

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
НАУКИ ИНСТИТУТ ПРОБЛЕМ СВЕРХПЛАСТИЧНОСТИ МЕТАЛЛОВ
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК

На правах рукописи



Наумов Евгений Константинович

**ДЕЛОКАЛИЗОВАННЫЕ НЕЛИНЕЙНЫЕ
КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ МОДЫ И ДИСКРЕТНЫЕ
БРИЗЕРЫ В КВАДРАТНЫХ РЕШЕТКАХ**

Специальность 1.3.8. Физика конденсированного состояния

Диссертация на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:
доктор физико-математических наук, профессор
Дмитриев Сергей Владимирович

Уфа - 2025

Оглавление

	Стр.
Введение	4
Глава 1. Обзор работ по нелинейной динамике решетки применительно к физике кристаллов	10
1.1 Важные достижения в нелинейной динамике решетки	10
1.1.1 Дискретные бризеры	10
1.1.2 Делокализованные нелинейные колебательные моды (ДНКМ)	11
1.2 Эффект дальнего действия	13
1.3 Эффект супратрансмиссии	13
1.4 Однокомпонентные ДНКМ квадратной решетки	16
1.5 Описание исследуемой модели	18
1.6 Выводы по главе	23
Глава 2. Делокализованные нелинейные колебательные моды в квадратной решетке с дальнедействующими взаимодействиями	25
2.1 Дисперсионные соотношения для квадратной решетки с дальнедействием	25
2.2 Аналитические результаты для однокомпонентных ДНКМ	31
2.2.1 ДНКМ 1	33
2.2.2 ДНКМ 6	35
2.2.3 ДНКМ 9	36
2.2.4 ДНКМ 16	37
2.3 Сравнение аналитических и численных результатов	39
2.4 Выводы по главе	39
Глава 3. Супратрансмиссия в квадратной решетке β-ФПУЦ с дальнедействием	42
3.1 Описание модели	42
3.2 Дисперсионное соотношение фононных волн в квадратной решетке без учета дальнего действия	45

3.3	Передача энергии квадратной решетке от пары колеблющихся частиц	47
3.4	Передача энергии квадратной решетке от ряда колеблющихся частиц	50
3.5	Выводы по главе	57
Глава 4. Дискретные бризеры в квадратной решетке с дальнедействующими взаимодействиями		61
4.1	Новые дискретные бризеры, основанные на ДНКМ 6 и 9, полученные с помощью функций локализации	61
4.1.1	Одномерные дискретные бризеры	62
4.1.2	Дискретные бризеры	66
4.2	Движущиеся одномерные дискретные бризеры	68
4.3	Выводы по главе	72
Заключение		74
Благодарности		76
Список сокращений и условных обозначений		77
Список литературы		78
Список рисунков		95
Список таблиц		100
Публикации автора по теме диссертации		101

Введение

Актуальность работы. Интерес к нелинейным колебаниям решетки возрос в последние десятилетия после открытия возможности существования локализованных в пространстве колебаний большой амплитуды, называемых дискретными бризерами (ДБ) [1–3]. Кроме того, Чечиным и Сахненко была развита теория бушей нелинейных нормальных мод [4], которые позже в физике кристаллов были названы делокализованными нелинейными колебательными модами (ДНКМ). Установление тесной связи между ДБ и ДНКМ открыло возможность нахождения ДБ в решетках высокой размерности. Способ построения ДБ в квадратной скалярной решетке, основанный на симметрично-определенных инвариантных многообразиях, рассматривался авторами работы [5]. Такой подход к изучению ДБ может быть распространен на двумерные и трехмерные решетки [6; 7].

ДБ интересны в физике конденсированного состояния поскольку они осуществляют транспорт локализованной энергии по кристаллической решетке [8]. ДБ могут облегчать преодоление потенциальных барьеров образования или миграции дефектов кристаллической решетки. Другим важным для физики кристаллов эффектом нелинейности является передача энергии нелинейной решетке от периодического внешнего воздействия на частоте за пределами спектра малоамплитудных колебаний (явление супратрансмиссии). Важно, что названные выше эффекты нелинейности являются общими и проявляются в нелинейных решетках любой размерности, хотя имеются определённые аспекты, связанные с размерностью решетки. Это говорит о возможности изучения многих эффектов нелинейности на примере относительно простых решеток, где физическая суть явления проявляется наиболее ярко.

Большую роль в физике конденсированного состояния и в физике нелинейных явлений сыграли двумерные решетки. Квадратная решетка использовалась для изучения ферромагнетизма [9], при изучении нелинейных возбуждений в кристалле слюды [10], нелинейной локализации энергии в фотонных кристаллах [11]. Бурлаковым с соавторами удалось возбудить устойчивый покоящийся ДБ в квадратной нелинейной решетке [12], но попытки получения движущихся ДБ не увенчались успехом. В работе [13] доказано существование ДБ в тре-

угольной и квадратной решетке с потенциалом Морзе. Методология построения двумерных ДБ в квадратной решетке рассматривалась в работе [14], где было выявлено три типа ДБ (стабильный, нестабильный и промежуточный типы). В работе [15] изучены ДБ, возникшие в результате потери устойчивости ДНКМ в квадратной решетке, а в работе [7] ДБ на поверхности упорядоченного сплава.

Несмотря на имеющиеся достижения в изучении нелинейной динамики двумерных решеток остается ряд важных неизученных проблем, одной из которых является учет дальнего действия, что особенно важно для физики твердого тела. Химическая связь в металлах, а также кулоновские взаимодействия в ионных кристаллах являются дальнедействующими, что открывает вопрос о возможных новых эффектах в нелинейной динамике решеток, связанных с дальним действием.

С учетом вышеописанных исследований можно заключить, что изучение нелинейной динамики квадратной решетки с учетом дальнего действия является важной и актуальной задачей физики конденсированного состояния. Данная диссертационная работа направлена на изучение ДНКМ и ДБ в квадратной решетке, где взаимодействие между частицами описывается потенциалом β -ФПУЦ (Ферми-Паста-Улама-Цингоу), и учитываются взаимодействия вплоть до четвертого соседа.

