The background of the entire page is a repeating pattern of a two-dimensional lattice of spheres. The spheres are arranged in a regular grid, with each sphere slightly offset from the others to create a three-dimensional effect. The spheres are rendered in shades of gray, with some appearing as simple circles and others as slightly elongated, overlapping shapes that suggest depth. The overall effect is a textured, crystalline background.

Корзникова Е. А.  
Фомин С. Ю.  
Дмитриев С. В.

# **Локализованные колебания в двумерных решетках**

Корзникова Е. А., Фомин С. Ю., Дмитриев С. В.

**ЛОКАЛИЗОВАННЫЕ КОЛЕБАНИЯ  
В ДВУМЕРНЫХ РЕШЕТКАХ**

Монография

Санкт-Петербург  
Научно-технологические институты  
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.

Корзникова Е. А., Фомин С. Ю., Дмитриев С. В.  
К 66 Локализованные колебания в двумерных решетках: монография. – СПб.: Научное издание технологий, 2018. – 130 с.

ISBN 978-5-6041427-6-9

В данной монографии рассматривается проблема существования локализованных колебаний – дискретных бризеров в ангармонических дискретных решетках. Особое внимание уделено влиянию размерности на возможность существования и свойства дискретных бризеров. В монографии проанализированы концепции соотношения делокализованных и локализованных колебательных мод. Выделяются и описываются характерные особенности различных подходов реализации дискретных бризеров. Описан пример дискретного бризера в низкосимметричной решетке урана.

Монография предназначена для научных работников, работающих в области физики конденсированного состояния, а также может быть полезна магистрантам, аспирантам, а также преподавателям соответствующих специальностей.

УДК 541.6  
ББК 22.31

*Издание осуществлено при финансовой поддержке Российского Научного фонда, грант № 14-13-00982*

© Корзникова Е. А., 2018  
© Фомин С. Ю., 2018  
© Дмитриев С. В., 2018  
© Оформление. Издательство «Научное издание технологий», 2018

**ISBN 978-5-6041427-6-9**

## ОГЛАВЛЕНИЕ

ОГЛАВЛЕНИЕ .....	3
ВВЕДЕНИЕ .....	5
ГЛАВА 1. ОБЗОР ЛИТЕРАТУРЫ ПО ДИСКРЕТНЫМ БРИЗЕРАМ .....	13
1.1. Дискретные бризеры в ряду других колебательных мод кристаллов. История вопроса .....	13
1.2. О роли дискретных бризеров в физике и механике кристаллов. О возможности их надежной экспериментальной идентификации .....	18
1.3. Основные успехи и нерешенные проблемы исследования дискретных бризеров в кристаллах методами атомистического моделирования .....	21
1.4. Метод молекулярной динамики и его программные реализации .....	23
1.5. Проблема начальных условий для возбуждения дискретных бризеров в кристаллах .....	30
1.6. Выводы по главе 1 .....	40
ГЛАВА 2. ДБ В ДВУМЕРНЫХ КРИСТАЛЛАХ МОРЗЕ .....	42
2.1. Моноатомный двумерный кристалл .....	42
2.1.1. Детали компьютерного эксперимента .....	42
2.1.2. Плотность фононных состояний .....	44
2.1.3. Возбуждение ДБ с использованием анзаца .....	46
2.1.4. Результаты моделирования свойств ДБ .....	47
2.2. Реализация коротковолновых фононных мод в двумерном кристалле и анализ их свойств .....	54
2.3. Способ возбуждения ДБ с использованием локализации коротковолновых фононных мод .....	57
2.3.1. Возбуждение низкосимметричного ДБ из коротковолновой фононной моды .....	57
2.3.2. Высокосимметричный ДБ, полученный из коротковолновой фононной моды .....	62

2.3.3. Расчет полей перемещений в окрестности высокосимметричного ДБ в 2D кристалле .....	63
2.3.4. Свойства высокосимметричного ДБ .....	65
2.4. Биатомный кристалл .....	70
2.4.1. Плотность фононных состояний.....	70
2.4.2. Исследование влияния поляризации на ДБ с мягким типом нелинейности.....	71
2.4.3. Анализ зависимости частоты коротковолновых фононных мод от амплитуды .....	80
2.4.4. Реализация ДБ с жестким типом нелинейности посредством локализации коротковолновых фононных мод .....	81
2.5. Выводы по главе 2.....	83
ГЛАВА 3. ДБ В ТРЕХМЕРНЫХ КРИСТАЛЛАХ МОРЗЕ .....	86
3.1. Возбуждение дискретных бризеров в 3D кристалле с помощью анзаца .....	87
3.2. Анализ зависимости частоты коротковолновых фононных мод от амплитуды .....	93
3.3. Возбуждение ДБ в трехмерных кристаллах посредством локализации коротковолновых фононных мод .....	96
3.4. Выводы по главе 3.....	100
ГЛАВА 4. ДБ В АЛЬФА-УРАНЕ .....	101
4.1. Описание модели .....	102
4.2. Результаты моделирования .....	105
4.3. Выводы по главе 4.....	110
ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ.....	111
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ .....	113

## ВВЕДЕНИЕ

Физика нелинейных явлений, активно развиваемая с середины прошлого столетия, существенно обогатила понятийный аппарат современного естествознания. В частности, возникло понятие солитона, то есть уединенной волны, способной двигаться в среде практически не рассеивая свою энергию и, более того, сохраняя свою индивидуальность при столкновении с другими солитонами [1,2]. Математиками были найдены несколько примеров нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных, допускающих точные решения в виде волн солитонного типа, к ним относятся уравнения Кортевега-де-Фриза, Клейн-Гордона, нелинейное уравнение Шредингера и ряд других. Оказалось, что солитоны являются вездесущими объектами, связанными с различными физическими явлениями, например, волны цунами на поверхности океана, самофокусирующееся распространение света в оптически нелинейной среде, доменные стенки или дислокации в кристаллах и т.п. Устойчивая пространственная локализация энергии в солитонах обусловлена тем, что нелинейность среды компенсирует явление дисперсии, то есть расплывание волновых пакетов. Следующим важным шагом в развитии нелинейной физики стало открытие солитонов в **дискретных** нелинейных системах. Первой полностью интегрируемой нелинейной цепочкой, для которой были получены точные решения в виде уединенных волн, стала цепочка Тоды [3], которая в континуальном пределе переходит в уравнение Кортевега-

де-Фриза. Вскоре была открыта и интегрируемая цепочка Абловица-Ладика [4], в континуальном приближении переходящая в нелинейное уравнение Шредингера. Существование интегрируемых нелинейных цепочек показало, что дискретность среды не является препятствием для движения нелинейных пространственно локализованных возбуждений, несмотря на отсутствие трансляционной симметрии. Однако число известных дискретных нелинейных систем, допускающих точные солитонные решения, было весьма ограниченным. Три десятилетия назад Долгов показал возможность пространственной локализации колебательной энергии в неинтегрируемой дискретной нелинейной цепочке [5]. Позже в целом ряде математических работ было доказано, что подобные решения могут быть точными и устойчивыми [6]. Такие решения получили название дискретных бризеров (ДБ). Данный термин происходит от английского слова *breath* (дыхание), отражая периодичность колебания ДБ во времени, подобно дыханию.

Исследование широкого класса систем различной размерности показало, что дискретность и нелинейность среды являются двумя необходимыми ингредиентами для существования ДБ, в то время как конкретный вид нелинейного потенциала взаимодействия между частицами влияет лишь на свойства ДБ, но не на саму возможность их существования. ДБ не рассеивают свою энергию потому, что их частота лежит вне спектра малоамплитудных колебаний решетки. Выход частоты ДБ из спектра происходит за счет зависимости частоты нелинейных колебаний от амплитуды. Если частота ДБ растет

(уменьшается) с амплитудой, говорят, что он демонстрирует жесткий (мягкий) тип нелинейности.

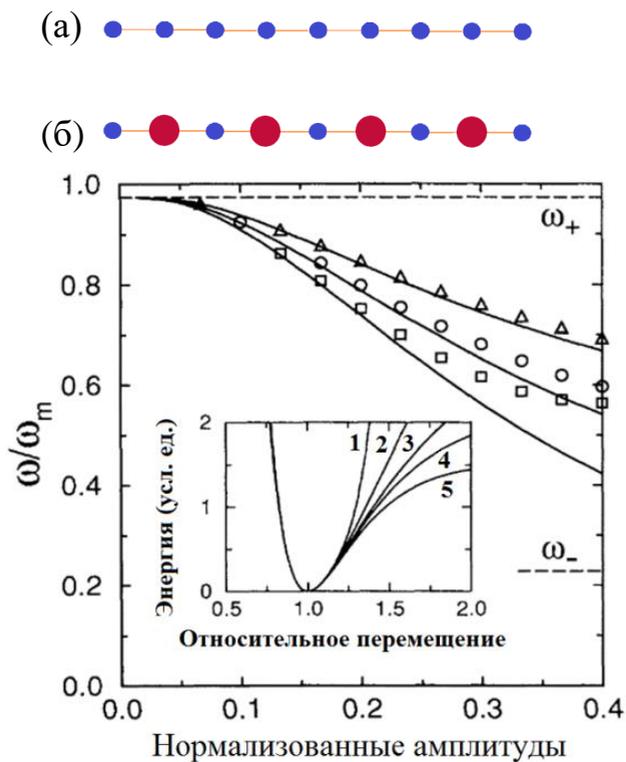


Рисунок 1.1 – а) Одномерные моноатомный (сверху) и биатомный (снизу) кристаллы. б) Безразмерная частота ДБ как функция амплитуды щелевого ДБ для биатомного кристалла для потенциалов 3 (треугольники), 4 (кружки) и 5 (квадраты). На вставке показаны пять парных межатомных потенциалов: 1-  $K_2$ - $K_3$ - $K_4$ , 2 - Тоды, 3 - Борн-Маера, 4 - Леннарда-Джонса и 5 - Морзе. Щель в фоновом спектре биатомного кристалла располагается в диапазоне частот от  $\omega$  до  $\omega_+$ .

Очевидно, что ДБ с мягким типом нелинейности возможны только в решетках, имеющих запрещенную зону (щель) в спектре малоамплитудных колебаний.

Спустя десятилетие после пионерских математических работ по изучению ДБ, их стали находить экспериментаторы в нелинейных дискретных средах разной физической природы, например, в массивах джозефсоновских сверхпроводящих контактов, в массивах нелинейных оптических волноводов, в периодических электрических цепях, в цепочках микромеханических кантелеверов и т.д. По прошествии еще одного десятилетия, исследователи, изучающие ДБ, стали уделять внимание кристаллам, которые являются природными дискретными и нелинейными средами, если их рассматривать на атомном уровне.

Первая работа, выполненная с использованием метода молекулярной динамики (МД), в которой была показана возможность возбуждения ДБ в кристалле, касалась щелочно-галогенидного кристалла NaI [7]. Для этого же кристалла был проведен ряд экспериментов, доказывающих наличие в них ДБ в условиях теплового равновесия при повышенных температурах [8]. Совершенно не случайно, что первые попытки исследования ДБ в кристаллах связаны с кристаллом NaI. О причинах следует поговорить особо, поскольку это пояснит мотивацию к данной работе.

Отправной точкой является статья Киселева и др. [9], где исследовался одномерный кристалл (рисунок 1.1 (а)) с атомами, взаимодействующими посредством одного из пяти парных межатомных потенциалов: полиномиального  $K_2$ - $K_3$ - $K_4$ , Годы, Борн-

Маера, Леннарда-Джонса и Морзе, которые изображены на вставке на рисунке 1.1 (б) под цифрами от 1 до 5, соответственно. Потенциалы нормированы так, что совмещены их точки минимума, в которых совпадают значения потенциалов, а также первые и вторые производные. Сразу заметим, что потенциалы 1 и 2 не могут применяться для описания межатомных взаимодействий в кристаллах, поскольку они описывают связь, которая не разрывается на бесконечном удалении атомов. Потенциалы 3, 4 и 5 качественно подходят для этих целей и широко используются в МД расчетах.

Строгие математические расчеты, проведенные в работе [9], показали, что в одномерных моноатомных кристаллах с потенциалами 2, 3, 4 и 5 ДБ существовать не могут, поскольку данные потенциалы обеспечивают мягкий тип нелинейности, а щели в спектре моноатомного кристалла нет. Рассмотрев биатомный кристалл с чередующимися легкими и тяжелыми атомами, авторам удалось возбудить щелевые ДБ, то есть ДБ с частотами, лежащими в щели фоннного спектра. Безразмерная частота щелевого ДБ как функция его амплитуды представлена на рисунке 1.1 (б) для потенциалов 3 (треугольники), 4 (кружки) и 5 (квадраты). Отметим, что среди трех данных потенциалов наиболее мягким является потенциал Морзе, поскольку частота ДБ для него спадает с амплитудой быстрее, чем для двух других потенциалов.

На основании результатов данной работы был сделан вывод о том, что реалистичные парные межатомные потенциалы дают мягкий тип нелинейности и в кристаллах со сплошным спектром не могут реализовываться ДБ с частотами выше фоннного спектра.

Следовательно, при поиске ДБ внимание следует уделять только кристаллам, имеющим достаточно широкую щель в фоннном спектре. Например, атом натрия в 5,5 раз легче атома йода, что обеспечивает наличие щели в фоннном спектре кристалла NaI и, следовательно, возможность существования в нем щелевых ДБ.

Данный вывод затормозил поиски ДБ в чистых металлах и других важных кристаллах, не имеющих щели в фоннном спектре.

Возникает вопрос, не является ли сделанный вывод следствием одномерности кристалла, рассмотренного в [9]? Нет ли возможности возбудить ДБ с частотами выше фоннного спектра в моноатомных кристаллах Морзе размерности два и три? Данное исследование было направлено на то, чтобы ответить на эти вопросы и ответы оказались положительными.

Таким образом, целью работы, представленной в монографии, являлось возбуждение и моделирование свойств ДБ в моноатомных и биатомных кристаллах Морзе размерности два и три, с использованием метода молекулярной динамики. Достижение данной цели потребовало решения следующих задач:

1. Создание молекулярно-динамических моделей кристаллов Морзе различного состава и различной размерности.
2. Поиск начальных условий, приводящих к возбуждению ДБ в рассматриваемых моделях кристаллов ДБ.
3. Определение свойств ДБ, таких, как зависимость частоты от амплитуды, степень пространственной локализации, способность или неспособность к движению по кристаллу и др.

4. Объяснение механизмов существования ДБ в двумерных и трехмерных кристаллах Морзе.

#### **Научная новизна:**

1. Впервые показана возможность возбуждения ДБ в моноатомных двумерных и трехмерных кристаллах Морзе.

2. Впервые для кристаллов Морзе реализован способ возбуждения ДБ путем наложения колоколообразных функций на коротковолновую фононную моду, частота которой в нелинейном режиме выходит из фононного спектра малоамплитудных колебаний кристалла.

3. Впервые доказано существование ДБ нового типа в двумерных и трехмерных кристаллах Морзе, отличающихся более высокой симметрией от известных ранее ДБ, локализованных в одном плотноупакованном атомном ряду.

4. Установлено, что в кристаллах Морзе различные колебательные моды в нелинейном режиме могут проявлять как мягкий, так и жесткий тип нелинейности, в случае если больший вклад в динамику атомов дает мягкий хвост или жесткое ядро потенциала, соответственно.

#### **Научная и практическая ценность.**

Потенциал Морзе является одним из наиболее популярных межатомных потенциалов, используемых в молекулярной динамике для решения широкого круга задач физики конденсированного состояния и материаловедения. Доказательство существования ДБ с жестким типом нелинейности в **моноатомных** двумерных и трехмерных кристаллах Морзе развеяло существовавшее долгое время

предположение о том, что в кристаллах с реалистичными межатомными взаимодействиями (имеющими жесткое ядро и мягкий хвост) ДБ с частотами выше фононного спектра существовать не могут. Данное предположение строилось на математически обоснованном факте, что в одномерных кристаллах Морзе такие ДБ действительно не существуют. Следовательно, в монографии наглядно продемонстрировано нетривиальное значение размерности кристаллической решетки в вопросах существования и изучения свойств ДБ. Настоящая работа стимулирует постановку экспериментальных исследований по обнаружению ДБ с жестким типом нелинейности в кристаллах с простой структурой, например, в чистых металлах, не имеющих щели в фононном спектре.

# **ГЛАВА 1. ОБЗОР ЛИТЕРАТУРЫ ПО ДИСКРЕТНЫМ БРИЗЕРАМ**

Несмотря на то, что дискретные бризеры в кристаллах стали активно изучаться всего лишь около десятилетия назад, уже имеется значительный объем опубликованной литературы [10], анализ которой и составил основу данной главы. Будут освещены вопросы, касающиеся дискретных бризеров в кристаллах, с точки зрения возможности их компьютерного моделирования методом молекулярной динамики и изучения их роли в физике конденсированного состояния.

## **1.1. Дискретные бризеры в ряду других колебательных мод кристаллов. История вопроса**

В широко известной монографии [11] представлена физика малоамплитудных фононных колебаний кристаллической решетки. Разнообразные проблемы физики кристаллов трактуются в ней с точки зрения динамической теории решетки. В частности, введение понятия фононов позволило сформулировать и решить ряд задач, относящихся к кинетическим явлениям в кристаллах. Фононы представляют собой точные решения линеаризованных уравнений колебания кристаллической решетки. Согласно принципу суперпозиции решений линейных систем обыкновенных дифференциальных уравнений, любая линейная комбинация решений

также является решением системы. С физической точки зрения это означает, что линейные фононы не взаимодействуют друг с другом и не обмениваются энергией. Кроме того, их частота не зависит от амплитуды. Фононы позволяют объяснить такие явления как дисперсия волн, теплопроводность, теплоемкость, но с их помощью невозможно предсказать, например, тепловое расширение кристаллической решетки. Последняя задача может быть решена лишь с учетом ангармонизмов межатомных взаимодействий [12]. Ангармонизмы приводят к взаимодействию фононов, обмену энергией между ними, снижению длины их свободного пробега.

Бездефектных макроскопических кристаллов в природе не существует. Важным классом колебательных мод в кристаллах являются моды, локализованные на дефектах. Самый простой пример – это колебания, локализованные на примесных атомах. Если масса примесного атома равна  $m$ , а жесткость его связи с решеткой  $\gamma$ , то частота его малоамплитудных колебаний около положения равновесия будет равна  $\omega = \sqrt{\gamma/m}$ . Эта частота может оказаться либо выше фононного спектра, либо в запрещенной зоне, при ее наличии. Время жизни таких мод при отсутствии возмущений (например, тепловых колебаний) бесконечно. Такие моды могут существовать как при малых, так и при значительных амплитудах. Другим важным примером дефектных мод являются моды, локализованные на линейных и планарных дефектах, например, на дислокациях и границах раздела или на свободной поверхности. Акустические волны, распространяющиеся вдоль поверхности и экспоненциально затухающие с глубиной, называются рэлеевскими

[13]. Такие волны также могут быть найдены из линеаризованных континуальных уравнений, описывающих линейно-упругую среду.

Лишь тридцать лет назад, в работе Долгова [5] было впервые показано, что нелинейная и дискретная среда с трансляционной симметрией способна поддерживать пространственно локализованные колебательные моды и в отсутствие дефектов. Два года спустя к аналогичному выводу пришли Сиверс и Такено [14], назвав данные колебательные моды *intrinsic localized modes*. Поскольку их работа была опубликована в престижном западном журнале, она привлекла внимание широкой научной общественности и вызвала взрыв интереса к таким модам колебаний, которые позже получили другое название “*discrete breathers*” (по-русски – дискретные бризеры) для которых принята аббревиатура ДБ. Можно назвать несколько обзорных работ, где собраны основные достижения исследований дискретных бризеров в нелинейных дискретных системах [15,16]. Пионерские работы были направлены на строгое математическое обоснование дискретных бризеров как точных решений нелинейных дифференциальных уравнений, описывающих динамику решетки. Также уделялось внимание исследованию их устойчивости. При этом исследовались, как правило, системы низкой размерности с упрощенными потенциалами взаимодействия [6,17,18]. Анализ более сложных, а, следовательно, и более реалистичных систем представлял бы значительные математические трудности. Спустя примерно десять лет после математического открытия дискретных бризеров в нелинейных дискретных системах стали появляться работы по их экспериментальному наблюдению, например, в массивах оптических

волноводов [19,20], массивах сверхпроводящих джозефсоновских контактов [21], периодических системах связанных механических осцилляторов [22,23] и других физических системах [15,16].

С некоторой задержкой появились первые работы по атомистическому моделированию дискретных бризеров в кристаллах. Исторически первой работой, датированной 1997 годом, стало молекулярно-динамическое исследование щелевых дискретных бризеров в щелочно-галоидном кристалле NaI [7]. Эта работа стимулировала постановку эксперимента по наблюдению дискретных бризеров в данном кристалле, в условиях теплового равновесия при повышенной температуре, методом неупругого рассеяния нейтронов [8]. Далее число работ по атомистическому моделированию дискретных бризеров в кристаллах стремительно растет, множится и количество экспериментальных исследований, подтверждающих их существование. Среди успешных молекулярно-динамических исследований отметим изучение дискретных бризеров в ковалентных кристаллах Si и Ge [24], в графене [25,26], в углеродных нанотрубках [27-29], в упорядоченных сплавах [30-34], на краю растянутой графеновой наноленты [35,36], в графене (полностью наводороженном графене) [37], в ГЦК Ni и ОЦК Nb, W, Fe и V [38,39]. Экспериментальные работы по обнаружению дискретных бризеров в кристаллах частично отражены в обзоре [40]. Выделим также и ряд более поздних экспериментальных исследований [8,41,42], более детально представленных в обзоре [10].

Опишем некоторые свойства дискретных бризеров, установленные в результате вышеупомянутых молекулярно-

динамических и экспериментальных исследований. Дискретные бризеры в однокомпонентных кристаллах, таких как графен [25,26] чистые металлы [38,39], ковалентные кристаллы [24], имеют частоты выше максимальной частоты бесщелевого фононного спектра и демонстрируют жесткий тип нелинейности (то есть их частота растет с амплитудой). В двухкомпонентных кристаллах с большой разницей масс компонент, например, в щелочно-галогидном кристалле NaI и в упорядоченном сплаве Pt<sub>3</sub>Al, легко возбуждаются щелевые дискретные бризеры (имеющие частоты в щели фононного спектра) с мягким типом нелинейности. Такие дискретные бризеры локализованы практически на одном атоме легкой компоненты. Щель в фононном спектре графена можно индуцировать приложением однородной упругой деформации, что делает возможным возбуждение в нем щелевых дискретных бризеров с мягким типом нелинейности [26]. Амплитуда колебания дискретных бризеров может достигать величины порядка 0.1 межатомного расстояния. Энергия дискретных бризеров может составлять от долей эВ до нескольких эВ. Дискретные бризеры в графене и трехмерных ковалентных кристаллах Si и Ge не могут перемещаться по кристаллу. Напротив, в чистых металлах дискретные бризеры подвижны и их максимальная скорость достигает порядка 0.1 скорости звука в кристалле. Дискретные бризеры в углеродных нанотрубках могут аккумулировать достаточно энергии для создания дефекта 5-7-7-5 в случае, если нанотрубка находится под действием достаточно большого растягивающего усилия, которое делает образование таких дефектов энергетически выгодным [27]. Неподвижные Дискретные бризеры в графене могут

обмениваться колебательной энергией, если они расположены достаточно близко друг к другу [43,44]. Движущиеся дискретные бризеры в металлах сталкиваясь, приводят к еще большей степени локализации энергии. В силу нелинейности и асимметрии межатомных взаимодействий дискретные бризеры вызывают эффект локального «теплового расширения» кристаллической решетки, так, что центры колебания атомов смещаются от решеточных положений равновесия в сторону от центра дискретных бризеров. Дискретные бризеры существуют в тепловом равновесии, причем, с повышением температуры растет концентрация дискретных бризеров с большим временем жизни (десятки периодов колебаний) [45], при этом время жизни тепловых флуктуаций составляет лишь несколько колебательных периодов.

## **1.2. О роли дискретных бризеров в физике и механике кристаллов. О возможности их надежной экспериментальной идентификации**

На основе известных свойств дискретных бризеров можно сделать обоснованные предположения об их роли в физике и механике кристаллов [10]. Однако следует отметить, что количественные вклады дискретных бризеров в те или иные процессы, протекающие в твердых телах, еще не установлены.

Концентрируя на себе значительную энергию, дискретные бризеры вносят вклад в теплоемкость кристаллов [42], а подвижные

дискретные бризеры также и в теплопроводность. Дискретные бризеры могут переносить электрический заряд в кристаллах, где в обычных условиях концентрация свободных носителей заряда весьма мала [46-49]. Колебания большой амплитуды в ядре дискретных бризеров, как уже отмечалось, приводят к локальной дилатации решетки, что должно вносить вклад в тепловое расширение кристалла [50]. Дискретные бризеры, возбужденные на поверхности монокристалла германия его плазменной обработкой, способны трансформировать дефекты кристаллической структуры на значительной глубине, перенося энергию в концентрированной форме на значительные расстояния [41]. Нелинейные кооперированные колебания решетки ответственны за образование вакансий [51]. Согласно работам [52-54], дискретные бризеры вносят значительный вклад в кинетику термоактивируемых реакций в кристаллах.

Роль дискретных бризеров становится более ощутимой в процессах, далеких от термодинамического равновесия, например, при пластической деформации, при облучении, при протекании электрического тока высокой плотности. Например, эффект электропластичности [55,56] или электроимпульсного отжига металлов после интенсивной пластической деформации [57] можно объяснить за счет возбуждения дискретных бризеров потоком электронов высокой плотности [58]. Возбуждаемые дискретные бризеры способны снижать энергетический барьер образования вакансий и межузельных атомов [59-62], а точечные дефекты, в свою очередь, способствуют переползанию дислокаций и их отрыву от стопоров, повышая пластичность материала.

Каковы перспективы экспериментального обнаружения дискретных бризеров в кристаллах? Очевидно, что их невозможно увидеть методами прямого разрешения, поскольку они не являются топологическими дефектами и время их жизни намного меньше времени экспозиции при известных методах прямого разрешения. Если концентрация дискретных бризеров достаточно высока, то их можно увидеть, измеряя спектры колебаний, например, по методу неупругого рассеяния нейтронов или рентгеновского рассеяния. Частоты дискретных бризеров должны лежать вне спектра малоамплитудных колебаний кристалла. Однако в обычных условиях теплового равновесия концентрация термоактивируемых дискретных бризеров невелика, согласно оценке, сделанной для ионного кристалла NaI [63]. По-видимому, наиболее достоверные результаты по идентификации дискретных бризеров будут получены тогда, когда будет развита теория, определяющая вклад дискретных бризеров в легко измеряемые макроскопические свойства кристаллов, такие как тепловое расширение, теплоемкость, теплопроводность и другие. По аналогии с вакансиями, можно заключить, что концентрация дискретных бризеров в неравновесных процессах может на порядки превосходить их равновесные значения. Следовательно, в неравновесных процессах роль дискретных бризеров должна быть более осязаемой.

### **1.3. Основные успехи и нерешенные проблемы исследования дискретных бризеров в кристаллах методами атомистического моделирования**

В изучении свойств дискретных бризеров методами атомистического моделирования достигнут колоссальный прогресс. Как уже отмечалось в разделе 1.1, метод молекулярной динамики позволил описать дискретные бризеры и исследовать их свойства в ковалентных кристаллах [24], в углеродных наноматериалах [25-29,35,36], в графене [37], в упорядоченных сплавах [30-34], в чистых металлах [38,39].

