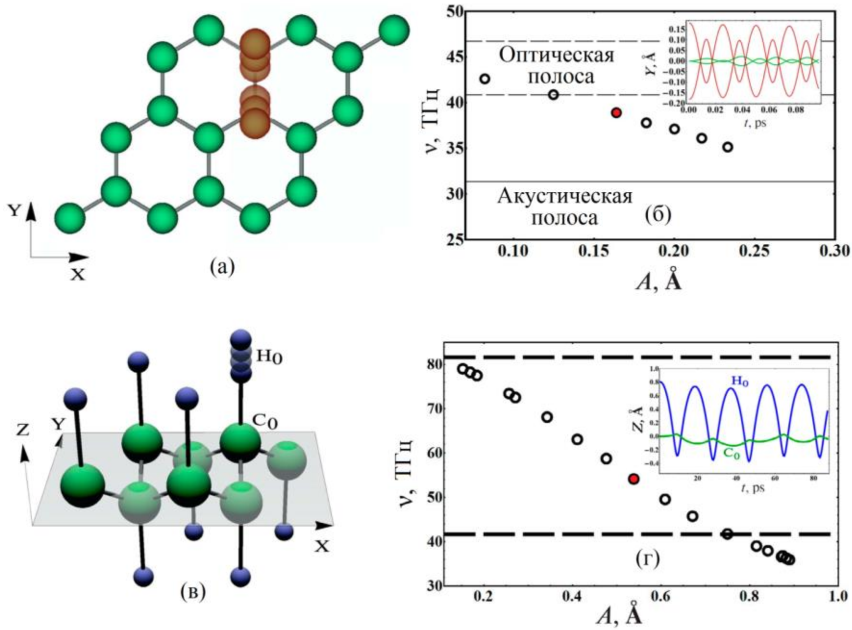


Рис. 11. Результаты первопринципного моделирования. Стробоскопические картины движения атомов в окрестности щелевых ДБ в (а) однородно деформированном графене и (в) в графане. Зависимость частоты от амплитуды для ДБ (б) в однородно деформированном графене и (г) в графане. На вставках на (б) и (г) показаны перемещения центральных атомов ДБ как функции времени. Адаптировано из работы [57].

Эти картины качественно совпадают с результатами, полученными ранее методом молекулярной динамики [15,53], а именно, ДБ в графене сформирован парой атомов, колеблющихся в противофазе в направлении «кресно», а в графане одним атомом водорода, совершающем колебания перпендикулярно листу. На (б) и (г) показаны зависимости частоты от амплитуды для ДБ в однородно деформированном графене и в графане, соответственно. Для графена первопринципные расчеты дают зависимость частоты от амплитуды ДБ качественно совпадающую с молекулярно-динамическими расчетами [53]. Что касается графана, то здесь имеется качественное различие результатов, получаемых двумя методами. Первопринципный расчет дает монотонное уменьшение частоты ДБ с амплитудой [см. Рис. 11(г)], а в молекулярно-динамическом моделировании была получена немонотонная зависимость [15], которая лишь при не слишком больших амплитудах ДБ согласуется с первопринципной кривой. На вставках на (б) и (г) показаны перемещения центральных атомов ДБ как функции времени. Видно, что ДБ в графене и графане сильно локализованы, что и позволяет проводить расчеты их свойств на малых расчетных ячейках с периодическими граничными условиями.

1.1.3. Буши нормальных мод

Как уже упоминалось, буши нормальных мод – это инвариантные многообразия, соответствующие подгруппам группы симметрии Гамильтониана изучаемой физической системы [26,27].

Используя теоретико-групповой подход, были получены буши как для отдельных молекул [59], так и для решеток, в частности, для гексагональной решетки [12]. В работе [12] были описаны как одномерные, так и двумерные буши для гексагональной решетки. Оказалось, что в такой решетке существует четыре одномерных буша, которые изображены на Рис. 12. Буши отличаются друг от друга симметрией колебаний атомов. Например, буши (б-г) сохраняют изотропию гексагональной решетки, а буш (а) не сохраняет.

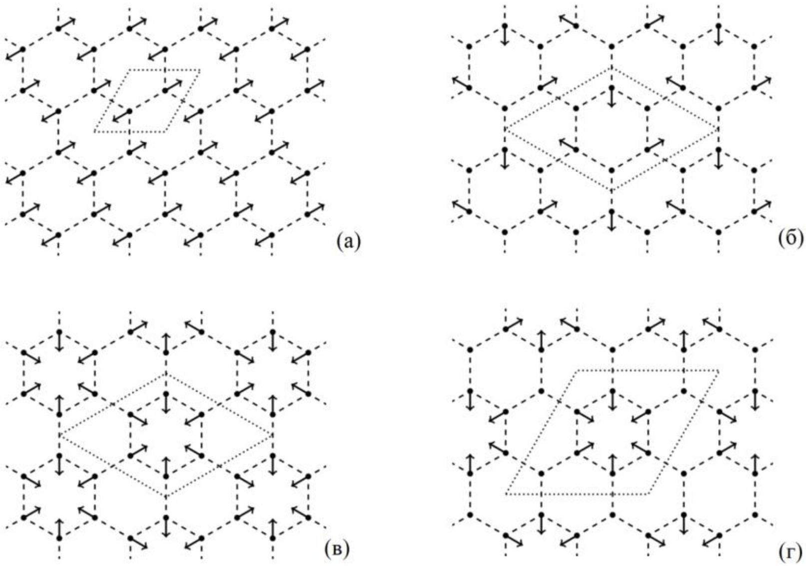


Рис. 12. Колебания частиц в четырех одномерных бушах гексагональной решетки [12]. Пунктирной линией для каждого буша показаны трансляционные ячейки.

Представленные буши интересны тем, что они являются точными решениями уравнений движения изотропной гексагональной решетки для любых амплитуд колебаний и для любых межчастичных потенциалов взаимодействия. Авторы работы [12] получили данные колебательные моды, имея в виду решетку графена, но полученные ими результаты справедливы для любой изотропной гексагональной решетки.

В данной работе будет рассматриваться гексагональная решетка точечных масс и в случае изотропной решетки, будут изучаться только одномерные буши (ОБ), показанные на Рис. 12. В частности, будет изучена модуляционная неустойчивость [60,61] данных мод, проявляемая при не слишком малых амплитудах.

1.2. Основные механизмы появления ауксетических свойств в макроскопических структурах и материалах

Опишем, опираясь на литературные данные, что может являться причиной появления ауксетических свойств у макроскопических дискретных структур или у материалов. Напомним, что у ***изотропных*** материалов коэффициент Пуассона не может выходить за пределы от -1 до 1 в двумерном случае и от -1 до 0,5 в трехмерном. Для анизотропных материалов нет теоретических ограничений на величину коэффициентов Пуассона, которые к тому же зависят от направления растяжения и от направления измерения поперечной деформации. Напомним, что если при любом выборе направлений коэффициент Пуассона отрицателен, то материал называют (полным) ауксетиком, а если он отрицателен для определенных направлений и положителен для других направлений, то частичным ауксетиком [1].

Начнем с работы [62], где было строго показано, что любое изотропное упругое тело при приложении отрицательного (растягивающего) гидростатического давления выше определенного значения превращает его в изотропный ауксетик. Более того, было показано, что превращение в ауксетик происходит до того, как упругое тело выйдет за пределы термодинамической устойчивости. Таким образом, достаточно сильное отрицательное гидростатическое давление является причиной появления ауксетических свойств изотропных материалов. Разумеется, приложение отрицательного гидростатического давления может превращать в ауксетик (частичный или полный) и анизотропные материалы.

В работе [63] была рассмотрена модельная двумерная система, показанная на Рис. 13. Важной особенностью такой структуры является то, что она построена из частиц конечного размера, положение которых на плоскости определяется не только координатами центра масс частиц, но и углом их ориентации. Системы из точечных масс описываются только положениями частиц. Были рассчитаны коэффициенты Пуассона данной системы, что показало, что если повороты частиц запрещены, то ауксетических свойств не возникает, а если разрешены, то имеется область параметров модели, где она становится ауксетиком. Таким образом, можно сказать, что именно вращательные степени свободы частиц могут стать причиной отрицательного коэффициента Пуассона. По-видимому, вращения жестких тетраэдрических кластеров SiO_4 и являются причиной ауксетического поведения кристобалита (SiO_2), наблюдаемого вблизи фазового перехода [64].

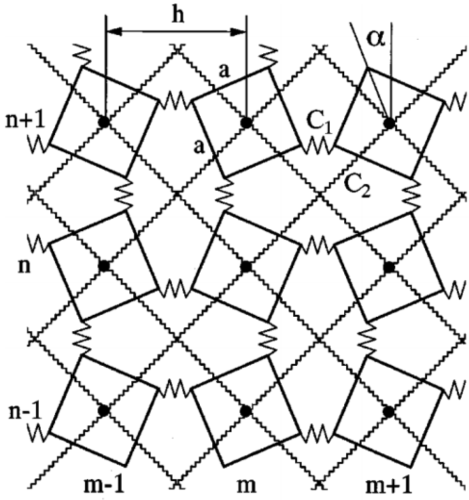


Рис. 13. Модельная двумерная система взаимодействующих квадратных частиц конечного размера, имеющих вращательную степень свободы [62].

В цикле работ мальтийской школы было показано, что вращение различных плоских фигур, соединенных вершинами определенным образом, является причиной ауксетического поведения двумерных структур [65-68]. На Рис. 14 показаны (а,б) – ромбы, (в-е) параллелограммы, соединенные в вершинах так, что они могут совершать относительные вращения. Все эти структуры – ауксетики, что видно из их деформации, показанной поэтапно на Рис. 14. В момент наибольшего раскрытия структур они вырастают как в продольном, так и в поперечном направлениях.

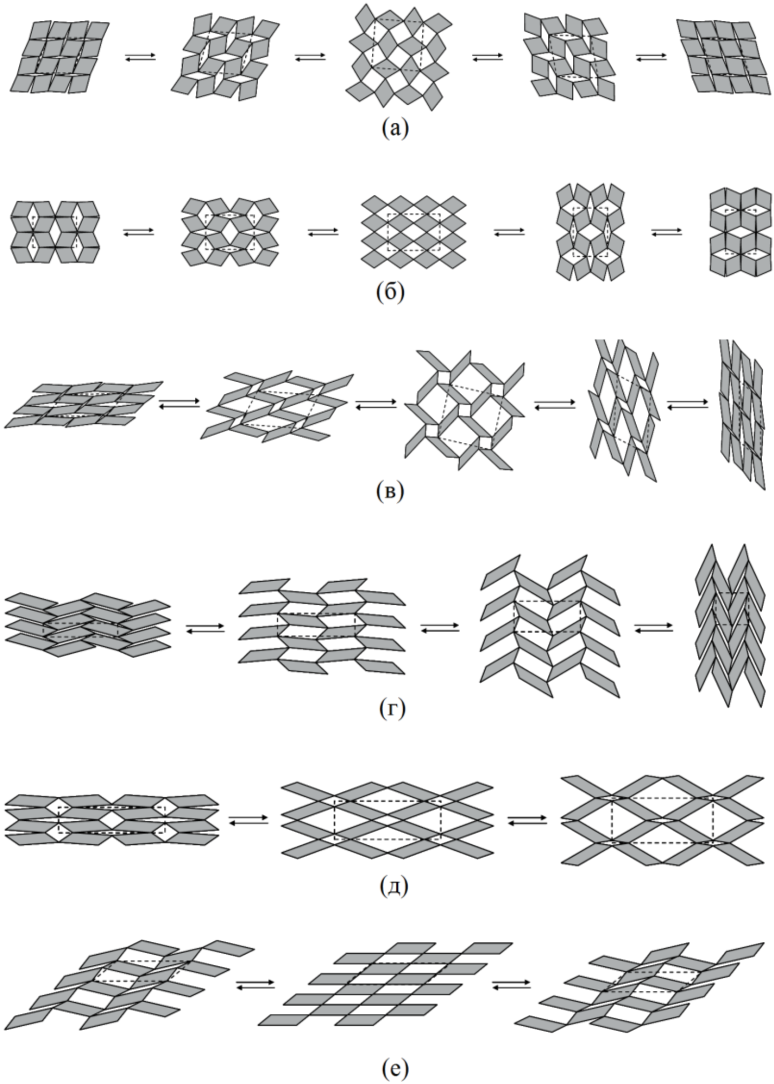


Рис. 14. Различные плоские фигуры (а,б) – ромбы, (в-е) параллелограммы, соединенные в вершинах так, что они могут совершать относительные вращения, создают двумерные ауксетические структуры [65-68].

На практике подобные структурные элементы не бывают абсолютно жесткими. Но даже если допустить, что они выполнены из деформируемого материала, данные структуры могут сохранять ауксетические свойства, если вклад вращательных степеней свободы в общую деформацию достаточно велик.

Следующим важным источником ауксетизма следует назвать анизотропию среды. Сильно анизотропные ламинатные композиты очень часто оказываются частичными ауксетиками. Опять же в силу анизотропии, частичными ауксетиками являются многие монокристаллы, в том числе и кубической сингонии [29-38].

Упомянем как отдельные механизмы появления ауксетических свойств полидисперсность ГЦК кристалла, сформированного деформируемыми сферами и димерами деформируемых сфер [69,70], а также фрактальность среды [71].

Несомненно, что поиск новых механизмов появления ауксетических свойств дискретных структур и материалов является интересной и важной задачей.

1.3. Нелинейные колебания решеток, их роль в формировании физических и механических свойств решеток

Насколько известно автору, влияние бушей нелинейных мод на свойства решеток до настоящего времени не изучалось. В настоящей работе делается попытка изучения влияния одномерных бушей на упругие свойства двумерной гексагональной решетки.

С другой стороны, в литературе имеются попытки описания возможного влияния ДБ на механические и физические свойства кристаллов [13,72], основанные на знаниях их основных свойств, полученных из молекулярно-динамических расчетов и частично подтвержденных экспериментально. В качестве основных свойств ДБ можно перечислить следующее [13]. Они локализуют энергию порядка одного эВ на группе от одного до десятка атомов. Амплитуда колебания атомов в ядре ДБ может достигать 15-20% от межатомного расстояния. В некоторых случаях ДБ могут обмениваться энергией друг с другом как слабо связанные осцилляторы [82-84]. В некоторых случаях они могут двигаться по кристаллу, преодолевая значительные расстояния и перенося энергию далеко от места своего зарождения [48,85-88]. В металлах максимальная скорость движения ДБ составляет порядка 0,1 от скорости звука [85]. ДБ могут возбуждаться термофлуктуационно [89], при плазменной обработке поверхности [73] или потоком частиц [81,90].

ДБ, возбуждаемые импульсным электрическим током высокой плотности, способны приводить к релаксации дефектной структуры металла после его пластической деформации [91] или к электропластическому эффекту [92,93].

Тепловое расширение кристаллов объясняется ангармонизмом и асимметрией межатомных потенциалов. Поэтому при термофлуктуационном возбуждении ДБ, которые являются сильно нелинейными колебательными модами, усиливается тепловое расширение кристаллов, возникает анизотропия теплового расширения и его неоднородность на микроскопическом уровне (см. Рис. 15). В виду того, что ДБ способны снижать энергии активации миграции и зарождения точечных дефектов, они вносят вклад в диффузию, ионную проводимость, скорость отжига радиационных повреждений [73-81]. ДБ эффективно рассеивают фононы, поэтому решеточная теплопроводность снижается при тепловой активации ДБ, в то время как электропроводность остается неизменной. Это изменение транспортных свойств позволяет предположить, что ДБ могут улучшить термоэлектрические свойства кристаллов.

В целом, следует признать, что вклад нелинейных колебаний в свойства кристаллов еще не до конца выяснен.

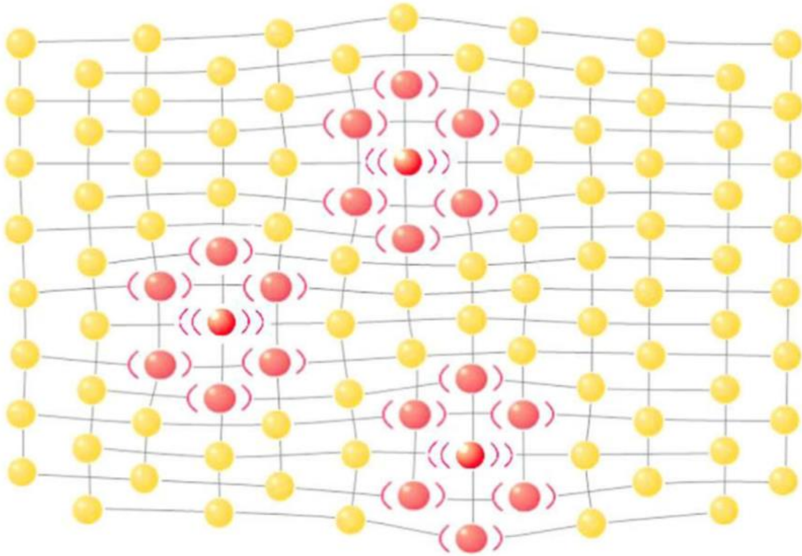


Рис. 15. Схематическая иллюстрация локальной дилатации кристаллической решетки вблизи ДБ [72].

1.4. Заключение по главе

Анализ литературных данных, проведенных в данной главе, подводит к ряду открытых проблем, связанных с возможностью возбуждения и изучения свойств дискретных бризеров (ДБ) и одномерных бушей (ОБ) в нелинейных решетках, как с обычными упругими свойствами, так и в ауксетиках. Вторая проблема - это влияние нелинейной динамики решетки на ее упругие свойства. Эти проблемы сформулированы во Введении как цели и задачи данного исследования и затрагиваются в последующих главах.

В качестве объекта исследования выбрана двумерная нелинейная решетка с гексагональной симметрией расположения ее узлов. Узлы данной решетки могут соединяться связями по-разному, что дает возможность управлять упругими свойствами системы, в том числе, и коэффициентом Пуассона. Гексагональная решетка выбрана потому, что для нее были определены все ОБ [12]. Двумерная решетка дает преимущества по сравнению с трехмерной в том плане, что, во-первых, уменьшаются затраты компьютерных ресурсов и во-вторых, упрощается визуализация полученных результатов. В то же время, двумерная решетка существенно богаче одномерной в плане возможных физических эффектов. Потенциал межчастичного взаимодействия выбран в самой простой форме – полиномиальный потенциал с кубической нелинейностью, так называемый β-ФПУ потенциал.