Степень разработанности темы исследования. Несмотря на то, что было проведено множество исследований, направленных на изучения нелинейной динамики решеток, существует немало нерешённых задач в этой области, например, практически не изучен эффект дальнедействующих связей между частицами на динамику ДНКМ и возможность существования различных типов ДБ. Именно в физике кристаллов важен учет дальнего действия. В металлах это связано с делокализацией электронов проводимости, а в ионных кристаллах с наличием медленно затухающего с расстоянием ($1/r$) кулоновского взаимодействия. Это говорит о недостаточной степени разработанности темы исследования и необходимости дальнейшей работы в данном направлении. Эффект дальнего действия в данной работе изучается на примере квадратной решетки с потенциалом β -ФПУЦ.

Цель работы: Разработка численных методов возбуждения стационарных и движущихся дискретных бризеров в квадратной решетке с дальнедей-

ствующим потенциалом β -ФПУЦ, получаемых путем наложения функций локализации на ДНКМ и по механизму супратрансмиссии.

Для достижения поставленной цели сформулированы следующие **задачи**:

1. Вывести дисперсионные соотношения для фононных волн в квадратной решетке с дальнедействующим потенциалом.
2. Найти новые типы стационарных и движущихся дискретных бризеров в квадратной решетке с дальнедействующим потенциалом при помощи наложения функции локализации на ДНКМ.
3. Описать эффект супратрансмиссии в квадратной решетке от пары соседних атомов, совершающих вынужденные колебания по гармоническому закону.
4. Описать эффект супратрансмиссии в квадратной решетке от одного плотноупакованного ряда квадратной решетки, совершающего вынужденные гармонические колебания.

Научная новизна:

1. Впервые для квадратной решетки с дальнедействующими взаимодействиями аналитически получены дисперсионные соотношения для фононов, найдены амплитудно-частотные характеристики и волновые векторы всех возможных 16-и ДНКМ. Показано, что 5 из 16-и ДНКМ могут иметь частоту выше фононного спектра, а именно ДНКМ 1, 6, 7, 9 и 16, что важно для изучения ДБ в рассматриваемой решетке.
2. Впервые описаны новые стационарные ДБ на основе ДНКМ 6 и 9 квадратной решетки с дальнедействием, которые не могут существовать в решетке без учета дальнедействия. Получен движущийся ДБ в квадратной решетке, тем самым решена задача Бурлакова для квадратной решетки.
3. При рассмотрении эффекта супратрансмиссии от пары колеблющихся атомов в квадратной решетке впервые найдены критические частоты в зависимости от амплитуды вынужденных колебаний, при превышении которых энергия перестает поступать в квадратную решетку. При частотах внешнего воздействия на частотах близких к критическим, происходит генерация движущихся ДБ, испускаемых периодически, а при уменьшении частоты воздействия периодичность в испускании ДБ теряется.

4. При изучении супратрансмиссии от ряда колеблющихся атомов в квадратной решетке установлено, что ДБ могут испускаться при внешнем воздействии на частоте внутри фононного спектра близко к его верхней границе. Впервые показано, что данный вывод справедлив и для случая квадратной решетки с дальнедействующими взаимодействиями.

Теоретическая и практическая значимость работы: Продвижение в теории состоит в выводе и анализе дисперсионного соотношения и в получении аналитических выражений для амплитудно-частотных характеристик ДНКМ в рамках кубического приближения для квадратной решетки с учетом взаимодействий до четвертого соседа включительно. Кроме того, численно определены параметры периодических внешних воздействий на решетку, при которых возбуждаются движущиеся ДБ. Показано, что частота внешнего воздействия при этом может находиться в фононном спектре решетки, недалеко от его края. С практической точки зрения работа важна тем, что в металлах и ионных кристаллах важен учет дальнего действия, проведенный в данной работе. Установлено, что в решетке с дальнедействием возможны новые типы ДБ, которые не реализуются в решетке со взаимодействием только между первыми и вторыми соседями. Более полное представление о типах ДБ, поддерживаемых квадратной решеткой с дальнедействием, ставит задачу поиска новых ДБ в кристаллах с металлической и ионной связью, где учет дальнего действия может оказаться важным.

Положения, выносимые на защиту:

1. Пять из шестнадцати ДНКМ квадратной решетки β -ФПУЦ с дальнедействием могут иметь частоту выше фононного спектра, а без учета дальнего действия - только две ДНКМ.
2. Квадратная решетка с дальнедействием может поддерживать новые типы ДБ, которые не существуют в решетке без дальнедействующих взаимодействий.
3. Различные типы ДБ возможны в квадратной решетке с дальнедействием при условии, что жесткость связей убывает с расстоянием, как и жесткость химических связей в кристаллах.
4. В квадратной решетке движущиеся ДБ могут испускаться квази-периодически парой атомов, совершающих вынужденные колебания на частоте выше фононного спектра решетки.

5. В квадратной решетке с дальнодействием ДБ могут испускаться при вынужденном внешнем воздействии на частоте внутри фононного спектра близко к его верхней границе.

Достоверность результатов работы подтверждается корректной постановкой задач исследования, использованием строгих математических методов кристаллографии при построении ДНКМ и известных аналитических методов получения дисперсионных кривых для малоамплитудных фононных мод. Численные результаты получены с применением высокоточных устойчивых численных схем для интегрирования систем нелинейных уравнений движения взаимодействующих частиц. Полученные результаты физически непротиворечивы и, где возможно, сопоставлены с результатами других авторов.

Апробация работы: Результаты исследований были представлены на российских и международных конференциях, таких как: «Ультрамелкозернистые и наноструктурные материалы - 2022» (г. Уфа, Республика Башкортостан, Россия, 3-7 октября 2022), «Современные физика, математика, цифровые и нанотехнологии в науке и образовании (ФМЦН-23)», посвященная 80-летию со дня рождения д.ф.-м.н., профессора Р.С. Сингатуллина (г. Уфа, Республика Башкортостан, Россия, 18-20 апреля 2023 г.), XIV Международная школа-конференция студентов, аспирантов и молодых ученых «Фундаментальная математика и ее приложения в естествознании», посвящённой 75 - летнему юбилею профессоров Я.Т. Султанаева и М.Х. Харрасова (спутник Международной научной конференции «Уфимская осенняя математическая школа-2023») (г. Уфа, Республика Башкортостан, Россия, 8 - 11 октября 2023 г.), X межрегиональная школа-конференция молодых ученых-физиков (г. Уфа, Республика Башкортостан, Россия, 25 – 26 апреля 2024 г.), «Ультрамелкозернистые и наноструктурные материалы - 2024» (г. Уфа, Республика Башкортостан, Россия, 30 сентября-4 октября 2024).