Однако существует ряд проблем, связанных с применением метода МД к изучению дискретных бризеров. Основная из них – это достоверность используемых межатомных потенциалов. Для одних и тех же кристаллов в литературе можно найти несколько различных потенциалов и парадокс заключается в том, что одни потенциалы могут поддерживать существование дискретных бризеров, а другие нет. В качестве примера назовем проблему выбора потенциалов, возникшую при моделировании дискретных бризеров в ковалентных кристаллах. Авторы работы [24] сообщают, что при моделировании дискретных бризеров в кремнии они испытали несколько известных межатомных потенциалов, разработанных для данного кристалла, и лишь потенциал Терсоффа дал положительный результат, а остальные – нет. Удивительно то, что при моделировании дискретных бризеров в алмазе потенциал Терсоффа не дал положительного результата [24], хотя кремний и алмаз имеют одинаковую кристаллическую решетку.

С другой стороны, в работах [64,65] было показано, что потенциал LCВOP [66] поддерживает дискретные бризеры в алмазе. В работе [67] дискретные бризеры в алмазе были получены с использованием другого популярного межатомного потенциала AIREBO [68]. Возникает вопрос, каким потенциалам можно доверять, а каким нет. Ответ на этот вопрос могут дать более общие методы моделирования, не требующие предположений относительно потенциалов межатомного взаимодействия, так называемые первопринципные расчеты. Одним из методов, реализующих данный подход, является метод функционала плотности.

Первой работой, в которой при моделировании дискретных бризеров использовалась теория функционала плотности, была статья [69]. В ней изучены свойства дискретных бризеров в графене (полностью гидrogenизированном графене). В частности, была рассчитана зависимость частоты дискретного бризера от амплитуды, которая лишь при не слишком больших значениях амплитуды качественно совпала с полученной ранее методом молекулярной динамики [70], а при больших амплитудах наблюдалось существенное расхождение результатов. Несколько позже первопринципное моделирование было применено и к моделированию дискретных бризеров в однородно деформированном графене [71]. На этот раз был получен результат, качественно согласующийся с результатом, установленным ранее методом молекулярной динамики [26].

Еще одной важной проблемой при исследовании дискретных бризеров в кристаллах является выбор начальных условий,

порождающих дискретные бризеры в атомистических расчетах. Раздел 1.5 посвящен этому вопросу.

#### **1.4. Метод молекулярной динамики и его программные реализации**

Принципиально метод молекулярной динамики очень прост, численно интегрируется система нелинейных обыкновенных дифференциальных уравнений, описывающих движение атомов в расчетной ячейке. Однако практическая реализация данного метода требует тщательного выбора параметров модели, поскольку они могут сказаться на результате.

Как уже говорилось, первым вопросом, возникающим при формулировке молекулярно-динамической модели, является выбор межатомного потенциала. В данной работе делается принципиальный выбор в пользу потенциала Морзе [72]

$$\varphi(r) = D(e^{-2\alpha(r-r_m)} - 2e^{-\alpha(r-r_m)}) \quad (1.1)$$

где  $\varphi$  – энергия взаимодействия пары атомов, расположенных на расстоянии  $r$  друг от друга а  $D$ ,  $r_m$ ,  $\alpha$  – параметры потенциала, определяющие энергию разрыва связи, равновесное межатомное расстояние и жесткость связи, соответственно (см. рисунок 1.2). Все результаты в данной работе представлены в безразмерных величинах, полагая без потери общности, что  $D=r_m=1$ , чего всегда можно достичь выбором единиц измерения энергии и расстояния. В моноатомном кристалле масса атомов также равна 1, что достигается должным

выбором единицы измерения времени. В биатомных кристаллах массы компонент выбираются согласно стехиометрии кристалла так, что атомная масса тяжелого элемента в 10 раз больше чем легкого, при сохранении плотности кристалла равной плотности в моноатомном случае.

На рисунке 1.2 показана зависимость  $U(r)$  для трех возможных значений параметра  $\alpha = \{5; 10; 20\}$  при  $D = r_m = 1$ . Вертикальными пунктирными линиями показаны радиусы первой координационной сферы для случаев одномерной (1D), двумерной (2D) и трехмерной (3D) решеток. Как видно из зависимости  $U(r)$  в двумерном кристалле при  $\alpha = 10$  и  $\alpha = 20$  взаимодействие имеет место лишь между соседними атомами, т.е. потенциал по сути является ближкодействующим.

Ввиду вышесказанного для анализа влияния коэффициента жесткости связи на нелинейную динамику решетки и на свойства дискретных бризеров были рассмотрены значения  $\alpha = 4$  и  $\alpha = 5$ , для которых равновесное межатомное состояние было  $a = 0.9655659$  и  $a = 0.9881329$  соответственно.

Потенциал Морзе выбран для того, чтобы проверить гипотезу, высказанную во введении о том, что результат работы [9], отрицающий существование дискретных бризеров с жестким типом нелинейности в моноатомных кристаллах Морзе, применим только к одномерным цепочкам, которые и рассматривались в данной работе [9]. В работе исследуются двумерные и трехмерные кристаллы Морзе.

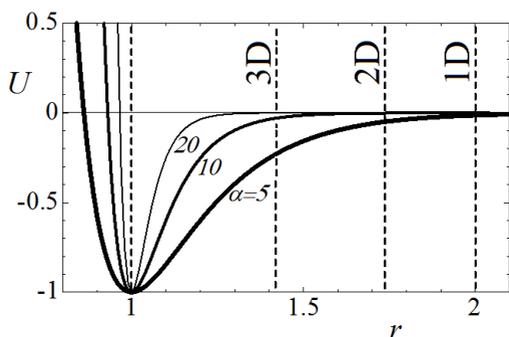


Рисунок 1.2 – Межатомный потенциал Морзе (1.1) для трех значений параметра  $\alpha=\{5;10;20\}$  при  $D=r_m=1$ . Вертикальные пунктирные линии показывают положения вторых соседей для кристаллов различной размерности, если принимать расстояние между ближайшими соседями равным 1.

Отметим, что среди пяти потенциалов, рассмотренных в [9] ( $K_2$ - $K_3$ - $K_4$ , Тоды, Борн-Маера, Леннарда-Джонса и Морзе) потенциал Морзе оказался самым мягким. Это означает, что если потенциал Морзе позволит возбудить дискретный бризер с жестким типом нелинейности, то любой другой из оставшихся потенциалов и подавно даст такую возможность.

Кроме того, часть важных свойств дискретных бризеров в некоторых кристаллах невозможно проанализировать парными межатомными потенциалами. Однако, в сравнении с использованием других дальнедействующих потенциалов, описание межатомных взаимодействий посредством потенциала Морзе способно привести к весьма реалистичным результатам исследования по сравнению с использованием упрощенных межатомных потенциалов, в том числе,

ангармонизмов простого полиномиального вида, которые способны описать взаимодействие лишь ближайших атомов кристалла.

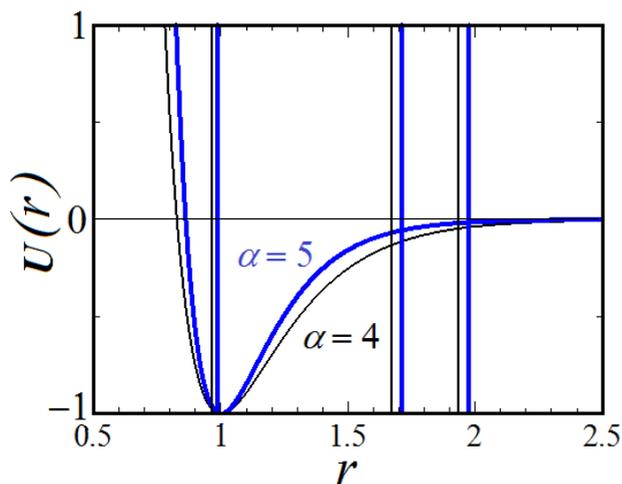


Рисунок 1.3 – Потенциал Морзе (1.1), построенный для значений параметров  $D=r_m=1$  и  $\alpha = 4$  (черная кривая),  $\alpha = 5$  (синяя кривая). Вертикальные линии соответствующего цвета показывают положения первой, второй и третьей координационных сфер в равновесном двумерном кристалле при 0 К.

На рисунке 1.2 видно, что потенциал Морзе имеет точку перегиба, левее которой вторая производная  $d^2U/dr^2$  положительна, а правее – отрицательна. Такая форма кривой зависимости потенциальной энергии от межатомного расстояния свидетельствует о том, что на небольших расстояниях (до точки перегиба) нелинейное взаимодействие атомов носит жесткий характер. С увеличением же расстояния, при переходе в область где  $d^2U/dr^2 < 0$ , тип межатомного

взаимодействия меняется на мягкую нелинейность. В соответствующей литературе этот феномен принято обозначать как «жесткое ядро» (hard core) и «мягкий хвост» (soft tail) потенциала Морзе [10]. Данное свойство является общим для всех без исключения реалистичных межатомных потенциалов, отражая природу межатомных взаимодействий, где на больших расстояниях атомы взаимодействуют на уровне слабых внешних электронных оболочек, что обуславливает межатомное притяжение. На малых расстояниях между атомами действуют значительные по величине силы отталкивания, обусловленные взаимодействием атомных ядер и электронных оболочек первых уровней.

Следует отметить два недостатка, которые приписываются методу молекулярной динамики – это рассмотрение малых объемов вещества и анализ весьма коротких временных интервалов. Действительно, даже  $10^6$  атомов укладываются в куб с ребром в 100 межатомных расстояний, что соответствует примерно 20-30 нм в зависимости от сорта атомов. Увеличение числа атомов до  $10^9$ , анализ которых под силу лишь самым мощным суперкомпьютерам, приводит к увеличению ребра куба всего лишь до 200-300 нм. Временной шаг численного интегрирования в методе молекулярной динамики составляет примерно 1 фс. Поэтому  $10^6$  шагов по времени, на каждом из которых выполняется пересчет сил, действующих на атомы со стороны соседей в пределах радиуса обрезки потенциала, составят всего лишь 1 нс.

Что касается изучения свойств дискретных бризеров в кристаллах, ситуация оказывается весьма благоприятной. Дискретные

бризеры, по определению, пространственно локализованные объекты. Степень их пространственной локализации зависит от типа кристалла и от типа дискретных бризеров, но обычно ядро дискретных бризеров не превосходит по размеру десятков межатомных расстояний, и для их анализ можно ограничиваться сравнительно небольшими расчетными ячейками. Время жизни дискретного бризера может оказаться весьма большим, но практически важным оказывается оценить лишь скорость затухания дискретного бризера, что можно сделать с большой точностью по первой сотне колебаний, то есть за  $10^4$  шагов по времени (сто шагов по времени на один период колебания более чем достаточно для достижения высокой точности интегрирования уравнений движения). Как видим, дискретные бризеры являются весьма удобным объектом исследования методом молекулярной динамики, поскольку не требуется рассматривать большие расчетные ячейки на значительных отрезках времени.

В данной работе всегда использовались периодические граничные условия для того, чтобы избежать влияния свободной поверхности. В этом случае, по сути, рассматривается периодический массив дискретных бризеров. Размер расчетной ячейки всегда выбирался так, чтобы дискретные бризеры были достаточно удалены друг от друга и можно было считать, что они не взаимодействуют.

Для интегрирования уравнений движения применялся явный метод Штормера (Störmer) [73] шестого порядка точности. Его применение основано на том, что в памяти компьютера хранится информация о положениях атомов на четырех последовательных временных шагах. Отметим, что простейшая численная схема Эйлера

требует хранения в памяти двух временных слоев, поскольку решаются дифференциальные уравнения второго порядка. Однако хранение четырех слоев позволяет использовать интерполирующие полиномы более высокой степени и, тем самым, добиться большей точности предсказания перемещений атомов на следующем временном слое [73]. Применение данного метода позволяет добиться за типичное время моделирования дискретного бризера ( $10^4$  шагов по времени) относительной точности сохранения энергии в пределах  $10^{-8}$  -  $10^{-10}$ . Отметим, что метод Штормера применим к уравнениям движения второго порядка, не содержащего первой производной по времени (вязкий член, описывающий трение). Именно такие уравнения решаются при рассмотрении NVE ансамбля. Учет вязкого трения понижает симметрию дифференциального оператора и снижает точность интегрирования до четвертого порядка при учете информации с того же числа временных слоев.

В некоторых случаях на границе расчетной ячейки вводилось вязкое трение. Это делалось для того, чтобы поглотить малоамплитудные волны, испускаемые дискретным бризером при выходе на стационарные колебания или в процессе слабозатухающих установившихся колебаний. Тем самым предотвращалось влияние данного излучения на свойства дискретного бризера.

В некоторых задачах моделирование происходило при нулевом внешнем давлении. С этой целью размер расчетной ячейки изменялся на каждом временном шаге так, чтобы обнулить давление.

## 1.5. Проблема начальных условий для возбуждения дискретных бризеров в кристаллах

Работа [9], как отмечалось выше, стимулировала поиск щелевых дискретных бризеров в биатомных кристаллах со щелью в фоннном спектре, которая возникает из-за значительной разницы атомных масс компонент. Оказалось, что такие дискретные бризеры сильно локализованы, что делало их возбуждение сравнительно простой задачей. Приведем иллюстрирующие примеры, взятые из литературы. На рисунке 1.4 показаны атомные перемещения атомов в окрестности ядра дискретного бризера в кристалле NaI, согласно работе [7]. Видно, что максимальную амплитуду колебаний имеют легкие атомы Na, причем, амплитуды быстро убывают с удалением от центрального атома. В работе [7] для запуска дискретного бризера применялся метод вращающихся волн. В более поздних работах по дискретным бризерам в ионных кристаллах со структурой NaCl ДБ с поляризацией [100] и [110] возбуждались простым смещением одного легкого атома в соответствующем кристаллографическом направлении [74]. Однако возбуждение дискретных бризеров с поляризацией [111] в этом же кристалле потребовало применение более сложной процедуры накачки энергии по принципу качели [75].

Сильно локализованы и щелевые дискретные бризеры в упорядоченном сплаве Pt<sub>3</sub>Al, что также допускает их возбуждение путем отклонения одного легкого атома (Al) из положения равновесия.

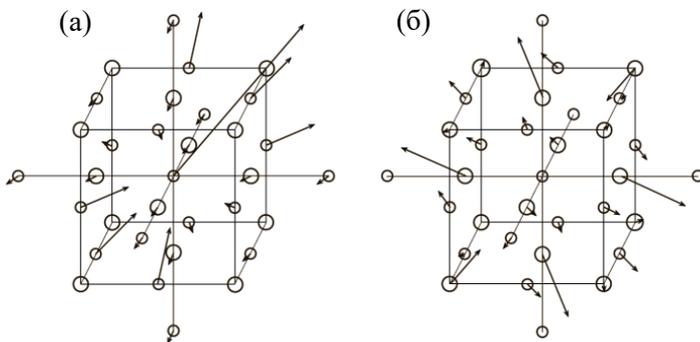


Рисунок 1.4 – Картина атомных перемещений в окрестности ядра щелевого дискретного бризера в кристалле NaI [9]. Тяжелые атомы I показаны большими, а легкие атомы Na меньшими кружками. На (а) даны амплитуды колебаний атомов, а на (б) смещения центров колебаний за счет локального эффекта «теплового расширения».

Пожалуй наибольшую степень локализации имеет дискретный бризер в графите, он локализован на одном атоме водорода, совершающем колебания перпендикулярно плоскости кристалла, как показано на рисунке 1.5 [69,70]. Процедура возбуждения такого дискретного бризера тривиальна и опять же сводится к отклонению одного атома водорода из положения равновесия.

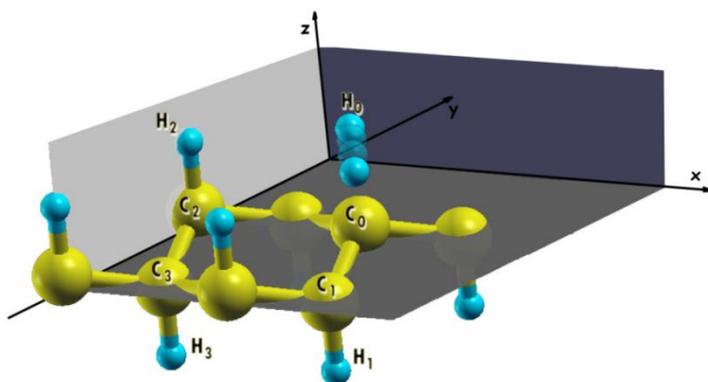


Рисунок 1.5 – Щелевой дискретный бризер в графене [69]. Один атом водорода ( $H_0$ ) совершает колебания большой амплитуды перпендикулярно плоскости кристалла. Атомы углерода (водорода) показаны большими (маленькими) сферами.

Дискретный бризер в ковалентном кристалле кремния [24] имеет частоты выше фонного спектра. Он локализован преимущественно на двух атомах, соединенных валентной связью и колеблющихся в противофазе, см. рисунок 1.6. Для нахождения начальных условий для его возбуждения использовался метод вращающейся волны.

Щелевой дискретный бризер в однородно деформированном графене также локализован на паре атомов, колеблющихся в направлении «кресло» в противофазе [26], как изображено на рисунке 1.7. Щель в фонном спектре графена индуцирована его однородной упругой деформацией. Данный дискретный бризер был возбужден начальным отклонением пары атомов углерода в противоположные стороны вдоль направления «кресло».

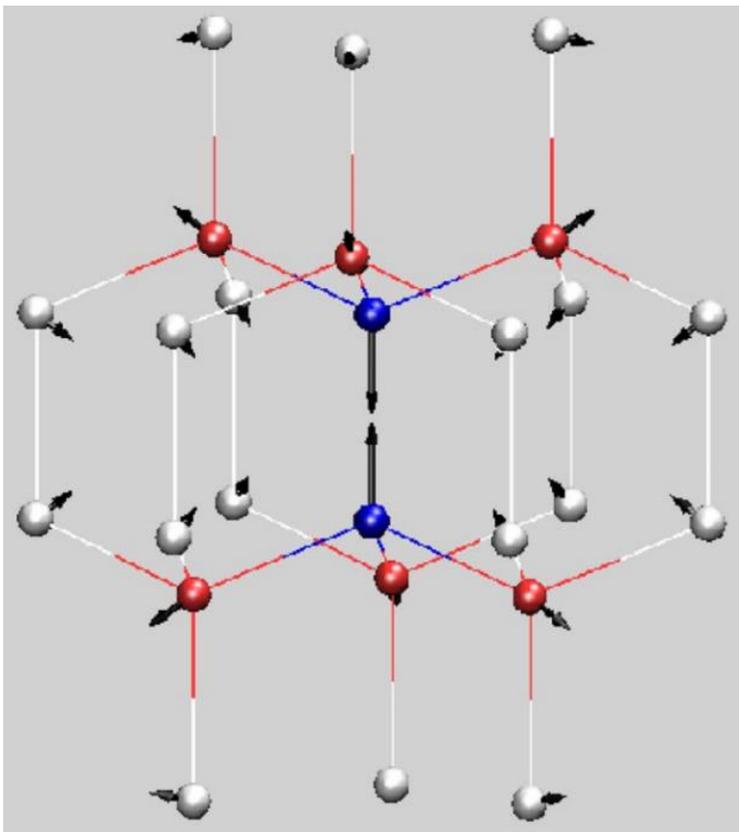


Рисунок 1.6 – Дискретный бризер с частотой выше фононного спектра в ковалентном кристалле кремния [24].

Пример щелевого дискретного бризера в двумерном кристалле Морзе стехиометрии  $A_3B$  дана на рисунке 1.8. Атомы  $B$  в 10 раз легче атомов  $A$ . Дискретный бризер сильно локализован на одном легком атоме [45]. Дискретный бризер был возбужден выведением из положения равновесия одного легкого атома.

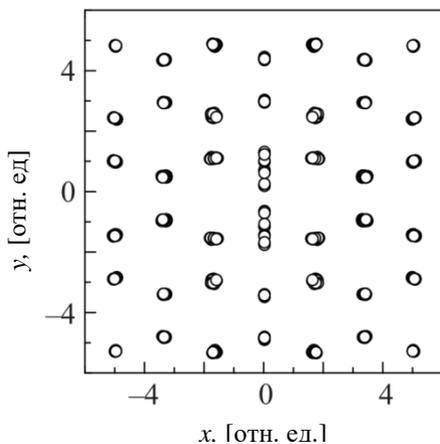


Рисунок 1.7 – Щелевой дискретный бризер в двумерном ковалентном кристалле графена, подверженном однородной деформации с целью получения щели в фоновом спектре [26].

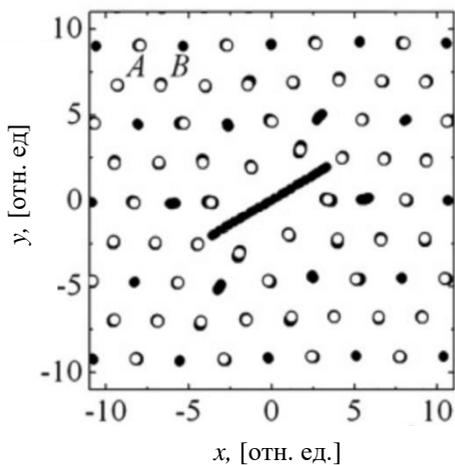


Рисунок 1.8 – Щелевой дискретный бризер в двумерном кристалле Морзе стехиометрии  $A_3B$ . Атомы  $B$  в 10 раз легче атомов  $A$ . Дискретный бризер сильно локализован на одном легком атоме. Перемещения атомов увеличены в 4 раза для наглядности [45].

Итак, выше приведены примеры сильно локализованных дискретных бризеров, возбуждение которых не составляет большого труда, поскольку начальные условия следует задать лишь для одного или для пары атомов. Во всех случаях начальные условия не являются точными и часть энергии, переданной кристаллу в нулевой момент времени, рассеивается в течение некоторого переходного периода, но значительная ее часть остается в пространственно локализованной форме в виде долгоживущего дискретного бризера. По сути, речь здесь идет не о точных в математическом смысле одночастотных и строго периодических дискретных бризеров, а о квазibriзерах [76], имеющих не строгую периодичность.

Хорошо известно, что нелинейные системы могут допускать множество различных решений. Возникает естественный вопрос, могут ли наряду с сильно локализованными дискретными бризерами в том же кристалле существовать и другие дискретные бризеры, возможно, с меньшей степенью локализации? Для ответа на данный вопрос следует использовать более общие методы поиска подходящих начальных условий. Опишем некоторые известные подходы к решению этой задачи.

Наиболее естественный механизм возбуждения дискретных бризеров в кристаллах состоит в их термофлуктуационном зарождении при повышенных температурах в условиях термодинамического равновесия [8,45,77,78]. Тепловые колебания решетки, с одной стороны, уменьшают время жизни дискретных бризеров [79], но с другой стороны, с ростом температуры увеличивается вероятность их термофлуктуационного возбуждения [45,77,78]. Таким образом, дискретные бризеры могут появляться

сами собой, но проблема состоит в том, как их выделить на фоне тепловых колебаний. Один из подходов здесь состоит в термализации кристалла, а затем в быстром отводе тепла по границам расчетной ячейки. Бегущие фононные волны быстро затухают на границе, а в центре ячейки остаются долгоживущие и малоподвижные дискретные бризеры. Такой прием успешно использовался в ряде работ [80]. В качестве примера, на рисунке 1.9 представим результат работы [80], где показано распределение энергии в двумерном кристалле после того, как он был сначала выдержан при высокой температуре, а затем был смоделирован отвод тепла по краям расчетной ячейки.

Весьма нетривиальный механизм спонтанной генерации дискретного бризера был открыт в работах [81,82], который затем применялся к одномерным [83-86] и двумерным [87] моделям, а также к трехмерному кристаллу со структурой NaCl [74]. В соответствии с данным механизмом дискретные бризеры появляются спонтанно в результате модуляционной неустойчивости [88] фононной коротковолновой колебательной моды, при условии, что ее амплитуда не слишком мала. Неустойчивость приводит к пространственной локализации энергии в форме дискретного бризера большой амплитуды, которые медленно излучают энергию, и в конце концов система приходит к тепловому равновесию с равным распределением энергии по всем колебательным модам. Пример такой динамики взят из работы [80] и представлен на рисунке 1.10.

В теоретической работе [89] был выполнен строгий анализ модуляционной неустойчивости ряда фононных мод в двумерной нелинейной решетке.

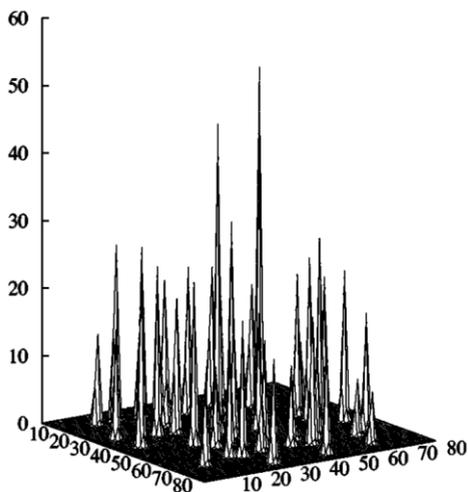


Рисунок 1.9 – Распределение энергии в двумерном кристалле после того, как он был выдержан при высокой температуре, а затем был осуществлен отвод тепла по краям расчетной ячейки [80]. Видны слабо взаимодействующие друг с другом, долгоживущие дискретные бризеры.

Если к нелинейной дискретной системе приложить периодическую силу, действующую на частоте вне спектра малоамплитудных колебаний, то при небольших амплитудах силы энергия не будет передаваться системе, поскольку бегущие волны не будут возбуждаться. Однако если амплитуда силы выше порогового значения, то могут возбуждаться дискретные бризеры, которые способны переносить энергию по системе. Данный механизм возбуждения нелинейных мод периодической силой с частотой вне фонованого спектра системы был назван нелинейной супратрансмиссией [90] и изучался для различных дискретных нелинейных систем [91-93].

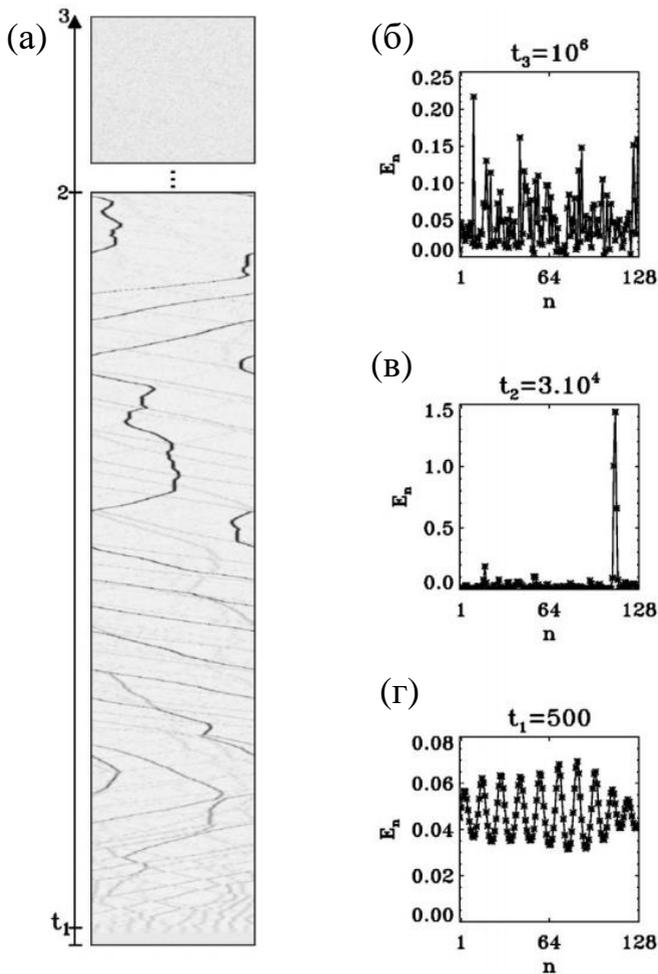


Рисунок 1.10 – (а) Эволюция во времени распределения энергии в одномерном кристалле, в котором была возбуждена неустойчивая коротковолновая мода [80]. Чем темнее цвет, тем выше плотность энергии. (б-г) Профили распределения энергии в одномерном кристалле в различные моменты времени. (б) Начало развития неустойчивости. (в) Практически вся энергия локализовалась на одном долгоживущем ДБ. (г) Тепловое равновесие.