Для решения поставленных задач будут использованы классические, хорошо разработанные методы расчета спектров линейных колебаний решеток и метод молекулярной динамики.

Предполагается, что решение поставленных задач поможет, на качественном уровне, глубже понять связь между нелинейными колебаниями решетки и ее упругими свойствами. Это, в свою очередь, может послужить отправной точкой для инженерных разработок, использующих нелинейные решеточные системы в качестве фильтров частот, демпферов колебаний и прочих устройств.

Глава 2. Возбуждение дискретных бризеров и анализ их свойств в двумерных нелинейных решетках

В данной главе ставится задача определения свойств ДБ в нелинейных двумерных структурах с сильно различающимися упругими характеристиками.

2.1. Описание модели

На рис. 16 представлены двумерные решетки взаимодействующих частиц единичной массы, исследуемые в данной главе. Имеется три типа связей: длинные вертикальные связи 1, короткие вертикальные связи 2 и связи в направлении зигзаг 3. Все они описываются пружинами с кубической нелинейностью, потенциальная энергия которых определяется выражением

$$\varphi(r)=\frac{k}{2}(r-L)^2+\frac{\beta}{4}(r-L)^4\,, \qquad (2)$$

где r – текущая длина пружины, L – равновесная длина пружины, k – коэффициент линейной жесткости пружины, β – коэффициент при кубическом слагаемом (в выражении для межатомной силы $F(r)=-d\varphi/dr$). Данный потенциал называют β-ФПУ в часть Ферми, Паста и Улама. При β=0 выражение (2) описывает линейную связь, подчиняющуюся закону Гука.

Расчеты проводились для следующих трех наборов параметров потенциалов:

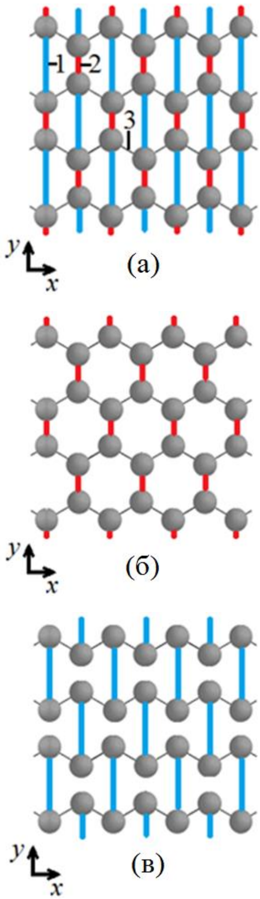
структура I: k_1=1, k_2=1;

структура II: $k_1=10^{-3}$, k_2=1;

структура III: k_1=1, $k_2=10^{-3}$;

при этом остальные параметры брались одинаковыми для всех трех структур: k_3=1, L_1=2, $L_2=L_3$=1, $\beta_1=\beta_2=\beta_3$=10. Заметим, что в структуре I линейная жесткость длинных и коротких вертикальных связей одинакова, в структуре II длинные связи намного слабее коротких, а в структуре III слабыми являются короткие связи. Слабые связи не показаны на Рис. 16 (б) и (в) для более наглядного выявления их структурных особенностей.

Выбор единичной массы частиц не снижает общности рассмотрения, поскольку это соответствует определенному выбору единицы измерения времени. Выбор единичной длины связи между ближайшими частицами также достигается соответствующим выбором единицы измерения длины и не влияет на общность рассматриваемой модели. Наконец, выбором единицы измерения энергии всегда можно добиться равенства единице линейной жесткости связи 3 (зигзаг). Выбор остальных параметров межчастичных взаимодействий уже влияет на результат существенно. Высокое значение коэффициента нелинейной жесткости обеспечивает заметный вклад нелинейного слагаемого при смещениях частиц на 10% от межатомного расстояния. Это типичное значение для кристаллических твердых тел.



Структура I

Структура II

Структура III

Рис. 16. Двумерная гексагональная решетка взаимодействующих точечных частиц единичной массы. Имеется три типа связей: вертикальные длинные 1, вертикальные короткие 2 и связи в направлении зигзаг 3, показанные тонкими линиями. Рассмотрены различные сочетания жесткостей трех видов связи. (а) В структуре I длинные и короткие вертикальные связи имеют одинаковый коэффициент линейной жесткости. (б) Случай слабых длинных вертикальных связей (не показаны), структура II. (в) Случай слабых коротких вертикальных связей (не показаны), структура III.

Положительное значение коэффициента нелинейной жесткости означает, что межчастичные взаимодействия демонстрируют жесткий тип нелинейности. Для выбранного полиномиального потенциала связь между частицами не может быть разорвана, если β неотрицательно.

Сразу же отметим, что структура на Рис. 16 (в) эквивалентна показанной на Рис. 1 (а) и, следовательно, можно ожидать, что она имеет отрицательный коэффициент Пуассона.

Все три структуры анизотропны, но степень анизотропии структуры II минимальна, в то время как анизотропия структур I и III велика. Слабые связи не могут быть отброшены, поскольку без них структуры II и III превратились бы в механизмы, то есть были бы линейно неустойчивы и могли бы деформироваться сколь угодно малыми внешними силами.

Примитивная трансляционная ячейка для всех трех структур имеет форму ромба и содержит две частицы, каждая из которых имеет две степени свободы – компоненты вектора перемещения в плоскости (x,y). Расчетная ячейка включала 32x32 примитивных ячеек. Использовались периодические граничные условия. Уравнения движения частиц решались численно методом Штормера шестого порядка точности.

Константы упругости рассчитывались по хорошо известной методике, путем приложения малых деформаций (порядка 10^{-4}) и расчета возникающих при этом напряжений. Далее использовался закон Гука для плоского напряженного состояния.

2.2. Коэффициенты Пуассона

Коэффициент Пуассона является важной характеристикой упругих свойств материала, широко используемой в инженерных расчетах. Как отмечалось во введении, коэффициент Пуассона, определяется как отношение поперечной деформации ε_T к продольной ε_L, взятое со знаком минус, т.е. по формуле (1), из опыта на одноосное нагружение, когда напряженное состояние описывается тензором напряжений с единственной ненулевой диагональной компонентой.

Как отмечалось, все три исследуемые структуры анизотропны (точнее сказать, ортотропны), поэтому были рассчитаны коэффициенты Пуассона из опытов на малое растяжение вдоль оси *x* (ν_{xy}) и вдоль оси *y* (ν_{yx}). Получены следующие результаты:

структура I: $\nu_{xy} = 0.003$, $\nu_{yx} = 0.013$;

структура II: $\nu_{xy} = 0.851$, $\nu_{yx} = 0.858$;

структура III: $\nu_{xy} = -0.454$, $\nu_{yx} = -0.714$.

Отмечается, что структура I имеет коэффициент Пуассона близкий к нулю при приложении растягивающего напряжения как вдоль *x*, так и вдоль *y*. Известен природный материал с коэффициентом Пуассона близким к нулю, это – пробка. Это означает, что при осевом нагружении пробки ее поперечный размер практически не меняется. Структура II показывает большие положительные значения коэффициента Пуассона и высокую степень изотропии, то есть близость коэффициентов Пуассона, рассчитанных из опытов на растяжение вдоль разных координатных осей. Структура III является ауксетиком, поскольку коэффициент Пуассона при растяжении вдоль x и вдоль y отрицателен.

2.3. Плотности фононных состояний

Информация о спектрах фононных колебаний важна для изучения ДБ, поскольку частоты ДБ должны лежать вне спектра малоамплитудных колебаний. При наличии щели (запрещенной зоны) в спектре, структура может допускать существование щелевых ДБ, имеющих частоты в щели. В отсутствии щели в спектре, можно рассчитывать лишь на существование ДБ с частотами выше спектра.

На рис. 17, сверху вниз показаны плотности состояний малоамплитудных (фононных) колебаний структур с I по III, соответственно. Как и ожидалось, спектры всех трех структур являются бесщелевыми, и это означает, что данные структуры могут поддерживать только ДБ с частотами выше фононного спектра. Жесткий тип нелинейности межчастичных взаимодействий, обеспеченный выбором положительного значения параметра β в потенциале (2), должен привести к росту частоты локализованных колебаний с амплитудой и их выход выше фононного спектра. Верхняя граница спектра структуры I соответствует отметке 0,356, а для структур II и III она совпадает при значении 0,276.

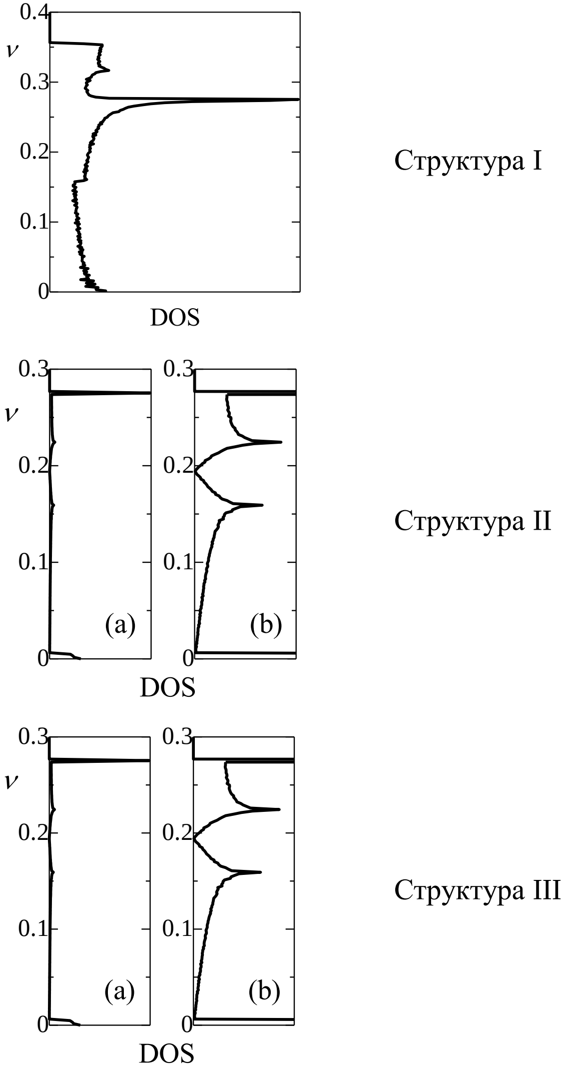


Рис. 17. Плотности состояний малоамплитудных колебаний решетки I (сверху), II (в центре) и III (снизу). На (а) и (б) показано одно и то же, но с выбором различных масштабов по оси абсцисс, чтобы показать детали спектров между двумя острыми пиками, расположенными вблизи нижней и верхней границ спектров.

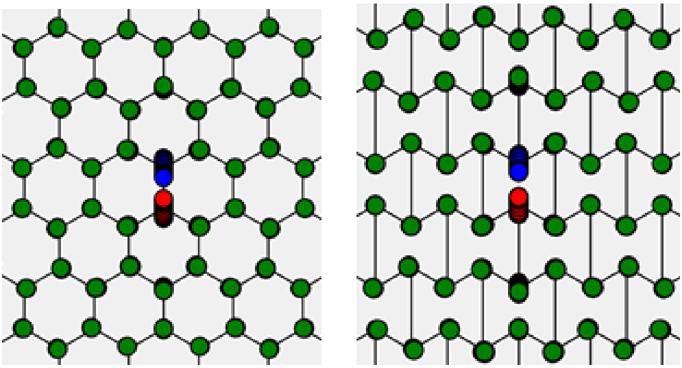
Ввиду того, что в структурах II и III имеются связи с сильно различающейся линейной жесткостью, в фононных спектрах их колебаний имеется два резких пика вблизи верхнего и нижнего края спектра. Для того, чтобы увидеть детали плотности фононных состояний во всем интервале частот, для этих структур спектр представлен на (a) и (b) с выбором разных масштабах для оси абсцисс.

Заметим попутно, что спектры были рассчитаны для линеаризованных уравнений движения частиц, то есть в предположении малости их перемещений по сравнению с межчастичным расстоянием, равным 1. Поэтому величина коэффициента нелинейной жесткости β никак не сказалась на результате расчета.

2.4. Дискретные бризеры

Во всех трех структурах удалось возбудить ДБ (см. рис. 18). В качестве начальных условий использовалось отклонение пары частиц, соединенных вертикальной связью, в противоположные стороны в направлении оси *y*.

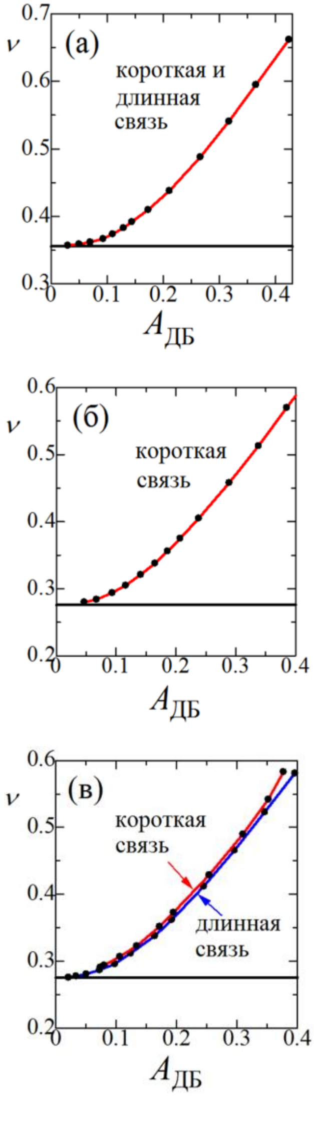
Начальные скорости всех частиц были равны нулю. Успех столь простых начальных условий связан с тем, что ДБ сильно локализованы на паре атомов, как это видно из рис. 18 (а) и (б), где приводятся примеры ДБ в структурах II и III, соответственно. Видно, что колебания с большой амплитудой совершают только две частицы, двигаясь в противофазе в направлении оси *y*, так что простые начальные условия оказались близкими к существующей колебательной моде. Амплитуды колебаний других частиц малы и экспоненциально быстро убывают с удалением от центра ДБ. Более того, оказалось, что в структурах I и III, ДБ можно запустить как на коротких, так и на длинных вертикальных связях.



(а) (б)

Рис. 18. Стробоскопическая картина движения атомов в окрестности ДБ возбужденных в структуре (а) II и (б) III.

На рис. 19 показаны зависимости частоты от амплитуды для всех найденных ДБ. Отметим, что на (а) и (в) даны результаты для ДБ, возбужденных как на длинной, так и на короткой связи, а на (б) только для ДБ на короткой связи, так как на длинной связи в структуре II возбудить ДБ не удалось. Отсутствие ДБ на длинной связи в структуре II объясняется весьма малой жесткостью этих связей, практически их отсутствием. С другой стороны, структура III поддерживает ДБ на короткой связи, которая также имеет весьма малую жесткость. В данном случае ДБ существует благодаря наличию жесткости, созданной связями зигзаг.



Структура I

Структура II

Структура III

Рис. 19. Зависимости частоты ДБ от амплитуды в структурах (а) I, (б) II и (в) III. Верхняя граница спектра показана горизонтальной линией.

Горизонтальные линии на рис. 19 показывают верхнюю границу фононного спектра. Видно, что во всех случаях частота ДБ растет с амплитудой, отщепляясь от верхней границы спектра. Рост частоты ДБ с амплитудой говорит о жестком типе нелинейности данной колебательной моды. Такой результат и ожидался при выборе положительного значения коэффициента β в потенциале (2).

Итак, все три рассмотренные структуры имеют существенно различающиеся значения коэффициентов Пуассона, но это не сказалось на возможности существования в них ДБ. Данный факт лишний раз свидетельствует в пользу тезиса о том, что дискретность и нелинейность среды, являясь необходимыми условиями существования ДБ, часто оказываются и достаточными условиями.

2.5. Выводы по главе

На примере двумерной гексагональной решетки точечных масс с кубически нелинейными связями исследована зависимость между значением коэффициентов Пуассона и возможностью существования ДБ. Рассмотрены три варианта параметров модели, обеспечивающих практически нулевой, положительный, либо отрицательный коэффициент Пуассона (структуры I, II и III, соответственно). Несмотря на значительные различия в упругих свойствах рассмотренных структур, все они поддерживают существование дискретных бризеров одного и того же типа. Частоты ДБ растут с амплитудой, отщепляясь от верхнего края фононного спектра. Единственной отличительной особенностью оказалось то, что в структурах I и III ДБ существуют как на длинной, так и на короткой вертикальных связях, а в структуре II – только на коротких.

Таким образом, показано, что в двумерной решетке с полиномиальным потенциалом взаимодействия с кубической нелинейностью, можно возбудить ДБ с высокой степенью пространственной локализации.

Глава 3. Влияние одномерных бушей на упругие свойства двумерной решетки

В настоящей главе описано влияния нелинейных колебательных мод (одномерных бушей) на упругие свойства изотропной двумерной решетки точечных частиц, взаимодействия между которыми определяется посредством парных полиномиальных потенциалов с кубической нелинейностью. Известно, что материалы обычно демонстрируют нелинейный тип поведения при приложении достаточно больших деформаций. В данном случае речь идет об исследовании влияния нелинейных коротковолновых колебательных мод на упругие свойства материалов в контексте явления ауксетизма.

3.1. Описание модели и двух исследованных делокализованных колебательных мод

На рис.1 показана структура гексагональной двумерной решетки точечных масс (показаны желтыми точками) где каждая частица взаимодействует с первыми и третьими соседями. Взаимодействие вторых соседей не учитывалось, чтобы избежать излишнего усложнения модели. Взаимодействие между частицами описывается посредством полиномиального потенциала β-Ферми-Паста-Улама (2) (см. раздел 2.1).

Опишем выбор параметров потенциала взаимодействия. Без потери общности мы принимаем межчастичное расстояние равным единице и, следовательно, L=1 для ближайших взаимодействий и

L=2 для взаимодействий с третьими соседями. Данный выбор основан на возможности использования произвольной единицы измерения расстояния и, следовательно, общность рассмотрения от этого не снижается. Для коэффициента линейной жесткости мы всегда принимаем k=1 для обоих типов связей. Для одной из связей, например, между ближайшими соседями, этого всегда можно добиться выбором единицы измерения энергии. Линейная жесткость второй связи является параметром модели, и она выбрана равной единице из соображений удобства и простоты модели.