Личный вклад автора работы:

В работе над диссертацией автор самостоятельно изучил и обобщил научную литературу по теме исследования. Вывел дисперсионные соотношения для квадратной решётки с дальнодействием. Получил аналитические выражения амплитудно-частотных характеристик ДНКМ в кубическом приближении, а также провел численное моделирование дискретных бризеров, полученных наложением функции локализации на ДНКМ. Провел численное моделирование

явления супратрансмиссии в квадратной решетке. Модифицировал программы компьютерного моделирования под свои задачи, принял непосредственное участие в интерпретации и анализе полученных результатов, формулировке выводов, подготовке научных статей и тезисов докладов к публикации. В работах, опубликованных в соавторстве, соискателю принадлежат основные аналитические результаты и результаты численного моделирования ДНКМ и дискретных бризеров в квадратной решетке β -ФПУЦ.

Публикации. По материалам диссертационной работы опубликовано 6 статей в журналах, из них 5 в изданиях, входящих в базы данных Web of Science и Scopus (три статьи в журналах квартиля Q1), а также тезисы 5 докладов на Международных и Всероссийских конференциях.

Финансирование работы. Работа поддержана грантами Российского научного фонда №№ 21-19-00813, 21-12-00229 и 24-11-00139.

Объем и структура диссертационной работы. Диссертация состоит из введения, четырёх глав и заключения. Полный объем диссертации составляет 101 страницу с 23 рисунками и 1 таблицей. Список литературы содержит 167 наименований.

Глава 1. Обзор работ по нелинейной динамике решетки применительно к физике кристаллов

1.1 Важные достижения в нелинейной динамике решетки

Интерес к нелинейным колебаниям решетки вызван, с одной стороны, наличием в природе и технике периодических в пространстве дискретных систем, а с другой стороны тем, что во многих областях применения они могут подвергаться высокоамплитудным воздействиям, когда начинает проявляться нелинейная природа связей между частицами. Оказалось, что учет нелинейности приводит к ряду новых, достаточно общих эффектов, которые могут проявляться в решетках любой размерности и со взаимодействиями между частицами различных типов. Некоторые из таких эффектов будут представлены ниже.

1.1.1 Дискретные бризеры

Важным эффектом нелинейности в дискретных периодических структурах является возможность существования пространственно локализованных колебаний большой амплитуды, которые получили название "дискретные бризеры" (ДБ) (или внутренние локализованные моды) [1—3; 8; 16; 17]. Колебания, локализованные на дефектах, могут быть реализованы и в случае линейных взаимодействий, однако ДБ существуют в бездефектных решетках, но только за счет нелинейности. Для существования ДБ необходимы два условия - дискретность и нелинейность среды. Дискретность обеспечивает ограниченность спектра малоамплитудных колебаний решетки, а нелинейность даёт возможность частоте колебаний ДБ выйти из этого спектра. Колебаясь на частоте вне спектра малоамплитудных колебаний, ДБ не затрачивает свою энергию на их возбуждение и, теоретически, в отсутствии возмущений, может существовать вечно [3; 17].

Исторической справедливости ради отметим, что первооткрывателем ДБ является советский физик Долгов [1], но его работа не была замечена широкой

научной общественностью, и двумя годами позже ДБ были независимо переоткрыты Сиверсом и Такено [2].

ДБ исследовались в различных нелинейных дискретных системах, но нас в наибольшей степени интересуют ДБ в кристаллах. Эта тема обсуждалась в известной работе Манли [18], где, основываясь на известных экспериментальных данных, говорилось о влиянии ДБ на теплоемкость, механические свойства и тепловое расширение α -урана.

На ДБ может быть локализована энергия порядка нескольких эВ [19], кроме того, перемещаясь по кристаллической решетке, ДБ способны транспортировать её [20–23]. Эта локализованная энергия может привести к модификации дефектов [24], помочь в преодолении порога миграции дефектов [25; 26] или понизить потенциальный барьер испарения атома с поверхности кристалла [7]. ДБ способны аккумулировать и переносить электрический заряд, что объясняет появление электрического тока в кристаллах, не имеющих свободных зарядов [27–30].

ДБ снижают теплопроводность кристаллов, особенно при высоких температурах, поскольку на них рассеиваются фононы [31; 32]. При превышении определенной температуры популяция ДБ возрастает настолько, что может наблюдаться переход от баллистической теплопроводности к диффузионной [31].

В ряде работ [33; 34] было показано, что хаотические ДБ, возникающие в результате модуляционной неустойчивости ДНКМ, изменяют тепловое расширение, теплоемкость и константы упругости нелинейных решеток.

1.1.2 Делокализованные нелинейные колебательные моды (ДНКМ)

В 1962 году Розенберг указал на возможность существования точных решений динамики решетки, диктуемых симметрией решетки [35]. Эта идея была развита в работах Чечина и Сахненко [4; 36; 37], в результате чего был создан теоретико-групповой подход к нахождению подобных точных решений, названных авторами бушами нелинейных нормальных мод (БННМ). Метод применим к решеткам любой размерности и сложности, а также к молекулам, и отталки-

ваются он от рассмотрения исключительно симметрии решетки или молекулы, а значит, все получаемые решения существуют для любых типов взаимодействия между частицами.

В более поздних работах, применительно к решеткам, БННМ именовались делокализованными нелинейными колебательными модами (ДНКМ) [8; 38–40]. Заметим, что делокализованные колебания нелинейных решеток изучены гораздо меньше, чем ДБ. ДНКМ могут быть многокомпонентными, то есть являться суперпозицией нескольких колебательных мод. Однокомпонентные ДНКМ периодичны в пространстве и во времени, характеризуются одной частотой колебаний, в то время как m -компонентные ДНКМ имеют m степеней свободы с m , вообще говоря, несоизмеримыми частотами.