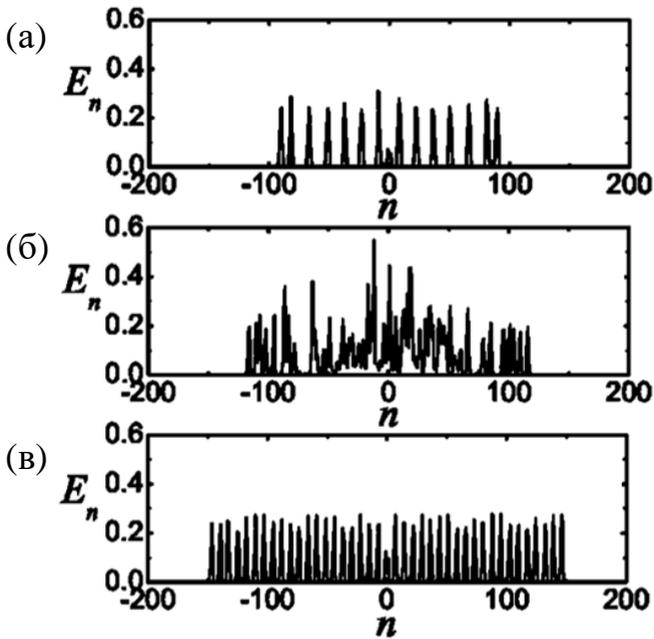


Рисунок 1.11 – Распределение энергии в одномерной нелинейной цепочке при воздействии на узел  $n=0$  периодической силой достаточно большой амплитуды на частоте вне фононного спектра [93]. (а-в) Результаты для различных значений частоты силы.

На рисунке 1.11 показано явление супратрансмиссии, наблюдавшееся в нелинейной цепочке при воздействии на узел  $n=0$  внешней силой достаточно большой амплитуды на различных частотах выше спектра малоамплитудных колебаний [93]. На (а) и (в) хорошо видны дискретные бризеры, испускаемые узлом  $n = 0$  квазипериодически. На (б) испускание дискретных бризеров происходит хаотично во времени.

В работе [94] предпринята успешная попытка генерации целевых дискретных бризеров в кристалле  $Pt_3Al$  путем воздействия на него с частотой близкой к частоте дискретного бризера.

## 1.6. Выводы по главе 1

Как следует из Введения и анализа литературы, представленного в данной главе, в теории дискретный бризер существует один важный невыясненный вопрос – могут ли существовать дискретные бризеры с жестким типом нелинейности в моноатомных кристаллах Морзе размерности два и три? Строгий математический анализ, проведенный в работе [9], показал, что в одномерном кристалле Морзе такие дискретные бризеры существовать не могут. Причиной была названа мягкость хвоста потенциала Морзе, которая не может обеспечить рост частоты дискретного бризера с амплитудой и выход частоты дискретного бризера выше фононного спектра. Однако потенциал Морзе имеет жесткое ядро, и возникает гипотетическая возможность повысить вклад жесткого ядра в динамику дискретного бризера с тем, чтобы его частота росла с амплитудой и выходила выше фононного спектра. Дают ли двумерные и трехмерные кристаллы такую возможность? Ответ на этот вопрос (положительный) станет главным результатом настоящей работы.

Вторым важным вопросом, поставленным в данной главе, является поиск систематического задания начальных условий для запуска дискретного бризера. Здесь также будет достигнут прогресс, и в результате будет показано, что один и тот же кристалл способен

поддерживать дискретные бризеры различной симметрии с жестким типом нелинейности.

Ставятся и более частные задачи, а именно, расчет параметров дискретных бризеров, таких, как степень пространственной локализации, зависимость частоты дискретных бризеров от амплитуды, диапазон изменения амплитуды и энергии дискретных бризеров и т.п.

Решение данных вопросов внесет вклад в развитие нелинейной динамики кристаллической решетки и поможет ответить на вопрос о роли дискретных бризеров в физике кристаллов.

## ГЛАВА 2. ДБ В ДВУМЕРНЫХ КРИСТАЛЛАХ МОРЗЕ

В данной главе рассмотрен двумерный (2D) кристалл, представляющий собой плоскость (111) трехмерной ГЦК решетки (см. рисунок 2.1). Были рассмотрены случаи моноатомного и биатомного кристалла. В случае биатомного кристалла рассмотрена стехиометрия  $A_3B$ , при этом массы тяжелых (A) и легких (B) атомов отличались в 10 раз. ДБ щелевого типа являются в целом достаточно изученными ввиду простоты их генерации [10]. Поэтому в данной главе акцент сделан на изучении возможных типов ДБ в моноатомных двумерных решетках, в которых, как это уже отмечалось во Введении, возможность существования ДБ, при использовании реалистичных межатомных потенциалов, подвергалась сомнению [9]. Однако нам, путем численного эксперимента, удалось не только показать возможность существования бризеров в таких кристаллах, но и продемонстрировать что можно выделить несколько способов возбуждения подобных ДБ и реализовать ДБ различной симметрии.

### 2.1. Моноатомный двумерный кристалл

#### 2.1.1. Детали компьютерного эксперимента

На рисунке 2.1 показана элементарная трансляционная ячейка треугольной двумерной решетки, использовавшаяся в расчетах. Ячейка включает 4 атома, хотя примитивная трансляционная ячейка треугольной решетки включает лишь один атом. Удвоение периода

трансляции по обоим направлениям сделано для того, чтобы использовать единый алгоритм при моделировании как моноатомной решетки, так и биатомной решетки стехиометрии  $A_3B$ , имеющей четыре атома в примитивной трансляционной ячейке.

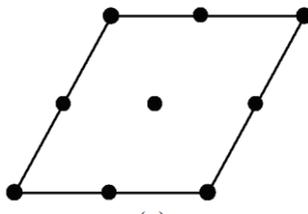


Рисунок 2.1 – Структура двумерного плотноупакованного кристалла.

Взаимодействие атомов задавалось посредством парного потенциала Морзе, описанного в разделе 1.4 (формула 1.1).

Как уже упоминалось, для анализа влияния жесткости связи на характеристики нелинейной динамики решетки были выбраны значения параметра потенциала Морзе  $\alpha=4$  и  $\alpha=5$  усл. ед. (рисунок 1.3), при  $D=r_m=1$  усл. ед., при которых проявляется дальнедействующий характер потенциала. Равновесное межатомное расстояние, достигнутое после релаксации структуры, составило  $a=0.9881329$  усл. ед. в случае  $\alpha=5$  и  $a=0.96555659$  усл. ед. для  $\alpha=4$ . Для меньшего значения жесткости связи характерно большее сжатие решетки и, следовательно, меньшее межатомное расстояние. Радиус обрезки потенциала в обоих случаях составил  $6.5a$ .

Расчеты были проведены без учета тепловых колебаний атомов, иными словами, при температуре  $T = 0$  К.

Интегрирование уравнений движения атомов в процессе молекулярно-динамических расчетов производилось с использованием метода Штормера шестого порядка точности. Интегрирование проходило с условием, что на один период колебания атома приходилось 20-30 шагов по времени. Это условие обеспечивало сохранение полной энергии системы с относительной точностью порядка  $10^{-6}$ - $10^{-8}$ .

В ходе численного интегрирования отслеживались следующие параметры: перемещения и скорости атомов, их потенциальная, кинетическая и полная энергии.

### **2.1.2. Плотность фоонных состояний**

В данном пункте рассматривается двумерная модель моноатомного плотноупакованного кристалла.

На рисунке 2.2 представлены плотности фоонных состояний для значений параметра межатомного взаимодействия  $\alpha = 4$  и  $\alpha = 5$ . Верхняя граница фоонного спектра для моноатомной решетки с коэффициентом межатомного взаимодействия  $\alpha = 4$  достигает значения 2.68 [отн. ед.], а для  $\alpha = 5$  верхний предел фоонного спектра равен 2.99 [отн. ед.].

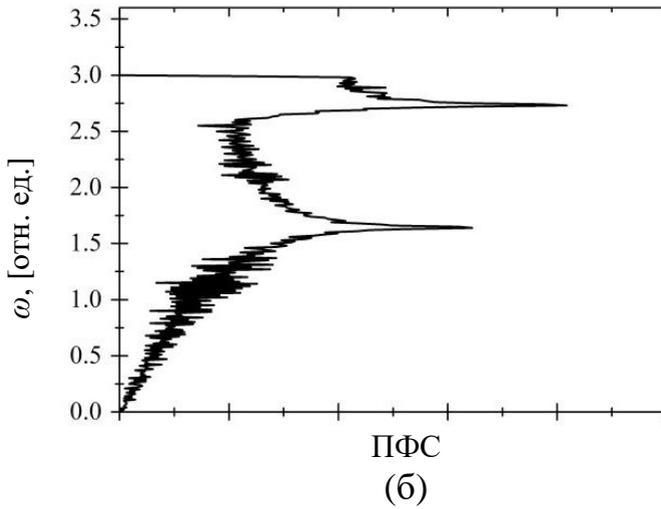
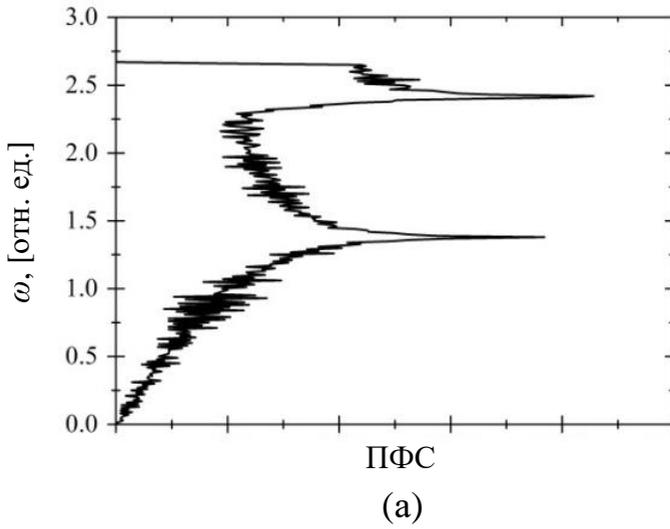


Рисунок 2.2 – плотность фоновых состояний для 2D кристалла Морзе для (а)  $\alpha=4$  и (б)  $\alpha=5$ .

### 2.1.3. Возбуждение ДБ с использованием анзаца

Первым способом, использованным для возбуждения ДБ, стало использование анзаца – начальных условий, определяющих смещения и скорости атомов в некотором плотноупакованном атомном ряду в нулевой момент времени. ДБ возбуждался в центре расчетной ячейки с периодическими граничными условиями, которая содержала  $160 \times 160$  атомов. Атомы имели две степени свободы – компоненты вектора перемещения в плоскости  $xu$ . Излучаемые ДБ малоамплитудные колебания поглощались введенным на периферии расчетной ячейки вязким трением.

Для изученного в данной работе *неподвижного* ДБ начальные условия задавались следующим образом

$$x_n^0 = T_n^0 + S_n^0, \quad \dot{x}_n^0 = 0, \quad y_n^0 = 0, \quad \dot{y}_n^0 = 0, \quad (2.1)$$

где  $x_n^0$ ,  $y_n^0$  и  $\dot{x}_n^0$ ,  $\dot{y}_n^0$  – компоненты векторов начальных перемещений и начальных скоростей атомов выбранной плотноупакованной цепочки,  $n$  – номер атома в цепочке. Для других атомов кристалла брались нулевые начальные значения перемещений и скоростей. Функции  $T_n^0$  и  $S_n^0$  в (2.2) и (2.3) описывают амплитуду колебания атомов и смещения их центров колебания, соответственно. Данные функции имеют вид

$$T_n^0 = \frac{(-1)^n A}{\cosh[\beta(n - x_0)]}, \quad (2.2)$$

$$S_n^0 = \frac{-B(n-x_0)}{\cosh[\gamma(n-x_0)]}, \quad (2.3)$$

где амплитуду колебания ДБ определяет параметр  $A$ , амплитуду смещений центров колебаний атомов определяет параметр  $B$ , а степень пространственной локализации ДБ задают параметры  $\beta$  и  $\gamma$ . Параметр  $x_0$  задает начальное положение ДБ. При значении  $x_0=0$  получаем ДБ центрированный на атоме плотноупакованного ряда, а при  $x_0=1/2$  в центре между двумя соседними атомами.

#### 2.1.4. Результаты моделирования свойств ДБ

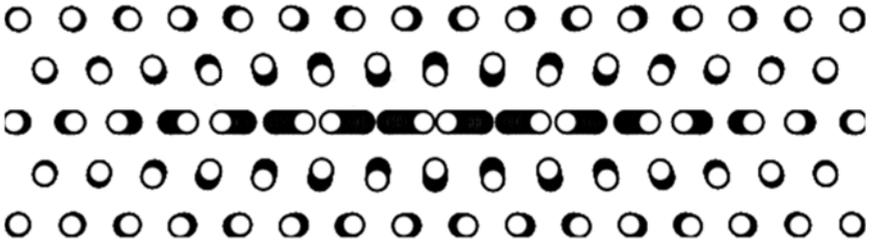


Рисунок 2.3 – Стробоскопическая картина движения атомов в моноатомном кристалле для случая ДБ, инициированного посредством применения анзаца.

Ранее в работах [95,96] были определены оптимальные параметры анзаца для получения ДБ и показана возможность запуска ДБ с жестким типом нелинейности в моноатомном кристалле. В данной работе был исследован стационарный ДБ, который был локализован на десятке атомов, совершающих свои колебания в

противофазе в одном плотноупакованном ряду двумерной кристаллической решетки. Стробоскопическая картина движения атомов в данном ДБ показана на рис. 2.3.

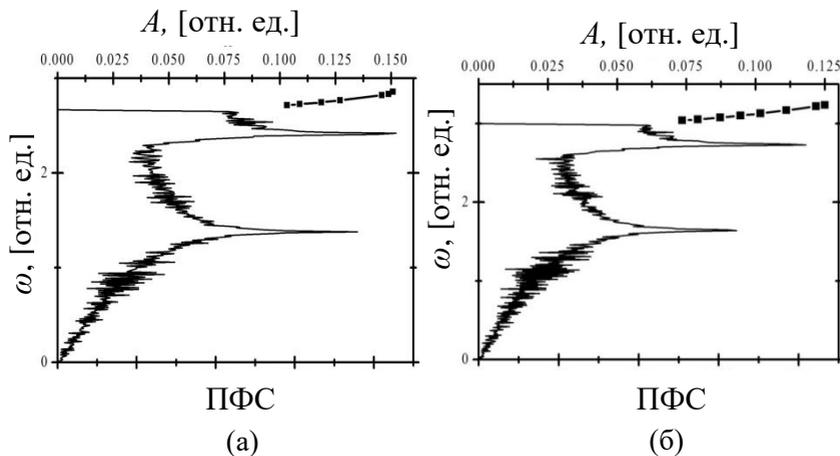


Рисунок 2.4 – Плотности фоновых состояний и амплитудно-частотная характеристика ДБ с жестким типом нелинейности в двумерном морзевском кристалле для (а)  $\alpha = 4$  and (б)  $\alpha = 5$ .

Зависимости частоты от амплитуды для полученного ДБ и соответствующие фоновые спектры представлены на рисунке (2.4). Интервал амплитуд  $A$  находится в пределах значений  $(0,0727 - 0,1298)$   $a$ . При этом частота ДБ изменялась от 2,72 до 2,86 [отн. ед.] для  $\alpha = 4$  и от 3,039 до 3,24 [отн. ед.] для  $\alpha = 5$ . Нижняя граница частоты бризера практически совпадает с верхней границей фоновонного спектра, находящегося на уровне 2,67 [отн.ед.] для  $\alpha = 4$  и 3,01 [отн.ед.] для  $\alpha = 5$  (рисунок 2.4).

Спектр моноатомного кристалла является сплошным, поэтому ДБ с жестким типом нелинейности, для которого график зависимости  $A(\omega)$  отщепляется от верхней границы фононного спектра, является единственной реализуемой возможностью существования ДБ в таком кристалле.

Было установлено, что с течением времени амплитуда ДБ квазипериодически изменяется. Это связано с тем, что данный ДБ не является точным аналитическим решением уравнения движения атомов в данной решетке при заданных начальных условиях, и в данном случае ему свойственно рассеяние энергии. На рисунке 2.5 представлена средняя амплитуда колебаний  $A$  и интервалы амплитуд колебаний ДБ  $A_{\min}$  и  $A_{\max}$  как функции средней амплитуды. Можно отметить, что разброс значений практически во всем исследованном интервале изменяется незначительно и составляет  $\pm 6\%$  для минимальных и  $\pm 4\%$  для максимальных значений амплитуды ДБ. Параметр  $\alpha$ , который определяет жесткость межатомной связи, является одним из важных факторов, влияющих на разброс значений амплитуды. Уменьшение параметра  $\alpha$  способствует возрастанию интервала  $A_{\max}-A_{\min}$ .

Со временем происходит осцилляция не только амплитуды, но и частоты ДБ. Проанализировав интервал частот ДБ  $\omega_{\min}$ ,  $\omega$ ,  $\omega_{\max}$  (рисунок 2.6) можно сказать, что (i) относительные значения разброса частот на много меньше тех же величин для амплитудной зависимости и располагаются в пределах от 0,1% до 0,5%  $\omega$  и (ii) степень разброса при увеличении амплитуды меняется не монотонно. Наибольшее

время жизни возбужденного ДБ можно ожидать в интервале амплитуд  $0,09 < A < 0,105$ , где вариации значений  $\omega$  являются наименьшими.

Отметим, что вариации амплитуды и частоты ДБ с течением времени могут выступать характеристикой квазибрезерности ДБ в реальных кристаллах [97].

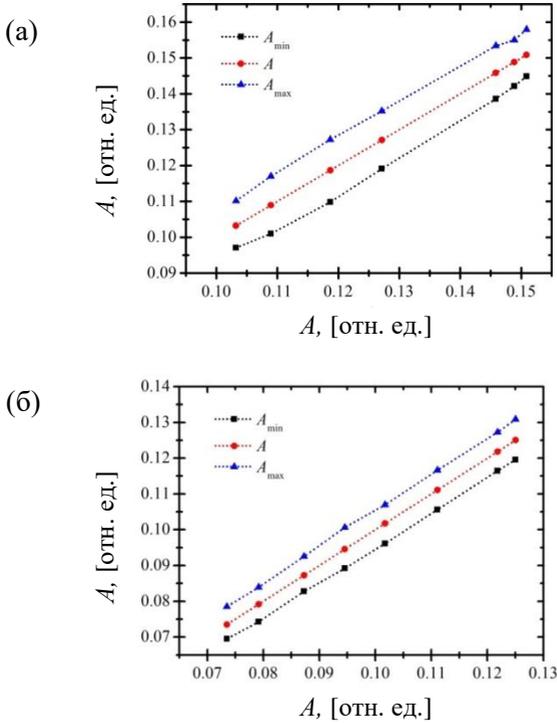


Рисунок 2.5 – Границы вариации амплитуды ДБ с течением времени как функции средней амплитуды  $A$  для двумерного морзевского кристалла для (а)  $\alpha=4$  и (б)  $\alpha=5$ .

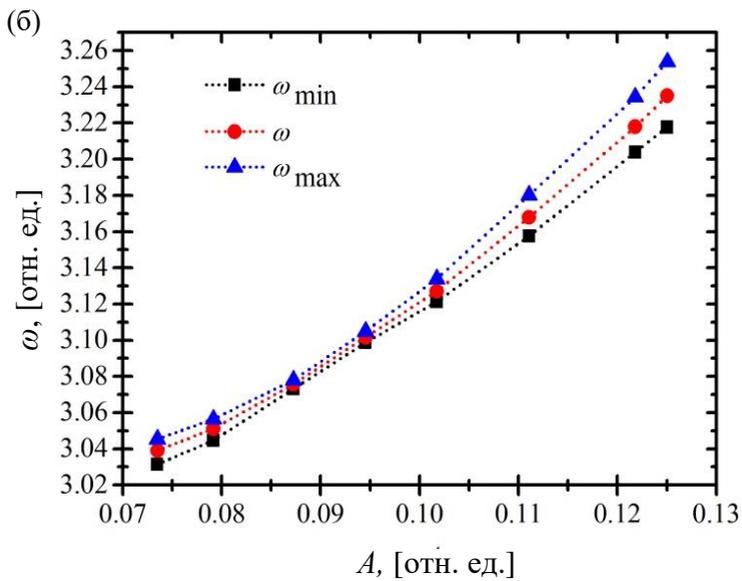
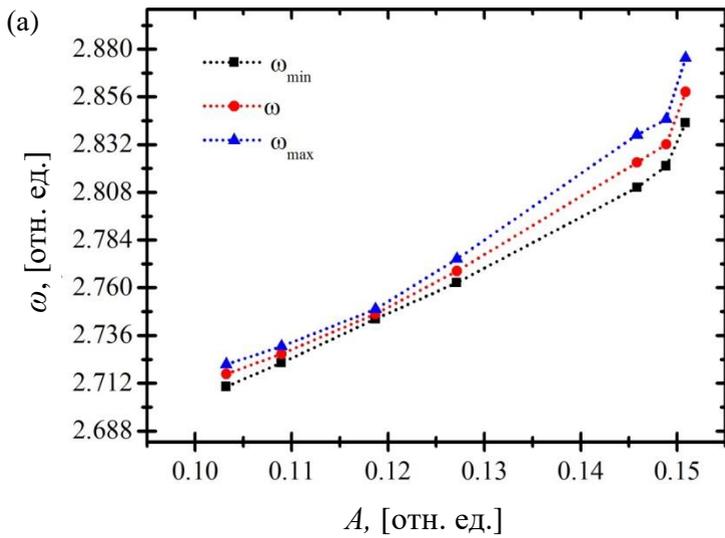


Рисунок 2.6 – Границы вариации частоты ДБ с течением времени как функции средней амплитуды  $A$  ДБ в двумерном морзевском кристалле для (а)  $\alpha=4$  и (б)  $\alpha=5$ .

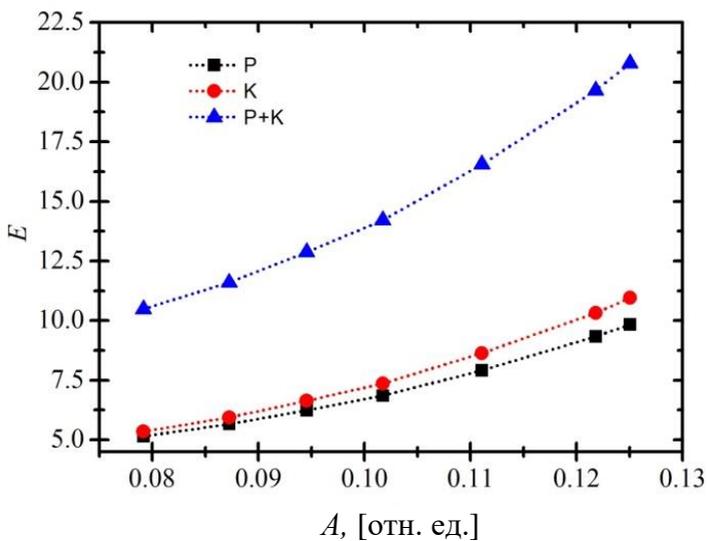
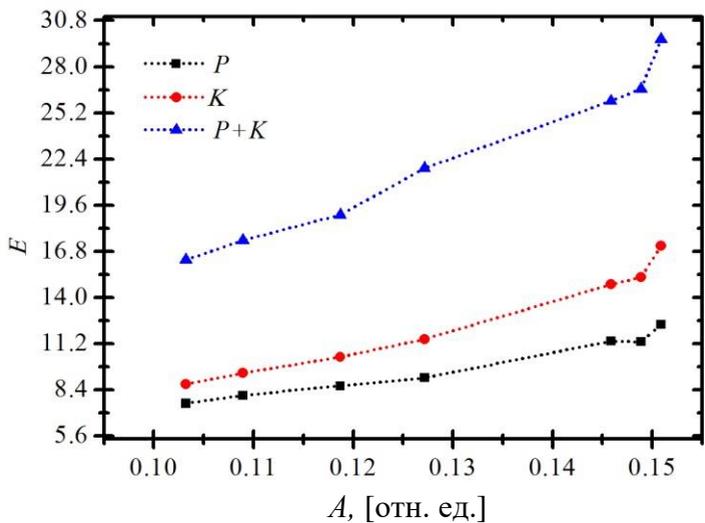


Рисунок 2.7 – Зависимости кинетической ( $K$ ), потенциальной ( $P$ ) и общей ( $P+K$ ) энергии ДБ от амплитуды в двумерном морзевском кристалле для (а)  $\alpha=4$  и (б)  $\alpha=5$ .

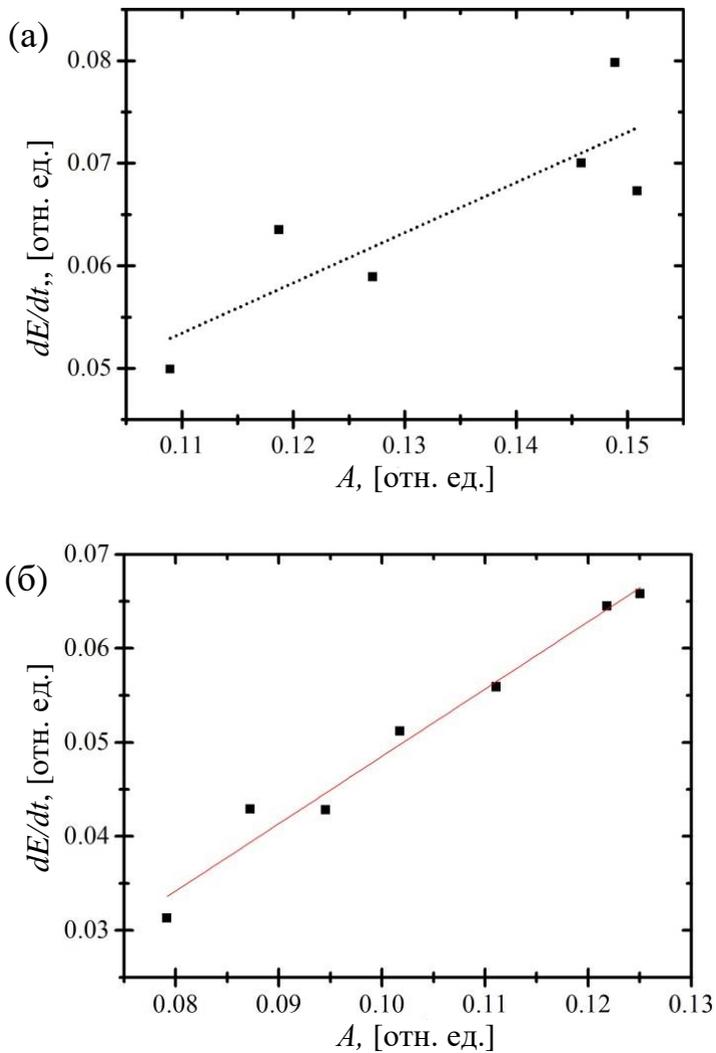


Рисунок 2.8 – Зависимость величины  $dE/dt$ , характеризующей скорость излучения энергии бризером, от его амплитуды в двумерном морзевском кристалле для (а)  $\alpha=4$  and (б)  $\alpha=5$ .

## 2.2. Реализация коротковолновых фононных мод в двумерном кристалле и анализ их свойств

В предыдущем разделе описан пример ДБ в моноатомном морзевском кристалле. Можно отметить, что по структуре данный ДБ аналогичен мобильным бризерам описанным в работе Хааса с соавторами [64-65] и при задании определенных внешних условий может передвигаться по кристаллу [62].

Рассмотрим 2D кристалл, атомы которого расположены в узлах треугольной решетки, как показано на рисунке 2.10 (а). Атомы в кристалле взаимодействуют посредством дельнодействующего парного потенциала Морзе (1.1).