Нами рассмотрены случаи линейного взаимодействия при β=0 и нелинейного взаимодействия с β=10 для обоих типов связей. Следует принимать во внимание что, что неотрицательное β гарантирует невозможность разрыва связей между частицами.

Масса частицы устанавливается равной единице, что всегда может быть достигнуто путем надлежащего выбора единицы измерения времени.

В зависимости от решаемой задачи использовались разные размеры расчетных ячеек. При расчете спектра малоамплитудных колебаний достаточно использовать одну трансляционную ячейку, содержащую две частицы и, следовательно, четыре степени свободы. Расчетный блок из 18 частиц размером 3x3 элементарные ячейки использовался для расчета упругих констант как функции амплитуды колебательной моды A. Во всех случаях применялись периодические граничные условия.

Производилось численное интегрирование ньютоновских уравнений движения частиц методом Штромера шестого порядка точности с шагом по времени $\tau=10^{-3}$.

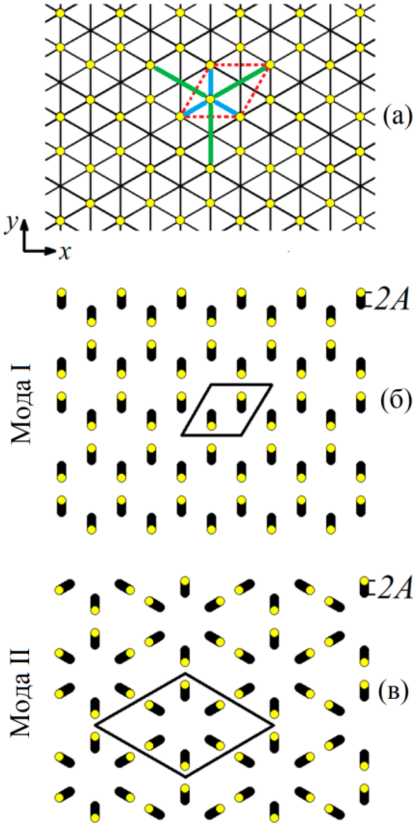


Рис. 20. (а) Структура рассматриваемой двумерной решетки. Точечные массы, взаимодействующие посредством парного β-ФПУ потенциала, расположенные в узлах гексагональной решетки, показаны желтыми точками. Примитивная трансляционная ячейка, обозначенная красными пунктирными линиями, включает в себя две частицы. Каждая частица взаимодействует с тремя ближайшими соседями (синие линии) и с тремя третьими соседями (зеленые линии). (б,в) Две колебательные моды (одномерные буши), представленные стробоскопической картиной движения частиц. Все частицы совершают колебания с амплитудой A. Моды имеют пространственную группу симметрии (б) Cmm2 и (в) P6mm. Обозначены примитивные трансляционные ячейки для мод.

В ходе интегрирования, полная энергия системы была постоянной величиной в пределах относительной погрешности порядка 10^{-7}.

3.2. Методика расчета констант упругости

Опишем детали расчета упругих констант решетки с возбужденной в ней колебательной модой. Колебательные моды (одномерные буши) амплитуды *A*, представленные на Рис. 20 (б,в), могут быть легко возбуждены путем задания начальных векторов смещений длиной *A* для всех частиц, в соответствии с симметрией моды. Начальные скорости частиц устанавливаются равными нулю. Когда колебательная мода возбуждена, усредненная за период кинетическая энергия частицы, $\langle K\rangle$, больше нуля и формально можно вычислить температуру *d*-мерной системы (в нашем случае *d*=2) следующим образом

$$T = \frac{2}{d}\frac{\langle K\rangle}{k_B}, \qquad (3)$$

где k_B = 8,617 × 10^{-5} эВ $К^{-1}$ - постоянная Больцмана. С другой стороны, термин температура обычно используется для описания систем близких к тепловому равновесию, когда энергия равномерно распределяется между всеми колебательными модами. В нашем случае возбуждена только одна колебательная мода и более уместно говорить не о температуре, а о средней за период полной энергии частиц $\langle e\rangle$.

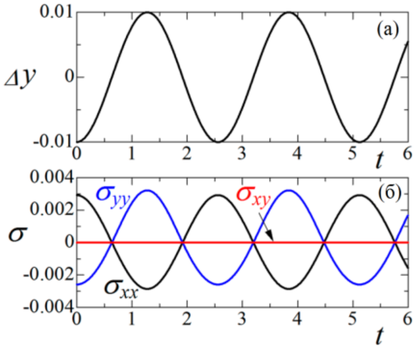


Рис. 21. Результаты для Моды I с амплитудой A=0,01 в случае β=10. Как функции времени показаны: (а) y-перемещение одной из частиц, (б) напряжения σ_{xx}, σ_{yy} и σ_{xy}. Амплитуда моды мала по сравнению с параметром решетки, равным 1, поэтому эффекты нелинейности не сказываются.

Приведем примеры динамики Моды I в линейном и нелинейном режимах. На рис. 21 показаны (а) зависимость y-перемещения одной из частиц и (б) значений напряжений от времени для Моды I с амплитудой A=0,01 в нелинейной решетке с β=10. Как уже упоминалось ранее расстояние между частицами равно 1, так что амплитуда моды весьма мала по сравнению с межчастичным расстоянием. Для такой малой амплитуды эффект нелинейности слаб и частицы совершают почти синусоидальные колебания вдоль оси y [Рис. 21 (а)].

Из периода колебаний T=2,56 усл. ед. была рассчитана частота колебаний ω=1/T=0.390 усл. ед.

Из Рис. 21 (б) видно, что компоненты напряжений σ_{xx} и σ_{yy} осциллируют практически по закону синуса с той же частотой, что и перемещения, и их значения достигают нуля при прохождении частицами равновесных положений, то есть при Δy=0. В силу симметрии Моды I значение сдвигающего напряжения $\sigma_{xy}\equiv 0$.

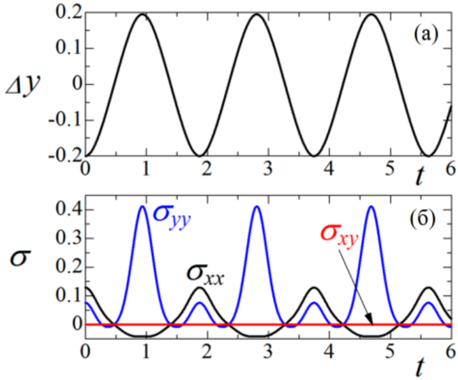


Рис. 22. То же, что и на Рис. 21, но для большей амплитуды Моды I, A=0,2, когда начинают существенно сказываться эффекты нелинейности

Поучительно сопоставить результаты, полученные для малой амплитуды колебательной моды с результатами для большой амплитудой, чтобы увидеть эффект кубической нелинейности в межчастичных взаимодействиях. Результаты, полученные при A=0,2, что сравнимо с расстоянием между частицами, приведены на Рис. 22, и они резко отличаются от тех, которые показаны на Рис. 21. Во-первых, заметим, что для большого значения амплитуды A частота колебаний возросла и достигла ω=0,533. Это ожидаемый результат, учитывая жесткий тип нелинейности межчастичных связей, обусловленным положительностью параметра нелинейности β. Функция $\Delta y\,(t)$ на Рис. 22 (а) показывает сильный ангармонизм (отклонение от синусоиды). Функции $\sigma_{xx}\,(t)$ и $\sigma_{yy}\,(t)$ на Рис. 22 (б) являются более сложными, чем в случае малой амплитуды моды. Обратим внимание на то, что решетка с большой амплитудой колебательной Моды I заметно анизотропна, поскольку максимальные и минимальные значения напряжений σ_{xx} и σ_{yy} сильно отличаются, в то время как они очень близки на Рис. 21 (б) для малой амплитуды моды.

Средне-интегральные за период значения напряжений могут быть рассчитаны как

$$\langle\sigma_{ij}\rangle=\frac{1}{T}\int_0^T \sigma_{ij}\,(t)\,dt\,. \tag{4}$$

Для случая, показанного на Рис. 21 (б), значения $\langle\sigma_{xx}\rangle$ = = 1.99×10^{-5}; $\langle\sigma_{yy}\rangle = 1.53 \times 10^{-4}$. Средние напряжения $\langle\sigma_{yy}\rangle$ имеют на порядок большее значение чем $\langle\sigma_{xx}\rangle$ ввиду того что в случае Моды I частицы совершают колебания вдоль направления y. Ввиду слабой нелинейности, максимальные значения напряжений превосходят соответствующие средние значения на два порядка.

Усредненные значения компонентов напряжения для случая, показанного на Рис. 22 (б), являются $\langle\sigma_{xx}\rangle$ = 0,0181 и $\langle\sigma_{yy}\rangle$ = 0,100. В данном случае, виду заметной нелинейности, максимальные значения напряжений превосходят соответствующие средние значения только на один порядок.

Компоненты тензора деформаций решетки не изменяются со временем, поэтому закон Гука для случая плоского напряженного состояния берем в форме

$$\begin{bmatrix} \langle\sigma_{xx}\rangle \\ \langle\sigma_{yy}\rangle \\ \langle\sigma_{xy}\rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} \\ C_{31} & C_{32} & C_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{xy} \end{bmatrix}. \qquad (5)$$

Для расчета значений упругих констант использовался известный метод, широко используемый в практике молекулярно-динамического моделирования. Производился расчет средних за период значений компонент напряжений $\langle\sigma_{ij}\rangle$ после задания поочередно каждой из компонент деформации расчетной ячейки малого приращения δ, как с положительным, так и с отрицательным знаком. То есть средние значения напряжений вычислялись для следующих шести деформированных состояний:

$$(\varepsilon_{xx}, \varepsilon_{yy}, \varepsilon_{xy}) = (\pm\delta, 0, 0),$$

$$(\varepsilon_{xx}, \varepsilon_{yy}, \varepsilon_{xy}) = (0, \pm\delta, 0),$$

$$(\varepsilon_{xx}, \varepsilon_{yy}, \varepsilon_{xy}) = (0, 0, \pm\delta).$$

Затем из (5) находились коэффициенты жесткости C_{ij} и усреднялись для положительных и отрицательных значений δ. В наших расчетах был получен практически одинаковый результат для δ в интервале $10^{-3} \le \delta \le 10^{-7}$. В итоге мы использовали значение $\delta = 10^{-7}$ для минимизации эффекта анизотропии, наведенного вариацией деформации решетки.

Наконец, зная константы жесткости C_{ij}, вычислялись инженерные константы упругости следующим образом.

Коэффициенты Пуассона

$$\nu_{xy}=C_{21}/C_{22},\ \nu_{yx}=C_{12}/C_{11}, \tag{6}$$

модули Юнга

$$E_x=C_{11}(1-\nu_{xy}\nu_{yx}),\ E_y=C_{22}(1-\nu_{xy}\nu_{yx}), \tag{7}$$

и модуль сдвига

$$G_{xy}=C_{33}. \tag{8}$$

Для случая малой амплитуды Моды I, показанного на Рис. 21, были найдены следующие значения инженерных констант упругости:

$$E_x = 0{,}898,\ E_y = 0{,}901,\ \nu_{xy}= 0{,}378,\ \nu_{yx} = 0{,}379,\ G_{xy} = 0{,}325.$$

Вообще говоря, Мода I разрушает изотропию решетки, но для малых амплитуд A, как в рассмотренном примере, имеем $E_x \approx E_y = E$, $\nu_{xy} \approx \nu_{yx} = \nu$, и $G_{xy} \approx E/2(1 + \nu)$, как должно быть для упруго-изотропного тела.

Для случая большой амплитуды Моды I, показанного на Рис. 22, были найдены следующие значения инженерных констант упругости:

$E_x = 1{,}52$, $E_y = 2{,}84$, $\nu_{xy} = 0{,}162$, $\nu_{yx} = 0{,}362$, и $G_{xy} = 1{,}01$. В данном случае модули Юнга и коэффициенты Пуассона сильно различаются для различных направлений, что свидетельствует о сильной анизотропии решетки, наведенной Модой I.

3.3. Спектр малоамплитудных колебаний решетки

Расчет спектров проводился с использованием самостоятельно разработанного программного обеспечения. Знание спектра позволяет определиться с максимальной частотой колебаний, поддерживаемых рассматриваемой системой. Кроме того, при изучении нелинейных колебаний важно знать структуру спектра – наличие или отсутствие запрещенных зон (щелей).

Для изучаемой изотропной гексагональной решетки [см. Рис. 20 (а)], несмотря на то, что одна трансляционная ячейка содержит два атома, теоретически доказано отсутствие щели в спектре малоамплитудных колебаний, подобно тому, как нет щели в спектре графена [53], имеющего ту же гексагональную решетку (но, разумеется, другие потенциалы взаимодействия).

Проведенные нами расчеты полностью подтвердили данный теоретический вывод.

Итак, исследуемая решетка имеет бесщелевой спектр фононных колебаний с максимальной частотой ω=0.390 усл. ед., что в точности соответствует частоте колебания Моды I в пределе малых амплитуд [см. параграф 3.2 и текст, связанный с Рис. 21].

3.4. Зависимость констант упругости от амплитуды одномерных бушей

В данном разделе будет исследовано влияние амплитуды колебательных Мод I и II на их частоты и энергии, а также на упругие характеристики исследуемой гексагональной решетки [см. Рис. 20 (а)]. Последовательно будут рассмотрены случаи линейных связей, когда в выражении (2) полагается β=0 и случай нелинейных связей для β=10. Нелинейность, заложенная в потенциал межчастичного взаимодействия, принято называть физической нелинейностью. Уже здесь отметим, что даже в случае линейных связей, при больших амплитудах колебания Мод I и II, на результаты будет влиять так называемая геометрическая нелинейность, связанная со значительным изменением длин связей и углов между ними. Подобные эффекты геометрической нелинейности отмечались и ранее [94,95].

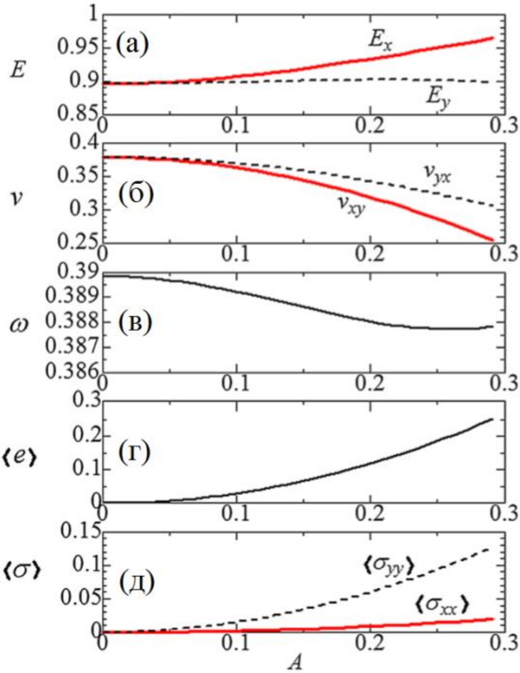


Рис. 23. Результаты для Моды I в случае линейных связей, β=0. Как функции амплитуды моды A показаны: (а) модули Юнга E_x, E_y; (б) коэффициенты Пуассона ν_{xy}, ν_{yx}; (в) частота моды ω; (г) осредненная за период полная (кинетическая плюс потенциальная) энергия в расчете на частицу $\langle e \rangle$; (д) осредненные за период напряжения $<\sigma_{xx}>$, $<\sigma_{yy}>$ (σ_{xy}=0).

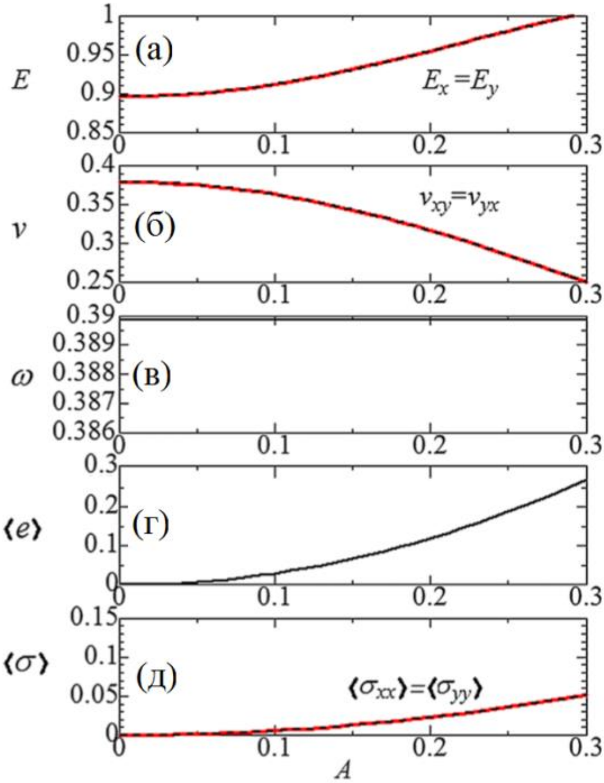


Рис. 24. То же, что и на Рис. 23, но для Моды II.

Молекулярно-динамические расчеты также проводились с использованием самостоятельно разработанного программного обеспечения.

3.4.1. Случай линейных связей

Нелишне будет напомнить, что рассматриваемые колебательные Моды I и II определены только симметрией решетки и поэтому, они являются точными решениями уравнений движения частиц, независимо от используемого типа потенциала взаимодействия и независимо от амплитуды мод. С другой стороны, симметрийное рассмотрение не гарантирует устойчивого движения частиц в данных модах. Устойчивость Мод I и II может зависеть как от потенциала взаимодействия между частицами, так и от амплитуды мод.

Итак, прежде всего, выясним влияние одной только геометрической нелинейности на свойства решетки с возбужденной в ней колебательной модой, выключив физическую линейность, полагая $\beta=0$.