Как отмечено выше, БННМ могут быть построены для молекул с учетом их точечной симметрии, а для нелинейных решеток - на основе их пространственной симметрии. Примерами могут служить одно- и двухкомпонентные ДНКМ в молекуле SF_6 [41] и в нелинейных цепочках [42–44].

На первый взгляд может показаться, что между ДБ и ДНКМ нет ничего общего, но оказалось, что между ними существует взаимосвязь. ДНКМ, найденные для цепочки и двумерной треугольной решетки, были использованы для построения одномерных и двумерных ДБ в ГЦК-металлах [45–47]. ДНКМ были использованы для обнаружения ДБ нового типа в треугольной решетке Морзе [48; 49], в ОЦК-металлах [50] и в треугольной β -ФПУЦ решетке [51]. ДНКМ гексагональной решетки [52] изучались в отношении двумерных материалов [53], таких как нитрид бора [54] и графен [39; 55–57]. Как отмечалось выше, хаотические ДБ могут возникать в решетках в результате потери устойчивости ДНКМ [58–63]. Двумерные нелинейные решетки использовались при изучении нелинейных возбуждений в слюде [64–66] и двумерных наноматериалов [10; 67–70].

ДНКМ, как и ДБ, оказывают влияние на макроскопические свойства решеток. Анализ одно- и двухкомпонентных ДНКМ в решетке графена выявил такие интересные явления, как генерация второй гармоники и возникновение отрицательного давления в плоскости листа графена за счёт вращательного движения углеродных шестиугольников [71].

1.2 Эффект дальнего действия

В кристаллах атомы взаимодействуют не только с ближайшими, но и с более удаленными соседями, особенно в металлах, где дальнее действие обусловлено делокализацией валентных электронов, а также в ионных кристаллах, где действуют медленно затухающие с расстоянием кулоновские силы.

В подавляющем числе работ по нелинейной динамике решеток рассматривались только ближайшие взаимодействия, однако в ряде работ были изучены эффекты дальнего действия.

ДБ в решетках с дальнедействующими взаимодействиями изучались применительно к молекулам ДНК [60; 72–76], в решетках с кулоновскими [77; 78] и дисперсионными [79] силами. Транспорт тепла в ФПУЦ цепочках с дальним действием рассматривался в работах [32; 80; 81] и роль ДБ в этих процессах была раскрыта в публикациях [32; 82]. Было показано, что дальнедействующие силы способствуют плавному распространению ДБ [83; 84].

1.3 Эффект супратрансмиссии

При изучении нелинейных цепочек, исследователи обнаружили возможность передачи энергии цепочке от внешнего периодического воздействия на частоте вне фононного спектра. Это явление было названо супратрансмиссией (префикс "супра" означает "за пределами") [85–87]. На основании первых работ были сделаны следующие выводы: (i) супратрансмиссия может наблюдаться когда амплитуда вынужденных колебаний превосходит некоторое критическое значение, (ii) на первых стадиях процесса наблюдается возбуждение ДБ, а на более поздних могут активироваться процессы транспорта энергии другими нелинейными возбуждениями. Появление ДБ происходит из-за неустойчивости профиля затухающей волны, которая генерируется внешним воздействием [88]. В зависимости от начальных условий может реализовываться эффект бистабильности, то есть при одной и той же частоте внешнего воздействия может наблюдаться как изолирующий, так и проводящий режим [89; 90].

Супратрансмиссия может найти применение во многих областях техники и физики. В матрице джозефсоновских сверхпроводящих контактов супратрансмиссия может быть использована для создания детектора, регистрирующего очень слабые сигналы, или усилителя сигналов [91; 92]. В цепочках нелинейных связанных генераторов данный эффект обеспечивает эффективный способ передачи двоичной информации [93; 94]. За счет супратрансмиссии можно получить асимметричный поток энергии в LC линиях передачи сигналов [95].

В ряде работ изучалось влияние локального потенциала и дальнедействующих взаимодействий на супратрансмиссию в решетках [96—100]. Было показано, что в структуре оригами Креслинга возможно осуществление контролируемой и высокоинтенсивной супратрансмиссии [101; 102]. Новые механизмы супратрансмиссии были обнаружены в крестовой решетке с нелинейностью [103] и в виброударной цепочке [104].

Опишем ряд последних работ, где изучалась супратрансмиссия в нелинейных дискретных системах. Примерами являются обобщенная цепочка β -ФПУЦ, ферромагнитные спиновые цепочки, где взаимодействуют ближайшие соседи [105], кристаллы пылевой плазмы [106], дробно-временные уравнения синуса-Гордона с затуханием [107], одномерные цепочки генераторов с гистерезисным затуханием [108], цепочка, моделирующая гранулированную среду [109], джозефсоновские переходы [110; 111], пьезоэлектрические метаструктуры [112], хиральные молекулярные цепи [113], активная нелинейная система с нелокальной обратной связью [114], поперечно соединенные нелинейные маятниковые пары [115], нелинейная цепочка связанных частиц, в локальном кубическом потенциале [116], кристалл интерметаллида Pt_3Al [117], модифицированные решетки Клейна-Гордона и Синуса-Гордона [118], дискретное нелинейное уравнение Шредингера, включающее ангармонизм третьей и пятой степени [119], дискретная нелинейная линия электропередачи [120; 121], неупорядоченная нелинейная периодическая структура [122], периодическая бистабильная механическая система [123—125], пьезо-метаструктура с бистабильными шунтирующими цепями [126], метастабильная модульная метаструктура [127].

Лишь небольшое число работ к настоящему времени выполнено для 2D- [128; 129] и 3D-решеток [130]; намного чаще явление супратрансмиссии анализируется в одномерных (1D) моделях.

Рассматривая нелинейную линию передачи с дисперсией, с периодическим возбуждением на границе, было показано, что порог супратрансмиссии может быть снижен за счет взаимодействия волны в запрещенной зоне с волной в фоннном диапазоне, причем последняя является возмущением для первой [131]. Критическая амплитуда для передачи энергии была оценена как предельная амплитуда возбуждения в работах [132–134]. Супратрансмиссия в цепочке связанных ротаторов изучалась авторами работы [135].