Рассмотрим, возможно ли возбудить в двумерном моноатомном морзевском кристалле другой ДБ демонстрирующий жесткий тип нелинейности. В данном исследовании по прежнему используется треугольная решетка аналогичная плоскости (111) ГЦК кристалла (рисунок 2.9, а) атомы в которой взаимодействуют посредством потенциала Морзе (1.1). Расчетная ячейка содержала  $80 \times 80$  атомов, на которую были наложены периодические граничные условия. Данный кристалл позволяет возбудить как минимум две фононные моды, волновой вектор которых лежит на границе зоны Бриллюэна  $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$ . Стробоскопические картины движения атомов для каждой из соответствующих мод показаны на рисунках 2.9 б и 2.9 в. Для анализа возможности реализации ДБ на основе данных мод был проведен анализ зависимости частоты фононных мод от их амплитуды в нелинейном режиме. Если такая мода проявляет жесткий

тип нелинейности, т.е. её частота растёт с амплитудой, то посредством наложения колоколообразной функции можно локализовать в пространстве нелинейную колебательную моду и тем самым получить ДБ.

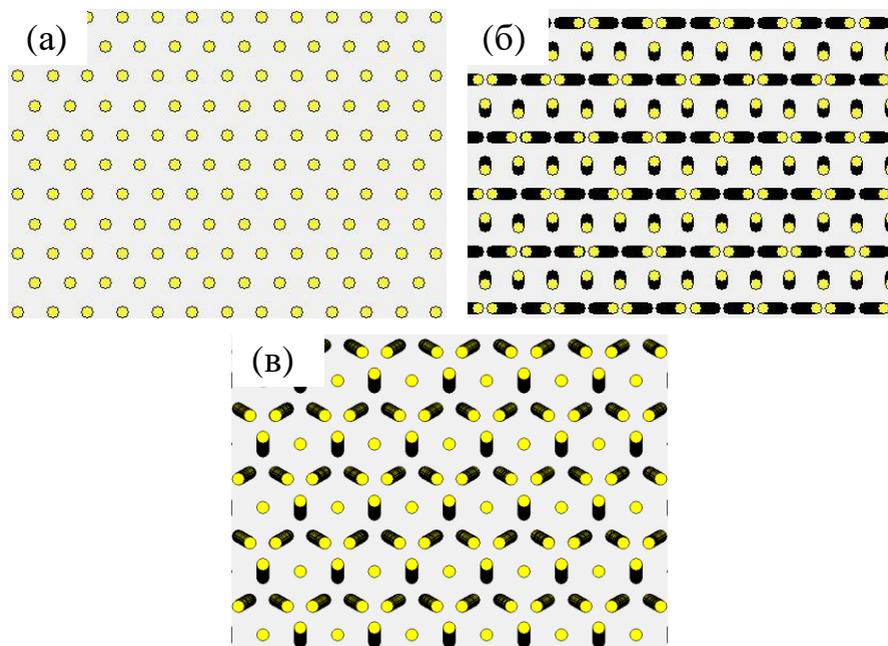


Рисунок 2.9 – (а) Двумерный кристалл, атомы которого расположены в узлах треугольной решетки. (б, в) Стробоскопическая картина движения атомов для фононной моды с волновым вектором на

границе зоны Бриллюэна

$\mathbf{q} = (\pi, 0)$  и  $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$ , соответственно.

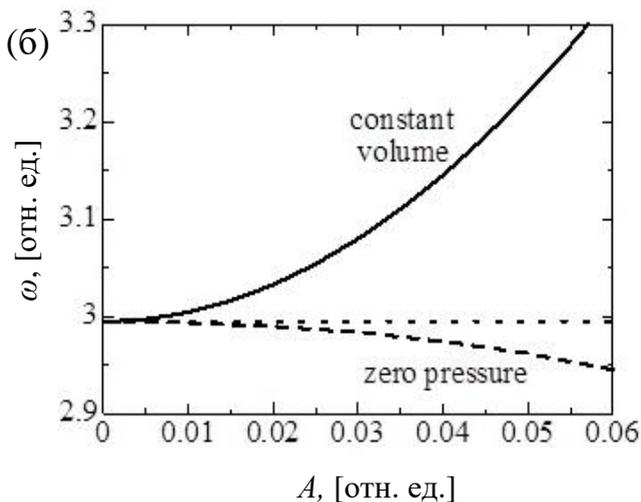
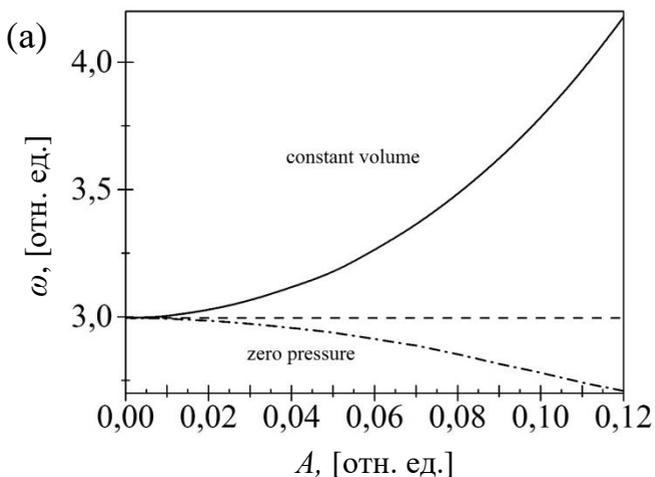


Рисунок 2.10 – Зависимости частот фоновых мод (а) для моды, стробоскопическая картина которой показана на рисунке 2.9 (б) и (б) для моды, стробоскопическая картина которой показана на рис. 2.9 (в) от амплитуды в нелинейном режиме: сплошная кривая соответствует зависимости при постоянных размерах расчетной ячейки, пунктирная кривая – зависимости при нулевом давлении.

На рисунке 2.10 показаны амплитудно-частотные зависимости данных мод для двух случаев. В первом случае рассматривался постоянный объем расчетной ячейки (сплошная линия), а во втором сохранялось нулевое давление в системе (пунктирная линия) и было разрешено термическое расширение атомов. Горизонтальная штриховая линия отображает верхнюю границу фононного спектра кристалла где  $\omega_{\max} = 2.995$  [отн. ед.]. Из рисунка 2.10 видно, что частоты данных фононных мод в нелинейном режиме возрастают с амплитудой, отщепляясь от верхней границы фононного спектра. А при нулевом внешнем давлении частоты этих мод убывают с увеличением амплитуды. Следовательно, ДБ может существовать только при условии, что кристалл будет сдерживать тепловое расширение, порождённое ДБ так, чтобы частота ДБ находилась выше фононного спектра кристалла. Далее будет показано, как в двумерном морзевском кристалле выдержать это условие.

### **2.3. Способ возбуждения ДБ с использованием локализации коротковолновых фононных мод**

#### **2.3.1. Возбуждение низкосимметричного ДБ из коротковолновой фононной моды**

Для получения ДБ применим наложение экспоненциально локализованной колоколообразной функции и колоколообразной функции радиальной симметрии на плоские фононные моды. Расчетные ячейки содержали  $80 \times 80$  атомов, с наложенными

периодическими граничными условиями. Для погашения малоамплитудных волн, которые в следствии неточности начальных условий излучает ДБ, на границе расчетных ячеек была введена вязкость. Расположение центра колоколообразной функции как на одном из покоящихся атомов, так и в точке равноудаленной от трех соседних атомов, приводило к получению ДБ с осью симметрии третьего порядка. Относительно малая степень локализации, полученных нами ДБ, показала слабую зависимость результатов от точки центрирования.

Рассмотрим подробнее ДБ, центрированный в точке равноудаленной от трёх соседних атомов. Обозначим координаты данной точки как  $(x_0, y_0)$ , тогда амплитуду колебания атома с координатами  $(x, y)$  примем равной

$$A_x(x) = \frac{A_1}{\cosh[\beta(x - x_0)]}, \quad (2.4)$$

$$A_y(y) = \frac{A_2}{\cosh[\gamma(y - y_0)]}, \quad (2.5)$$

где  $A_1, A_2$  – амплитуды колоколообразных функций накладываемых вдоль координатных направлений  $x$  и  $y$ , соответственно. Параметры  $\beta$  и  $\gamma$  определяют степень их локализации вдоль направлений  $x$  и  $y$ , соответственно.

На рисунке 2.11 представлен ДБ возбужденный для значений следующих параметров:  $A_1=0.07$ ,  $A_2=0.0286$ , входящих в (2.5). Для получившегося ДБ на рисунке 2.12 представлены (а) амплитуды колебаний атомов как функция расстояния от центра дискретного

бризера, которая задана выражением (2.5), и(б) смещение центров колебаний атомов как функция расстояния от центра ДБ, определенная в [100] (2.6).

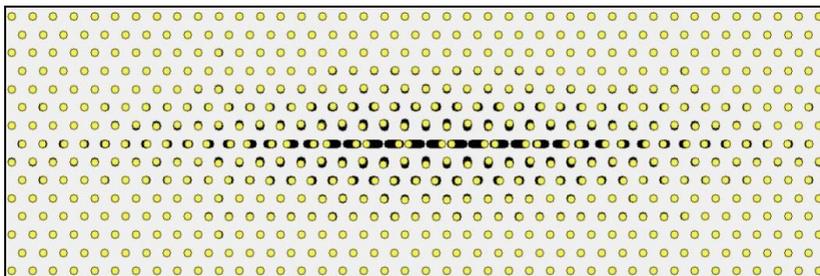


Рисунок 2.11 – Стробоскопическая картина движения атомов в окрестности ДБ, полученного путем наложения колоколообразных функций с различной степенью локализации вдоль  $x$  и  $y$  на коротковолновую фоновую моду в нелинейном режиме.

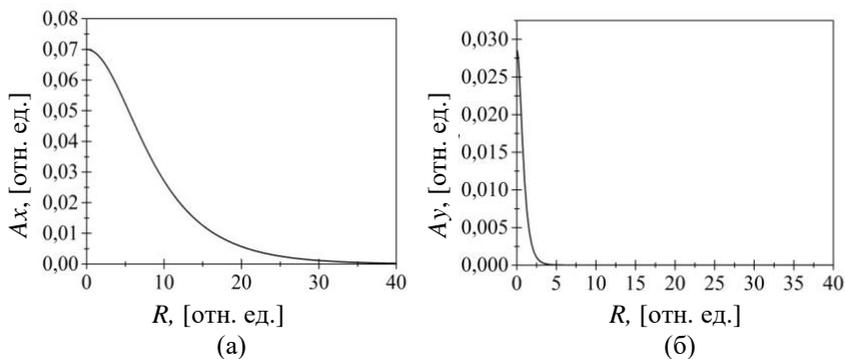


Рисунок 2.12 – (а) Амплитуда колебаний атомов как функция расстояния от центра ДБ вдоль координаты  $x$ , заданная выражением  $A_x(x)$  (2). (б) Амплитуда колебаний атомов как функция расстояния от центра ДБ вдоль координаты  $y$ , заданная выражением  $A_y(x)$  (2).

Значения параметров:  $A_1 = 0.07$ ,  $A_2 = 0.0286$ ,  $\beta = \gamma = 0.16$ .

На рисунке 2.13 приводится зависимость перемещения атома 1 в вертикальном направлении от времени для ДБ, показанного на рисунке 2.11. Атом 1 является одним из трех атомов в центре ДБ.

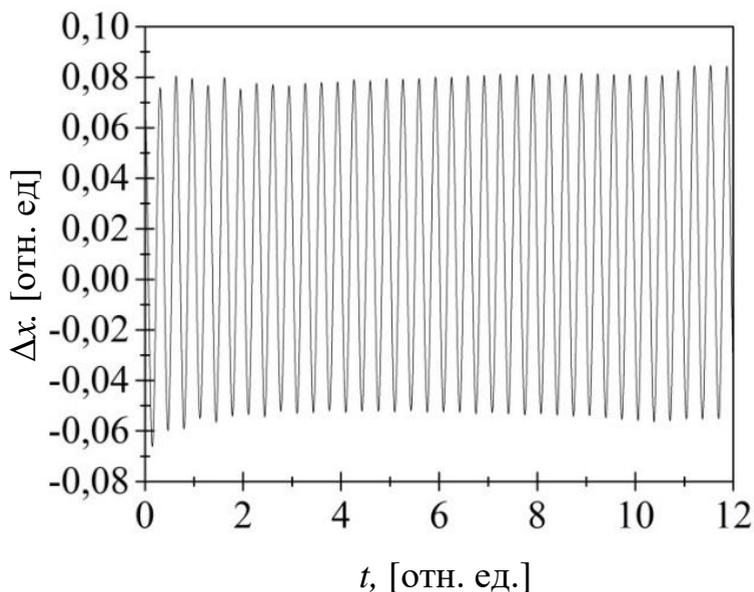


Рисунок 2.13 – Зависимость перемещения атома 1 в вертикальном направлении от времени для ДБ, показанного на рисунке 2.11.

Определенная из графика частота ДБ (рисунок 2.13) имеет значение 3.02 и лежит выше фононного спектра кристалла (см. рисунок 2.14).

Аналогично с данным ДБ были возбуждены и другие, для различных значений параметра  $T$ , задающих амплитуду ДБ. По результатам расчетов для ДБ была построена зависимость частоты от амплитуды. Зависимость представлена на рисунке 2.14 точками и соединена жирной кривой. Как оказалось, частота ДБ возрастает с

амплитудой, т.е. демонстрирует жесткий тип нелинейности. Как видно из графика, скорость возрастания частоты с увеличением амплитуды для ДБ меньше по сравнению с фоновой модой, из которой был получен ДБ. Что говорит об увеличении расстояния между центрами колебаний атомов в ядре ДБ, и в отличие от фоновой моды с условиями постоянства объема увеличивает рост вклада мягкого хвоста потенциала Морзе в динамику системы.

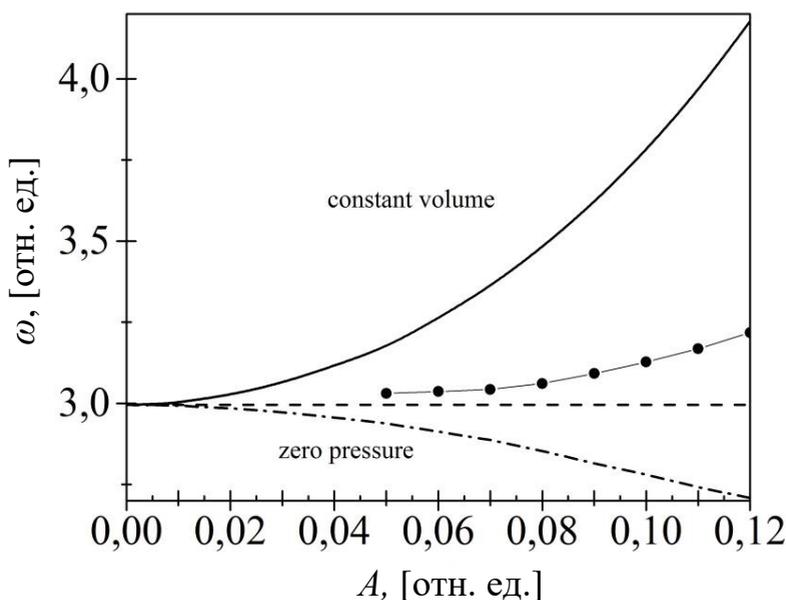


Рисунок 2.14 – Зависимость частоты ДБ, показанного на рисунке 2.11 от амплитуды колебания его центрального атома.

### 2.3.2. Высокосимметричный ДБ, полученный из коротковолновой фонной моды

Для получения ДБ в плоской фонной моде, применим экспоненциально локализованную колоколообразную функцию радиальной симметрии. Расчетные ячейки содержали  $192 \times 192$  атомов, с наложенными периодическими граничными условиями. Для погашения малоамплитудных волн, которые в следствии неточности начальных условий излучает ДБ, на границе расчетных ячеек была введена вязкость. Расположение центра колоколообразной функции как на одном из покоящихся атомов, так и в точке равноудаленной от трех соседних атомов (рисунок 2.9 в), приводило к получению ДБ с осью симметрии третьего порядка. Оказалось, ДБ слабо зависят от точки его центрирования ввиду своей относительно низкой степени локализации.

Рассмотрим подробнее ДБ, центрированный в точке равноудаленной от трёх соседних атомов. Обозначим координаты данной точки как  $(x_0, y_0)$ , тогда амплитуду колебания атома с координатами  $(x, y)$ , удаленного от центра на расстояние  $R = \sqrt{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2}$  примем равной:

$$A(R) = \frac{T}{\cosh(\beta R)}, \quad (2.6)$$

где  $T$  – амплитуда колоколообразной функции, а  $\beta$  определяет степень ее локализации.

Задавая начальные условия для ДБ, также следует учитывать смещение центров колебаний атомов радиально от точки  $(x_0, y_0)$ . Что происходит в следствии асимметричности потенциала Морзе, схожего с тепловым расширением кристаллов. На периферии ДБ атомы имеют небольшое смещение в радиальном направлении. Эти смещения слабо изменяются с расстоянием, что хорошо должно описываться линейной теорией упругости.

### 2.3.3. Расчет полей перемещений в окрестности высокосимметричного ДБ в 2D кристалле

Приведем известное решение задачи линейной теории упругости для круглой тонкой пластины диаметра  $b$  с концентрическим круглым отверстием диаметра  $2a$  [100]. Предположим, что данная пластина выполнена из изотропно-упругого материала с модулем Юнга  $E$  и коэффициентом Пуассона  $\mu$ . Радиальное давление  $p$  приложено к краям внутреннего выреза. В полярных координатах имеем неизвестное радиальное перемещение  $u(r)$ , две ненулевых компоненты тензора напряжений  $\sigma_r$  и  $\sigma_\theta$  и три ненулевых компоненты тензора деформаций  $\varepsilon_r$ ,  $\varepsilon_\theta$  и  $\varepsilon_z$ . Уравнение равновесия, записанное в перемещениях, имеет вид

$$\frac{d^2 u}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{du}{dr} - \frac{u}{r^2} = 0, \quad (2.7)$$

общее решение которого

$$u = C_1 r + \frac{C_2}{r}, \quad (2.8)$$

константы интегрирования выражаются следующим образом,

$$C_1 = \frac{1-\nu}{E} \frac{a^2 p}{b^2 - a^2}, \quad (2.9)$$

$$C_2 = \frac{1+\nu}{E} \frac{a^2 b^2 p}{b^2 - a^2}, \quad (2.10)$$

что было получено путем подчинения общего решения заданным граничным условиям. Состоят граничные условия в том, что радиальное напряжение приобретает значения на внутреннем вырезе  $\sigma_r(a) = -p$ , а на внешней границе  $\sigma_r(b) = 0$ . Бесконечную пластину с круговым отверстием следует рассматривать в пределе  $b \rightarrow \infty$ , из чего получается  $C_1 = 0, C_2 = a^2 p(1+\nu)/E$ . Учитывая это, из (2.8) для радиального перемещения получаем

$$u = a^2 p \frac{1+\nu}{E} \frac{1}{r}. \quad (2.11)$$

Это выражение задает дальнедействующее статическое поле радиальных перемещений атомов вдали от центра ДБ в двумерном кристалле. Первый множитель уравнения (2.11)  $a^2 p$  имеет размерность силы и он определяет эффективную сосредоточенную силу со стороны ДБ, действующую на бесконечный двумерный кристалл.

На относительно большом расстоянии от центра ДБ центры колебаний атомов радиально смещаются согласно выражению (2.11),

однако в центре ДБ, в силу симметрии, они должны равняться нулю. Расчеты показали, что зависимость, аппроксимирующую сдвиг центров колебаний атомов от расстояния до центра ДБ,  $R$ , можно принимать в виде

$$S(R) = \frac{P \tanh^2(\delta R)}{R}, \quad (2.12)$$

где  $P$  и  $\delta$  – параметры. Множитель  $\tanh^2(\delta R)$  в выражении (2.12) обеспечивает обращение в ноль  $S(R)$  для  $R=0$  и асимптотическое поведение  $S(R) \approx P/R$  на больших  $R$ .

### 2.3.4. Свойства высокосимметричного ДБ

Дискретный бризер, представленный на рисунке 2.15, был возбужден при использовании следующих значений параметров, входящих в (2.6) и (2.12):  $T=0.04$ ,  $\beta = 0.245$ ,  $P = 0.12$ ,  $\delta = 0.19$ . Определяющий амплитуду ДБ параметр  $T$  изначально был назначен, и для него эмпирическим путем были подобраны другие параметры.

Для данных значений параметров на рисунке 2.16 показаны (а) амплитуда колебаний атомов как функция расстояния от центра ДБ, полученная выражением (2.6), и (б) смещение центров колебаний атомов как функция расстояния от центра ДБ, заданная выражением (2.12). Точками показаны рассчитанные (а) амплитуды колебаний атомов и (б) смещение центров колебаний атомов в момент времени  $t = 20$ . Темные точки отображают атомы подрешеток 1- 3, имеющие в фоновной моде одинаковые амплитуды колебаний, а светлые точки

показывают атомы подрешетки 4 в фононной моде (рисунок 2.9 в), которые имеют нулевые амплитуды колебаний.

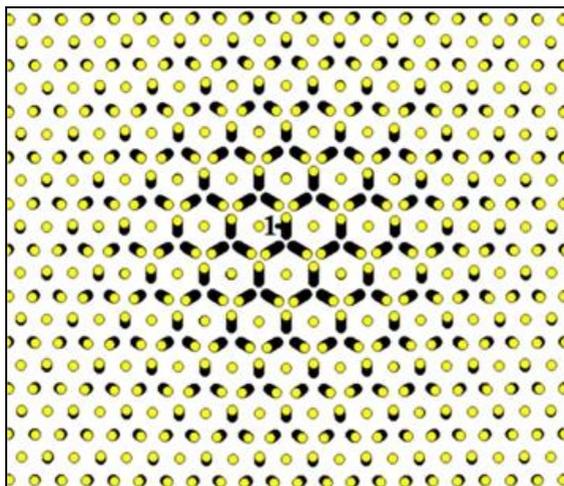


Рисунок 2.15 – Стробоскопическая картина движения атомов в окрестности ДБ, полученного путем наложения колоколообразной функции радиальной симметрии на коротковолновую фононную моду в нелинейном режиме. Перемещения атомов увеличены для наглядности.

Отметим малые расстояния реальных амплитуд колебаний атомов и смещений их центров колебаний к аппроксимирующим зависимостям (2.6) и (2.12) соответственно.

Из графика 2.17 была определена частота ДБ, равная 3.002. Полученная частота лежит выше спектра фононных колебаний (см. рисунок 2.18). Аналогично с данным ДБ были возбуждены и другие, для различных значений параметра  $T$ , задающих амплитуду ДБ.

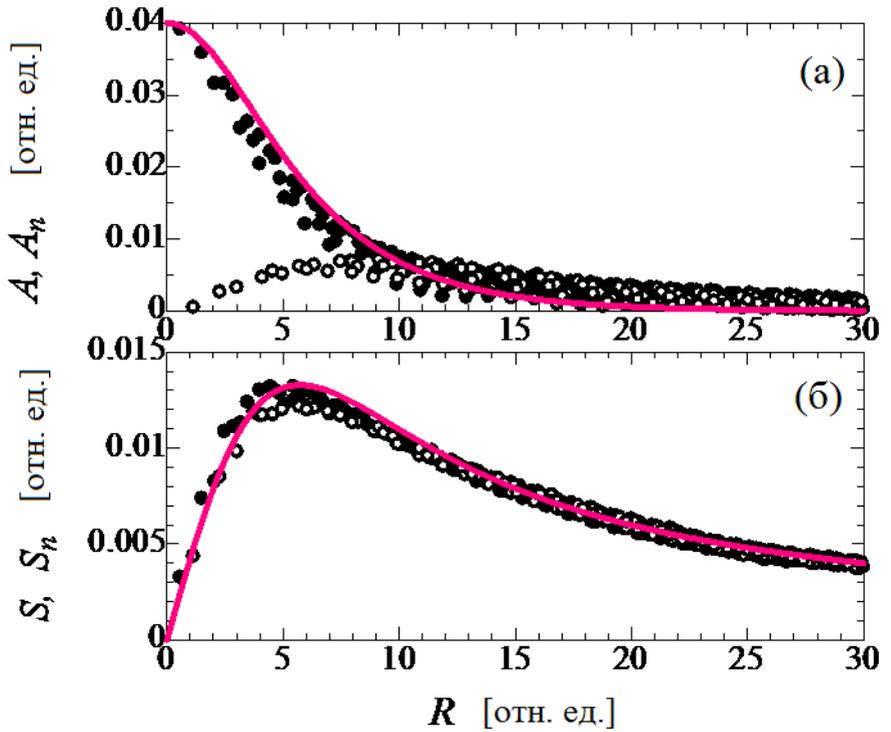


Рисунок 2.16 – Сплошные линии: (а) амплитуда колебаний атомов как функция расстояния от центра ДБ, заданная выражением (2.6); (б) смещение центров колебаний атомов как функция расстояния от центра ДБ, определенная в (2.12). Темные и светлые точки показывают результат вычислений в момент времени  $t = 20$  для подрешеток 1-3 и 4, соответственно. Все значения даны в относительных единицах. Значения параметров, входящих в (2.7) и (2.13):  $T=0.04$ ,  $\beta = 0.245$ ,  $P = 0.12$ ,  $\delta=0.19$ .

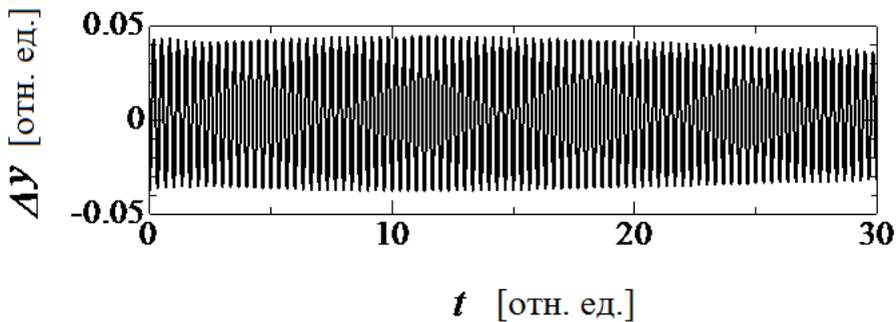


Рисунок 2.17 – Зависимость вертикального перемещения атома 1 от времени для ДБ, показанного на рисунке (2.15).

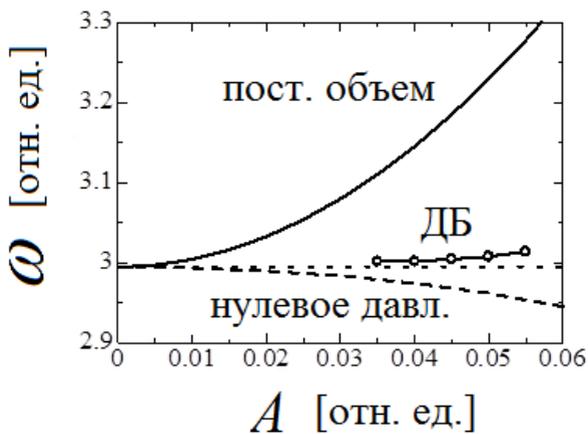


Рисунок 2.18 – Зависимость частоты ДБ, показанного на рисунке 2.15 от амплитуды колебания одного из центральных атомов.

По результатам была построена зависимость частоты от амплитуды. Зависимость представлена на рисунке 2.18 светлыми точками, соединенными кривой. Как оказалось, частота ДБ возрастает с амплитудой, т.е. демонстрирует жесткий тип нелинейности. Как видно из графика, скорость возрастания частоты с увеличением амплитуды для ДБ меньше по сравнению с фононной модой, из которой был получен ДБ. Это говорит об увеличении расстояния между центрами колебаний атомов в ядре ДБ, и в отличие от фононной моды с условиями постоянства объема увеличивает рост вклада мягкого хвоста потенциала Морзе в динамику системы

Отметим, что полученный ДБ не является точным решением нелинейных уравнений движений атомов и должен рассматриваться как квазибризер [97], имеющий достаточно большое время жизни.