На Рис. 23 и Рис. 24 приводятся результаты расчетов для Моды I и Моды II, соответственно, в случае физически линейных связей, $\beta=0$. В зависимости от амплитуды моды A рассчитаны: (а) модули Юнга E_x, E_y; (б) коэффициенты Пуассона ν_{xy}, ν_{yx}; (в) частота моды ω; (г) осредненная за период полная (кинетическая плюс потенциальная) энергия в расчете на частицу $\langle e \rangle$; (д) осредненные за период напряжения $<\sigma_{xx}>$, $<\sigma_{yy}>$ ($\sigma_{xy}=0$). Отметим, что, как уже говорилось, несмотря на линейность межчастичного взаимодействия, система проявляет нелинейные свойства за счет изменения геометрии при больших амплитудах колебательных мод.

Одним из важных отличий между колебательными Модами I и II является то, что первая из них разрушает упругую анизотропию решетки, а вторая нет. Обе моды неустойчивы при не очень малых амплитудах A и результаты, представленные на рисунках для больших A были получены на отрезках времени до развития неустойчивости. Видно, что на графиках даны результаты только для А $\leq$ 0,3, так как для больших амплитуд неустойчивость колебательных мод развивается слишком быстро для того, чтобы успеть снять характеристики мод. Развитие неустойчивости будет обсуждаться более подробно в следующей главе. Как видно из Рис. 23 и 24, с увеличением A решетка становится более жесткой, поскольку увеличиваются модули Юнга [на Рис. 23 (а) возрастает только E_x]. С другой стороны, коэффициенты Пуассона уменьшается с ростом A. На Рис. 23 (в) можно наблюдать слабую зависимость частоты Моды I от амплитуды. Полная энергия решетки возрастает с амплитудой почти квадратично, $\langle e \rangle \sim A^2$. Также отметим, что решетка с возбужденными в ней колебательными модами находится под действием средних во времени сжимающих напряжений, о чем свидетельствуют положительные значения $<\sigma_{xx}>$ и $<\sigma_{yy}>$.

3.4.2. Случай нелинейных связей

Теперь положим β=10 в (2) и повторим расчет упругих свойств решетки с возбужденными колебательными модами. На Рис. 25 и Рис. 26 представлены те же результаты, что и на Рис. 23 и Рис. 24, но для случая нелинейных связей, β=10. В данном случае эффекты нелинейности проявляются значительно ярче, что приводит к большим изменениям параметров системы с увеличением амплитуды колебательных мод, A.

Действительно, модули Юнга увеличиваются, а коэффициенты Пуассона уменьшаются с ростом амплитуды намного быстрее на Рис. 25 и Рис. 26, по сравнению со случаем линейных связей, представленном на Рис. 23 и Рис. 24. Частота колебательных мод монотонно увеличивается на Рис. 25 и Рис. 26. Полная энергия системы в расчете на частицу увеличивается быстрее, чем $\langle e\rangle \sim A^2$. Сжимающие напряжения также увеличиваются с амплитудой быстрее в случае ангармонических связей.

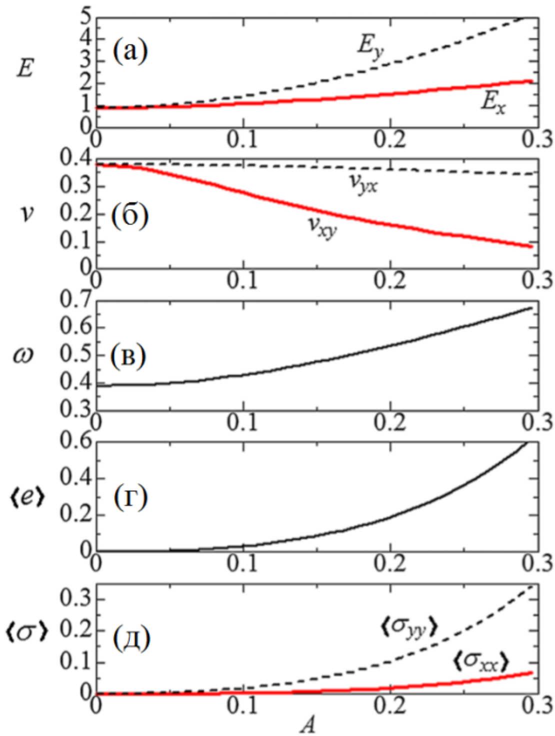


Рис. 25. То же, что и на Рис. 23,

но для случая нелинейных связей, β=10.

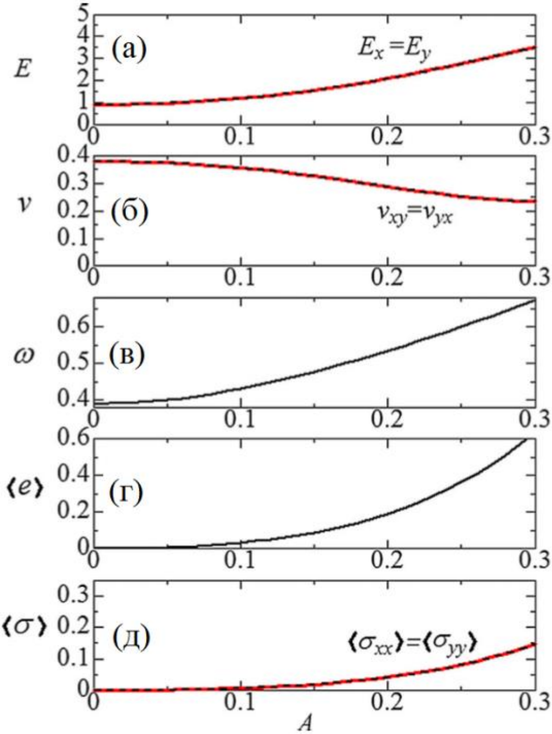


Рис. 26. То же, что и на рис. 23, но для Моды II и для случая нелинейных связей, β=10.

Однако ни в случае линейных связей, ни в случае связей с жесткой кубической нелинейностью, коэффициенты Пуассона, уменьшаясь с амплитудой мод, не достигли отрицательных значений в исследованном диапазоне амплитуд A<0,3. Более высокие амплитуды не рассматривались из-за весьма быстрого развития неустойчивости данных мод при A>0,3.

3.5. Совместное влияние возбуждения одномерных бушей и отрицательного гидростатического давления

Как отмечалось, с ростом амплитуд Мод I и II наблюдается снижение значений коэффициентов Пуассона (см. рисунки с Рис. 23 по Рис. 26), но они не достигают отрицательных значений в пределах исследованных амплитуд A<0,3.

Войцеховским было доказано, что отрицательное гидростатическое давление достаточной величины превращает любое изотропное упругое тело в ауксетик в пределах области его термодинамической устойчивости [62].

Представляется интересным изучить совместный эффект влияния нелинейной колебательной моды и всестороннего растяжения решетки (т.е. отрицательного гидростатического давления) на коэффициенты Пуассона. Результаты таких вычислений приведены на Рис. 27. Величина равноосной деформации растяжения $\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy}$ указана в процентах для каждой кривой. Рассмотрены случаи (а) Мода I, β=0, (б) Мода II, β =0, (в) Мода I, β =10, и (г) Мода II, β =10. На (а) и (в) сплошные (пунктирные) кривые показывают ν_{xy} (ν_{yx}). На (б) и (г) изотропия решетки сохраняется и $\nu_{xy} = \nu_{yx}$. Отметим, что на всех четырех панелях Рис. 27 видны отрицательные значения коэффициентов Пуассона для достаточно больших A и достаточно большой равноосной растягивающей деформации.

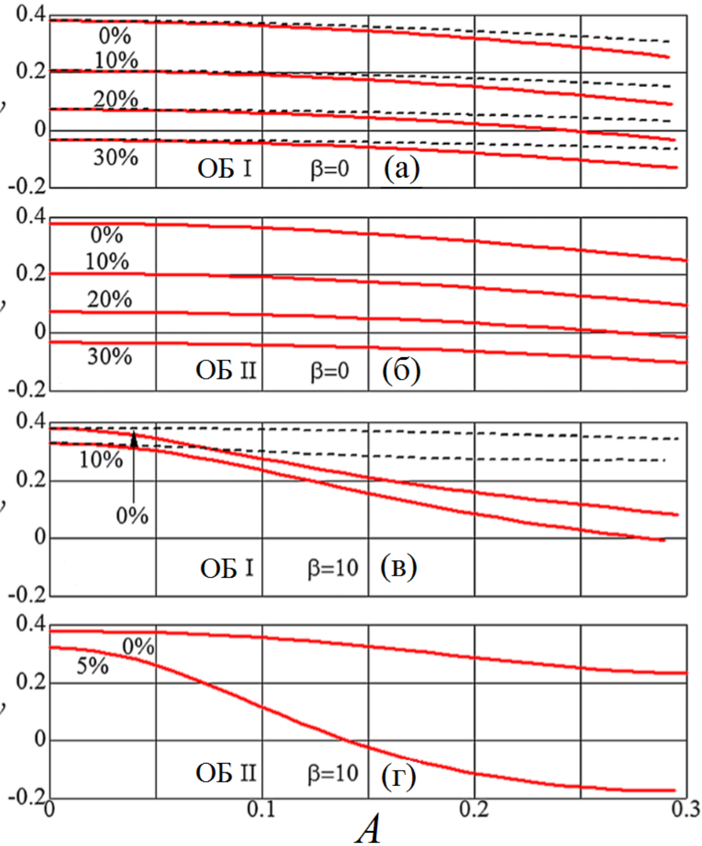


Рис. 27. Комбинированный эффект амплитуды Мод I и II, *A*, и равноосного растяжения решетки $\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy}$ на коэффициенты Пуассона (величина деформации указана для каждой кривой в процентах). (а) Мода I, β=0, (б) Мода II, β =0, (в) Мода I, β =10, и (г) Мода II, β =10. На (а) и (в) сплошные (пунктирные) кривые показывают ν_{xy} (ν_{yx}). На (б) и (г) $\nu_{xy} = \nu_{yx}$.

Можно заключить, что одновременное действие нелинейных колебательных мод и равноосной растягивающей деформации могут превратить рассматриваемую решетку в ауксетик.

3.6. Выводы по главе

Методом молекулярной динамики для гексагональной решетки с кубически нелинейными связями изучено влияние двух колебательных мод большой амплитуды (одномерных бушей) на константы упругости. Мода I, в отличие от Моды II, разрушает изотропию решетки. Обе моды проявляют модуляционную неустойчивость, которая развивается тем быстрее, чем больше амплитуда моды.

Изучено влияние только геометрической нелинейности (когда межчастичные связи подчиняются закону Гука), а также совместное влияние геометрической и физической нелинейности (когда учитывается кубическая нелинейность в межчастичных взаимодействиях).

Установлено, что с ростом амплитуды мод модули Юнга возрастают, а коэффициенты Пуассона уменьшаются, причем, эффекты нелинейности проявляются значительно сильнее в случае нелинейных межчастичных связей, что не противоречит здравому смыслу. Тем не менее, в пределах исследованного диапазона амплитуд мод $A<0,3$, коэффициенты Пуассона не достигают отрицательных значений. При $A>0,3$ развитие модуляционной неустойчивости мод происходит слишком быстро (в течение нескольких колебательных периодов).

Исследовано совместное влияние колебательных мод и отрицательного гидростатического давления на константы упругости гексагональной решетки. Показано, что для достаточно больших значений амплитуды мод A и достаточно большого отрицательного гидростатического давления решетка становится частичным или полным ауксетиком, то есть один или оба коэффициента Пуассона становятся отрицательными (см. Рис. 27).

Таким образом, обнаружен новый источник ауксетизма, состоящий в возбуждении в нелинейной (геометрически или геометрически и физически) решетке колебательных мод большой амплитуды (одномерных бушей) и приложении достаточно большого отрицательного гидростатического давления (т.е. всестороннего растяжения).

Глава 4. Модуляционная неустойчивость одномерных бушей

В данной главе подробно анализируется явление модуляционной неустойчивости, упоминавшееся в главе 3, для всех четырех одномерных бушей, поддерживаемых двумерной гексагональной решеткой.

4.1. Описание модели

Исследуется та же гексагональная решетка, что и в главе 3 [см. Рис. 20 (а)]. Единичные точечные массы (частицы) расположены в узлах решетки. Расстояние между ближайшими частицами были установлены равными единице. Примитивная трансляционная ячейка решетки содержит две частицы и определяется векторами трансляции $\left(\sqrt{3}, 0\right)$ и $\left(\sqrt{3}/2, 3/2\right)$, как показано красными пунктирными линиями на Рис. 20 (а). Каждая частица имеет две степени свободы, которые являются компонентами вектора перемещения в плоскости xy.

Каждая частица взаимодействует с тремя ближайшими частицами и с тремя третьими соседями. Параметры потенциала (2) следующие: L=1 для ближайших взаимодействий и L=2 для взаимодействий с третьими соседями. Для коэффициента линейной жесткости принимаем k=1 для обоих типов связей. Коэффициент при кубическом слагаемом для обоих типов связей берется β=10 (жесткий тип нелинейности).

Для того, чтобы изучить влияние размера расчетной ячейки на результат, вычисления проводились для ячеек, содержащих 30×30 и 60×60 примитивных трансляционных ячеек (1800 и 7200 частиц, соответственно). В обоих направлениях использовались периодические граничные условия. Шаг по времени при численном интегрировании уравнений движения частиц был равен 0,004 безразмерных единиц времени, а продолжительность численных экспериментов составляла 6000 безразмерных единиц времени, что оказалось достаточным для наблюдения изучаемых явлений. Тепловые флуктуации в систему не вводились.

Колебательные моды (одномерные буши) возбуждались путем задания частицам начальных перемещений и нулевых начальных скоростей частицам решетки в соответствии с симметрией моды (более подробная информация приведена ниже).

Степень пространственной локализации энергии в двумерной решетке можно охарактеризовать безразмерным параметром L, который рассчитывался следующим образом

$$L=\frac{\sum_{n=1}^{N} e_n^2}{\left(\sum_{n=1}^{N} e_n\right)^2} . \qquad (9)$$

Здесь e_n – это полная (кинетическая плюс потенциальная) энергия n-й частицы, а N – число частиц в системе. Потенциальная энергия частицы рассчитывается путем суммирования половин энергий ее связи с шестью частицами (трех ближайших соседей и трех третьих соседей). Как следует из выражения (9), если вся энергия системы локализована на одной частице, т.е. e_n=0 для всех n, за исключением одной частицы, то $L = 1$. Если энергия равномерно распределяется между всеми частицами, то есть e_n=e для всех n, то L=1/N, что близко к нулю для большого числа частиц N.

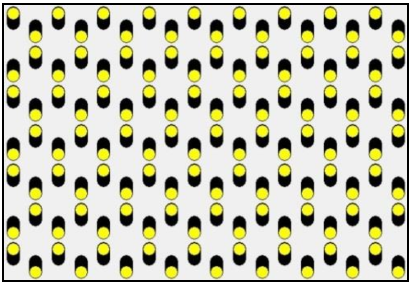
4.2. Результаты моделирования

4.2.1. Нелинейные колебательные моды (одномерные буши)

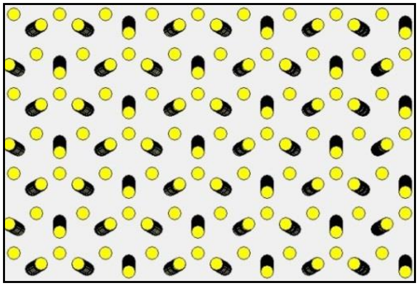
Чечин и др. [12] с помощью теоретико-группового подхода нашли четыре одномерных буша в гексагональной решетке, которые являются точными решениями уравнений движения частиц, независимо от типа взаимодействия между частицами и от амплитуды моды. Стробоскопические картины движения частиц в пределах одного полупериода для этих мод представлены на Рис. 28. Такие моды легко возбудить путем задания начальных смещений частицам согласно симметрии моды, при нулевых начальных скоростях. В модах I и III все частицы колеблются с одинаковой амплитудой.

В моде II половина частиц неподвижна, а в моде IV каждая четвертая частица неподвижна, в то время как остальные частицы колеблются с одинаковой амплитудой. Все моды характеризуются одним параметром, а именно амплитудой колебания движущихся частиц. По этой причине эти буши являются одномерными.

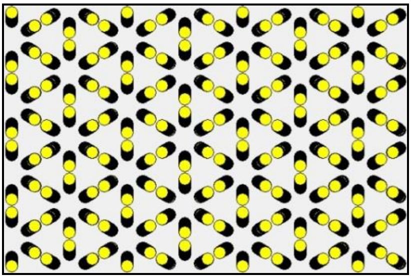
Мода I разрушает изотропию гексагональной решетки, в то время как три остальные моды сохраняют ее.



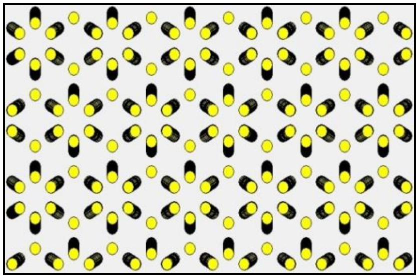
Мода I



Мода II



Мода III



Мода IV

Рис. 28. Четыре делокализованные коротковолновые колебательные моды (одномерные буши) в гексагональной решетке, найденные в работе [12] с помощью теоретико-группового подхода. Показаны стробоскопические картины движения частиц за один полупериод колебания.

На Рис. 29 показаны зависимости частоты от амплитуды колебаний, рассчитанные для четырех мод, показанных на Рис. 28. Моды I и III имеют почти идентичные зависимости частоты амплитуды и самые высокие частоты колебаний. Мода II имеет самую низкую частоту, в то время как мода IV имеет промежуточные значения частот. Все четыре моды демонстрируют жесткий тип нелинейности, т.е. их частота возрастает с увеличением амплитуды.