Нелинейная динамика двумерных и трехмерных решеток изучалась в ряде работ [136–140]; такие решетки используются, например, при изучении нелинейных возбуждений в калиевом слое кристалла слюды [22; 64–66], моделировании хаотических дискретных бризеров в ОЦК-решетке [141], делокализованных нелинейных колебательных мод в вольфраме [142], при изучении времени жизни термически возбужденных ДБ, при изучении локализованных колебательных мод в алмазе [143], при изучении нелинейной динамики пучков углеродных нанотрубок [144–148], имодельных решеток [10; 48; 67–70]. Запрещенная зона в фоннном спектре квадратной решетки может появиться из-за искажений [149]. ДБ были описаны в ферромагнитной сотовидной решетке [150], и было продемонстрировано существование периодических бегущих волн в решетке с насыщаемой нелинейностью [151]. Баимова с соавторами недавно изучили расплывание пространственно локализованных волновых пакетов в гармонической квадратной решетке и её континуальном аналоге [152], используя новый теоретический подход, развитый в работе [153] и основанный на математической аналогии транспорта массы и энергии.

Фононы являются основными теплоносителями во многих кристаллических материалах, и в последнее время происходит быстрое развитие новой области физики конденсированного состояния, получившей название фофоника, поскольку она сулит большие перспективы применения [154–158]. По мере увеличения амплитуды колебаний атомов увеличивается вклад нелинейности межатомных взаимодействий, и проявляются новые физические эффекты, которые могут быть использованы на практике [157].

1.4 Однокомпонентные ДНКМ квадратной решетки

В работе [159] Рябов и Чечин опубликовали 16 точных колебательных решений для квадратной решетки в виде однокомпонентных делокализованных нелинейных колебательных мод (ДНКМ). Для нахождения ДНКМ они использовали теоретико-групповой подход, основанный на анализе симметрии исследуемой решетки. Поскольку ничего кроме симметрии решетки не закладывается в поиск ДНКМ, такие решения существуют в квадратной решетке с любым взаимодействием между частицами и для любой амплитуды колебаний. Описанные ниже ДНКМ будут детально исследованы в данной работе.

Для возбуждения однокомпонентных ДНКМ необходимо задать начальные перемещения частицам решетки в соответствии со схемами рисунка 1.1. При этом начальные скорости всех частиц равны нулю. Оранжевые линии показывают трансляционные ячейки минимального размера для картин начальных смещений. ДНКМ 1, 3, 6 и 9 имеют самые маленькие трансляционные ячейки, включающие две частицы. ДНКМ 13 и 14, напротив, имеют самые большие трансляционные ячейки с восьмью частицами. Трансляционные ячейки минимального размера у ДНКМ 2 и 10 включают три частицы, а во всех остальных ДНКМ имеем по четыре частицы (это ДНКМ 4, 5, 7, 8, 11, 12, 15 и 16).

Некоторые частицы в ДНКМ, представленных на рисунке 1.1, имеют нулевые векторы начальных смещений. Все ненулевые векторы начальных смещений имеют одинаковую длину A , которая определяет амплитуду колебаний ДНКМ. У ДНКМ 1, 3, 6, 9, 15 и 16 все частицы совершают колебания. У ДНКМ 4, 5, 7, 8, 11, 12, 13 и 14 половина частиц находятся в состоянии покоя, в то время как другие частицы совершают колебания. У ДНКМ 2 и 10 треть частиц покоится и, соответственно, две трети колеблются. У ДНКМ от 1 до 6 все движущиеся частицы совершают колебания в плотноупакованном направлении (вдоль x или вдоль y). У ДНКМ 13 и 14 есть частицы, совершающие колебания в обоих плотноупакованных направлениях. У ДНКМ с 9 по 12 частицы колеблются вдоль одного из диагональных направлений, $y = x$ или $y = -x$, а у ДНКМ 15 и 16 они движутся в обоих диагональных направлениях (см. рисунок 1.1).

В обзорной главе проанализированы все возможные однокомпонентные ДНКМ квадратной решетки. Такие колебания называются делокализованными