Таким образом, в двумерном моноатомном морзевском кристалле был найден новый ДБ с жестким типом нелинейности. В сравнении с ДБ, полученным в работе [98], найденный нами ДБ имеет более высокую симметрию, и судя по всему, не способен перемещаться по кристаллу. Отметим, что каждый четвертый атом полученного ДБ практически неподвижен. Это касается и ядра дискретного бризера. На место данных атомов можно поставить тяжелые или более легкие атомы и это практически не изменит динамики ДБ. Следовательно, ДБ данного вида может существовать не только в моноатомном кристалле, но и в кристалле стехиометрического состава  $A_3B$ .

Результаты данной работы позволяют приблизиться к поиску высокосимметричных дискретных бризеров в трехмерных кристаллах.

## 2.4. Биатомный кристалл

В данном разделе работы рассматриваются способы возбуждения ДБ двумерной биатомной решетке со стехиометрией АЗВ. В первом случае мы использовали классический подход заключающийся в выведении одного легкого атома на значительное расстояние от положения равновесия. После некоторого процесса излучения энергии в кристалле реализуется ДБ с мягким типом нелинейности. Был проведен анализ влияния коэффициента жесткости межатомной связи на и направления поляризации смещаемого атома на свойства получаемых ДБ. По аналогии с описанным в предыдущем разделе 2.1.2 в биатомных кристаллах были проанализированы коротковолновые фоновые моды с волновым вектором на границе первой зоны Бриллюэна для оценки возможности реализации на их основе ДБ посредством наложения локализирующей функции.

### 2.4.1. Плотность фоновых состояний

На рисунке 2.19 (а, б) представлены фоновые спектры для коэффициентов межатомного взаимодействия  $\alpha = 4$  и  $\alpha = 5$ . Как видно из графиков, спектры биатомных кристаллов имеют характерную щель в фоновом спектре кристалла. Верхняя граница фонового спектра для биатомной решетки с коэффициентом межатомного взаимодействия  $\alpha = 4$  достигает значения 1.92 [отн. ед.] при этом щель фонового спектра занимает интервал 0.86-1.78 [отн.

ед.]. А для коэффициента  $\alpha = 5$  верхний предел составляет 2.18 [отн. ед.], и щель в пределах 0.95-2.06 [отн. ед.].

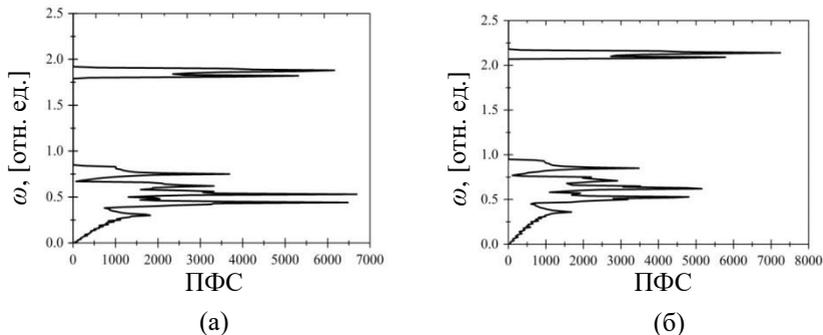


Рисунок 2.19 – Плотность фоновных состояний в биатомных 2D кристаллах Морзе для (а)  $\alpha = 4$  и (б)  $\alpha = 5$ .

#### 2.4.2. Исследование влияния поляризации на ДБ с мягким типом нелинейности

В данном разделе рассматривается биатомная 2D кристаллическая решетка с разницей масс атомов 10:1. Как и в предыдущих случаях, взаимодействие атомов было описано потенциалом Морзе (1.1).

Изменяемыми параметрами в ходе исследования являлись типы межатомных взаимодействий, параметры которого характеризуются коэффициентом  $\alpha$ . В наших расчетах принимались коэффициенты  $\alpha = 4$  и  $5$  значение которых  $\{0.9655659; 0.9881329\}$  соответственно. Также

были проанализированы случаи различной поляризации ДБ. Рассмотрены случаи возбуждения ДБ как вдоль плотноупакованного ряда атомов кристаллической решетки параллельному оси  $x$ , так и под углом в  $30^\circ$  к нему (рисунок 2.20 а, б).

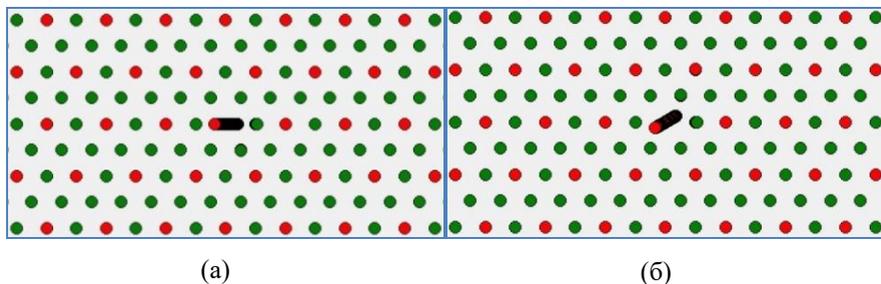


Рисунок 2.20 – Стробоскопическая картина движения ДБ локализованного на одном атоме биатомной кристаллической решетки. (а) с углом приложения начальных условий  $0^\circ$ , (б) с углом приложения начальных условий  $30^\circ$ .

Возбуждение ДБ происходило путем вывода легкого атома биатомной решетки из положения равновесия на относительно большое расстояние. После выведения атома из положения равновесия, наличие ДБ оценивалось нами по зависимости перемещений атомов в центре ДБ от времени (рисунок 2.21) из которой определялись амплитудно-частотные характеристики ДБ, и по поведению полной энергии ДБ от времени (рисунок 2.22).

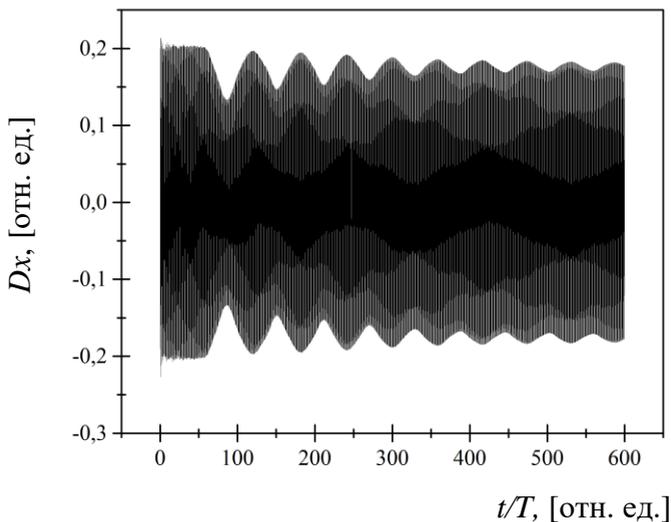


Рисунок 2.21 – Зависимость  $x$  координаты центрального атома от времени для ДБ в двумерном кристалле с  $\alpha = 4$  и углом поляризации начального смещения атома  $0^\circ$ .

Все полученные ДБ имеют мягкий тип нелинейности, и их частота отщепляется от верхней границы щели фононного спектра. Амплитудно-частотные зависимости полученных ДБ, наложенные на плотность фононных состояний кристалла, показаны на рисунках 2.23 и 2.24. Установлено что в целом изменение поляризации начального смещения атома с  $0^\circ$  до  $30^\circ$  увеличивает интервал амплитуд ДБ примерно на 10-15 % для обеих рассмотренных величин коэффициента жесткости межатомной связи  $\alpha$ . Увеличение же значения этого коэффициента с  $\alpha=4$  до  $\alpha=5$  приводит к росту частоты

получаемого ДБ, что связано с изменением соответствующих значений пограничных частот щели фононного спектра.

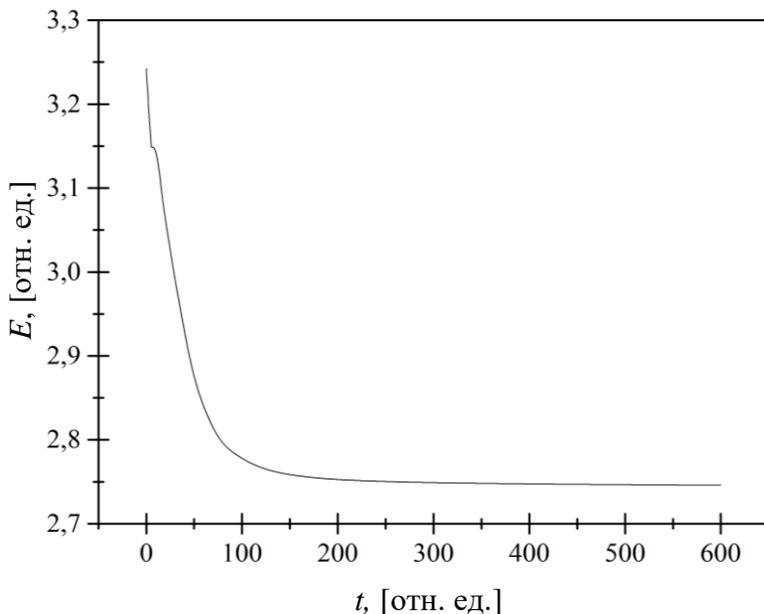


Рисунок 2.22 – график зависимости полной энергии ДБ от времени для ДБ в двумерном биатомном кристалле с  $\alpha = 4$  и углом поляризации начального смещения атома  $0^\circ$ .

Отметим, что максимальная амплитуда ДБ была получена для случая  $\alpha=4$  и угла поляризации начального смещения  $30^\circ$  и составила 0,31%  $a$ , то есть практически третью часть от межатомного расстояния, что является достаточно значительной величиной, чтобы предположить, что подобные колебания решетки могут снижать энергетический барьер генерации пар Френкеля и, тем самым, вносить

вклад в перемещение атомов по кристаллу, то есть в диффузию атомов.

По результатам измерений зависимости полной энергии полученных бризеров от времени, для разных коэффициентов межатомного взаимодействия и разных углов приложения начальных условий колебаний атома, была оценена скорость излучения энергии  $dE/dt$  (рисунки 2.25, 2.26)

Аналогично с моноатомным случаем, инициировались и анализировались коротковолновые фонные моды в биатомном кристалле с волновым вектором на границе зоны Бриллюэна. Коэффициент жесткости межатомной связи при этом был равен  $\alpha = 4$ . Стробоскопические картины этих мод представлены на рисунке 2.27. Три из этих мод возбуждены на легких атомах (рисунок 2.27 а,б,в), и лишь одна на тяжелых атомах кристалла (рисунок 2.27 г).

Зависимости частоты от амплитуды для этих мод показаны на рисунке 2.28. Моды локализованные на лёгких атомах имеют убывающую частоту с увеличением амплитуды и расположение её в пределах фонного спектра. Следовательно, такие моды не могут быть использованы для поиска ДБ.

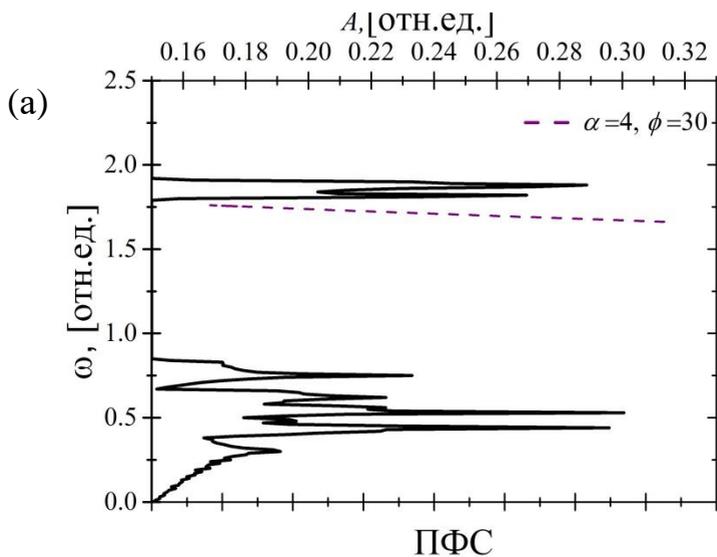
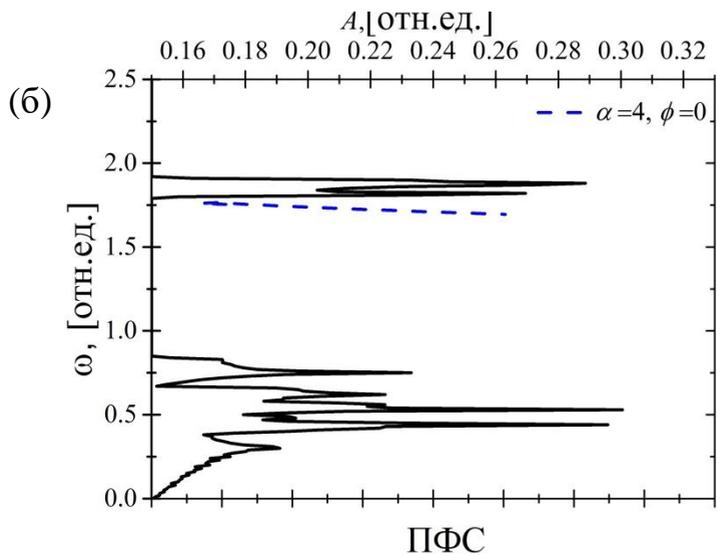


Рисунок 2.23 – Расположение частот возникших бризеров на фонном спектре в исследуемом кристалле (а) для  $\alpha=4$  при угле  $0^\circ$ ,

(б) для  $\alpha=4$  при угле  $30^\circ$ .

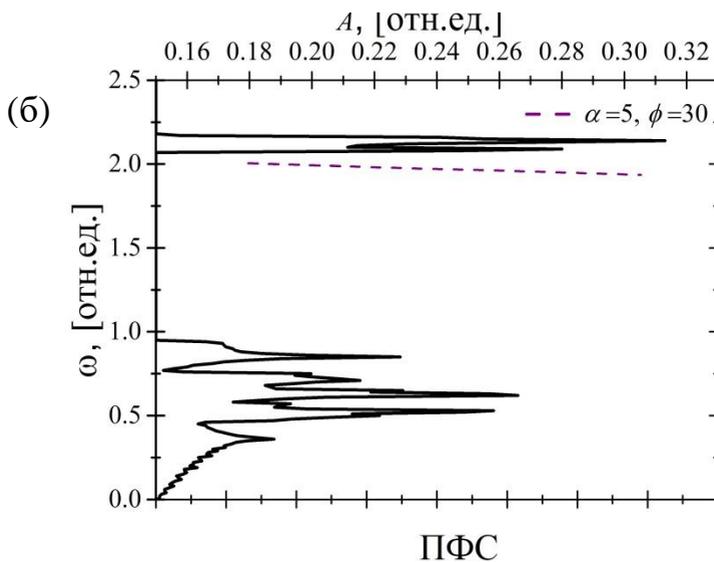
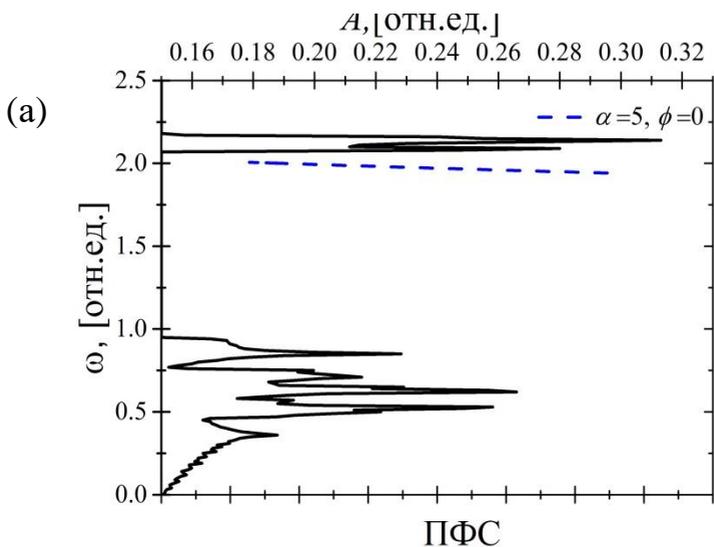


Рисунок 2.24 – Расположение частот бризеров на фоннном спектре в исследуемом кристалле (а) для  $\alpha=5$  при угле  $0^\circ$ , (б) для  $\alpha=5$  при угле  $30^\circ$ .

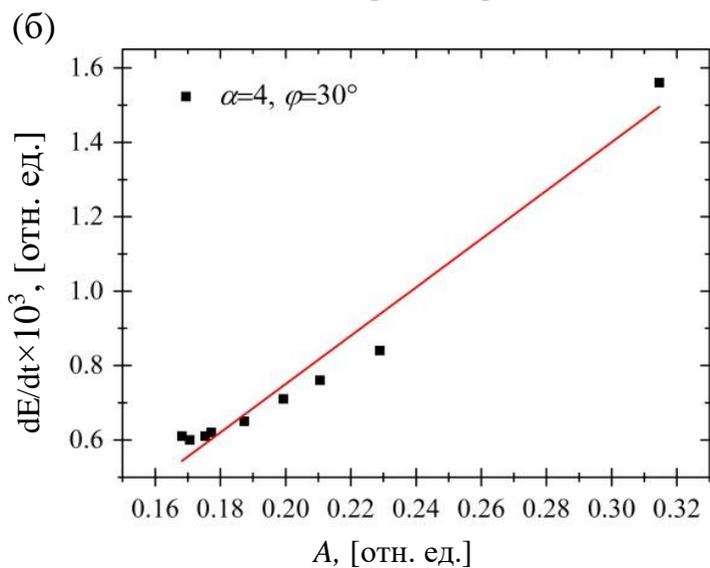
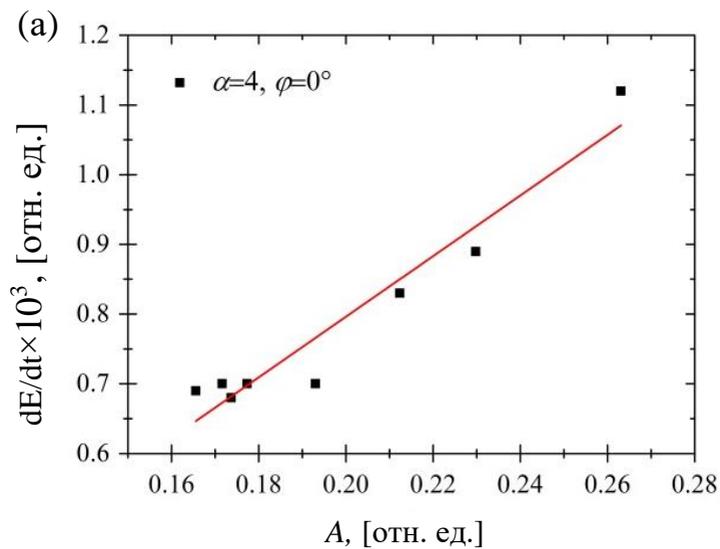


Рисунок 2.25 – Зависимость скорости падения энергии ДБ  $dE/dt$  от его амплитуды для случая  $\alpha=4$ : (а) при  $\varphi=0^\circ$ ; (б) при  $\varphi=30^\circ$ . Прямая линия представляет линейную аппроксимацию численных данных по методу наименьших квадратов.

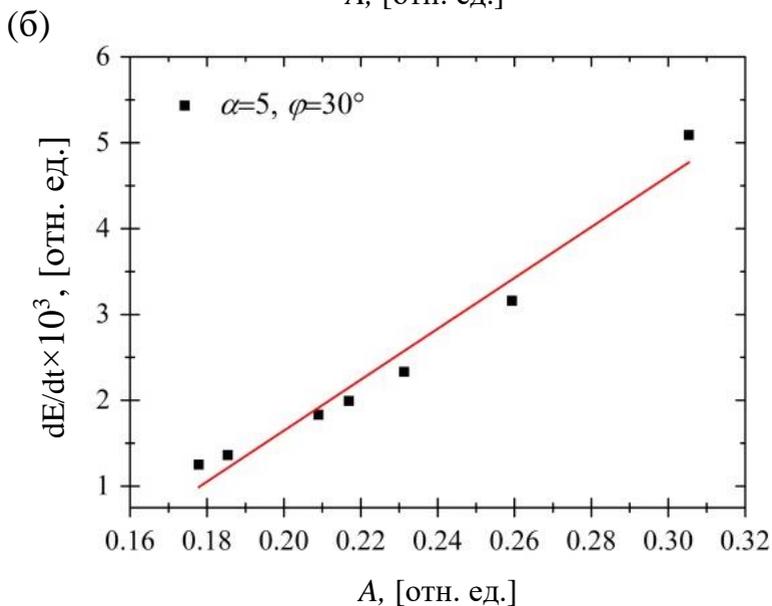
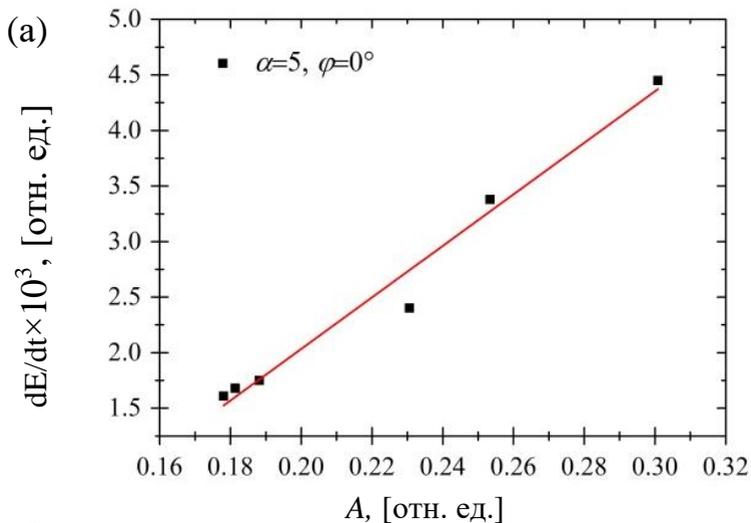


Рисунок 2.26 – скорость излучения энергии  $dE/dt$  для БД, возбужденного в 2D кристаллах Морзе с  $\alpha=5$ : (а) при  $\varphi=0$ ; (б) при  $\varphi=30$ .

### 2.4.3. Анализ зависимости частоты коротковолновых фононных мод от амплитуды

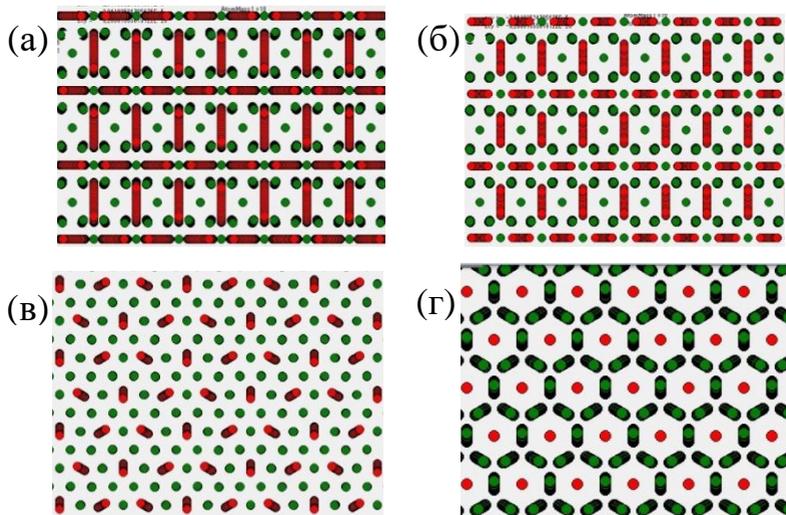


Рисунок 2.27 - Стробоскопическая картина колебательных мод  
двумерной бездефектной кристаллической решетки. (а,б,в)  
высокоамплитудные колебания легких атомов; (г)  
высокоамплитудные колебания тяжелых атомов.

Однако, на рисунке 2.28 г, график демонстрирует жесткий тип  
межатомного взаимодействия. А частоты данной фононной моды  
занимают место в щели фононного спектра кристалла. Это позволяет  
предположить возможность построения ДБ на основе данной  
колебательной моды.

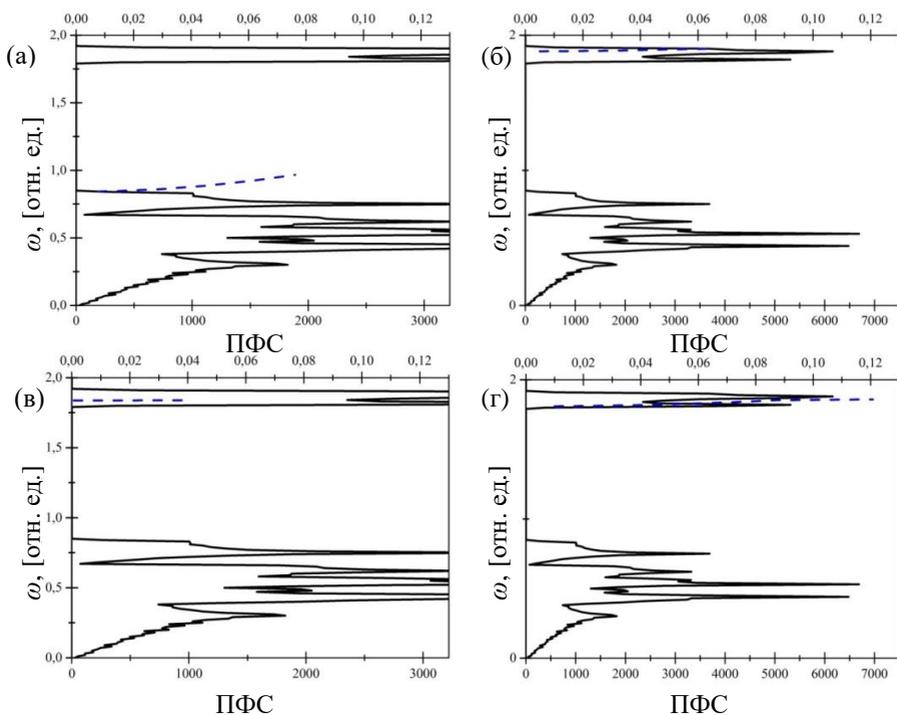


Рисунок. 2.28 – Зависимости частот фоннных мод, представленных на рисунке 2.27 (а,б,в,г соответственно) от амплитуды в нелинейном режиме.

#### 2.4.4. Реализация ДБ с жестким типом нелинейности посредством локализации коротковолновых фоннных мод

Подобно ранее описанному случаю в разделе 2.1.3 для моноатомной 2D решетке, мы наложили аналогичную колоколообразную функцию радиальной симметрии, на колебательную моду, изображенную на рисунке 2.27 г. Благодаря

чему получили высокосимметричный ДБ. Стробоскопическая картина движения атомов и амплитудно - частотная характеристика данного ДБ показаны на рисунке 2.29 и 2.30 соответственно. Можно отметить что данный ДБ имеет жесткий тип нелинейности и частота его увеличивается с ростом амплитуды отщепляясь от нижней границы фононного спектра. Подобный тип ДБ был впервые получен в рамках численного эксперимента.