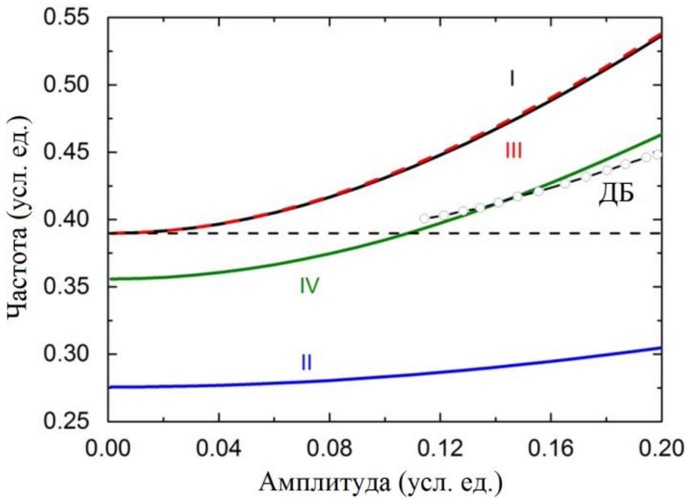


Рис. 29. Зависимость частоты колебаний от амплитуды для четырех делокализованных коротковолновых колебательных мод, представленных на Рис. 28. Горизонтальная пунктирная линия показывает верхний край спектра малоамплитудных колебаний решетки. Кружками, соединенными линией, показана зависимость частоты от амплитуды, вычисленная для ДБ (см. Рис. 30).

Такое поведение связано с выбором положительного значения β в выражении (2) для межчастичного потенциала. Верхний край спектра малоамплитудных колебаний решетки составляет около 0,39 условных единиц (горизонтальная пунктирная линия на Рис. 29). Частоты мод I и III ответвляются от верхнего края спектра, а две других моды (II и IV) имеют частоты в спектре и только при очень больших амплитудах колебаний ($A>0,1$) частота моды IV выходит выше верхней границы спектра.

4.2.2. Дискретный бризер

Исследуемая нелинейная решетка поддерживает существование дискретных бризеров (ДБ). Пример такой пространственно-локализованной моды колебаний приведен на Рис. 30, где показаны (а) стробоскопическая картина движения частиц в окрестности ДБ и (б) зависимость y-компоненты смещения центральной и ближайшей к ней частицы от времени. Две центральные частицы ДБ осциллируют в противофазе с амплитудой 0,184 усл. ед. и частотой 0,44 усл. ед. Обратим внимание на то, что амплитуда ДБ определяется как амплитуда колебаний его центральных частиц. Как видно из Рис. 30, частица соседняя с центральной осциллирует в противофазе с центральной частицей и отношение их амплитуд приблизительно равно 2.

Прочие частицы имеют намного меньшие амплитуды колебаний. Амплитудно-частотная зависимость для ДБ приведена на Рис. 29 (кружки, соединенные линией). Частота ДБ возрастает с увеличением амплитуды и лежит выше спектра малоамплитудных колебаний решетки, что и обеспечивает его существование в течение долгого времени без затухания.

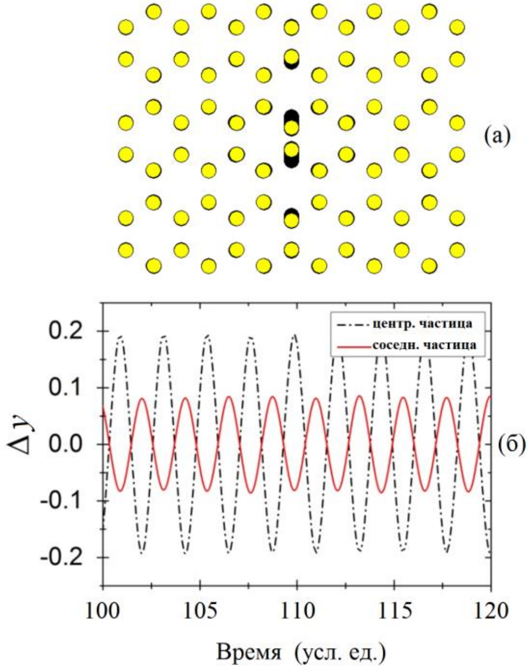


Рис. 30. (а) Стробоскопическая картина движения частиц в окрестности ДБ за один полупериод колебания; (б) y-компоненты смещений центральной частицы ДБ и соседней с ней частицы как функции времени

На Рис. 29 зависимость частоты ДБ от амплитуды дается для амплитуд A>0,11. Это связано с тем, что ДБ в данной работе возбуждались простым отклонением двух частиц, связанных короткой связью, вдоль оси y в противоположных направлениях. Начальные смещения других атомов, а также их скорости были равны нулю. Такие начальные условия довольно далеки от истинной колебательной моды, поэтому часть энергии, данной системе в нулевой момент времени, рассеивается по решетке в виде малоамплитудных тепловых колебаний. Для начальных перемещений меньше определенного порогового значения, ДБ не возбуждается из-за диссипации энергии. Для того, чтобы получить ДБ с амплитудами A<0,11, следует использовать более точные начальные условия.

4.2.3. Неустойчивая динамика колебательных мод

В данном разделе анализируется неустойчивая динамика мод I, II, III и IV, представленных на Рис. 28.

Зависимости параметра локализации L от времени для моды I с различными значениями начальных амплитуд (указаны для каждой кривой) изображены на Рис. 31 для двух размеров расчетной ячейки: (а) 30×30 и (б) 60×60 примитивных трансляционных ячеек. Все кривые ведут себя аналогичным образом. В начальный период времени энергия равномерно распределена между всеми частицами и, следовательно, параметр локализации L близок к нулю. Обратим внимание на то, что начальное возмущение не вводилось в систему. Тем не менее, ошибки округления, а также ошибки численного интегрирования играют роль возмущений. Как видно из Рис. 31, развитие неустойчивости колебательных мод приводит к резкому увеличению параметра локализации, что связано с образованием высокоэнергетических ДБ в системе. Возникшие ДБ очень медленно излучают энергию в виде волн малой амплитуды, что приводит к постепенному уменьшению параметра локализации. В конце концов, система достигает теплового равновесия, когда энергия близка к равнораспределению по всем частицам и параметр локализации колеблется вокруг небольшого значения в силу короткоживущих тепловых флуктуаций. Амплитуда этих колебаний очень мала и не заметна в масштабе Рис. 31.

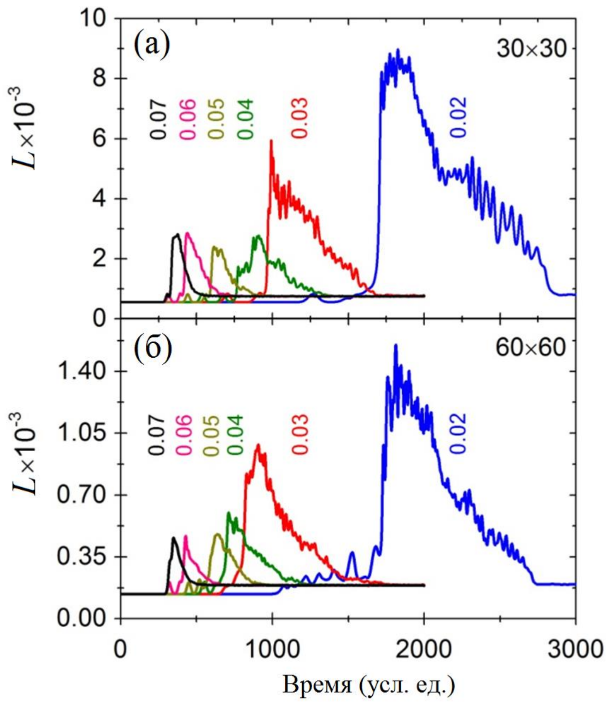


Рис. 31. Параметр локализации L как функция времени для различных значений начальных амплитуд A моды I (указаны для каждой кривой). Результаты получены для расчетных ячеек, содержащих (а) 30×30 и (б) 60×60 примитивных ячеек.

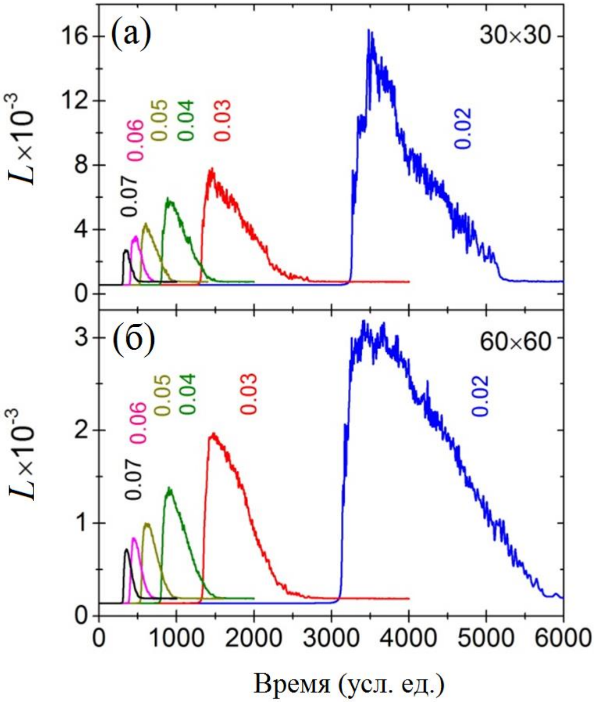


Рис. 32. Параметр локализации L как функция времени для различных значений начальных амплитуд A моды III (указаны для каждой кривой). Результаты получены для расчетных ячеек, содержащих (а) 30×30 и (б) 60×60 примитивных ячеек.

Для моды III поведение кривых $L(t)$ аналогично тому, что наблюдалось для моды I (см. Рис. 32). Для обеих мод существует четкая тенденция: время до наступления модуляционной неустойчивости (момент резкого скачка параметра локализации) и максимальное значение параметра локализации L увеличиваются с уменьшением начальной амплитуды мод, A. Кроме того, максимальная величина параметра локализации L примерно в два раза выше для моды III, чем для моды I и в 5-6 раз выше для малой расчетной ячейки, чем для большой.

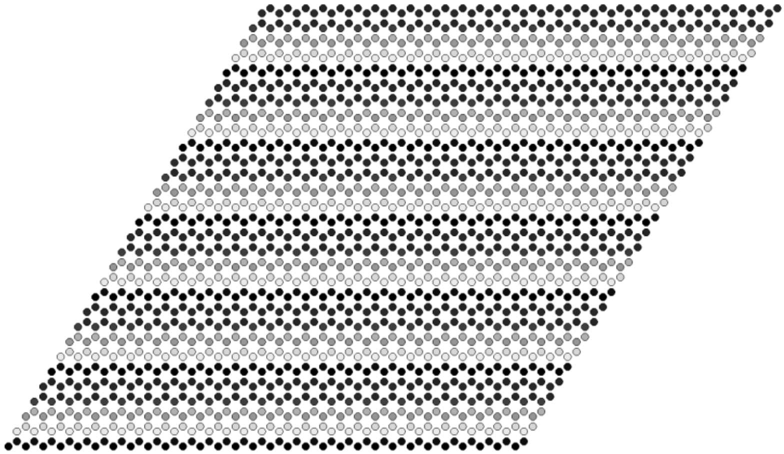
Приведем картины эволюции распределения энергии по площади моделируемой двумерной решетки. С этой целью окрасим частицы так, что минимальной по всем частицам энергии соответствует белый цвет, а максимальной – черный.

Для моды I результаты показаны на Рис. 33. В начальный момент времени энергия распределена поровну между всеми частицами (данный режим тривиален и не представлен на рисунке). Развитие неустойчивости моды I приводит в момент времени t=680 к появлению неоднородности распределения энергии, которая проявляется в виде волны вдоль оси y [Рис. 33(а)]. Тем не менее, такое распределение энергии также нестабильно, и к моменту времени t=1120 формируются пять ДБ, которые выглядят как пары соседних частиц с высокой энергий. Один из пяти ДБ оказался движущимся, что видно из сравнения Рис. 33 (б) и (в). Возникшие ДБ медленно излучают энергию в виде низкоамплитудных фононных волн и, наконец, в момент t=2400 система приходит в состояние, представленное на Рис. 33 (г), где наблюдаются тепловые флуктуации с коротким временем жизни.

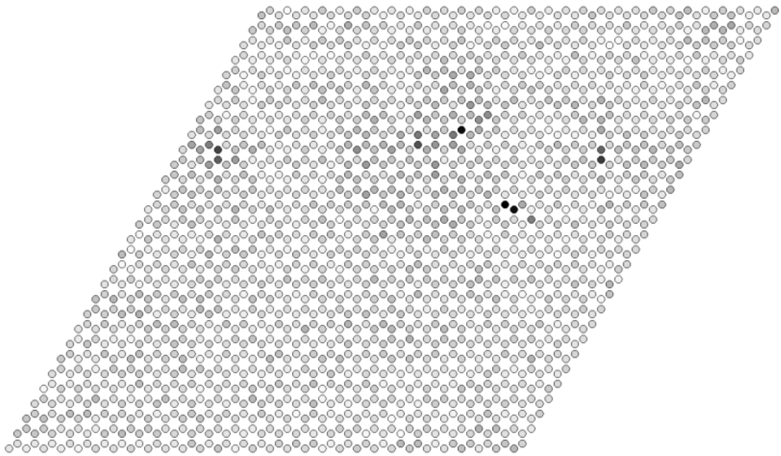
Распад моды III происходит по сценарию, отличающемуся от того, что наблюдался для моды I (сравните Рис. 33 и Рис. 34). При t=1100 мода III трансформируется в коротковолновую моду колебаний, в которой две подрешетки периодически обмениваются своей энергией, как показано на Рис. 34 (а). Эти колебания также неустойчивы, и их эволюция приводит к образованию при t=1350 четырех локализованных областей с высокой плотностью энергии Рис. 34 (б). В дальнейшем, при t=1500, эти области трансформируются в шесть долгоживущих ДБ, см. Рис. 34 (в). ДБ медленно излучают свою энергию и к моменту времени t=2400 устанавливаются равновесные тепловые колебания с кратковременными флуктуациями энергии. Таким образом, модуляционная неустойчивость мод I и III заканчивается равнораспределением энергии по всем колебательным степеням свободы, но достигается это состояние через пространственную локализацию энергии в виде долгоживущих ДБ.

Модуляционная неустойчивость наблюдается также и для мод II и IV. Однако распад этих мод не приводит к пространственной локализации энергии, как это наблюдалось для мод I и III, а происходит прямой переход к тепловым колебаниям с короткоживущими флуктуациями энергии. Это связано с тем, что частоты мод II и IV при малых амплитудах находятся глубоко в спектре фононных колебаний решетки (см. Рис. 29). При этих условиях не может произойти формирование ДБ с частотами выше спектра колебаний решетки.

На Рис. 35 дана эволюция во времени параметра локализации L для мод (а) II и (б) IV при начальных амплитудах мод A=0,03. Продолжительность развития неустойчивости составляет около 2500 единиц времени для моды II и 600 единиц времени для моды IV. Представленный результат был получен для расчетной ячейки, содержащей 30×30 примитивных трансляционных ячеек, но он слабо зависит от размера расчетной ячейки.

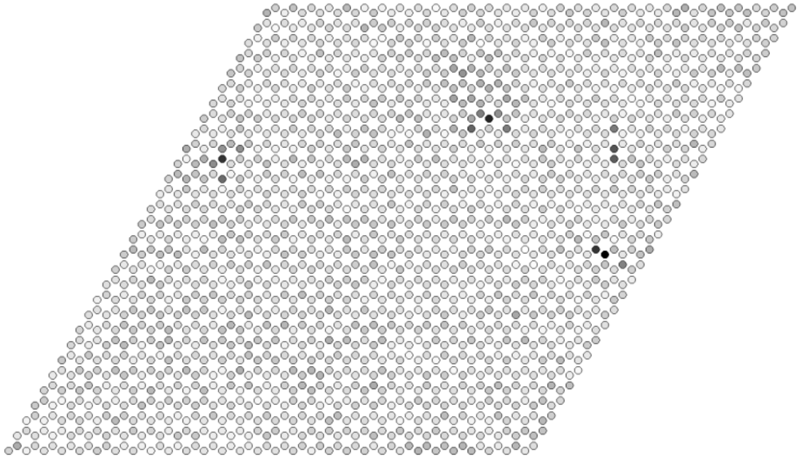


(а)

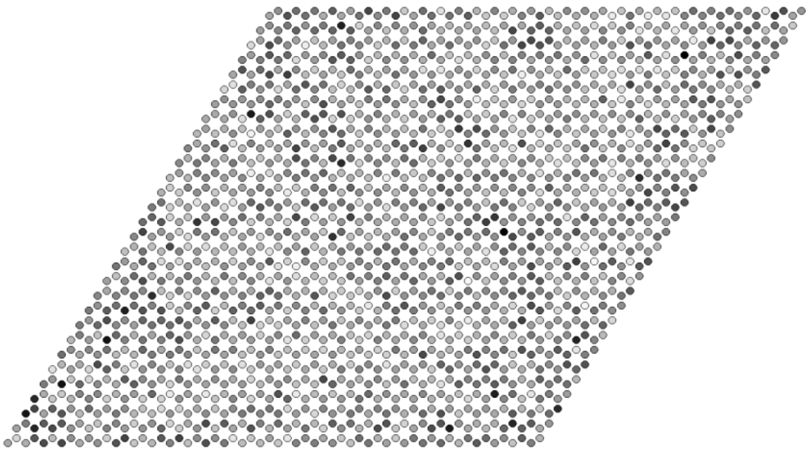


(б)

Рис. 33. Эволюция распределения энергии по частицам в результате развития модуляционной неустойчивости моды I с начальной амплитудой A=0.03 в расчетной ячейке из 30×30 примитивных ячеек. Черный цвет – максимальная энергия, белый – минимальная. (а) t=680, (б) t=1120.