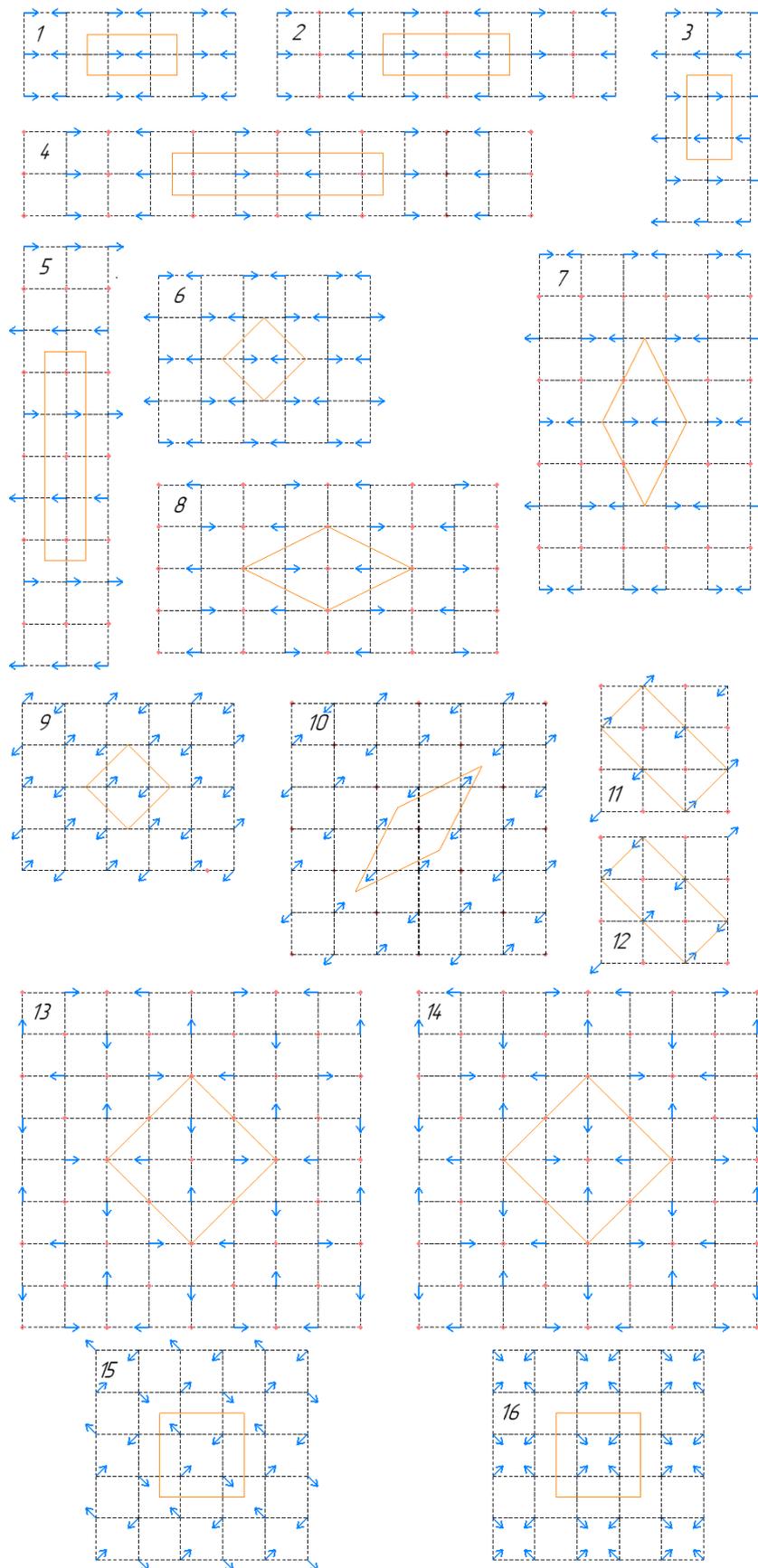


Рисунок 1.1 — Шестнадцать однокомпонентных ДНКМ квадратной решетки [159]. Показаны вектора начальных смещений частиц, приводящих, при нулевых начальных скоростях, к возбуждению ДНКМ. Трансляционные ячейки паттернов смещений выделены оранжевым

потому, что определенный мотив колебаний, имеющий небольшую трансляционную ячейку, транслируется параллельным переносом на всю бесконечную решетку. Взаимодействия между четырьмя ближайшими соседями описываются потенциалом β -ФПУЦ. Для каждой ДНКМ частота, кинетическая и потенциальная энергии рассчитаны как функции амплитуды. Представлены механические напряжения, вызванные ДНКМ, и влияние ДНКМ на константы жесткости решетки. В главе 2 приведены примеры аналитического анализа ДНКМ.

ДБ, также называемые внутренними локализованными модами, представляют собой пространственно локализованные колебательные моды большой амплитуды в бездефектных нелинейных решетках. ДБ существуют потому, что частота их колебаний лежит вне спектра колебаний решетки малой амплитуды. Не резонируя с фононами, ДНКМ не теряют свою энергию на их возбуждение. Изучение ДБ в двумерных и трехмерных кристаллах привело к необходимости изучения ДНКМ нелинейных решеток соответствующих размерностей, а также учета дальнедействующих взаимодействий, таких как металлические или кулоновские силы.

Дискретные бризеры в нелинейных решетках интересны для фундаментальной науки, а также для физики кристаллов, поскольку они накапливают некоторую энергию, которая может быть использована для инициирования или эволюции дефектов. Решетки с более высокой размерностью поддерживают различные ДБ с различной симметрией, и важно знать условия их существования. В кристаллах важную роль могут играть силы дальнего взаимодействия, например кулоновские взаимодействия. В настоящей работе была исследована квадратная β -ФПУЦ решетка с учетом взаимодействий вплоть до четвертого соседа в главе 2.

1.5 Описание исследуемой модели

Рассматривается двумерная квадратная β -ФПУЦ решетка с учетом взаимодействий до четвертого ближайшего соседа включительно, представленная на рисунке 1.2.

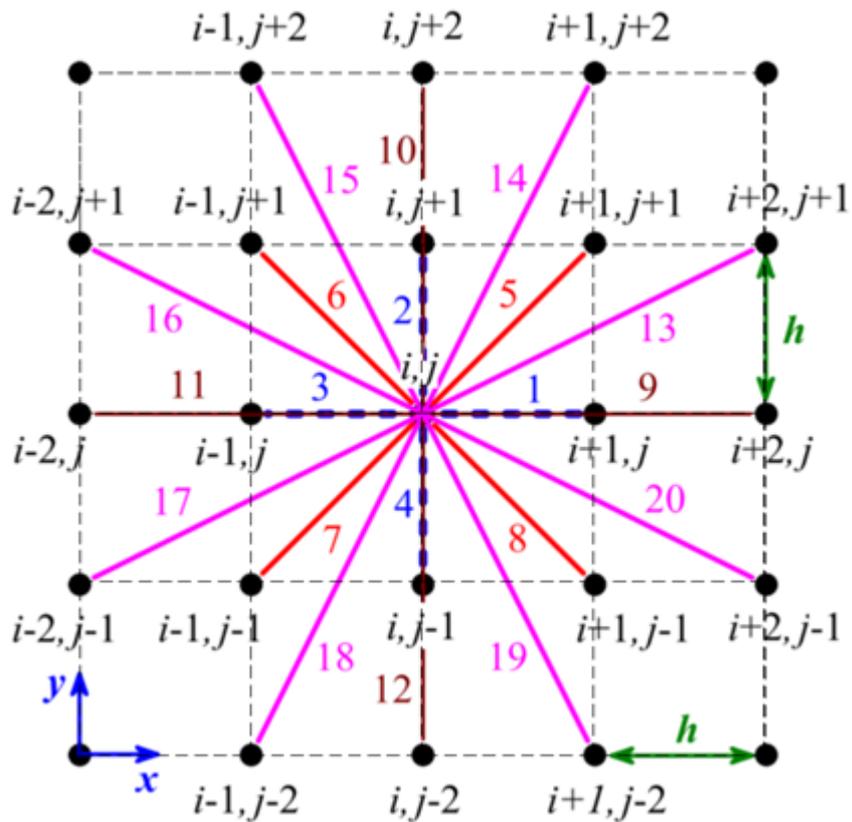


Рисунок 1.2 — Частицы квадратной решетки с шагом h , обозначенные черными точками. Частицы пронумерованы индексами i, j ; показана также и нумерация связей. Рассмотрены взаимодействия вплоть до четвертого ближайшего соседа

Расстояние между ближайшими узлами решетки равно h . Приняв базисные векторы решетки в виде $e_1 = (h, 0)$ и $e_2 = (0, h)$, радиус-векторы точек решетки на плоскости xy определяются по формуле

$$\boldsymbol{\xi}_{i,j} = ie_1 + je_2, \quad (1.1)$$

где i и j - номера точек.