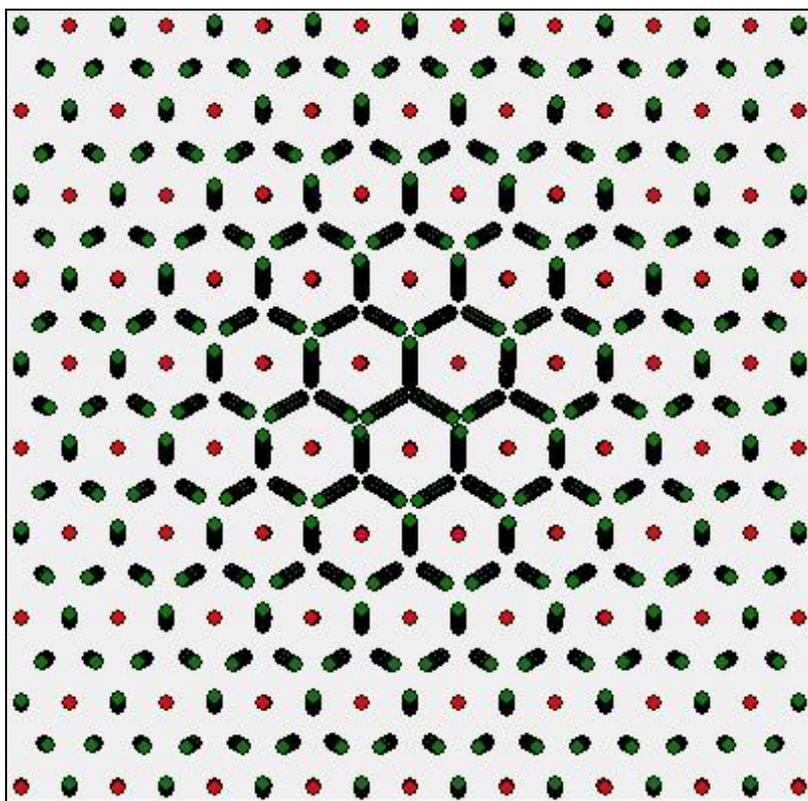


Рисунок 2.29 – Стробоскопическая картина движения атомов в ядре высокосимметричного ДБ.

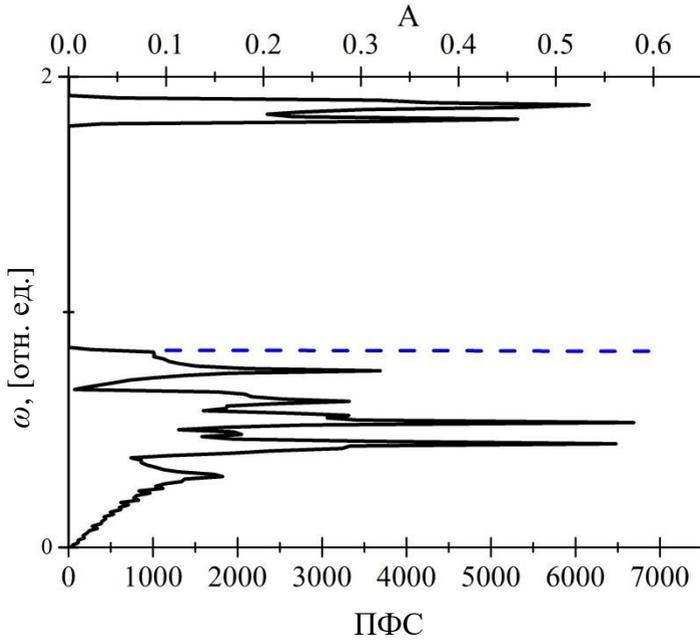


Рисунок 2.30 – Амплитудно-частотная зависимость центрального атома ДБ, показанного на рисунке 2.29.

## 2.5. Выводы по главе 2

1. Показана возможность существования в двумерном кристалле Морзе ДБ с жестким типом нелинейности с частотой выше фононного спектра. Возможность существования данных ДБ, локализованных в одном плотноупакованном атомном ряду, продиктована влиянием локального периодического потенциала от атомов кристалла, окружающих данный плотноупакованный ряд. Роль этого потенциала заключается в том, что он значительно затрудняет термические расширения атомов в плотноупакованном ряду, содержащем ДБ, тем

самым повышая вклад жесткого ядра потенциала в нелинейную динамику решетки.

2. Для возбуждения неподвижных ДБ в плотноупакованном ряду двумерного моноатомного кристалла Морзе был предложен анзац, содержащий небольшое число параметров, имеющих ясный физический смысл. Исследования влияния коэффициента жесткости связи в потенциале Морзе  $\alpha$  на характеристики такого ДБ показали, что его изменение незначительно изменяют такие свойства ДБ как максимально достигаемые амплитуды, общий уровень энергии и скорость излучения энергии с течением времени. Частота получаемых ДБ изменяется в соответствии со смещением верхней границы фононного спектра при изменении значения коэффициента жесткости связи.

3. Были проанализированы две коротковолновые фононные моды в моноатомном двумерном кристалле при различных внешних условиях и показано, что в условиях фиксированного размера расчетной ячейки (постоянство объема) они обладают жестким типом нелинейности и частота их выходит из спектра. Это свойство было использовано для возбуждения ДБ с жестким типом нелинейности посредством наложения колоколообразной функции локализации на коротковолновые фононные моды в нелинейном режиме. Этим способом было получено два типа ДБ с различным типом симметрии. ДБ с низкой симметрией (стержневого типа) аналогичен по конфигурации ДБ полученным ранее с помощью анзаца.

4. В двумерной биатомной решетке было исследовано влияние коэффициента жесткости атомной связи  $\alpha$  и направления начального

смещения атома на характеристики высоко-локализованного ДБ с мягким типом нелинейности. Установлено, что при величине угла поляризации ДБ  $\varphi=30^\circ$  их амплитуда на 10-15 % выше, чем в случае  $\varphi=0^\circ$ . Вариации  $\alpha$  практически не влияют на амплитуду ДБ в исследованном интервале амплитуд.

5. Проведенный анализ коротковолновых фононных мод с волновым вектором на границе первой зоны Бриллюэна в биатомном кристалле показал, что все моды, локализованные на легких атомах, демонстрируют мягкий тип нелинейности и находятся в пределах фононного спектра. Единственной модой с частотой в пределах щели спектра стала мода, локализованная на тяжелых атомах. Наложение на нее локализирующей функции позволило получить ДБ с жестким типом нелинейности с частотами в пределах щели фононного спектра.

### ГЛАВА 3. ДБ В ТРЕХМЕРНЫХ КРИСТАЛЛАХ МОРЗЕ

Большинство кристаллов, с которыми имеют дело физика и технологии, являются трехмерными, поэтому в данной работе представляется важным рассмотреть ДБ в трехмерных кристаллах Морзе в сравнении с ДБ в двумерных кристаллах. Поскольку целевым ДБ в трехмерных биатомных кристаллах Морзе было посвящено большое количество работ [10], в данном исследовании акцент сделан на рассмотрении ДБ с жестким типом нелинейности в монокристаллах.

В данном разделе проведен анализ трехмерного (3D) ГЦК кристалла, атомы в котором взаимодействуют посредством парного потенциала Морзе (1.1)

Функции  $U(r)$  представлены на рисунке 2.2 для значений параметра  $\alpha = \{5; 10; 20\}$  при  $D = r_m = 1$ . Как уже было отмечено в Главе 1 для 3D кристалла при  $\alpha = 10$  и  $\alpha = 20$  потенциал довольно таки короткодействующий, и взаимодействие происходит только между ближайшими атомами. А для  $\alpha = 5$  в трёхмерном кристалле взаимодействие уходит до третьей координационной сферы. Ввиду вышесказанного для проведения численных экспериментов было выбрано значение коэффициента жесткости связи  $\alpha = 5$  при  $D=r_m=1$ . Масса атомов так же бралась равной единице для сохранения общности полученных результатов, которые можно обеспечить выбором единиц времени.

Принимая радиус обрезки потенциала равным 7.5 [отн. ед.], равновесный параметр трехмерной ГЦК решетки составляет 1.36 [отн.

ед.] (равновесное межатомное расстояние при этом равно 0.962 [отн. ед.]). Двумерная гексагональная решетка имела равновесное расстояние равное 0.988 [отн. ед.].

Трехмерная расчетная ячейка была составлена из  $32 \times 32 \times 16$  атомов с наложенными периодическими граничными условиями. Расчеты проводились при  $T=0$  К, т.е. тепловые колебания атомов не учитывались.

Во время моделирования велась оценка таких параметров как: перемещение и скорость атомов, а так же поведение кинетической, потенциальной и полной энергии системы.

### **3.1. Возбуждение дискретных бризеров в 3D кристалле с помощью анзаца**

Рассмотрим 3D модель плотноупакованного кристалла. Примем расстояние между атомами равное  $a$ . Без потери общности, масса атомов принималась за единицу. Атомы взаимодействовали посредством парного межатомного потенциала Морзе (1.1). Выбранные параметры решетки 0.988 [отн. ед.] для 3D кристалла соответствовали выбранному радиусу обрезки в 7.5 [отн. ед.].

Расчетная ячейка с периодическими граничными условиями содержала  $32 \times 32 \times 16$  атомов.

Пронумеруем индексом  $n$  атомы одного из плотноупакованных рядов в трехмерном кристалле как показано на рисунке 3.1 а.

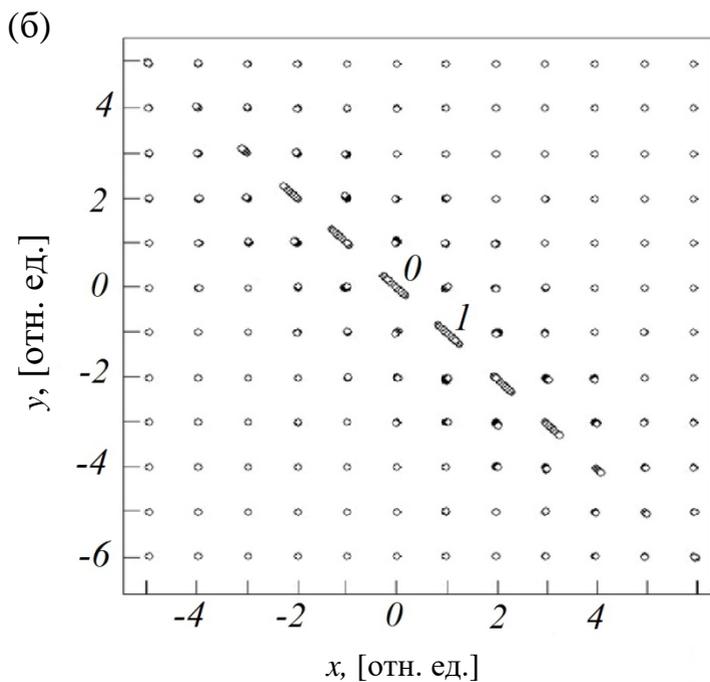
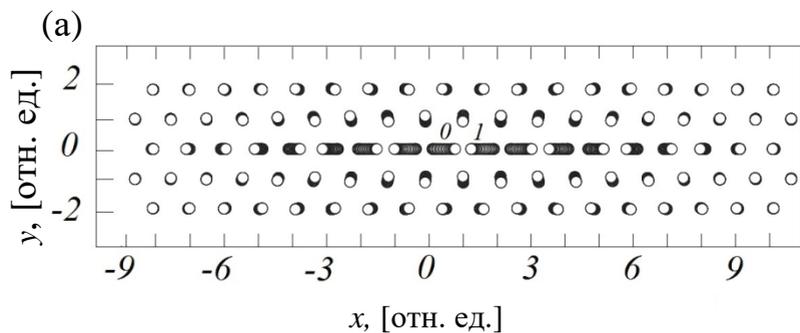


Рисунок 3.1 – Стробоскопическая картина движения атомов ДБ, возбужденных в плотно упакованном ряду а) 2D и б) 3D кристаллах Морзе. Для наглядности смещения атомов были увеличены в 4 раза.

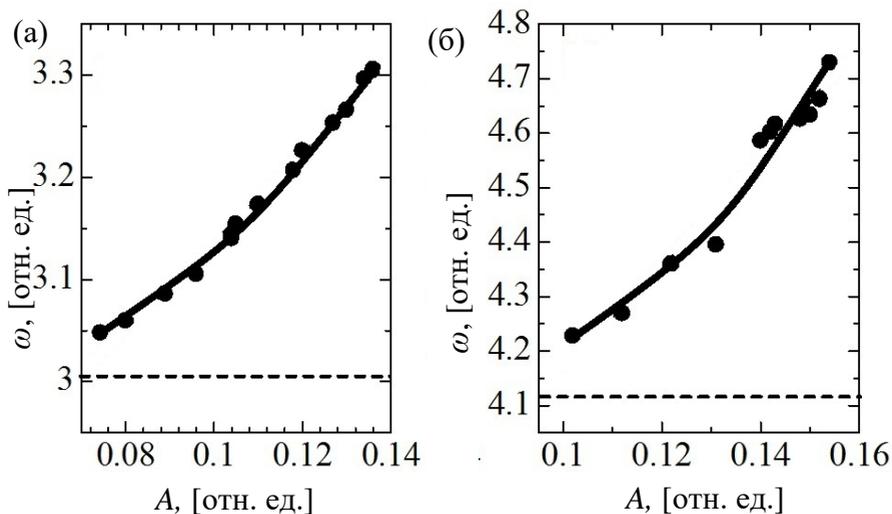


Рисунок 3.2 – Зависимости частоты от амплитуды ДБ в (а) 2D и (б) 3D моноатомных кристаллах.

Начальные условия для запуска дискретного бризера в состоянии покоя были заданы аналогично случаю двумерного кристалла Морзе (2.2), (2.3).

Амплитуду колебания ДБ определяет параметр  $A$ , амплитуду смещений центров колебаний атомов определяет параметр  $B$ , а степень пространственной локализации ДБ задают параметры  $\beta = \gamma$ . Параметр  $x_0$  задает его начальное положение. При значении  $x_0 = 0$  получаем ДБ центрированный на атоме расчетной ячейки, а при  $x_0 = 1/2$  в центре между двумя соседними атомами.

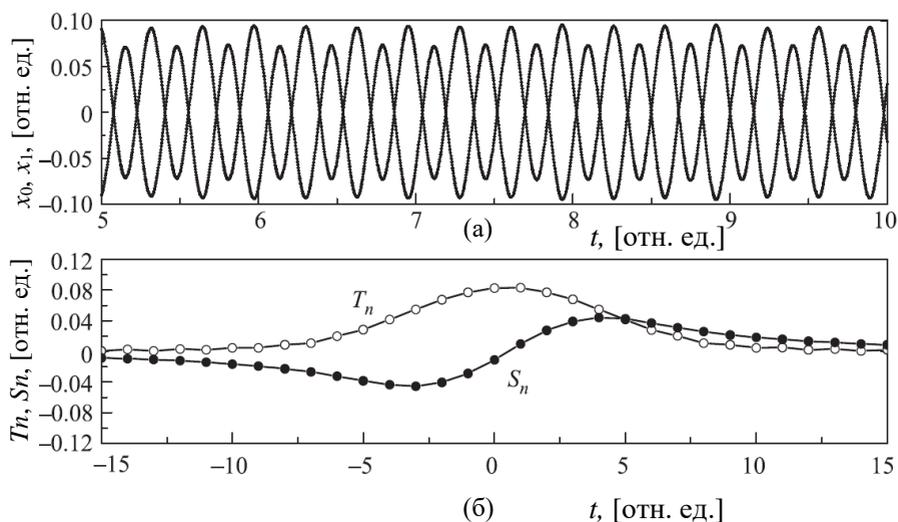


Рисунок 3.3 – Пример стационарного ДБ в плотно упакованном 2D кристалле. (а) временная зависимость смещения атомов ДБ (атомы 0 и 1 на рисунке 3.1 а). (б) амплитуды  $T_n$  и смещения решетки  $S_n$  позиций атомов плотно упакованного ряда, где возбужден дискретный бризер.

Проведем сравнение характеристик ДБ в двумерном и трехмерном кристалле Морзе. Амплитудно-частотные зависимости для ДБ в монокристаллах 2D и 3D кристаллах представлены на рисунке 3.2 а, б. Пунктирной линией отмечена верхняя граница фонового спектра кристаллов. ДБ демонстрируют увеличение их частот с ростом амплитуды, что характерно для жесткого типа нелинейности системы.

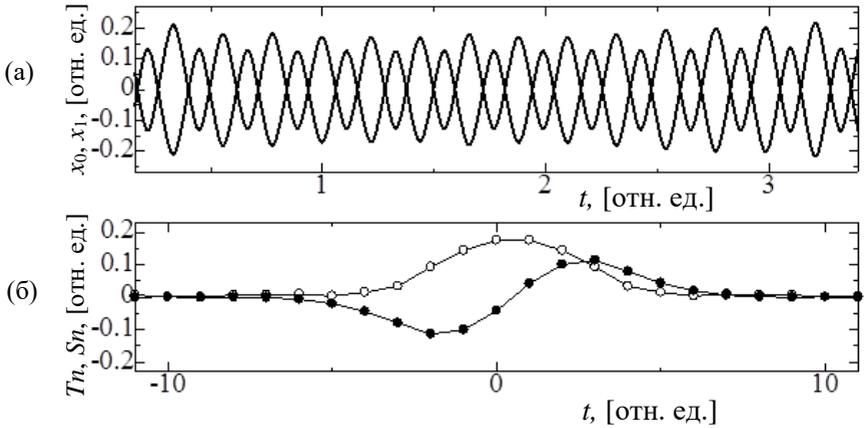


Рисунок 3.4 – Временная зависимость смещения  $x_0(t)$  и  $x_1(t)$ (а) атомов ДБ 0 и 1 (рисунок 3.1 б) и функции  $T_n$  и  $S_n$  (б) для ДБ в 3D кристалле.

На рисунке 3.3 приведен пример неподвижного ДБ в плотноупакованном ряду двухмерного кристалла, с начальными условиями (2.2), (2.3). Для анзацев использовались соответствующие параметры:  $A = 0.0945$ ,  $B = 0.011$ ,  $\beta=\gamma=0.22$ ,  $x_0 = 1/2$ . На рисунке 3.5 а, показана эволюция во времени смещений  $x_0(t)$  и  $x_1(t)$  двух центральных атомов ДБ (атомы помеченные как 0 и 1, см. рисунок 3.1 а). Функции  $T_n$  и  $S_n$ , как показано на рисунке 3.5 б, показывают амплитуду и атомный сдвиг с позиций решетки атомов, стоящих в плотноупакованном атомном ряду.

На рисунке 3.4 представлены аналогичные результаты для дискретного бризера в трехмерном кристалле с параметрами для (2.2), (2.3):  $A = 0.21$ ,  $B = 0.07$ ,  $\beta=\gamma=0.6$ ,  $x_0 = 1/2$ .

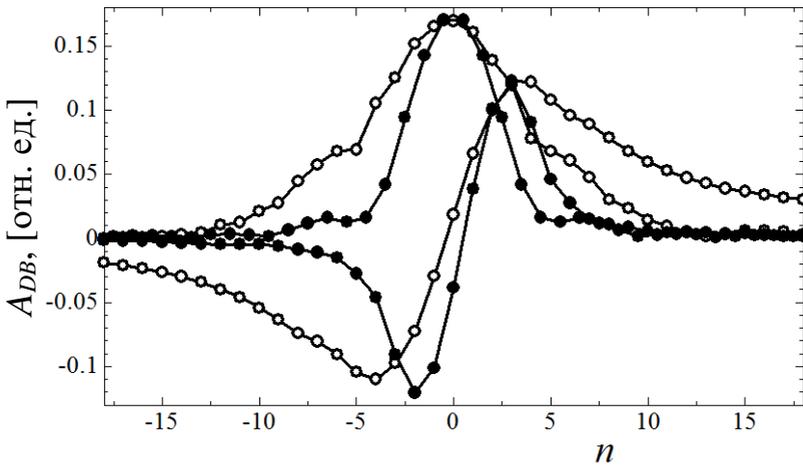
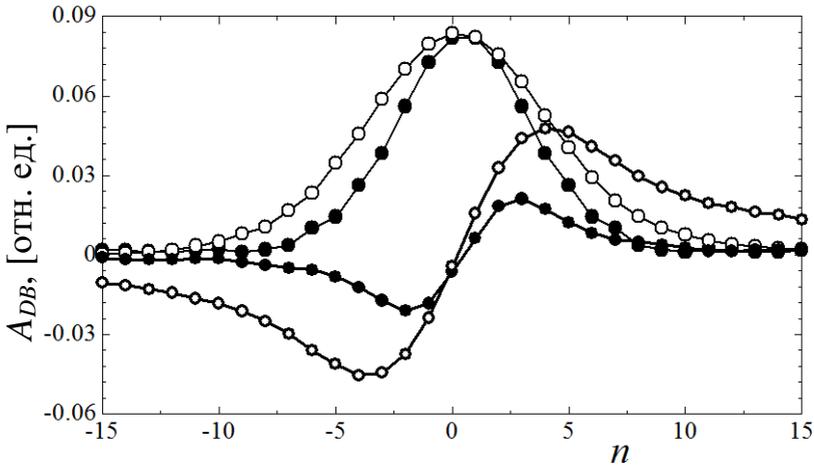


Рисунок 3.5 – Сравнение ДБ в 2D и 3D кристаллах возбужденными с различными начальными параметрами. Открытые кружки показывают смещение атома ДБ в 2D кристалле, черные кружки для 3D случая.

ДБ, возбужденные с различными начальными условиями в двух- и трехмерных случаях, показаны на рисунке 3.5. Параметры анзаца

(2.2), (2.3) и (2.4), используемые для возбуждения ДБ были:  $A=0.24$ ,  $B=0.014$ ,  $\beta=\gamma=0.22$ ,  $x_0=1/2$  – для 2D кристалла,  $A=0.19$ ,  $B=0.04$ ,  $\beta=\gamma=0.65$ ,  $x_0=1/2$  для 3D случая, показанного на рисунке 3.4. На рисунке 3.5 представлены 2D кристалл с параметрами анзаца:  $A=0.4$ ,  $B=0.016$ ,  $\beta=\gamma=0.22$ ,  $x_0=1/2$ ; и 3D кристалл с параметрами анзаца  $A=0.23$ ,  $B=0.07$ ,  $\beta=\gamma=0.65$ ,  $x_0=1/2$ .

Атомы в 2D кристалле показаны в открытых кружках, 3D – черные круги. Отметим, что степень локализации в 3D кристалле выше, чем в 2D кристалле.

### **3.2. Анализ зависимости частоты коротковолновых фононных мод от амплитуды**

В рассмотренном кристалле оказалось возможным возбуждение как минимум двух коротковолновых фононных мод, изображенных на рисунке 3.2 а,б. На рисунке показаны восемь атомов транслируемой ячейки, и векторы трансляции данной ячейки в направлениях от атома обозначенного 0 к атомам под номерами 1, 2 и 4. Система координат для решетки выбрана так, чтобы плотноупакованная плоскость ГЦК кристалла (111) была параллельна плоскости  $xu$ . Атомы транслируемой ячейки под номерами 0-3 располагаются на одной плотноупакованной плоскости, а атомы 4-7 на параллельной к первой. Делокализованная колебательная мода I (рисунок 3.6 а) задавалась смещением атомов 0, 1, 2 и 4 на расстояние  $T$  к равноудаленной от этих атомов точке. Аналогично отклонялись атомы 3,5,6 и 7. Мода II (рисунок 3.6 б) задавалась смещением атомов 0, 1, 2 и 4 смещением на

величину  $T$  к равноудаленной точки, а атомы 3, 5, 6 и 7 смещались от равноудаленной точки.

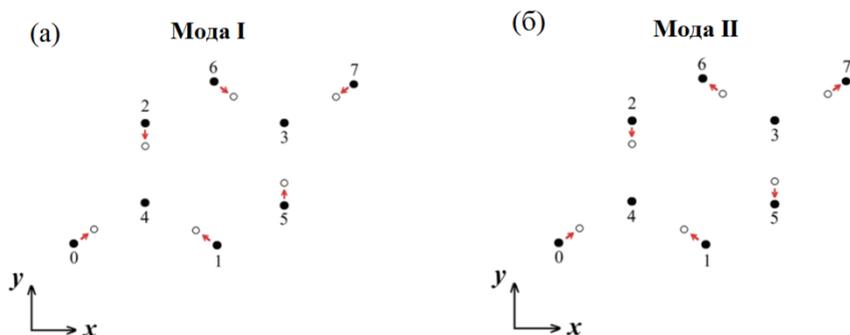


Рисунок 3.6 – Схематическое изображение колебаний атомов (а) моды I и (б) моды II в ГЦК кристалле Морзе. Плоскость  $xу$  совпадает с плоскостью (111) ГЦК решетки.

Скорости всех атомов в начальное время равнялись нулю. Полученные моды I и II имеют точные решения уравнений движения атомов, обусловленные симметрией ГЦК решетки. Полученные моды не зависят от типа межатомного потенциала и от первоначальных амплитуд  $T$ . Как и в двумерном кристалле Морзе, для 3D кристалла были рассмотрены два случая. В первом, размер расчетной ячейки был фиксирован ( $V=const$ ). Во втором случае он увеличивался с ростом амплитуды коротковолновой моды так, что сохранялось нулевое внешнее давление ( $P=0$ ). Зависимости частоты от амплитуды исследуемых мод I и II для этих случаев представлены на рисунке 3.7. Как видно из графиков, по аналогии с двумерным случаем, в нелинейном режиме при условии постоянного объема данные моды

демонстрируют рост частоты с амплитудой, а в случае нулевого внешнего давления частота фононных мод уменьшается с амплитудой.

Таким образом, можно заключить, что существование ДБ возможно только при сдерживании “теплового расширения” решетки, таким образом, чтобы ядро потенциала вносило больший вклад в динамику, и частота бризера оставалась выше фононного спектра кристалла.

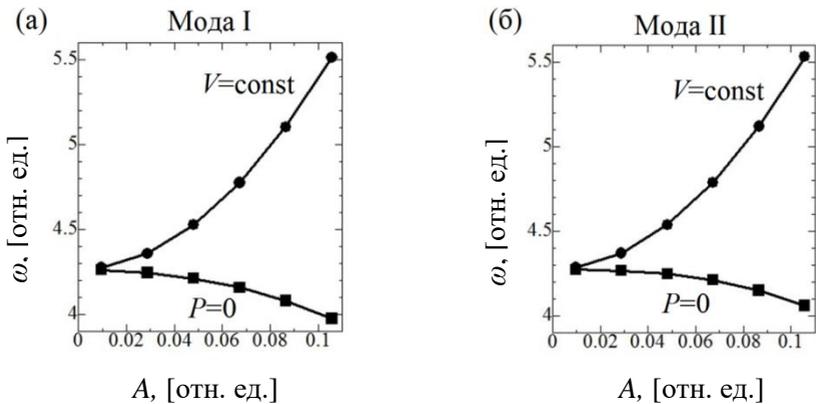


Рисунок 3.7 – Зависимости частоты фононных мод (а) I и (б) II, представленных на рисунке 3.2 а и б, соответственно, от амплитуды, в нелинейном режиме: при неизменных размерах расчетной ячейки ( $V=const$ ) (кружки, соединенные линией), при нулевом давлении ( $P=0$ ) (квадраты, соединенные линией).

### 3.3. Возбуждение ДБ в трехмерных кристаллах посредством локализации коротковолновых фононных мод

Для получения ДБ из делокализованной фононной моды, применим к ней экспоненциально локализованную функцию сферической симметрии. В процессе моделирования выяснилось, что расположение точки центрирования локализующей функции сильно влияет на свойства возникающих ДБ. Пусть координатами исходной точки центрирования ДБ являются  $(x_0, y_0, z_0)$ . Тогда амплитуду колебаний атома с координатами  $(x, y, z)$ , на расстоянии  $R = \sqrt{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2 + (z - z_0)^2}$  от центра ДБ будет рассчитана по формуле (2.6).

На рисунке 3.8 (а, б) представлены стробоскопические картины движения атомов в районе ДБ в проекции на плоскость  $(x, y)$ . Получены данные ДБ наложением локализующей функции (2.6) на коротковолновую фононную моду I. Параметры, входящие в (2.6):  $T = 0.55$ ,  $\beta = 0.85$ . На рисунках 3.8 а и б, показаны случаи различного выбора точки центрирования ДБ.