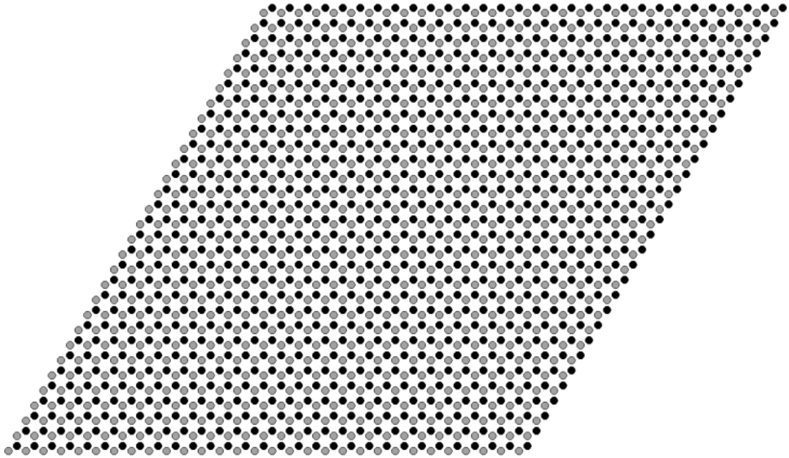


(в)

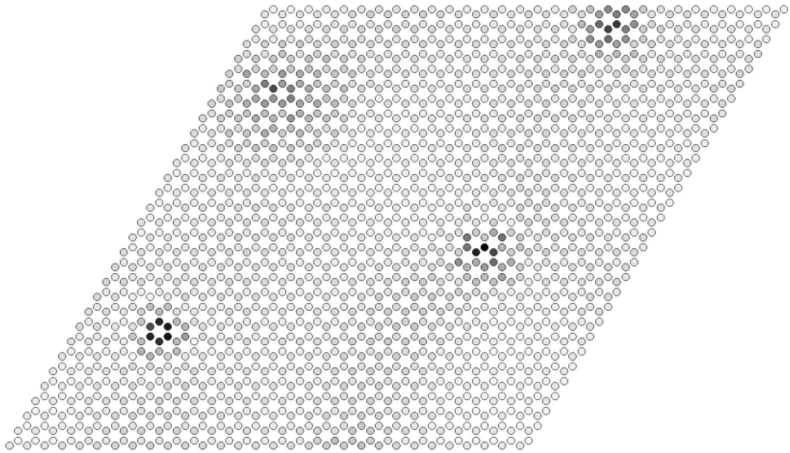


(г)

Рис. 33 (продолжение). (в) t=1160, (г) t=2400.

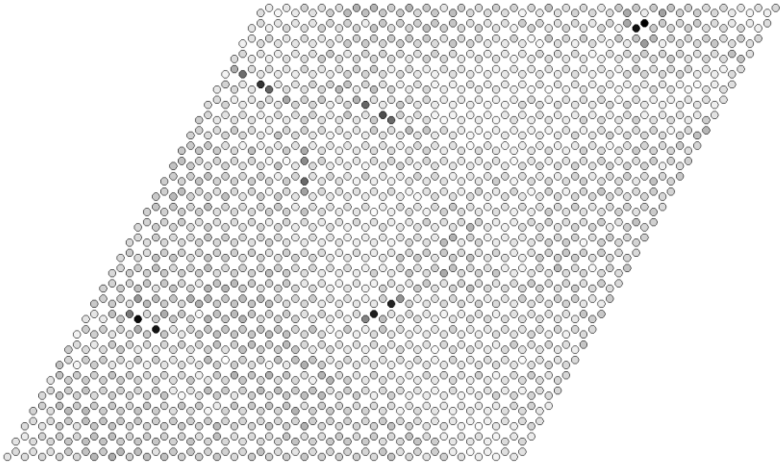


(а)

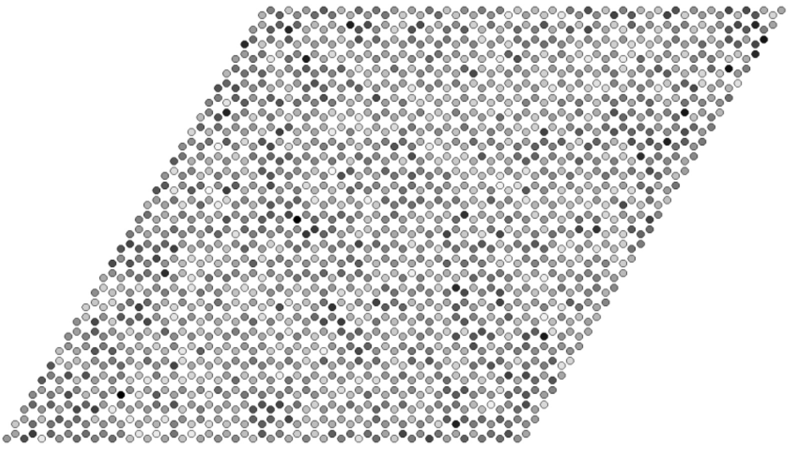


(б)

Рис. 34. Эволюция распределения энергии по частицам в результате развития модуляционной неустойчивости моды III с начальной амплитудой A=0.03 в расчетной ячейке из 30×30 примитивных ячеек. Черный цвет – максимальная энергия, белый – минимальная. (а) t=1100, (б) t=1350.



(в)



(г)

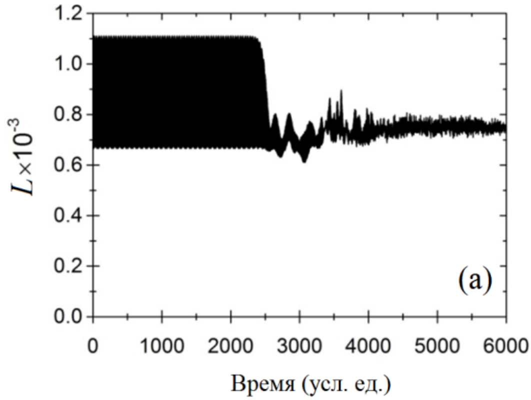
Рис. 34 (продолжение). (в) t=1500, (г) t=2400.

Следует отметить, что параметр локализации для мод II и IV не показывает внезапного роста, что связано с отсутствием режима пространственной локализации энергии в процессе эволюции этих мод.

Приведем некоторые характеристики эволюции параметра локализации L мод I и III. Как видно из Рис. 31 и Рис. 32, параметр локализации L для мод I и III изменяется по одному и тому же сценарию, который состоит из трех этапов: (1) развитие неустойчивости, когда L мало и не зависит от времени в масштабе рисунка; (2) формирование ДБ, когда L резко возрастает и остается на высоком уровне до тех пор, пока они существуют в системе; (3) L падает до малого значения, которое практически не зависит от времени, поскольку его изменение определяется короткоживущими тепловыми флуктуациями.

Продолжительность первой стадии обозначим через t_1. Эта величина в зависимости от амплитуды мод A показана на Рис. 36 для двух исследованных размеров расчетной ячейки. Можно сделать вывод, что время t_1 уменьшается с увеличением A и что развитие неустойчивости для моды III требует больше времени, чем для моды I.

Кроме того, Рис. 36 ясно показывает, что размер расчетной ячейки не оказывает существенного влияния на время начала роста параметра локализации t_1. Это особенно заметно в диапазоне высоких амплитуд, $A \geq 0{,}03$, где точки, полученные для двух размеров расчетных ячеек, практически сливаются.



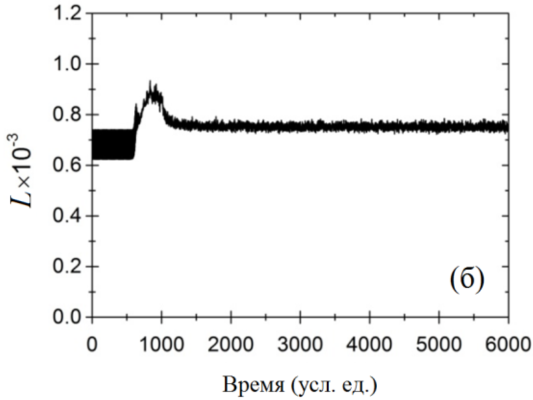


Рис. 35. Параметр локализации L как функция времени для мод (а) II и (б) IV при начальных амплитудах мод A=0,03. Результаты получены для расчетной ячейки, содержащей 30×30 примитивных ячеек.

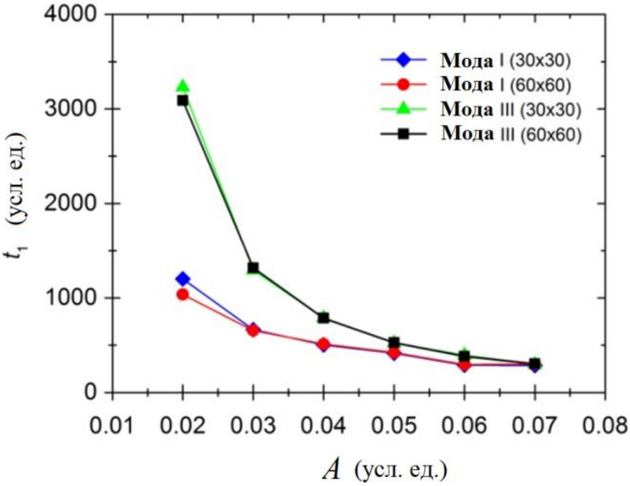


Рис. 36. Время развития модуляционной неустойчивости как функция амплитуды для мод I и III, рассчитанные для расчетных ячеек, содержащих 30×30 и 60×60 примитивных ячеек.

Время жизни ДБ (продолжительность второго этапа) обозначим через t_2. Эта величина рассчитывается как ширина пика на кривых $L(t)$. Она показана как функция амплитуды мод на Рис. 37. Видно, что t_2 также почти не зависит от размера расчетной ячейки для амплитуд A>0,04. Стоит отметить, что при более высоких начальных амплитудах разница между режимами I и III, в терминах t_1 и t_2 постепенно исчезает, как показано на Рис. 36 и Рис. 37.

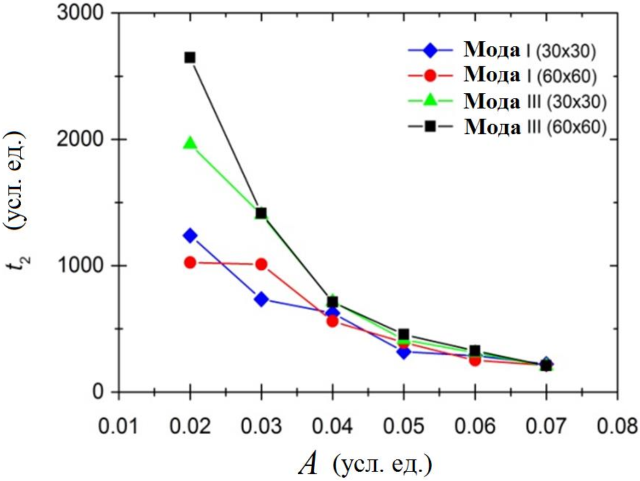


Рис. 37. Время жизни ДБ как функция амплитуды для мод I и III, рассчитанные для расчетных ячеек, содержащих 30×30 и 60×60 примитивных ячеек.

По-видимому, для $A \geq 0{,}08$ эти различия и вовсе исчезают.

4.3. Выводы по главе

Впервые было изучено явление модуляционной неустойчивости для четырех нелинейных нормальных мод в двумерной гексагональной решетке с использованием метода молекулярной динамики. Основные выводы можно сформулировать следующим образом.

1. Распад мод I и III приводит к появлению долгоживущих дискретных бризеров с частотами выше спектра малоамплитудных колебаний решетки. Возникшие дискретные бризеры медленно излучают энергию в виде малоамплитудных волн и, наконец,

система приходит к тепловому равновесию. Дискретные бризеры образуются потому, что моды I и III имеют частоты выше спектра малоамплитудных колебаний решетки.

2. Моды II и IV также модуляционно неустойчивы, но распадаясь, они приводят непосредственно к тепловым колебаниям с короткоживущими флуктуациями энергии, минуя фазу формирования долгоживущих дискретных бризеров. Дискретные бризеры не образуются, поскольку моды II и IV имеют частоты в спектре малоамплитудных колебаний решетки, и они не могут производить локализованные моды с частотами выше спектра.

3. Уменьшение начальной амплитуды мод I и III сопровождается увеличением максимального значения параметра локализации, длительности развития неустойчивости и времени жизни дискретных бризеров.

4. При более высоких амплитудах колебательных мод различия между эволюцией мод I и III постепенно исчезают с точки зрения длительности развития неустойчивости и времени жизни дискретных бризеров.

Представленные результаты расширяют наше понимание о динамике нелинейных решеток и о роль дискретных бризеров в процессах перехода от неравновесных состояний к тепловому равновесию.

Основные результаты и выводы

1. Методами компьютерного моделирования исследованы нелинейная динамика и упругие характеристики двумерной гексагональной решетки с кубически нелинейными связями. Акцент сделан на изучении ауксетических свойств решетки.

2. В зависимости от параметров, характеризующих различные связи между частицами, можно получить решетку с положительными, близкими к нулю и отрицательными коэффициентами Пуассона.

3. Вне зависимости от значения коэффициентов Пуассона в решетках с кубической нелинейностью удалось возбудить ДБ локализованные на паре связанных атомов, колеблющихся в противофазе. Частоты ДБ растут с амплитудой, отщепляясь от верхней границы бесщелевого спектра малоамплитудных колебаний.

4. Исследовано влияние двух ОБ на упругие характеристики изотропной неауксетической решетки. Показано, что с ростом амплитуд ОБ растут модули Юнга решетки и уменьшаются коэффициенты Пуассона. Однако в пределах исследованного интервала амплитуд ОБ решетка не становится ауксетиком. Комбинированное влияние ОБ и равноосного растяжения решетки привело к появлению ауксетических свойств.

5. Детально изучен процесс модуляционной неустойчивости всех четырех ОБ гексагональной решетки. Все ОБ проявляют

модуляционную неустойчивость при не слишком малых амплитудах. Два ОБ из четырех, в результате развития модуляционной неустойчивости, приводят к пространственной локализации энергии на долгоживущих ДБ.

6. Результаты данной работы свидетельствуют о том, что упругими свойствами нелинейных решеток можно управлять путем возбуждения в них высокоамплитудных колебаний. Кроме того, для таких решеток возможна пространственная локализация колебательной энергии в форме ДБ.

Приложение.
Расчет спектра малоамплитудных колебаний двумерной решетки

Уже неоднократно подчеркивалось, что прежде чем анализировать динамику нелинейной решетки, важно исследовать ее в линейном приближении. В данном приложении получены необходимые соотношения для нахождения спектра колебаний и собственных мод колебаний линеаризованных уравнений движения для бесконечных решеток.

П.1. Методика расчета плотности фононных состояний решеток

Решетки или кристаллические тела обладают трансляционной симметрией, то есть их структура может быть описана путем задания расположения частиц (атомов) в некоторой ячейке периодичности и трансляцией этой ячейки вдоль n линейно независимых векторов трансляции, где $n=\{1,2,3\}$ определяет размерность решетки. Ниже будет рассмотрен случай двумерной решетки ($n=2$).

Пусть примитивная ячейка (трансляционная ячейка минимальной площади) двумерной решетки содержит I частиц и опирается на вектора трансляции w_1, w_2. Декартовы координаты этих векторов составляют строки матрицы, называемой порождающей матрицей

$$\mathbf{W}=\begin{bmatrix} w_{11} & w_{12} \\ w_{21} & w_{22} \end{bmatrix}. \qquad (П.1)$$

Легко показать, что площадь примитивной ячейки можно рассчитать так $V=\det W=w_{11}w_{22}-w_{12}w_{21}$.

Удобно занумеровать частицы решетки тремя индексами *m, n, i*, где $-\infty<m,n<\infty$ определяют номер примитивной ячейки бесконечной решетки, а $1\le i\le I$ определяет номер частицы в пределах данной примитивной ячейки. Тогда радиус-вектор произвольной частицы решетки будет иметь вид $\mathrm{r} = m\mathrm{w}_1+ n\mathrm{w}_2+ \mathrm{k}_i$, где k_i – это вектора сдвигов подрешеток. Частицы *i*-ой подрешетки имеют сорт A_i и массу m_i.

Взаимодействие между частицами решетки будут считаться парными, то есть предполагается, что сила взаимодействия между рассматриваемой парой частиц не зависит от присутствия других частиц. Заметим, что данное предположение может быть не всегда оправдано.

Уравнения движения частицы с индексами *m, n, i* имеют вид:

$$m_i\ddot{\mathbf{u}}_{m,n,i}=\sum_{k,l,j}\mathbf{F}_{k,l,j}\ , \qquad (П.2)$$

где $\mathrm{F}_{k,l,j}$ – это сила, действующая на частицу *m, n, i* со стороны частицы с индексами *k, l, j* и суммирование производится по всем соседям частицы *m, n, i* в пределах радиуса обрезания потенциала.

Поскольку построение уравнений движения сводится к суммированию сил парных взаимодействий, рассмотрим взаимодействие между произвольной парой частиц сортов *A* и *B*, положения которых определяется на плоскости радиус-векторами r_A и r_B (см. рис. П.1).

Проекции вектора силы, действующей на частицу *A* со стороны частицы *B* будут:

$$F_{Ax} = \varphi'_{AB}\left(|\mathbf{r}_{AB}|\right) \cdot \frac{r_{xAB}}{|\mathbf{r}_{AB}|},$$
$$F_{Ay} = \varphi'_{AB}\left(|\mathbf{r}_{AB}|\right) \cdot \frac{r_{yAB}}{|\mathbf{r}_{AB}|}, \qquad \text{(П.3)}$$

где $\varphi_{AB}\left(|\mathbf{r}_{AB}|\right)$ – это известный парный потенциал, штрих обозначает дифференцирование функции по ее аргументу, и введено обозначение:

$$\mathbf{r}_{AB} = \mathbf{r}_B - \mathbf{r}_A = \left(r_{xAB}, r_{yAB}\right). \qquad \text{(П.4)}$$

Выражения (П.3), (П.4) позволяют вычислить силы парных связей, входящих в (П.2).

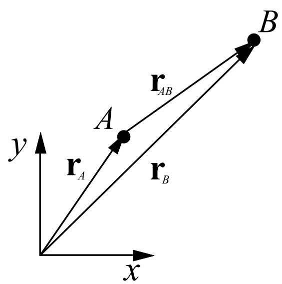


Рис. П.1. К построению уравнений движения.

П.2. Линеаризованные уравнения движения частиц

Предположим, что радиус-векторы $\mathbf{r}_A^0$ и $\mathbf{r}_B^0$ определяют равновесные положения частиц, т.е. те положения, в которых потенциальная энергия всей решетки минимальна, и векторная сумма сил, действующих на любую частицу, равна нулю. Рассмотрим малые отклонения частиц от равновесных положений, определяемые векторами перемещений u_A и u_B, как показано на рис. П.2.

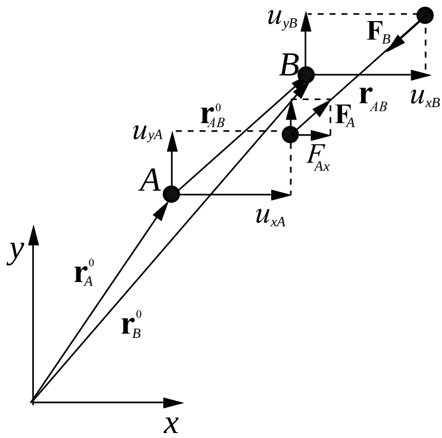


Рис. П.2. К построению линеаризованных уравнений движения частиц.