В узлах решетки размещены точечные частицы массы m . Перемещение частицы i,j относительно ее равновесного положения в решетке обозначим вектором $(u_{i,j}, v_{i,j})$. Радиус-вектор частицы в момент времени t будет равен сумме векторов $\mathbf{r}_{i,j}(t) = \boldsymbol{\xi}_{i,j} + (u_{i,j}(t), v_{i,j}(t))$.

Каждая частица взаимодействует с 20 частицами, расположенными на четырех координационных оболочках, пронумерованных индексом l , посредством β -ФПУЦ потенциалов в соответствии с формулой

$$\varphi_l(r) = \frac{k_l}{2}(r - \zeta_l)^2 + \frac{\beta_l}{4}(r - \zeta_l)^4, \quad l = 1, \dots, 4, \quad (1.2)$$

где r - расстояние между частицами, радиусы координационных оболочек квадратной решетки равны $\zeta_1 = h$, $\zeta_2 = \sqrt{2}h$, $\zeta_3 = 2h$ и $\zeta_4 = \sqrt{5}h$; k_l и β_l - это коэффициенты для гармонической и ангармонической частей потенциала соответственно. Всегда можно положить $h = 1$ и $k_1 = 1$ за счет должного выбора единиц измерения расстояния и энергии соответственно. Будут рассмотрены различные значения $k_{2,3,4}$, которые удовлетворяют условию

$$k_1 = 1 > k_2 > k_3 > k_4 > 0. \quad (1.3)$$

Это условие учитывает, что жесткость межатомных связей в кристаллах обычно положительна и уменьшается с расстоянием. Для коэффициентов ангармоничности берём $\beta_l = 10$ для всех четырех типов связей.

Масса частицы равна $m = 1$, что достигается должным выбором единицы времени. Размер расчетной ячейки равен $I \times J$. Используются периодические граничные условия, $\mathbf{r}_{i,j} = \mathbf{r}_{i+I,j} = \mathbf{r}_{i,j+J}$. Гамильтониан системы (полная энер-

гия вычислительной ячейки) рассчитывается по формуле

$$\begin{aligned}
H = & \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \frac{m}{2} |\dot{\mathbf{r}}_{i,j}|^2 + \\
& + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \left(\sum_{k=1}^4 \varphi_1(|\mathbf{R}_{i,j,k}|) + \sum_{k=5}^8 \varphi_2(|\mathbf{R}_{i,j,k}|) \right. \\
& \left. + \sum_{k=9}^{12} \varphi_3(|\mathbf{R}_{i,j,k}|) + \sum_{k=13}^{20} \varphi_4(|\mathbf{R}_{i,j,k}|) \right), \tag{1.4}
\end{aligned}$$

где точка над переменной означает дифференцирование по времени, векторы $\mathbf{R}_{i,j,k}$, соединяющие частицу i, j с ее соседями в четырех первых координационных оболочках, определяются следующим образом

$$\begin{aligned}
\mathbf{R}_{i,j,1} &= \mathbf{r}_{i+1,j} - \mathbf{r}_{i,j}, & \mathbf{R}_{i,j,2} &= \mathbf{r}_{i,j+1} - \mathbf{r}_{i,j}, \\
\mathbf{R}_{i,j,3} &= \mathbf{r}_{i-1,j} - \mathbf{r}_{i,j}, & \mathbf{R}_{i,j,4} &= \mathbf{r}_{i,j-1} - \mathbf{r}_{i,j}, \\
\mathbf{R}_{i,j,5} &= \mathbf{r}_{i+1,j+1} - \mathbf{r}_{i,j}, & \mathbf{R}_{i,j,6} &= \mathbf{r}_{i-1,j+1} - \mathbf{r}_{i,j}, \\
\mathbf{R}_{i,j,7} &= \mathbf{r}_{i-1,j-1} - \mathbf{r}_{i,j}, & \mathbf{R}_{i,j,8} &= \mathbf{r}_{i+1,j-1} - \mathbf{r}_{i,j}, \\
\mathbf{R}_{i,j,9} &= \mathbf{r}_{i+2,j} - \mathbf{r}_{i,j}, & \mathbf{R}_{i,j,10} &= \mathbf{r}_{i,j+2} - \mathbf{r}_{i,j}, \\
\mathbf{R}_{i,j,11} &= \mathbf{r}_{i-2,j} - \mathbf{r}_{i,j}, & \mathbf{R}_{i,j,12} &= \mathbf{r}_{i,j-2} - \mathbf{r}_{i,j}, \\
\mathbf{R}_{i,j,13} &= \mathbf{r}_{i+2,j+1} - \mathbf{r}_{i,j}, & \mathbf{R}_{i,j,14} &= \mathbf{r}_{i+1,j+2} - \mathbf{r}_{i,j}, \\
\mathbf{R}_{i,j,15} &= \mathbf{r}_{i-1,j+2} - \mathbf{r}_{i,j}, & \mathbf{R}_{i,j,16} &= \mathbf{r}_{i-2,j+1} - \mathbf{r}_{i,j}, \\
\mathbf{R}_{i,j,17} &= \mathbf{r}_{i-2,j-1} - \mathbf{r}_{i,j}, & \mathbf{R}_{i,j,18} &= \mathbf{r}_{i-1,j-2} - \mathbf{r}_{i,j}, \\
\mathbf{R}_{i,j,19} &= \mathbf{r}_{i+1,j-2} - \mathbf{r}_{i,j}, & \mathbf{R}_{i,j,20} &= \mathbf{r}_{i+2,j-1} - \mathbf{r}_{i,j}. \tag{1.5}
\end{aligned}$$

Первое слагаемое в гамильтониане (1.4) дает кинетическую энергию частиц, а четыре последующих слагаемых определяют потенциальные энергии связей между частицами в четырех координационных оболочках.