Можно отметить, что конфигурация ДБ, показанная на рис. 3.7 по истечении некоторого времени, значительно отличается от изначально заданной сферической формы и приближается к вытянутой вдоль плотноупакованного направления (стержнеподобной) форме. Данная топология ДБ хорошо соотносится с аналогичными ДБ в двумерном кристалле, описанными в разделе 2.1.3. Бризеры схожей конфигурации, полученные с использованием

реалистичных межатомных потенциалов и описанные в работах [64-65], способны перемещаться по кристаллу.

На рисунке 3.9 показаны стробоскопические картины движения атомов ДБ, полученного из коротковолновой фононной моды II путем наложения локализирующей функции (2.6). Значения для параметров из (2.6): (а)  $T = 0.45$ ,  $\beta = 0.6$ ; (б)  $T = 0.55$ ,  $\beta = 0.85$ . В данном случае получаемая конфигурация ДБ имеет более высокую симметрию, чем в предыдущем случае, однако полной сферической симметрии, как в двумерном случае (раздел 2.2), не наблюдается. Одним из возможных объяснений такого значительного влияния точки центрирования локализирующей функции на конфигурацию получаемого после релаксации ДБ может служить тот факт, что трехмерный кристалл, в отличие от двумерного, не может быть изотропным.

Отметим, что рассмотренные ДБ не являются точными решениями нелинейных уравнений движений атомов и должны рассматриваться как квазибризеры [76]. Они имеют весьма большое время жизни исчисляемое десятками периодов колебаний.

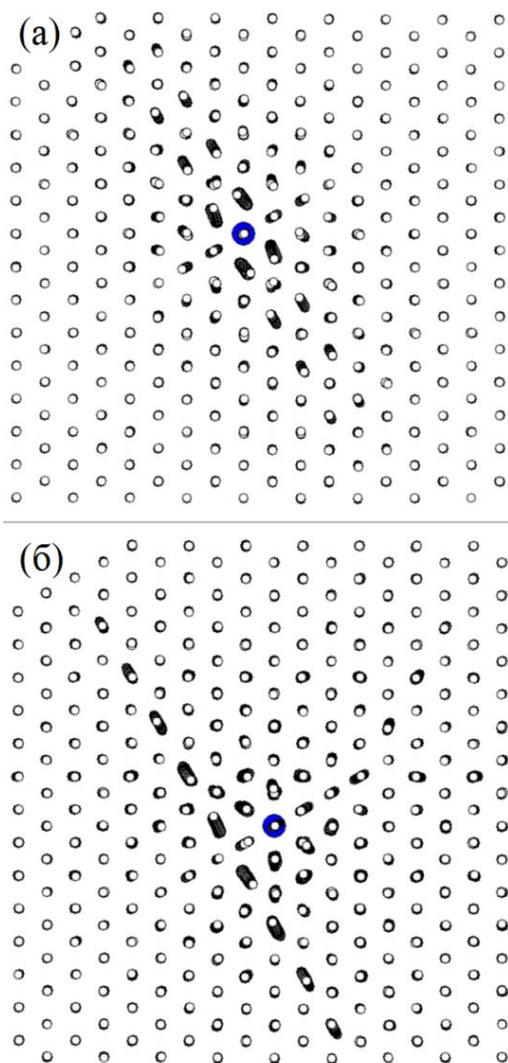


Рисунок 3.8 – Движение атомов в области ДБ в проекции на плоскость  $(x, y)$ , полученных путем локализирующей функции (2.6) на коротковолновую фоновую моду I. Значения параметров, входящих в (2.6):  $T = 0.55$ ,  $\beta = 0.85$ , при этом на (а) и (б) отличается точка центрирования ДБ.

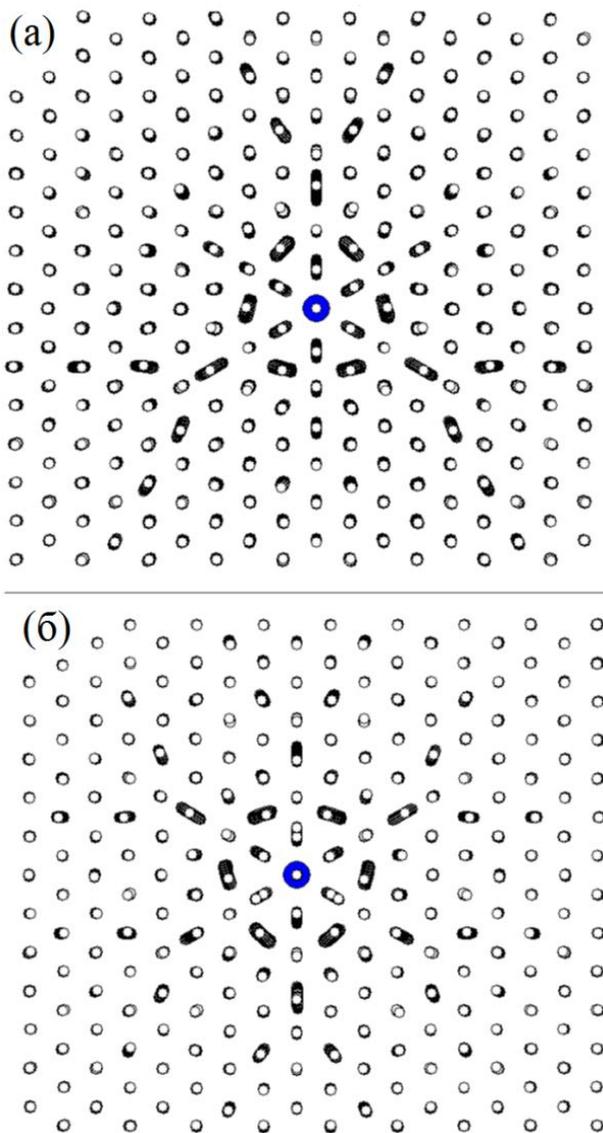


Рисунок 3.9 – Подобно рисунку 3.8, но при наложении локализирующей функции на фононную моду II. Значения параметров, входящих в (2.6): (а)  $T = 0.45$ ,  $\beta = 0.6$ ; (б)  $T = 0.55$ ,  $\beta = 0.85$ .

### 3.4. Выводы по главе 3

1. В данной главе рассмотрены свойства ДБ в трехмерных ГЦК кристаллах с межатомным потенциалом Морзе. Проведено сравнение бризеров, возбужденных посредством реализации анзаца в двумерных и трехмерных кристаллах Морзе. ДБ в трехмерных моноатомных кристаллах имеют степень пространственной локализации выше, чем в двумерных. Для ДБ, локализованных в плотноупакованном ряду, это связано с тем, что в трехмерном случае локальный потенциал, созданный окружением атомного ряда, оказывается более глубоким, чем в двумерном, и он более эффективно сдерживает «тепловое расширение» ряда. Для высокосимметричных ДБ это связано с тем, что в двумерном кристалле упругие напряжения, созданные ядром ДБ, спадают с удалением от ядра как  $R^{-2}$  в двумерном случае и более быстро, как  $R^{-3}$ , в трехмерном.

2. Проведен анализ поведения коротковолновых фононных мод при различных внешних условиях и получен ряд ДБ различной конфигурации путем локализации данных мод. Конфигурация получаемых ДБ значительно зависит от точки центрирования локализующей функции по отношению к атомам решетки.

## ГЛАВА 4. ДБ В АЛЬФА-УРАНЕ

Первые работы, посвященные изучению дискретных бризеров (ДБ) в нелинейных дискретных системах [14], инициировали большое число исследований их условий существования и свойств [16, 97,102]. Исследования ДБ экспериментальными методами [8, 40, 42, 103, 104, 105, 106, 107] имеют серьезные методологические трудности, связанные с разделением вкладов колебаний ДБ и тепловых фононных колебаний [63]. В настоящее время наиболее эффективным способом исследования ДБ является метод компьютерного эксперимента, в частности, метод молекулярной динамики с использованием эмпирических потенциалов. На данный момент множество работ посвящено исследованию условий существования и свойств ДБ в щелочно-галогидных кристаллах со структурой NaCl [7,74], структурах с модельными потенциалами [108, 109, 110, 111], в Si и Ge [24], в ГЦК [38], ОЦК [38] и ГПУ [112, 113, 114] металлах и графене [26,36,115]. Одним из наиболее значимых достижений в изучении нелинейных локализованных колебаний в кристаллах стала демонстрация возможности возбуждения ДБ в двумерном графене из первых принципов с использованием метода функционала электронной плотности, которое описано в работе [69].

В последние годы наблюдается немало попыток применения концепции ДБ для объяснения различных физических эффектов в твердых телах [46,53,116, 117, 118, 119]. Отметим, что многие явления, например, электропластичность [120, 121] еще ждут своего

объяснения и весьма вероятно, что эта задача может быть решена с привлечением концепции ДБ. Одним из частных вопросов, который может быть объяснен присутствием в структуре дискретных бризеров, является аномалия температурной зависимости теплопроводности в уране [42,106]. Данная работа посвящена исследованию возможности существования ДБ в орторомбическом кристалле урана.

#### 4.1. Описание модели

Для расчетов применялся пакет программ LAMMPS [122]. Потенциал взаимодействия между атомами урана был подобран, основываясь на методе погруженного атома - embedded-atom method (EAM) [123, 124].

Как известно, уран способен иметь три стабильные фазы кристаллической решетки:  $\alpha$  фаза ( $\alpha$ -U) - имеющая орторомбическую решетку,  $\beta$  фаза с тетрагональной решеткой и  $\gamma$  фаза с ОЦК решеткой. При давлении  $P = 0$  GPa и температуре  $T=935$  K  $\alpha$ -U трансформируется в  $\beta$ -U, существующий в весьма узких диапазонах давления и температуры. Достигая температуры 1045 K  $\alpha$ -U преобразуется в  $\gamma$ -U. Температура выше 1045 K приводит к началу плавления урана.

Подробно, структура  $\alpha$ -U изображена на рисунке 4.1. Стоит отметить, что в сравнении с ГЦК, ОЦК и ГПУ кристаллами, решетка альфа-урана имеет более низкую симметрию. Трансляционная ячейка включает четыре атома и имеет параметры решетки  $a$ ,  $b$ ,  $c$  равные 2.854, 5.87, 4.955 [отн. ед.] соответственно. Исследуемая расчетная

ячейка включала в себя  $60 \times 30 \times 30$  межатомных расстояний, что соответствовало линейным размерам  $170 \times 98.9 \times 57.6$  [отн. ед.]. Ячейка содержала 48000 атомов. Для инициализации мобильного ДБ выбиралось направление (001). Плотнупакованные ряды кристалла выделены светлым оттенком на рисунке 4.2 и пронумерованы индексом  $n$ .

Для возбуждения ДБ начальные условия были заданы следующим образом:

$$\begin{aligned} x_n(t) &= (-1)^n T_n \cos[\omega t + \varphi_0 + \delta(n - x_0)] + S_n, \\ y_n &= 0, \quad \dot{y}_n = 0, \end{aligned} \quad (4.1)$$

где  $\omega$  – частота ДБ, лежащая выше фононного спектра кристалла,  $\varphi_0$  – начальная фаза колебаний, параметр  $\delta$  определяет разность фаз колебаний соседних атомов,  $T_n$  и  $S_n$  определялись выражениями

$$T_n = \frac{A}{\cosh[\beta(n - x_0)]} \quad (4.2)$$

$$S_n = \frac{-B(n - x_0)}{\cosh[\gamma(n - x_0)]} \quad (4.3)$$

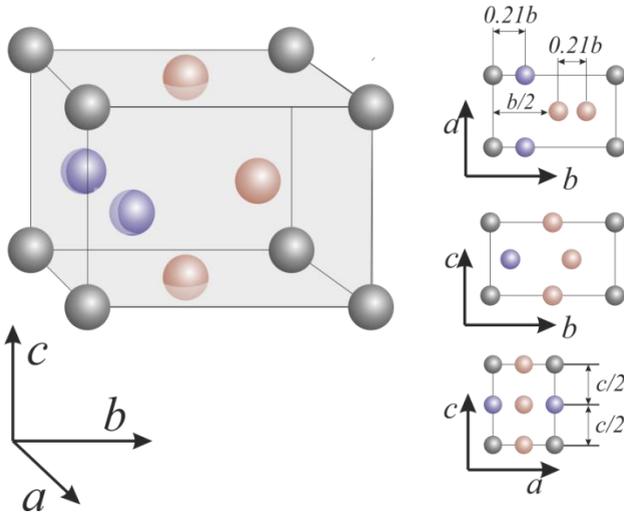


Рисунок 4.1– Кристаллическая структура  $\alpha$  - урана.

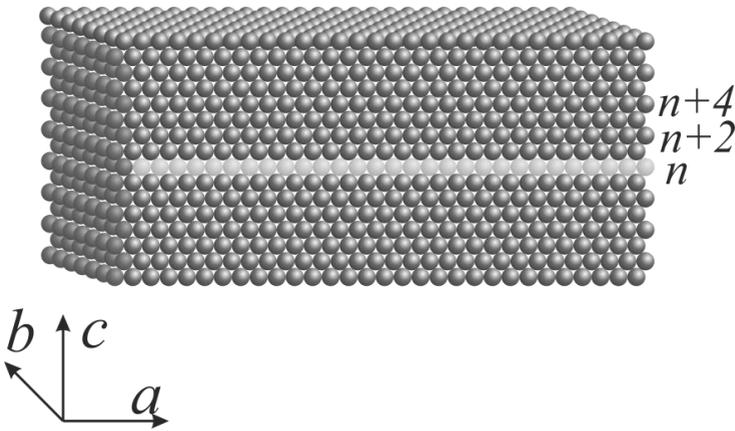


Рисунок 4.2 – Расчетная ячейка  $\alpha$  - урана. Возбуждение ДБ проходило в прямолинейном ряду, выделенном светлым оттенком. где параметр  $A$  определяет амплитуду ДБ, параметр  $B$  определяет амплитуду смещений центров колебаний атомов, параметры  $\beta$  и  $\gamma$  задают степень пространственной локализации ДБ, а  $x_0$  - его

начальное положение. При  $x_0=0$  имеем ДБ центрированный на атоме, а при  $x_0=1/2$  в середине между двумя соседними атомами. Функции  $T_n$  и  $S_n$  в (4.2, 4.3) описывают амплитуды колебания и смещения центров колебания атомов, соответственно. Проще говоря,  $T_n=(x_{n,max} - x_{n,min})/2$ ,  $S_n=(x_{n,max} + x_{n,min})/2$ , где  $x_{n,max}$  и  $x_{n,min}$  - это максимальное и минимальное значение (квази)периодической функции  $x_n(t)$ , которая описывает движение  $n$ -го атома в прямолинейном ряду. Отметим, что скорость ДБ зависит от  $\delta$ , и  $\delta=0$  соответствующей случаю неподвижного ДБ. Все атомы кроме выделенного плотноупакованного ряда имели нулевые начальные перемещения и скорости.

## 4.2. Результаты моделирования

Во-первых, плотность фононных состояний (ПФС), рассчитывается как представлено на рисунке 3. В (а) ПФС разлагается на три ортогональных компонента, в то время как в (б) представлен суммарный ПФС. Следует отметить, верхний предел фононного спектра для колебаний в направлении  $x$  составляет около 4,8 ТГц, в то время как для  $y$  и  $z$  направлений намного выше, и доходит до 5,2 ТГц. Это важно, потому что высокоамплитудные колебания атома в ядре БД ориентированы вдоль оси  $x$  и такой БД будет незначительно взаимодействовать с фононами, поляризованными вдоль направлений  $y$  и  $z$ .

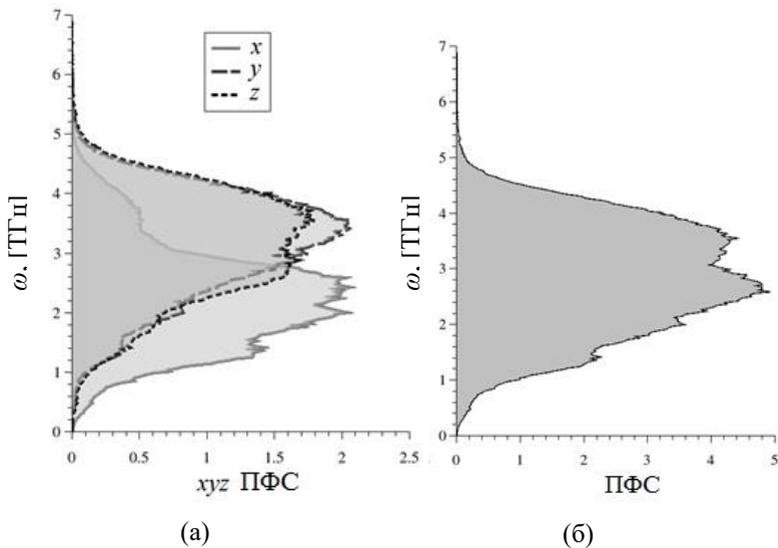


Рисунок 4.3– Плотность фоновых состояний для  $\alpha$ -урана. а) разложенные на три ортогональные составляющие, б) суммарный фоновый спектр.

Возбуждение ДБ удалось произвести при значениях параметров анзаца (1), (2)  $A = 0.47 - 0.60$ ,  $B = 0.31-0.38$ ,  $\beta = 0.67$ ,  $\gamma = 0.75$ . При этом существование ДБ продолжалось не менее 350 колебаний, что соответствует приблизительно 175 пс.

По результатам моделирования были построены графики амплитуды колебания атомов  $T_n$  и смещения центров колебания атомов  $S_n$ , которые представлены на рисунке 4.4. По данным графикам видно, что в  $\alpha$ -уране ДБ локализован на 8 атомах, которые имеют значимые величины смещения по сравнению с другими атомами ряда ( $25 < n < 35$ ). Из рисунке 4.4 видно, что смещения центров колебания

атомов  $S_n$  одного порядка со значениями максимальной амплитуды колебания  $T_n$ .

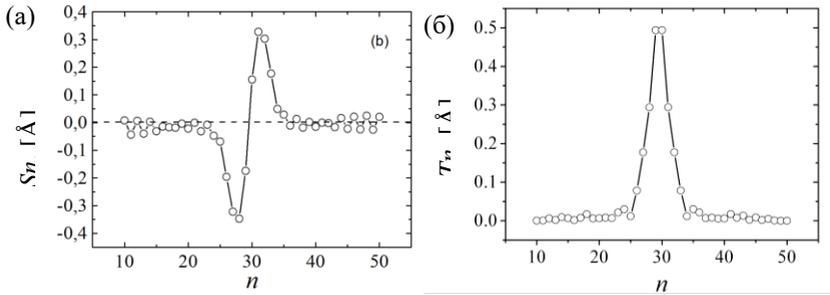


Рисунок 4.4 – Смещения центров колебания атомов (а) и амплитуды колебания атомов (б) дискретного бризера в  $\alpha$ -уране, возбужденного при помощи анзаца (1), (2) при начальных данных  $A = 0.55 \text{ \AA}$ ,  $B = 0.38 \text{ \AA}$ ,  $\beta = 0.67$ ,  $\gamma = 0.75$ ,  $x_0 = 1/2$ ,  $\delta = 0$ .

На рисунке 4.5 показана зависимость частоты неподвижного ДБ  $\omega$  от его амплитуды  $A$  в  $\alpha$ -U. Сплошной горизонтальной прямой показана нижняя граница фононного спектра. Действительно видно, что частота ДБ лежит выше фононного спектра металла, при этом отмечается жесткий тип нелинейности, при котором частота ДБ увеличивается с ростом его амплитуды. Значение полученных амплитуд неподвижного ДБ в  $\alpha$ -U лежит в пределах от 0.36 до 0.55 ангстрем в интервале частот 3.9- 4.5 терагерц.

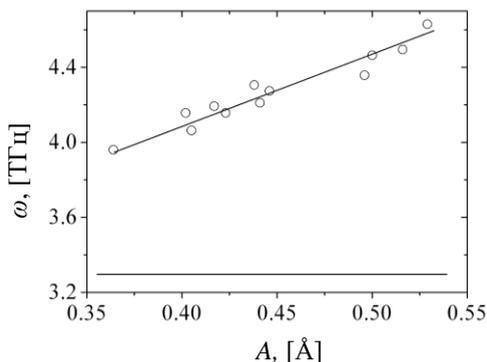


Рисунок 4.5 – Зависимость частоты дискретного бризера от амплитуды колебания для  $\alpha$ -урана. Начальные условия  $A = 0.47 - 0.60 \text{ \AA}$ ,  $B = 0.31-0.38 \text{ \AA}$ ,  $\beta = 0.67$ ,  $\gamma = 0.75$ . Горизонтальной прямой показана верхняя граница фононного спектра металла.

Нами была сделана попытка получить движущийся ДБ, используя анзац (1), (2), (3). На рисунке 4.6 показаны колебания атомов  $n$  и  $n+3$  как функции времени, чтобы показать прохождение через них ДБ. Можно отметить факт смещения среднего положения атомов с течением времени, и уменьшения амплитуды центрального атома с одновременным ростом ее на атоме  $n+3$  (рисунок 4.6). После прохождения ДБ имеет место уменьшение расстояния между атомами. Движущийся бризер достаточно быстро теряет свой начальный импульс и останавливается, пройдя несколько межатомных расстояний, как показано на рисунке 4.5. Нужно сказать, что малая длина пробега движущего ДБ не позволяет оценить зависимость скорости движения ДБ от параметра анзаца  $\delta$ .

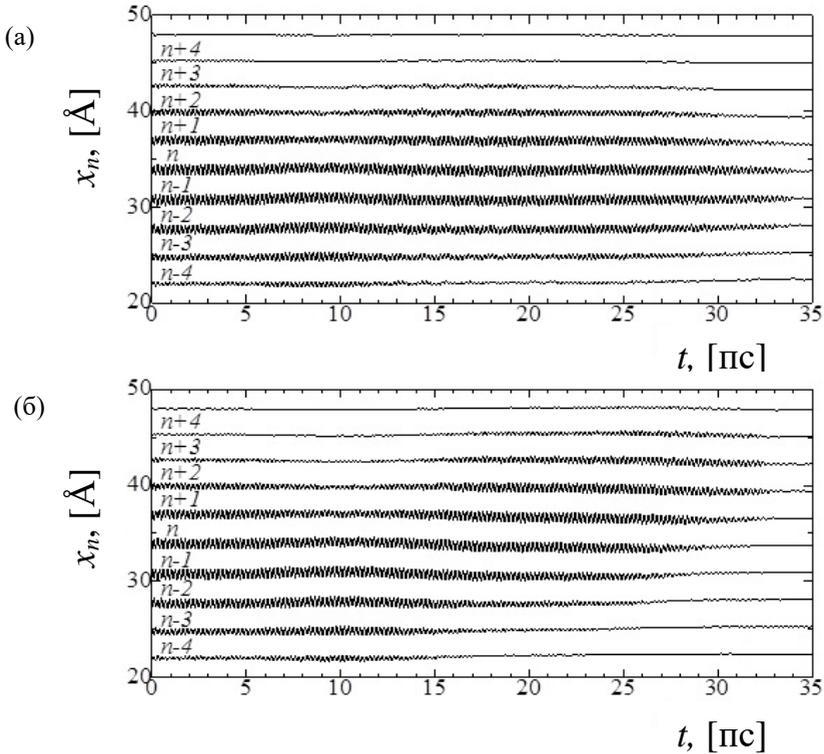


Рисунок 4.6 –  $x$ -координаты атома в ядре ДБ как функции времени. (а) стационарный ДБ, возбужденный с помощью начальных условий (4.1), (4.2), (4.3) с параметрами  $A = 0.55$  [Å],  $B = 0.38$  [Å],  $\beta = 0.67$ ,  $\gamma = 0.75$ ,  $\varphi_0 = 0$ ,  $x_0 = 1/2$ ,  $\delta = 0$ . Центр ДБ располагается между положениями  $n$  и  $n-1$ . (б) Перемещение ДБ, возбужденного с параметрами  $A = 0.56$  [Å],  $B = 0.36$  [Å],  $\beta = 0.47$ ,  $\gamma = 0.55$ ,  $\varphi_0 = 0$ ,  $x_0 = 1/2$ ,  $\delta = 0$ . ДБ демонстрирует слабую подвижность.

Основные результаты исследований по возбуждению ДБ в альфа-уране представлены в работах [125,126].

### 4.3. Выводы по главе 4

1. Методом молекулярной динамики с использованием пакета программ LAMMPS получен ДБ в кристалле  $\alpha$ -U с орторомбической кристаллической решеткой в плотноупакованном направлении (001). Полученный ДБ локализован примерно на восьми атомах и демонстрирует жесткий тип нелинейности. Амплитуда ДБ растет в интервале значений  $0.36 < A < 0.55 \text{ \AA}$  с ростом частоты в интервале  $3.9 < \omega < 4.5 \text{ THz}$ .

2. В начальном интервале амплитуд имеет место перекрытие частот ДБ с частотами фононного спектра кристалла урана. Это может объясняться различной поляризацией колебаний атомов ДБ и данной части спектра.

3. Попытка возбуждения движущихся ДБ показала, что данный вид бризеров в  $\alpha$ -U характеризуется низкой стабильностью и небольшой длиной пробега.

## ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

В работе показано, что **моноатомные** двумерные и трехмерные кристаллы с межатомными взаимодействиями, описываемыми классическими парными потенциалами Морзе, в отличие от одномерных, допускают существование ДБ с жестким типом нелинейности, с частотами выше бесщелевого фононного спектра.

Как в двумерном, так и в трехмерном моноатомных кристаллах Морзе удалось возбудить ДБ двух различных типов. Во-первых, возможны ДБ локализованные в одном плотноупакованном атомном ряду и имеющие квазиодномерную структуру. Во-вторых, существуют ДБ, имеющие ядро круговой формы в двумерном случае [см. рисунок 2.15] и формы близкой к сферической в трехмерном. Некоторое отклонение формы ядра ДБ от сферической вызвано упругой анизотропией ГЦК решетки.

Существование ДБ в моноатомных кристаллах Морзе размерности выше единицы обусловлено тем, что наряду с мягким хвостом, потенциал Морзе имеет жесткое ядро. Если ядро дает больший вклад в динамику колебательной моды чем хвост, то она проявляет жесткий тип нелинейности, то есть ее частота растет с амплитудой. Для квазиодномерных ДБ, локализованных в одном плотноупакованном атомном ряду, вклад жесткого ядра потенциала возрастает за счет локального потенциала, созданного окружением плотноупакованного ряда, затрудняющего его «тепловое расширение». Для ДБ круговой и сферической симметрии «тепловое

расширение» ядра бризера сдерживается упругим отпором его окружения.

ДБ в трехмерных монокристаллах Морзе имеют степень пространственной локализации выше, чем в двумерных. Для ДБ локализованных в плотноупакованном ряду это связано с тем, что в трехмерном случае локальный потенциал, созданный окружением атомного ряда, оказывается более глубоким, чем в двумерном, и он более эффективно сдерживает «тепловое расширение» ряда. Для высокосимметричных ДБ это связано с тем, что в двумерном кристалле упругие напряжения, созданные ядром ДБ, спадают с удалением от ядра как  $R^{-2}$  в двумерном случае и более быстро, как  $R^{-3}$ , в трехмерном.

Показано, что  $\alpha$ -уран, имеющий уникальную низкосимметричную кристаллическую решетку, поддерживает существование ДБ, локализованных в прямолинейном атомном ряду, ориентированном вдоль оси  $x$ . Частота ДБ растет с амплитудой, причем, нижняя часть диапазона частот ДБ лежит в спектре фоновых колебаний с компонентами перемещений в плоскости  $(y,z)$ , но выше спектра фоновых колебаний с компонентой перемещения вдоль оси  $x$ . Существование ДБ с частотами внутри фононного спектра объясняется слабым взаимодействием колебательных мод, поляризованных вдоль оси  $x$ , и мод с компонентами перемещений в плоскости  $(y,z)$ .