Длина вектора, соединяющего центры частиц A и B в их отклоненных положениях, запишется следующим образом:

$$|\mathbf{r}_{AB}|=|\mathbf{r}^0_{AB}+\mathbf{u}_{AB}|=\sqrt{\left(r^0_{xAB}+u_{xAB}\right)^2+\left(r^0_{yAB}+u_{yAB}\right)^2}\,, \tag{П.5}$$

где обозначено:

$$\mathbf{r}_{AB}^0 = \mathbf{r}_B^0 - \mathbf{r}_A^0, \qquad \mathbf{u}_{AB} = \mathbf{u}_B - \mathbf{u}_A. \tag{П.6}$$

С учетом выражений (П.3) и (П.5) проекции силы, действующей на частицу *A* со стороны частицы *B*, на оси декартовой системы координат *x* и *y* будут определяться как:

$$\begin{aligned} F_{Ax} &= \varphi'_{AB}\left(|\mathbf{r}_{AB}|\right) \cdot \frac{r_{xAB}^0 + u_{xAB}}{|\mathbf{r}_{AB}|}, \\ F_{Ay} &= \varphi'_{AB}\left(|\mathbf{r}_{AB}|\right) \cdot \frac{r_{yAB}^0 + u_{yAB}}{|\mathbf{r}_{AB}|}. \end{aligned} \tag{П.7}$$

Полагая, что $|\mathbf{u}_{AB}| << \left|\mathbf{r}_{AB}^0\right|$, приходим к возможности линеаризации уравнения (П.7)

$$\begin{aligned} F_{Ax} &\approx \frac{\partial F_{Ax}}{\partial u_{xAB}}\bigg|_{\mathbf{u}_{AB}=\mathbf{0}} \cdot u_{xAB} + \frac{\partial F_{Ax}}{\partial u_{yAB}}\bigg|_{\mathbf{u}_{AB}=\mathbf{0}} \cdot u_{yAB}, \\ F_{Ay} &\approx \frac{\partial F_{Ay}}{\partial u_{xAB}}\bigg|_{\mathbf{u}_{AB}=\mathbf{0}} \cdot u_{xAB} + \frac{\partial F_{Ay}}{\partial u_{yAB}}\bigg|_{\mathbf{u}_{AB}=\mathbf{0}} \cdot u_{yAB}, \end{aligned} \tag{П.8}$$

где учтено, что частицы находятся в равновесии и часть членов сокращается, а частные производные, посчитанные для равновесных положений, имеют вид:

$$\frac{\partial F_{Ax}}{\partial u_{xAB}} = \varphi''_{AB}\left(\left|\mathbf{r}_{AB}^0\right|\right) \cdot \frac{\left(r_{xAB}^0\right)^2}{\left|\mathbf{r}_{AB}^0\right|^2} + \varphi'_{AB}\left(\left|\mathbf{r}_{AB}^0\right|\right) \frac{\left|\mathbf{r}_{AB}^0\right|^2 - \left(r_{xAB}^0\right)^2}{\left|\mathbf{r}_{AB}^0\right|^3}, \tag{П.9}$$

$$\frac{\partial F_{Ay}}{\partial u_{yAB}} = \varphi''_{AB}\left(\left|\mathbf{r}_{AB}^0\right|\right) \cdot \frac{\left(r_{yAB}^0\right)^2}{\left|\mathbf{r}_{AB}^0\right|^2} + \varphi'_{AB}\left(\left|\mathbf{r}_{AB}^0\right|\right) \frac{\left|\mathbf{r}_{AB}^0\right|^2 - \left(r_{yAB}^0\right)^2}{\left|\mathbf{r}_{AB}^0\right|^3}, \tag{П.10}$$

$$\frac{\partial F_{Ax}}{\partial u_{yAB}}=\frac{\partial F_{Ay}}{\partial u_{xAB}}=$$
$$=\varphi''_{AB}\left(\left|\mathbf{r}^0_{AB}\right|\right)\cdot\frac{\left(r^0_{xAB}\right)\left(r^0_{yAB}\right)}{\left|\mathbf{r}^0_{AB}\right|^2}-\varphi'_{AB}\left(\left|\mathbf{r}^0_{AB}\right|\right)\frac{\left(r^0_{xAB}\right)\left(r^0_{yAB}\right)}{\left|\mathbf{r}^0_{AB}\right|^3}. \qquad (\text{П}.11)$$

По выражениям (П.8)-(П.11) можно вычислить силы парных взаимодействий, входящих в уравнения (П.2).

П.3. Собственные частоты и формы колебаний решетки

Найдем точные решения линеаризованных уравнений движения, разыскивая решения в виде:

$$\begin{Bmatrix} u_{xm,n,1} \\ u_{ym,n,1} \\ \dots \\ u_{xm,n,I} \\ u_{ym,n,I} \end{Bmatrix}=\begin{Bmatrix} U_{x1} \\ U_{y1} \\ \dots \\ U_{xI} \\ U_{yI} \end{Bmatrix}\exp\left(iq_x m+iq_y n-i\omega t\right), \qquad (\text{П}.12)$$

где q_x, q_y – волновые числа, i – мнимая единица, m, n – номер ячейки периодичности, $-\infty<m,n<\infty$.

Выражения вида (П.12) описывают плоские волны или фононы. Ввиду трансляционной симметрии решетки (и ввиду периодичности гармонических функций), достаточно рассматривать область волновых векторов $-\pi<q_x,q_y\le\pi$, которую называют первой зоной Бриллюэна.

После подстановки выражения (П.12) в систему линеаризованных уравнений (П.2), выписанных для одной трансляционной ячейки решетки, приходим к задаче на собственные значения вида:

$$\begin{bmatrix} K_{11} & \dots & K_{1,2I} \\ \dots & \dots & \dots \\ K_{2I,1} & \dots & K_{2I,2I} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} U_{x1} \\ U_{y1} \\ \dots \\ U_{xI} \\ U_{yI} \end{Bmatrix} = \omega^2 \begin{Bmatrix} m_1 U_{x1} \\ m_1 U_{y1} \\ \dots \\ m_I U_{xI} \\ m_I U_{yI} \end{Bmatrix}. \qquad (\Pi.13)$$

Коэффициенты матрицы K получаются суммированием вкладов от парных связей по очень простому алгоритму. Покажем, как добавить в матрицу вклад от связи между i-ой частицей ячейки с номером $m = n = 0$ (для которой строятся уравнения (П.13)) и частицей с номером k, l, j. Для определенности будем называть частицу с номером $0,0,i$ частицей A, а частицу с номером k, l, j – частицей B. Данная парная связь внесет выписанные ниже вклады в следующие коэффициенты матрицы K:

вклад в $K_{2i-1,2i-1}$:

$$\exp\left(i \cdot 0 \cdot q_x + i \cdot 0 \cdot q_y\right) \frac{\partial F_{Ax}}{\partial u_{xAB}}\Big|_{\mathbf{u}_{AB}=\mathbf{0}} = \frac{\partial F_{Ax}}{\partial u_{xAB}}\Big|_{\mathbf{u}_{AB}=\mathbf{0}},$$

вклад в $K_{2i-1,2i}$:

$$\exp\left(i \cdot 0 \cdot q_x + i \cdot 0 \cdot q_y\right) \frac{\partial F_{Ax}}{\partial u_{yAB}}\Big|_{\mathbf{u}_{AB}=\mathbf{0}} = \frac{\partial F_{Ax}}{\partial u_{yAB}}\Big|_{\mathbf{u}_{AB}=\mathbf{0}},$$

вклад в $K_{2i,2i-1}$:

$$\exp\left(i \cdot 0 \cdot q_x + i \cdot 0 \cdot q_y\right) \frac{\partial F_{Ax}}{\partial u_{yAB}}\Big|_{\mathbf{u}_{AB}=\mathbf{0}} = \frac{\partial F_{Ax}}{\partial u_{yAB}}\Big|_{\mathbf{u}_{AB}=\mathbf{0}},$$

вклад в $K_{2i,2i}$:

$$\exp\left(i \cdot 0 \cdot q_x + i \cdot 0 \cdot q_y\right) \frac{\partial F_{Ay}}{\partial u_{yAB}}\Big|_{\mathbf{u}_{AB}=\mathbf{0}} = \frac{\partial F_{Ay}}{\partial u_{yAB}}\Big|_{\mathbf{u}_{AB}=\mathbf{0}},$$

вклад в $K_{2i-1,2j-1}$:

$$-\exp\left(i\cdot k\cdot q_x+i\cdot l\cdot q_y\right)\frac{\partial F_{Ax}}{\partial u_{xAB}}\Big|_{\mathbf{u}_{AB}=\mathbf{0}},$$

вклад в $K_{2i-1,2j}$:

$$-\exp\left(i\cdot k\cdot q_x+i\cdot l\cdot q_y\right)\frac{\partial F_{Ax}}{\partial u_{yAB}}\Big|_{\mathbf{u}_{AB}=\mathbf{0}},$$

вклад в $K_{2i,2j-1}$:

$$-\exp\left(i\cdot k\cdot q_x+i\cdot l\cdot q_y\right)\frac{\partial F_{Ax}}{\partial u_{yAB}}\Big|_{\mathbf{u}_{AB}=\mathbf{0}},$$

вклад в $K_{2i,2j}$:

$$-\exp\left(i\cdot k\cdot q_x+i\cdot l\cdot q_y\right)\frac{\partial F_{Ay}}{\partial u_{yAB}}\Big|_{\mathbf{u}_{AB}=\mathbf{0}}.$$

Задача на собственные значения (П.13) описывается матрицей с размерностью, равной числу степеней свободы частиц, составляющих одну примитивную ячейку сверхструктуры, то есть в двумерном случае $2I$. Например, для гексагональной решетки, изучаемой в данной работе, в примитивной ячейке находится две частицы, каждая их которых имеет две степени свободы – компоненты вектора перемещения на плоскости. Следовательно, для такой решетки получаем спектральную задачу с матрицей 4x4. К сожалению, корни характеристического уравнения четвертой степени, в общем случае, не выражаются в явном виде и приходится использовать численные методы решения задачи на собственные значения, например, метод вращения в подпространстве.

Решив задачу на собственные значения, получим 2*I* квадратов собственных частот ω^2 и 2*I* собственных векторов U.

Известно, что, вообще говоря, собственный вектор является комплексным:

$$\mathrm{U} = \mathrm{U}_{\mathrm{Re}} + i\mathrm{U}_{\mathrm{Im}},$$

где после отделения мнимой и вещественных частей, компоненты векторов U_{Re} и U_{Im} оказываются действительными. В качестве решения линеаризованных уравнений движения можно по выбору использовать действительную

$$\mathbf{U}_{Re}\cos\left(q_x m + q_y n - \omega t\right) - \mathbf{U}_{\mathrm{Im}}\sin\left(q_x m + q_y n - \omega t\right)$$

или мнимую

$$\mathbf{U}_{\mathrm{Im}}\cos\left(q_x m + q_y n - \omega t\right) + \mathbf{U}_{Re}\sin\left(q_x m + q_y n - \omega t\right),$$

части комплексного решения (П.12). И в том и в другом случае получается одинаковый результат.

Исследования выполнены за счет гранта РНФ 16-12-10175

Список литературы

1. Wojciechowski K. W. Auxetics and other systems of “negative” characteristics / K. W. Wojciechowski, F. Scarpa, J. N. Grima, A. Alderson // Physical Status Solidi B. – 2016. – V. 253. – N 7. – P. 1241 – 1242.

2. Wu L. Isotropic negative thermal expansion metamaterials / L. Wu, B. Li, J. Zhou // ACS Applied Materials and Interfaces. – 2016. – V. 8. – N 27. – P. 17721–17727.

3. Attard D. Negative linear compressibility from rotating rigid units / D. Attard, R. Caruana–Gauci, R. Gatt, J. N. Grima // Physica Status Solidi (B). –2016. – V. 253. – N 7. – P. 1410–1418.

4. Веселаго В. Г. Электродинамика веществ с одновременно отрицательными значениями ε и μ / В. Г. Веселаго // УФН. – 1967. – Т. 92. – С. 517–526.

5. Goldstein R. V. The elastic properties of hexagonal auxetics under pressure / R. V. Goldstein, V. A. Gorodtsov, D. S. Lisovenko // Physica Status Solidi (B). – 2016. – V. 253 – N 7. – P. 1261–1269.

6. Wang P. Locally resonant band gaps in periodic beam lattices by tuning connectivity / P. Wang, F. Casadei, S. H. Kang, K. Bertoldi // Physical Review B. – 2015. – V. 91. – P. 020103.

7. Ruzzene M. Wave beaming effects in two-dimensional cellular structures / M. Ruzzene, F. Scarpa, F. Soranna // Smart Materials and Structures. –2003. – V. 12. – P. 363–372.

8. Kolat P. Solitary waves in auxetic plates / P. Kolat, B. M. Maruszewski, K. W. Wojciechowski // Journal of Non-Crystalline Solids. – 2010. – V. 356. – P. 2001–2009.

9. Porubov A. V. Non-linear plane waves in materials having hexagonal internal structure / A. V. Porubov, I. E. Berinskii // International Journal of Nonlinear Mechanics. – 2014. – V. 67. – P. 27-33.

10. Porubov A. V. Two-dimensional nonlinear shear waves in materials having hexagonal lattice structure / A. V. Porubov, I. E. Berinskii // Mathematics and Mechanics of Solids. – 2016. – V. 21. – P. 94–103.

11. Dmitriev S. V. Theoretical strength of 2D hexagonal crystals: application to bubble raft indentation / S. V. Dmitriev, J. Li, N. Yoshikawa, Y. Shibutani // Philosophical Magazine. – 2005. – V. 85. – P. 2177–2195.

12. Chechin G. M. Nonlinear vibrational modes in graphene: group-theoretical results / G. M. Chechin, D. S. Ryabov, S. A. Shcherbinin // Letters on materials. – 2016. – V. 6 – N 1. – P. 9–15.

13. Дмитриев С. В. Дискретные бризеры в кристаллах / С. В. Дмитриев, Е. А. Корзникова, Ю. А. Баимова, М. Г. Веларде // Успехи Физических Наук. – 2016. – Т. 186. – С. 471–488.

14. Korznikova E. A. Discrete breather on the edge of the graphene sheet with the armchair orientation / E. A. Korznikova, A. V. Savin, Y. A. Baimova, S. V. Dmitriev, R. R. Mulyukov // Letters to Jounal of Experimental and Theoretical Physics. – 2012. – V. 96. – P. 222–226.

15. Liu B. Discrete breathers in hydrogenated grapheme / B. Liu, J. A. Baimova, S. V. Dmitriev, X. Wang, H. Zhu, K. Zhou // J Journal of Physics D: Applied Physics. – 2013. – V. 46. – P. 305302.

16. Korznikova E. A. Effect of strain on gap discrete breathers at the edge of armchair graphene nanoribbons / E. A. Korznikova, J. A. Baimova, S. V. Dmitriev // Europhysics Letters. – V. 102. – P. 60004.

17. Chechin G. M. Properties of discrete breathers in graphane from ab initio simulations / G. M. Chechin, S. V. Dmitriev, I. P. Lobzenko, D. S. Ryabov // Physical Review B. –2014. – V. 90. – P. 045432.

18. Yamayose Y. Excitation of intrinsic localized modes in a graphene sheet / Y. Yamayose, Y. Kinoshita, Y. Doi, A. Nakatani, T. Kitamura // Europhysics Letters. – 2007. – V. 80. – P. 40008.

19. Kinoshita Y. Selective excitations of intrinsic localized modes of atomic scales in carbon nanotubes / Y. Kinoshita, Y. Yamayose, Y. Doi, A. Nakatani, T. Kitamura // Physical Review B. –2008. – V. 77. – P. 024307.

20. Shimada T. Stone-Wales transformations triggered by intrinsic localized modes in carbon nanotubes / T. Shimada, D. Shirasaki, T. Kitamura // Physical Review B. – 2010. – V. 81. – P. 035401.

21. Shimada T. Influence of nonlinear atomic interaction on excitation of intrinsic localized modes in carbon nanotubes / T. Shimada, D. Shirasaki, Y. Kinoshita, Y. Doi, A. Nakatani, T. Kitamura // Physica D. – 2010. – V. 239. – P. 407–413.

22. Doi Y. Structure and stability of nonlinear vibration mode in graphene sheet / Y. Doi and A. Nakatani // Procedia Engineering – 2011. – V. 10. – P. 3393–3398.

23. Evans K. E. Auxetic polymers: a new range of materials / K. E. Evans // Endeavour Volume. – 1991. – V. 15. – N 4. – P. 170-174.

24. Flach S. Discrete breathers / S. Flach and C. R. Willis // Physics Reports. – 1998. – V. 295. – P. 181–264.

25. Flach S. Discrete breathers Advances in theory and applications / S. Flach and A. V. Gorbach // Physics Reports. –2008. – V. 467. – P. 1-116.

26. Сахненко В. П. Кусты мод и нормальные колебания для нелинейных динамических систем с дискретной симметрией / В. П. Сахненко, Г. М. Чечин // Доклады Академии Наук. – 1994. – Т. 338. – №1. – С. 42–45.

27. Chechin G. M. Interactions between normal modes in nonlinear dynamical systems with discrete symmetry / G. M. Chechin, V. P. Sakhnenko // Exact results. Physica D. – 1998. – V. 117. – P. 43-76.

28. Alderson A. A triumph of lateral thought / A. Alderson // Chemistry and Industry. – 1999. – V. 10. – P. 384–391.

29. Paszkiewicz T. Anisotropic properties of mechanical characteristics and auxeticity of cubic crystalline media / T. Paszkiewicz and S. Wolski // Physica Status Solidi B. – 2007. – V. 244. – P. 966-977.

30. Paszkiewicz T. Elastic properties of cubic crystals: Every's versus Blackman's diagram / T. Paszkiewicz and S. Wolski // Journal of Physics: Conference Series. – 2008. – V. 104. – P. 012038.