**Работа выполнена при содействии Российского Научного фонда, грант № 14-13-00982**

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Drazin, P. G. Solitons: An Introduction / P. G. Drazin, R. S. Johnson // Cambridge University Press. – 1989.
2. Kivshar, Y. S. Optical Solitons: From Fibers to Photonic Crystals / Y. S. Kivshar, G. P. Agrawal // Academic Press, San Diego. – 2003.
3. Toda, M. Wave Propagation in Anharmonic Lattices / M. Toda. // J. Phys. Soc. Jpn. – 1967. – Vol. 23 – P. 501-506.
4. Ablowitz, M. J. Nonlinear differential-difference equations and Fourier analysis / M. J. Ablowitz, J. F. Ladik // J. Math. Phys. – 1976. – V. 17. – P. 1011 – 8.
5. Dolgov, A. S. The localization of vibrations in a nonlinear crystalline structure / A. S. Dolgov // Sov. Phys. Solid State. – 1986. – Vol. 28. – P. 907 – 909.
6. MacKay, R. S. Proof of Existence of Breathers for Time Reversible or Hamiltonian Networks of Weakly Coupled Oscillators / R. S. MacKay, S. Aubry // Nonlinearity. – 1994. – V. 7. – P. 1623-1643.
7. Kiselev, S. A. Generation of intrinsic vibrational gap modes in three-dimensional ionic crystals / S. A. Kiselev, A. J. Sievers // Phys. Rev. B. – 1997. – V. 55. – P. 5755.
8. Manley, M. E. Intrinsic localized modes observed in the high-temperature vibrational spectrum of NaI / M. E. Manley, A. J. Sievers, J. W. Lynn, S. A. Kiselev, N. I. Agladze, Y. Chen, A. Llobet, A. Alatas. // Phys. Rev. B. – 2009. – V. 79. – P. 134304.
9. Kiselev, S. A. Anharmonic gap modes in a perfect one-dimensional diatomic lattice for standard two-body nearest-neighbor

potentials / S. A. Kiselev, S. R. Bickham, A. J. Sievers. // *Phys. Rev. B.* – 1993. – Vol. 48. – P. 13508.

10. Дмитриев С. В., Дискретные бризеры в кристаллах / С. В. Дмитриев, Е. А. Корзникова, Ю. А. Баимова, М. G. Velarde // *УФН.* – 2016. – Т. 186. – С. 471–488.

11. Борн, М. Динамическая теория кристаллических решеток / М. Борн, Х. Кунь. – М.: Иностранная литература. – 1958. – 488 с.

12. MacDonald, D.K.C. Vibrational anharmonicity and lattice thermal properties. / D.K.C. MacDonald, S.K. Roy. // *Phys. Rev.* – 1955. – V. 97. – P. 673-675.

13. Lord Rayleigh. On waves propagated along the plane surface of an elastic solid / Lord Rayleigh // *Proc. London Math. Soc* – 1885. – V.17. – № 1: – P.4 – 11 (1885).

14. Sievers, A.J. Intrinsic localized modes in anharmonic crystals / A.J. Sievers, S. Takeno // *Phys. Rev. Lett.* – 1988. – V. 61. – P. 970-973.

15. Flach, S. Discrete Breathers / S. Flach, C.R. Willis // *Phys. Rep.* – 1998. – V. 295. – P. 181-264.

16. Flach, S. Discrete breathers: advances in theory and applications / S. Flach, A. Gorbach // *Phys. Rep.* – 2007. – V. 467. – P. 1-116.

17. Alfimov, G. L. On classification of intrinsic localized modes for the discrete nonlinear Schrodinger equation / G. L. Alfimov, V. A. Brazhnyi, and V. V. Konotop, // *Physica D.* – 2004. – V. 194. – P. 127.

18. 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.

19. Fleischer, J. W. Observation of two-dimensional discrete solitons in optically induced nonlinear photonic lattices / J. W. Fleischer, M. Segev, N. K. Efremidis, D. N. Christodoulides // *Nature*. – 2003. – V. 422. – P. 147-150.

20. Christodoulides, D. N. Discrete temporal solitons along a chain of nonlinear coupled microcavities embedded in photonic crystals / D. N. Christodoulides, and N. K. Efremidis // *Optics Letters*. – 2002. – V. 27. – P. 568.

21. Binder, P. Observation of breathers in Josephson ladders / P. Binder, D. Abraimov, A. V. Ustinov, S. Flach, Y. Zolotaryuk // *Phys. Rev. Lett.* – 2000. – V. 84. – P. 745-748.

22. Sato, M. Switching dynamics and linear response spectra of a driven onedimensional nonlinear lattice containing an intrinsic localized mode / M. Sato, S. Imai, N. Fujita, W. Shi, Y. Takao, Y. Sada, B. E. Hubbard, B. Ilic and A. J. Sievers // *Phys. Rev. E*. – 2013. – V. 87. – P. 012920.

23. Sato, M. Supertransmission channel for an intrinsic localized mode in a one-dimensional nonlinear physical lattice / M. Sato, T. Nakaguchi, T. Ishikawa, S. Shige, Y. Soga, Y. Doi and A. J. Sievers // *Chaos*. – 2015. – V. 25. – P. 103122.

24. Voulgarakis, N. K. Computational investigation of intrinsic localization in crystalline Si / N. K. Voulgarakis, G. Hadjisavvas, P. C. Kelires, G. P. Tsironis // *Phys. Rev. B*. – 2004. – V. 69. – P. 113201.

25. Yamayose, Y. Excitation of intrinsic localized modes in a graphene sheet / Y. Yamayose, Y. Kinoshita, Y. Doi, A. Nakatani, T. Kitamura // *EPL*. – 2007. – V. 80. – P. 40008-1-40008-6.

26. Khadeeva, L.Z. Discrete breathers in deformed graphene / L.Z. Khadeeva, S.V. Dmitriev, Yu.S. Kivshar // JETP Lett. – 2011. – V. 94. – P. 539-543.
27. Shimada, T. Stone – Wales transformations triggered by intrinsic localized modes in carbon nanotubes / T. Shimada, D. Shirasaki and T. Kitamura // Physical Review B. – 2010. – V. 81. – P. 035401.
28. 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 and T. Kitamura // Physica D. – 2010. – V. 239. – P. 407.
29. Kinoshita, Y. Selective excitations of intrinsic localized modes of atomic scales in carbon nanotubes / Y. Kinoshita, Y. Yamayose, Y. Doi, A. Nakatani, T. Kitamura // Phys. Rev. B. – 2008. – V. 77. – P. 024307-1-024307-6.
30. 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.
31. 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.
32. 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.

33. Dmitriev, S. V. Gap discrete breathers in two-component three-dimensional and two-dimensional crystals with Morse interatomic potentials / S. V. Dmitriev, L. Z. Khadeeva, A. I. Pshenichnyuk and N. N. Medvedev // *Physics of the Solid State*. – 2010. – V.52. – P. 1398.

34. Zakharov, P. V. Simulation of the interaction between discrete breathers of various types in a Pt3Al crystal nanofiber / P. V. Zakharov, M. D. Starostenkov, S. V. Dmitriev, N. N. Medvedev and A. M. Eremin // *Journal of Experimental and Theoretical Physics*. – 2015. – V. 121. – P. 217.

35. Korznikova, E. A. Discrete Breather on the Edge of the Graphene Sheet with the Armchair Orientation / E. A. Korznikova, A. V. Savin, Yu. A. Baimova, S. V. Dmitriev, and R. R. Mulyukov // *JETP Letters*. – 2012. – V. 96. – P. 222-226.

36. Korznikova, H. A. Effect of strain on gap discrete breathers at the edge of armchair graphene nanoribbon / H.A. Korznikova, J.A. Baimova, S.V. Dmitriev // *Europhys. Lett.* – 2013. – V. 102. – P. 60004-1-60004-5.

37. Liu, B. Discrete breathers in hydrogenated graphene / B. Liu, J. A. Baimova, S. V. Dmitriev, X. Wang, H. Zhu, and K. Zhou // *J. Phys. D: Appl. Phys.* – 2013. – V. 46. – P. 305302.

38. Haas, M. Prediction of high-frequency intrinsic localized modes in Ni and Nb / M. Haas, V. Hizhnyakov, A. Shelkan, M. Klopov, A. J. Sievers // *Phys. Rev. B*. – 2011. – V.84. – P. 144303.

39. Murzaev, R. T. Moving discrete breathers in bcc metals V, Fe and W / R. T. Murzaev, A. A. Kistanov, V. I. Dubinko, D. A. Terentyev and S. V. Dmitriev // *Computational Materials Science*. – 2015. – V.98. – P.88.

40. Campbell, D. K. Localizing energy through nonlinearity and discreteness / D. K. Campbell, S. Flach, and Y. S. Kivshar // *Physics Today*. – 2004. – V.57. – P.43.

41. 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.

42. Manley, M. E. Intrinsic nature of thermally activated dynamical modes in  $\alpha$ -U: Nonequilibrium mode creation by X-ray and neutron scattering / M. E. Manley, A. Alatas, F. Trouw, B. M. Leu, J. W. Lynn, Y. Chen and W. L. Hulth // *Physical Review B*. – 2008. – V.77. – P. 214305.

43. Baimova, J. A. Discrete Breather Clusters in Strained Graphene / J. A. Baimova, S. V. Dmitriev, K. Zhou // *EPL*. – 2012. – V. 100. – P. 36005-36011.

44. Baimova, J. A. Energy exchange between the discrete breathers in graphane / J. A. Baimova and S. V. Dmitriev // *Russian Physics Journal*. – 2015. – V. 58. – P. 785.

45. Khadeeva, L. Z. Lifetime of gap discrete breathers in diatomic crystals at thermal equilibrium / L.Z. Khadeeva and S.V. Dmitriev // *Phys. Rev. B*. – 2011. – V.84. – P. 144304.

46. Velarde, M.G. From polaron to soliton: The addition of nonlinear elasticity to quantum mechanics and its possible effect upon electric transport / M.G. Velarde // *J. Comput. Appl. Math.* – 2010. – V.233. – № 6. – P.1432-1445.

47. Brizhik, L. Electron pairing and Coulomb repulsion in one-dimensional anharmonic lattices / L. Brizhik, A. P. Chetverikov,

W. Ebeling, G. Röpke, and M. G. Velarde // *Phys. Rev. B.* – 2012. – V. 85. – P. 245105.

48. Chetverikov, A. P. Properties of nano-scale soliton-like excitations in two-dimensional lattice layers / A.P. Chetverikov, W. Ebeling, M.G. Velarde // *Physica D.* – 2011. – V. 240. – № 24. – P.1954-1959.

49. Cisneros-Akea, L.A. Mobile localized solutions for an electron in lattices with dispersive and non-dispersive phonons / L.A. Cisneros-Akea, L. Cruzeiro, M.G. Velarde // *Physica D.* – 2015. – V.306. – P.82.

50. Manley, M.E. Impact of intrinsic localized modes of atomic motion on materials properties / M.E. Manley // *Acta Mater.* – 2010. – V. 58. – P. 2926.

51. Glensk, A. Breakdown of the Arrhenius law in describing vacancy formation energies: The importance of local anharmonicity revealed by ab initio thermodynamics / A. Glensk, B. Grabowski, T. Hickel, and J. Neugebauer // *Phys. Rev. X.* – 2014. – V.4. – P.011018.

52. 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, J.M. Trillo // *J. Phys. Chem. B.* – 2006. – T.110. – №47. – P. 24112-24120.

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

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

55. Stolyarov, V.V. Deformability and nanostructuring of TiNi shape-memory alloys during electroplastic rolling / V.V. Stolyarov // *Mater. Sci. Eng. A.* – 2009. – V. 503. – P. 18.

56. Potapova, A.A. Deformability and structural features of shape memory TiNi alloys processed by rolling with current / A.A. Potapova, V.V. Stolyarov // *Mater. Sci. Eng. A.* – 2013. – V. 579. – P. 114.

57. 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. – V. 646. – P. 1–9.

58. Захаров, П.В. Возбуждение щелевых дискретных бризеров в кристалле состава АЗВ потоком частиц / П.В. Захаров, М.Д. Старостенков, А.М. Ерёмин, Е.А. Корзникова, С.В. Дмитриев // *Физика твердого тела.* – 2017. – Т. 59. – № 2. – С. 217-222.

59. Cuevas, J. Influence of moving breathers on vacancies migration / J. Cuevas, C. Katerji, J.F.R. Archilla, J.C. Eilbeck, F.M. Russell // *Phys. Lett. A.* – 2003. – V. 315. – P. 364.

60. Cuevas, J. Interaction of moving discrete breathers with vacancies / J. Cuevas, J.F.R. Archilla, B. Sánchez-Rey, and F.R. Romero // *Physica D.* – 2006. – V. 216. – P. 115.

61. Cuevas, J. Interaction of moving discrete breathers with simulated interstitial defects / J. Cuevas, B. Sánchez-Rey, J.C. Eilbeck, and F.M. Russell // *Discrete Contin. Dyn. S. Series S.* – 2011. – V. 4. – P. 1057.

62. Kistanov, A.A. Interaction of propagating discrete breathers with a vacancy in a two-dimensional crystal / A.A. Kistanov // *Tech. Phys. Lett.* – 2014. – V.40. – P. 657.
63. Sievers, A. J. Thermally populated intrinsic localized modes in pure alkali halide crystals / A. J. Sievers, M. Sato, J. B. Page, and T. Rössler // *Phys. Rev. B.* – 2013. – V. 88 – P. 104305.
64. Hizhnyakov, V. Discrete breathers above phonon spectrum / V. Hizhnyakov, M. Haas, M. Klopov, A. Shelkan, // *Letters on Materials.* – 2016. – V. 6. – P. 61-72.
65. 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. – V. 221. – P. 229-245.
66. Los, J.H. Intrinsic long-range bond-order potential for carbon: Performance in Monte Carlo simulations of graphitization / J.H. Los, A. Fasolino, // *Phys. Rev. B.* – 2003. – V. 68. – P. 024107.
67. Dmitriev, S.V. Discrete breathers in crystals: Energy localization and transport // *J. Micromechanics and Molecular Physics.* – 2016. – V. 1. – P. 1630001.
68. Stuart, S. J. A reactive potential for hydrocarbons with intermolecular interactions / S. J. Stuart, A. B. Tutein, and J. A. Harrison // *J. Chem. Phys.* – 2000. – V. 112 – P. 6472.
69. Chechin, G.M. Properties of discrete breathers in graphene from ab initio simulations / G. M. Chechin, S. V. Dmitriev, I. P. Lobzenko, D. S. Ryabov // *Phys. Rev. B.* – 2014. – V. 90 – P. 045432-6.

70. Liu, B. Discrete breathers in hydrogenated graphene / B. Liu, J. A. Baimova, S. V. Dmitriev, X. Wang, H. Zhu, and K. Zhou // *J. Phys. D: Appl. Phys.* – 2013. – V. 46. – P. 305302.

71. 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 // *ФТТ.* – 2016. – Т. 58. – № 3. – С. 616-622.

72. Morse, P.M. Diatomic molecules according to the wave mechanics. II. Vibrational levels / P.M. Morse // *Phys. Rev.* – 1929. – V. 34. – P. 57.

73. E. Hairer, S.P. Norsett and G. Wanner. Solving Ordinary Differential Equations I / E. Hairer, S.P. Norsett and G. Wanner. – Springer-Verlag Berlin Heidelberg. – 1993. – P. 528.

74. Khadeeva, L.Z. Discrete breathers in crystals with NaCl structure / L. Z. Khadeeva, S. V. Dmitriev // *Phys. Rev. B.* – 2010. – V.81. – P. 214306.

75. Kistanov, A.A. A molecular dynamics study of [111]-polarized gap discrete breathers in a crystal with NaCl-type structure / A.A. Kistanov, Y.A. Baimova, S.V. Dmitriev // *Technical Physics Letters.* – 2012. – T.38. – № 7. – P. 676-679.

76. Chechin, G. M. Quasibreathers as a generalization of the concept of discrete breathers / G. M. Chechin, G. S. Dzhelauhova, E. A. Mehonoshina // *Phys. Rev. E.* – 2006. – V. 74. – P. 36608-15.

77. Ivanchenko, M.V. Discrete breathers in transient processes and thermal equilibrium / M.V. Ivanchenko, O.I. Kanakov, V.D. Shalfeev, S. Flach. // *Physica D.* – 2004. – V. 198. – P. 120.

78. Eleftheriou, M. Discrete breathers in thermal equilibrium: distributions and energy gaps / M. Eleftheriou, S. Flach // *Physica D.* – 2005. – V.202. – P.142.

79. Захаров, П.В. Влияние низких температур на характеристики дискретного бризера в кристалле Pt3 Al / П.В. Захаров, М.Д. Старостенко, Н.Н. Медведев, А.М. Ерёмин, А.В. Маркидонов // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения.* – 2014. – Т. 11. – № 4. – С. 533 – 536

80. Dauxois, T. The anti-FPU problem / T. Dauxois, R. Khomeriki, F. Piazza, S. Ruffo // *Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science.* – 2005. – Т.15. – № 1. – P.015110.

81. Burlakov, V.M. Localized vibrations of homogeneous anharmonic chains / V.M. Burlakov, S.A. Kiselev, V.I. Rupasov // *Phys. Lett. A.* – 1990. – V.147. – P.130.

82. Burlakov, V.M. Localized vibrations of homogeneous anharmonic chains / V.M. Burlakov, S.A. Kiselev, V.I. Rupasov // *JETP Lett.* – 1990. – V. 51. – P. 544.

83. Kavitha, L. Nonlinear nano-scale localized breather modes in a discrete weak ferromagnetic spin lattice / L. Kavitha, E. Parasuraman, D. Gopi, A. Prabhu, and R. A. Vicencio // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials.* – 2016. – V. 401. – P. 394.

84. Cretegny, T. Localization and equipartition of energy in the  $\beta$ -FPU chain: Chaotic breathers / T. Cretegny, T. Dauxois, S. Ruffo, and A. Torcini // *Physica D.* – 1998. – V. 121. – P. 109.

85. Kosevich, Yu. A. Temporal Fourier spectra of stationary and slowly moving breathers in Fermi – Pasta – Ulam anharmonic lattice / Yu. A. Kosevich, and G. Corso // *Physica D.* – 2002. – V. 170. – P. 1.
86. Kosevich, Yu. A. Modulational instability and energy localization in anharmonic lattices at finite energy density / Yu. A. Kosevich and S. Lepri // *Phys. Rev. B.* – 2000. – V. 61. – P.299.
87. Ikeda, K. Chaotic breathers of two types in a two-dimensional Morse lattice with an on-site harmonic potential / K. Ikeda, Y. Doi, B. F. Feng, and T. Kawahara // *Physica D.* – 2007. – V. 225 – P. 184.
88. Kivshar, Yu.S. Modulational instabilities in discrete lattices / Yu.S. Kivshar, M. Peyrard // *Phys. Rev. A.* – 1992. – V. 46. – P. 3198.
89. Doi, Y. Modulational Instability of Zone Boundary Mode and Band Edge Modes in Two-Dimensional Nonlinear Lattices / Y. Doi, A. Nakatani // *J. Phys. Soc. Jpn.* – 2012. – V. 81. – P. 124402.
90. Geniet F., Leon J. Energy Transmission in the Forbidden Band Gap of a Nonlinear Chain / F. Geniet, J. Leon // *Phys. Rev. Lett.* – 2002. – V.89. – P.134102.
91. 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, and E. C. Aifantis // *Phys. Rev. E.* – 2004. – V.70. – P.066627.
92. Maniadis, P. Energy dissipation threshold and self-induced transparency in systems with discrete breathers / P. Maniadis, G. Kopidakis, S. Aubry // *Physica D.* – 2006. – V. 216. – P.121.

93. 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, and E. C. Aifantis // *Phys. Rev. E.* – 2004. – V.70. – P. 066627.

94. Медведев, М. Д. Локализованные колебательные моды в двумерной модели упорядоченного сплава Pt3Al / Н. Н. Медведев, М. Д. Старостенков, П. В. Захаров, О. В. Пожидаева // *Письма в ЖТФ.* – 2011. – Т. 37. – С. 7.

95. Кистанов, А.А. Дискретный бризер в двумерном моноатомном кристалле с частотой выше фононного спектра / А.А. Кистанов // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения.* – 2014. – Т. 11. – № 1. – С. 9-12.

96. Семенов А.С., Корзникова Е.А., Дмитриев С.В. Дискретные бризеры с жестким и мягким типом нелинейности в одномерной цепочке с дальнедействующим морзевским взаимодействием / А.С. Семенов, Е.А. Корзникова, С.В. Дмитриев // *Письма о материалах.* – 2015. – Т. 5. – № 1. – С. 11-14.

97. Chechin, G. M. Quasibreathers as a generalization of the concept of discrete breathers / G. M. Chechin, G. S. Dzhelauhova, E. A. Mehonoshina // *Phys. Rev. E.* – 2006. – V. 74. – P. 036608.

98. Кистанов, А.А. Движущиеся дискретные бризеры в моноатомном двумерном кристалле / А.А. Кистанов, Р.Т. Мурзаев, С.В. Дмитриев, В.И. Дубинко, В.В. Хижняков // *Письма в ЖЭТФ.* – 2014. – V. 99. – P. 403.

99. Кистанов, А.А. Зависимость степени локализация дискретных бризеров в двумерном кристалле от степени приложенной деформации / А.А. Кистанов, К. Жоу, Е.А. Корзникова, С.Ю. Фомин, С.В. Дмитриев // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. – 2015. – Т. 12. – № 1. – С. 103-107.

100. Корзникова, Е.А. Высокосимметричный дискретный бризер в двумерном кристалле Морзе / Е.А. Корзникова, С.Ю. Фомин, Э.Г. Соболева, С.В. Дмитриев // *Письма в Журнал экспериментальной и теоретической физики*. – 2016. – Т. 103. – № 3-4. – С. 303-308.

101. Тимошенко С. П., Гудьер Дж. Теория упругости / С. П. Тимошенко, Дж. Гудьер. – М.: Наука. – 1975. – 576 с.

102. Дмитриев, С.В. Щелевые дискретные бризеры в 2D и 3D кристаллах / С.В. Дмитриев // *Письма о материалах*. – 2011. – Т. 1. – № 2. – С. 78-83.

103. Swanson, B.I. Observation of Intrinsically Localized Modes in a Discrete Low-Dimensional Material / B.I. Swanson, J.A. Brozik, S.P. Love, G.F. Strouse, A.P. Shreve, A.R. Bishop, W.-Z. Wang, M.I. Salkola, // *Physical Review Letters*. – 1999. – V. 82. – P. 3288.

104. Voulgarakis, N.K. Multiquanta breather model for PtCl / N.K. Voulgarakis, G. Kalosakas, A.R. Bishop, G.P. Tsironis // *Physical Review B*. – 200. – V. 64. – P.020301.

105. Kalosakas, G. Nonlinear disorder model for Raman profiles in naturally abundant ptcl / G. Kalosakas, A. R. Bishop, A. P. Shreve // *Physical Review B*. – V.66. – P. 094303.

106. Manley, M.E. Formation of a New Dynamical Mode in  $\alpha$ -Uranium Observed by Inelastic X-Ray and Neutron Scattering /

M.E. Manley, M. Yethiraj, H. Sinn, H.M. Volz, A. Alatas, J.C. Lashley, W.L. Hults, G.H. Lander, J.L. Smith // *Physical Review Letters*. – 2006. – V. 96. – P. 125501.

107. Kempa, M. The temperature dependence of the phononic band gap of NaI / M. Kempa, P. Ondrejovic, P. Bourges, J. Ollivier, S. Rols, J. Kulda, S. Margueron, J. Hlinka // *Journal of Physics: Condensed Matter*. – 2013. – V. 25. – P.055403.

108. Kistanov, A.A. Properties of discrete breathers in 2d and 3d morse crystals / A.A. Kistanov, E.A. Korznikova, S.Yu. Fomin, K. Zhou, S.V. Dmitriev // *Letters on materials*. – 2014. – V.4. – № 4. – P. 315-318.

109. Фомин, С.Ю. Сравнение свойств различных видов дискретных бризеров в двумерном кристалле Морзе / С.Ю. Фомин, Е.А. Корзникова, С.В. Дмитриев // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. – 2016. – Т.13. – №1. – С.54-59.

110. Fomin, S.Yu. Discrete breathers of different symmetry in monoatomic 2D morse crystal / S.Yu. Fomin, E.A. Korznikova // *Letters on materials*. – 2016. – Т.6. – V1. – №21. – P. 57-60.

111. Korznikova, E.A. Effect of the interatomic potential stiffness on the properties of gap discrete breathers in 2D biatomic morse crystal / E.A. Korznikova, S.Yu. Fomin, S.V. Ustiuzhanina, S.V. Dmitriev // *Letters on materials*. – 2015. – V.5 – №4. – P.364-367.

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

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

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

115. Корзникова, Е.А. Дискретный бризер на краю листа графена ориентации "кресло" / Е.А. Корзникова, А.В. Савин, Ю.А. Баймова, С.В. Дмитриев, Р.Р. Мулюков // Письма в Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2012. – Т. 96. – № 3-4. – С. 238-242.

116. Дубинко, В.И. Влияние дискретных бризеров на пластичность и прочность кристаллов / В.И. Дубинко, А.В. Дубинко, С.В. Дмитриев // Письма о материалах. – 2013. – Т. 3. – № 3. – Р. 239-247.

117. Velarde, M.G. Soliton-mediated electron transfer and electric transport arising from coupling electron quantum mechanics to nonlinear elasticity in anharmonic crystal lattices / M.G. Velarde, W. Ebeling, A.P. Chetverikov // The European Physical Journal B. – 2012. – V.85. – P. 47-61.

118. Chetverikov, A.P. Nonlinear soliton-like excitations in two-dimensional lattices and charge transport / A.P. Chetverikov, W. Ebeling, M.G. Velarde // The European Physical Journal B. – 2013. – V. 222. – P. 2531-2546.

119. Sales, M.O. Electron-Soliton Dynamics in Chains With Cubic Nonlinearity / M.O. Sales, F.A.B.F. de Moura // Journal of Physics: Condensed Matter. – 2014. – V.26. – P. 415401.

120. Столяров, В.В. Структурные превращения при растяжении с током в титановых сплавах / В.В. Столяров // Письма о материалах. – 2013. – Т. 3. – №2. – С. 137-140.

121. Столяров, В.В. Влияние электроимпульсной обработки на структуру и механические свойства нанокристаллического сплава TiNi с памятью формы / В.В. Столяров // Письма о материалах. – 2011. – Т. 1. – № 2. – С. 75 -77.

122. <http://lammmps.sandia.gov/>.

123. Smirnova, D.E. New interatomic potential for computation of mechanical and thermodynamic properties of uranium in a wide range of pressures and temperatures / D.E. Smirnova, S.V. Starikov, V.V. Stegailov // The Physics of Metals and Metallography. – 2012. – V. 113. – № 2. – P. 107-116.

124. Li, Y. Classical interatomic potential for orthorhombic uranium / Y. Li, Tzu-Ray Shan, Tao Liang, Susan B Sinnott, Simon R Phillpot. // Journal of Physics: Condensed Matter. – 2012. – V. 24. – P. 235403.

125. 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.

126. Murzaev, R.T. Discrete breathers in alpha-uranium / R.T. Murzaev, R.I. Babicheva, K. Zhou, E.A. Korznikova, S.Yu. Fomin, V.I. Dubinko, S.V. Dmitriev // Eur. Phys. J. B. – 2016. – V.89. – P.168.

Научное издание

**Корзникова** Елена Александровна  
**Фомин** Сергей Юрьевич  
**Дмитриев** Сергей Владимирович

## **Локализованные колебания в двумерных решетках**

Монография

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

Подписано в печать 29.10.2018.  
Формат 60×84/16.  
Бумага офсетная. Печать цифровая.  
Объем 8,25 печ.л. Тираж 500 экз.

Монография публикуется в авторской редакции