31. Branka A. C. Auxeticity of cubic materials / A. C. Branka, D. M. Heyes and K. W. Wojciechowski // Physica Status Solidi B. – 2009. – V. 246. – P. 2063–2071.

32. Goldstein R. V. Auxetic mechanics of crystalline materials / R. V. Goldstein, V. A. Gorodtsov and D. S. Lisovenko // Mechanics of Solids. – 2010. – V. 45. – P. 529–545.

33. Goldstein R. V. Cubic auxetics / R. V. Goldstein, V. A. Gorodtsov and D. S. Lisovenko // Dokl. Physics – 2011. – V. 56. – P. 399–402.

34. Branka A. C. Auxeticity of cubic materials under pressure / A. C. Branka, D. M. Heyes and K. W. Wojciechowski // Physica Status Solidi B. – 2011. – V. 248. – P. 96–104.

35. Branka A. C. Cubic materials in different auxetic regions: Linking microscopic to macroscopic formulations / A. C. Branka, D. M. Heyes, Sz. Mackowiak, S. Pieprzyk and K. W. Wojciechowski // Physica Status Solidi B. – 2012. – V. 249. – P. 1373–1378.

36. Goldstein R. V. Classification of cubic auxetics / R. V. Goldstein, V. A. Gorodtsov and D. S. Lisovenko // Physica Status Solidi B. – 2013. – V. 250. – P. 2038–2043.

37. Гольдштейн Р. В. Ауксетики среди 6-константных тетрагональных кристаллов / Р. В. Гольдштейн, В. А. Городцов, Д. С. Лисовенко, М. А. Волков // Письма о материалах. – 2015. – V. 5. – N. 4. – С. 409–413.

38. Goldstein R. V. Negative Poisson's ratio for cubic crystals and nano/microtubes / R. V. Goldstein, V. A. Gorodtsov, D. S. Lisovenko, M. A. Volkov // Physical Mesomechanics. – 2014. – V. 17. – P. 97–115.

39. Grima J. N. Auxetic behavior from rotating squares / J. N. Grima and K. E. Evans // Journal of Materials Science Letters. – 2000. – V. 19. – P. 1563.

40. J. A. Baimova, K. W. Wojciechowski, J. W. Narojczyk Auxetic behaviour of carbon nanostructures (направлено в печать).

41. Dolgov A. S. The localization of vibrations in a nonlinear crystalline structure / A. S. Dolgov // Soviet Physics of Solid State. – 1986. – Vol. 28. – P. 907– 909.

42. Sievers A. J. Intrinsic localized modes in anharmonic crystals / A. J. Sievers and S. Takeno // Physical Review Letters. – 1988. – V. 61. – P. 970.

43. MacKay R. S. Proof of existence of breathers for time–reversible or Hamiltonian networks of weakly coupled oscillators / R. S. MacKay and S. Aubry // Nonlinearity. – 1994. – V. 7. – P. 1623–1643.

44. Bambusi D. Proof of existence of breathers for time–reversible or Hamiltonian networks of weakly coupled oscillators / D. Bambusi // Nonlinearity. – 1996. – V. 9. – P. 433–457.

45. Kevrekidis P. G. Energy criterion for the spectral stability of discrete breathers / P. G. Kevrekidisб J. Cuevas–Maraver and D. E. Pelinovsky // Physical Review Letters. – 2016. – V. 117. – P. 094101.

46. Page J. B. Asymptotic solutions for localized vibrational modes in strongly anharmonic periodic systems / J. B. Page // Physical Review B. – 1990. – V. 41. – P. 7835.

47. Bajars J. Nonlinear propagating localized modes in a 2D hexagonal crystal lattice / J. Bajars, J. C. Eilbeck and B. Leimkuhler // Physica D. – 2015. – V. 8. – P. 301–302.

48. Kistanov A. A. Moving discrete breathers in a monoatomic two–dimensional crystal / A. A. Kistanov, R. T. Murzaev, S. V. Dmitriev, V. I. Dubinko and V. V. Khizhnyakov // JETP Letters. – 2014. – V. 99. – P. 353–357.

49. Chetverikov A. P. Soliton assisted control of source to drain electron transport along natural channels – crystallographic axes – in two–dimensional triangular crystal lattices / A. P. Chetverikov, W. Ebeling, M. G. Velarde // European Physical Journal B. – 2016. – V. 89. –N 9. – P. 196.

50. Medvedev N. N. Energy localization on the Al sublattice of Pt3Al with L12 order / N. N. Medvedev, M. D. Starostenkov and M. E. Manley // Journal of Applied Physics. – 2013. – V. 114. – P. 213506.

51. Medvedev N. N. Energy localization on the Al sublattice of Pt3Al with L12 order / N. N. Medvedev, M. D. Starostenkov, A. I. Potekaev, P. V. Zakharov, A. V. Markidonov and A. M. Eremin // Russian Physics Journal. – 2014. – V. 57. – P. 387–395.

52. Medvedev N. N. Exciting discrete breathers of two types in a computer 3D model of Pt3Al crystal / N. N. Medvedev,

M. D. Starostenkov, P. V. Zakharov and S. V. Dmitriev // Technical Physics Letters. – 2015. – V. 41. – P. 994.

53. Khadeeva L. Z. Discrete breathers in deformed grapheme / L. Z. Khadeeva, S. V. Dmitriev and Yu. S. Kivshar // Letters to Jounal of Experimental and Theoretical Physics. – 2011. – V. 94. – P. 539–543.

54. Hizhnyakov V. Transverse intrinsic localized modes in monatomic chain and in grapheme / V. Hizhnyakov, M. Klopov, A. Shelkan // Physics Letters A. – 2016. – V. 380. – P. 1075–1081.

55. Fraile A. Long-lived discrete breathers in freestanding grapheme / A. Fraile, E. N. Koukaras, K. Papagelis, N. Lazarides, G. P. Tsironis // Chaos, Solitons and Fractals. – V. 87. – P. 262–267.

56. S. V. Dmitirev, I. P. Lobzenko, E. A. Korznikova Search for discrete breathers in unstrained graphene (направлено в печать).

57. Lobzenko I. P. Discrete breathers properties obtained from *ab initio* calculations in graphene and graphane / I. P. Lobzenko // Letters on Materials. – 2016. – V. 6. – P. 73–76.

58. Лобзенко И. П. Ab initio моделирование щелевых дискретных бризеров в деформированном графене / И. П. Лобзенко, Г. М. Чечин, Г. С. Безуглова, Ю. А. Баимова, Е. А. Корзникова, С. В. Дмитриев // Физика твердого тела. – 2016. – V. 58. – N. 3. – С. 616–622.

59. Chechin G. Nonlinear normal mode interactions in the SF6 molecule studied with the aid of density functional theory / G. Chechin, D. Ryabov, S. Shcherbinin // Physical Review E. – 2015. – V. 92. – N. 1. – P. 012907.

60. Burlakov V. M. Localized vibrations of homogeneous anharmonic chains / V. M. Burlakov, S. A. Kiselev and V. I. Rupasov // Physics Letters A. – 1990. – V. 147. – P. 130–134.

61. Kivshar, Yu. S. Modulational instabilities in discrete lattices / Yu. S. Kivshar, M. Peyrard // Physical Review A. – 1992. – V. 46. – P. 3198–3207.

62. Wojciechowski K. W. Negative Poisson ratios at negative pressures / K. W. Wojciechowski // Molecular Physics Reports. – 1995. – V. 10. – P. 129–136.

63. Vasiliev A. A. Elastic properties of a two–dimensional model of crystals containing particles with rotational degrees of freedom / A. A. Vasiliev, S. V. Dmitriev, Y. Ishibashi, T. Shigenari // Physical Review B. – 2002. – V. 65. – P. 094101.

64. Kimizuka H. Mechanism for negative poisson ratios over the alpha-beta transition of cristobalite, SiO2: A molecular-dynamics study / H. Kimizuka, H. Kaburaki, Y. Kogure // Physical Review Letters. – 2000. – V. 84. – P. 5548–5551.

65. Attard D. Auxetic behaviour from rotating rhombi / D. Attard and J. N. Grima // Physica Status Solidi B. – 2008. – V. 245. – P. 2395-2404.

66. Grima J. N. Auxetic behaviour from stretching connected squares / J. N. Grima, P. S. Farrugia, C. Caruana, R. Gatt and D. Attard // J. Mater. Sci. – 2008. – V. 34. – P. 5962–5971.

67. Grima J. N. On the auxetic properties of rotating rhombi and parallelograms: A preliminary investigation / J. N. Grima,

P. S. Farrugia, R. Gatt and D. Attard // Physica Stat. Sol. B. – 2008. – V. 245. – P. 521–529.

68. Grima J. N. On the role of rotating tetrahedra for generating auxetic behaviour in NAT and related systems / J. N. Grima, V. Zammit, R. Gatt, D. Attard, C. Caruana and T. G. C. Bray // J. Non-Cryst. Sol. – 2008. – V. 354. – P. 4214–4220.

69. Narojczyk J. W. Elastic properties of the fcc crystals of soft spheres with size dispersion at zero temperature / J. W. Narojczyk and K. W. Wojciechowski // Physica Status Solidi B. – 2008. – V. 245. – P. 606.

70. Narojczyk J. W. Elastic properties of degenerate f. c. c. crystal of polydisperse soft dimers at zero temperature / J. W. Narojczyk and K. W. Wojciechowski // J. Non-Cryst. Solids. – 2010. – V. 356. – P. 2026.

71. Novikov V. V. Negative Poisson coefficient of fractal structures / V. V. Novikov and K. W. Wojciechowski // Physics Solid State. – 1991. – V. 41. – P. 1970.

72. Manley M. E. Impact of intrinsic localized modes of atomic motion on materials properties / M. E. Manley // Acta Mater. – 2010. – V. 58. – N. 8. – P. 2926–2935.

73. Archilla J. F. R. Long range annealing of defects in germanium by low energy plasma ions / J. F. R. Archilla, S. M. M. Coelho, F. D. Auret, V. I. Dubinko and V. Hizhyakov // Physica D. – 2015. – V. 297. – P. 56.

74. Archilla J. F. R. Ultradiscrete kinks with supersonic speed in a layered crystal with realistic potentials / J. F. R. Archilla,

Yu. A. Kosevich, N. Jiménez, V. J. Sánchez-Morcillo and L. M. García-Raffi // Physical Rev. E. – 2015. – V. 91. – P. 022912.

75. Archilla J. F. R. Discrete breathers for understanding reconstructive mineral processes at low temperatures / J. F. R. Archilla, J. Cuevas, M. D. Alba, M. Naranjo and J. M. Trillo // J. Physical Chem. B. – 2006. – V. 110. – P. 24112.

76. Dubinko V. I. Reaction-rate theory with account of the crystal anharmonicity / V. I. Dubinko, P. A. Selyshchev, J. F. R. Archilla // Physical Rev. E. – 2011. – V. 83. – P. 041124.

77. Dubinko V. I., Nonlinear Localized Travelling Excitations in Crystals / V. I. Dubinko, J. F. R. Archilla, S. V. Dmitriev, V. Hizhnyakov in Quodons in Mica. // Springer Series in Materials Science. – 2015. – V. 221. – P. 381.

78. Dubinko V. I. Modification of reaction rates under irradiation of crystalline solids: Contribution from intrinsic localized modes / V. I. Dubinko, A. V. Dubinko // Nucl. Instrum. Meth. Physical Res. B. – 2013. – V. 303. – P. 133.

79. Dubinko V. I. Radiation-induced formation, annealing and ordering of voids in crystals: Theory and experiment / V. I. Dubinko, A. G. Guglya, S. E. Donnelly // Nucl. Instrum. Meth. Physical Res. B. – 2011. – V. 269. – P. 1634.

80. Dubinko V. I. Radiation damage and recovery due to the interaction of crystal defects with anharmonic lattice excitations / V. I. Dubinko, F. M. Russell // J. Nucl. Mater. – 2011. – Vol. 419 – P. 378–385.

81. Dubinko V. I. Plasticization of face–centered metals under electron irradiation / V. I. Dubinko, A. N. Dovbnya, V. A. Kushnir, I. V. Khodak, V. P. Lebedev, V. S. Krylovskiy, S. V. Lebedev, V. F. Klepikov, P. N. Ostapchuk // Phys. Solid State. – 2012. – Vol. 54 – No. 12 – P. 2442–2449.

82. Baimova J. A. Discrete breathers in graphane: Effect of temperature / J. A. Baimova, R. T. Murzaev, I. P. Lobzenko, S. V. Dmitriev, K. Zhou // Journal of Experimental and Theoretical Physics. – 2016. – Vol. 122 – No. 5 – P. 869–873.

83. Baimova J. Clusters of discrete breathers in carbon and hydrocarbon nanostructures / J. Baimova, I. Lobzenko, S. Dmitriev // Materials Science Forum. – 2016. – Vol. 845 – P. 255–258.

84. Baimova J. A. Discrete breathers in carbon and hydrocarbon nanostructures / J. A. Baimova, E. A. Korznikova, I. P. Lobzenko, S. V. Dmitriev // Reviews on Advanced Materials Science. – 2015. – Vol. 42 – No. 1 – P. 68–82.

85. Haas M. Prediction of high–frequency intrinsic localized modes in Ni and Nb / M. Haas, V. Hizhnyakov, A. Shelkan, M. Klopov, A. J. Sievers // Physical Review B. – 2011. – Vol. 84 – P. 144303.

86. Hizhnyakov V. Modeling of self-localized vibrations and defect formation in solids / V. Hizhnyakov, M. Haas, A. Pishtshev, A. Shelkan, M. Klopov // Nuclear Instruments Methods. – 2013. – Vol. B 303 – P. 91.

87. Hizhnyakov V. Theory and molecular dynamics simulations of intrinsic localized modes and defect formation in solids /

V. Hizhnyakov, M. Haas, A. Shelkan, M. Klopov // Physica Scripta. – 2014. – Vol. 89 – P. 044003.

88. Hizhnyakov V. Standing and moving discrete breathers with frequencies above the phonon spectrum / V. Hizhnyakov, M. Haas, A. Shelkan, M. Klopov // Springer Series in Materials Science. – 2015. – Vol. 221 – P. 229–245.

89. Khadeeva L. Z. Lifetime of gap discrete breathers in diatomic crystals at thermal equilibrium / L. Z. Khadeeva, S. V. Dmitriev // Physical Review B. – 2011. – Vol. 84 – No. 14 – P. 144304.

90. Захаров П. В. Возбуждение щелевых дискретных бризеров в кристалле состава A3B потоком частиц / П. В. Захаров, М. Д. Старостенков, А. М. Ерёмин, Е. А. Корзникова, С. В. Дмитриев // Физика твердого тела. – 2017. – Т. 59 – № 2.

91. Jin W. Microstructure, mechanical properties and static recrystallization behavior of the rolled ZK60 magnesium alloy sheets processed by electropulsing treatment / W. Jin, J. Fan, H. Zhang, Y. Liu, H. Dong, B. Xu // Journal of Alloys and Compounds. – 2015. – Vol. 646 – P. 1–9.

92. Stolyarov V. V. Deformability and nanostructuring of TiNi shape-memory alloys during electroplastic rolling / V. V. Stolyarov // Material Science and Engineering A. – 2009. – Vol. 503. – P. 18.

93. Potapova A. A. Deformability and structural features of shape memory TiNi alloys processed by rolling with current / A. A. Potapova, V. V. Stolyarov // Material Science and Engineering A. – 2013. – Vol. 579 – P. 114.

94. Takeno S. Nonlinear lattices generated from harmonic lattices with geometric constraints / S. Takeno, S. V. Dmitriev, P. G. Kevrekidis, A. R. Bishop // Physical Review B – 2005. – Vol. 71 – P. 014304.

95. Kevrekidis P. G. Rich example of geometrically induced nonlinearity: from rotobreathers and kinks to moving localized modes and resonant energy transfer / P. G. Kevrekidis, S. V. Dmitriev, S. Takeno, A. R. Bishop, E. C. Aifantis // Phys. Rev. – 2004. – Vol. E 70 – P. 066627.

96. Корзникова Е. А. Молекулярно-динамическое изучение дискретных бризеров с жестким типом нелинейности в моноатомной двумерной решетке с морзевским взаимодействием / Е. А. Корзникова, Д. И. Бокий, С. Ю. Фомин, Дмитриев С. В. // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2015. – Т. 12. № 3. – С. 311–315.

97. Мурзаев Р. Т. Свойства неподвижных дискретных бризеров в альфа-уране / Р. Т. Мурзаев, Е. А. Корзникова, Д. И. Бокий, С. Ю. Фомин, С. В. Дмитриев // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2015. Т. 12. № 3. – С. 324–329.

98. Dmitriev S. V. Auxeticity from nonlinear vibrational modes / S. V. Dmitriev, E. A. Korznikova, D. I. Bokij and K. Zhou // Physica Status Solidi B. – 2016. – V. 253. – I. 7. – P. 1310–1317.

99. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2016610362, Программа для исследования нелинейных локализованных колебаний в ауксетических материалах. Авторы:

Корзникова Е. А., Бокий Д. И., Дмитриев С. В., Фомин С. Ю. – 2016.

100. Кистанов А. А. Почему существуют дискретные бризеры в двумерных и трехмерных моноатомных кристаллах Морзе? / А. А. Кистанов, Е. А. Корзникова, К. С. Сергеев, Д. А. Шепелев, А. Р. Давлетшин, Д. И. Бокий, С. В. Дмитриев // Письма о материалах. – 2016. – Т. 6. – № 3. – С. 221–226.

Научное издание

Корзникова Елена Александровна
Бокий Дмитрий Игоревич
Дмитриев Сергей Владимирович

Нелинейная динамика гексагональной решетки

Монография

Изображение на обложке с сайта
https://previews.123rf.com/images/kenall/kenall1701/kenall170100094/69541443-vector-halftone-pattern-effect-no-gradient-spiral-hexagon-honeycomb.jpg

Издательство «Наукоемкие технологии»
ООО «Корпорация «Интел Групп»
http://publishing.intelgr.com
E-mail: publishing@intelgr.com
Тел.: (812) 945-50-63

ISBN 978-5-6041427-1-4

Подписано в печать 10.08.2018.
Формат 60×84/16.
Бумага офсетная. Печать офсетная.
Объем 7,1 печ.л. Тираж 500 экз.