Таблица 1 — Три набора параметров модели, рассматриваемые в данной работе. В последнем столбце указана точка первой зоны Бриллюэна в которой достигается максимальная частота фононного спектра и соответствующие ДНКМ

№	k_1	k_2	k_3	k_4	точка зоны Бриллюэна и ДНКМ
1	1,0	0,9	0,8	0,7	M, ДНКМ 6,9
2	1,0	0,9	0,8	0,0	X, ДНКМ 1,16
3	1,0	1,0	1,1	0,0	Z, ДНКМ 7

Уравнения движения, вытекающие из гамильтониана (1.4), представлены ниже:

$$\begin{aligned}
 m\ddot{u}_{i,j} &= \sum_{k=1}^4 D_1 R_{i,j,k,x} + \sum_{k=5}^8 D_2 R_{i,j,k,x} + \sum_{k=9}^{13} D_3 R_{i,j,k,x} + \sum_{k=14}^{20} D_4 R_{i,j,k,x}, \\
 m\ddot{v}_{i,j} &= \sum_{k=1}^4 D_1 R_{i,j,k,y} + \sum_{k=5}^8 D_2 R_{i,j,k,y} + \sum_{k=9}^{13} D_3 R_{i,j,k,y} + \sum_{k=14}^{20} D_4 R_{i,j,k,y}, \quad (1.6)
 \end{aligned}$$

где D_l определяется из уравнения

$$D_l = \frac{\varphi'_l(|\mathbf{R}_{i,j,k}|)}{|\mathbf{R}_{i,j,k}|}, \quad l = 1, \dots, 4. \quad (1.7)$$

Симплектический метод Штормера шестого порядка [160] используется для численного интегрирования уравнений движения (1.6). Размер вычислительной ячейки равен $I = J = 12$ при анализе ДНКМ и $I = J = 120$ при изучении ДБ.

Далее квадратная решетка будет рассматриваться для следующих параметров: масса частиц $m = 1$, коэффициенты линейной жесткости будут заданы одним из трех наборов, перечисленных в таблице 1, а для коэффициентов нелинейной жесткости принимаем $\beta_l = 10$, $l = 1, \dots, 4$. По большей части будем работать с набором параметров 1 из таблицы 1, поскольку он удовлетворяет условию (1.3), обеспечивающему убывание жесткости связи с расстоянием.

1.6 Выводы по главе

В представленной обзорной главе описаны основные вехи в изучении нелинейной динамики решетки, в частности, работы по изучению свойств ДБ и ДНКМ с фокусом на задачах физики конденсированного состояния. Описаны условия, необходимые для существования ДБ, а именно:

- среда должна быть дискретной для того, чтобы фононный спектр решетки был ограниченным;

- среда должна быть нелинейной, поскольку частота нелинейных колебаний зависит от амплитуды и, с ростом амплитуды, может выходить за пределы спектра фононных колебаний.

Если частота ДБ лежит вне фононного спектра, он не расходует свою энергию на возбуждение фононов и, в отсутствие возмущений, совершает незатухающие колебания.

Показана тесная связь между ДБ и ДНКМ:

- ДБ могут иметь паттерн атомных колебаний как в ДНКМ с частотой выше фононного спектра;

- ДБ могут рождаться при распаде неустойчивой ДНКМ с частотой выше фононного спектра.

Сделан вывод о важности учета дальнедействующих сил применительно к анализу ДБ в кристаллах, поскольку химическая связь, например, в металлах и ионных кристаллах является дальнедействующей. Приведен обзор работ, рассматривающих эффекты дальнего действия в нелинейных решетках.

Описан эффект супратрансмиссии - возможность передачи энергии нелинейной решетке от внешнего периодического воздействия на частотах за пределами фононного спектра при условии достаточно высокой амплитуды воздействия.

Проводится мысль о том, что изучаемые в данной работе эффекты нелинейности являются общими и проявляются в решетках любой размерности, поэтому они могут быть изучены на примере квадратной решетки, допускающей простую визуализацию и интерпретацию результатов. Полученные результаты могут иметь предсказательную силу и для других нелинейных решеток.

Представлены 16 однокомпонентных ДНКМ квадратной решетки, которые рассматриваются и анализируются в последующих главах с целью отыскания новых типов ДБ с учетом дальнего действия при дополнительном условии, что жесткость связей уменьшается с их длиной, что характерно для химических связей в кристаллах.

Приведено математическое описание исследуемой квадратной решетки для которой рассматривается связь каждой частицы с четырьмя ближайшими соседями; выписаны гамильтониан и уравнения движения для случая, когда частицы взаимодействуют посредством потенциала β -ФПУЦ. Описаны значения параметров квадратной решетки для которых проводится моделирование.

Глава 2. Делокализованные нелинейные колебательные моды в квадратной решетке с дальнедействующими взаимодействиями

В данной главе сначала будут всесторонне исследованы свойства пяти изучаемых ДНКМ, с этой целью будут получены и проанализированы дисперсионные соотношения для квадратной решетки с дальнедействием, далее будут получены аналитические выражения для амплитудно-частотных характеристик исследуемых ДНКМ и сопоставлены с численными результатами.

По причине, которая будет понятна позже, в данной главе анализируются только пять из шестнадцати однокомпонентных мод, описанных в главе 1, см. рисунок 2.1.

2.1 Дисперсионные соотношения для квадратной решетки с дальнедействием

Начнем с вывода и анализа дисперсионного соотношения для изучаемой решетки. Это необходимо для того, чтобы установить какая из ДНКМ имеет максимальную частоту в малоамплитудном пределе. Для случая малых перемещений, $u_{ij} \ll h$ и $v_{ij} \ll h$, разложим правые части уравнений движения (1.6) в ряды Тейлора и, отбрасывая члены старше линейных, получим так называемые

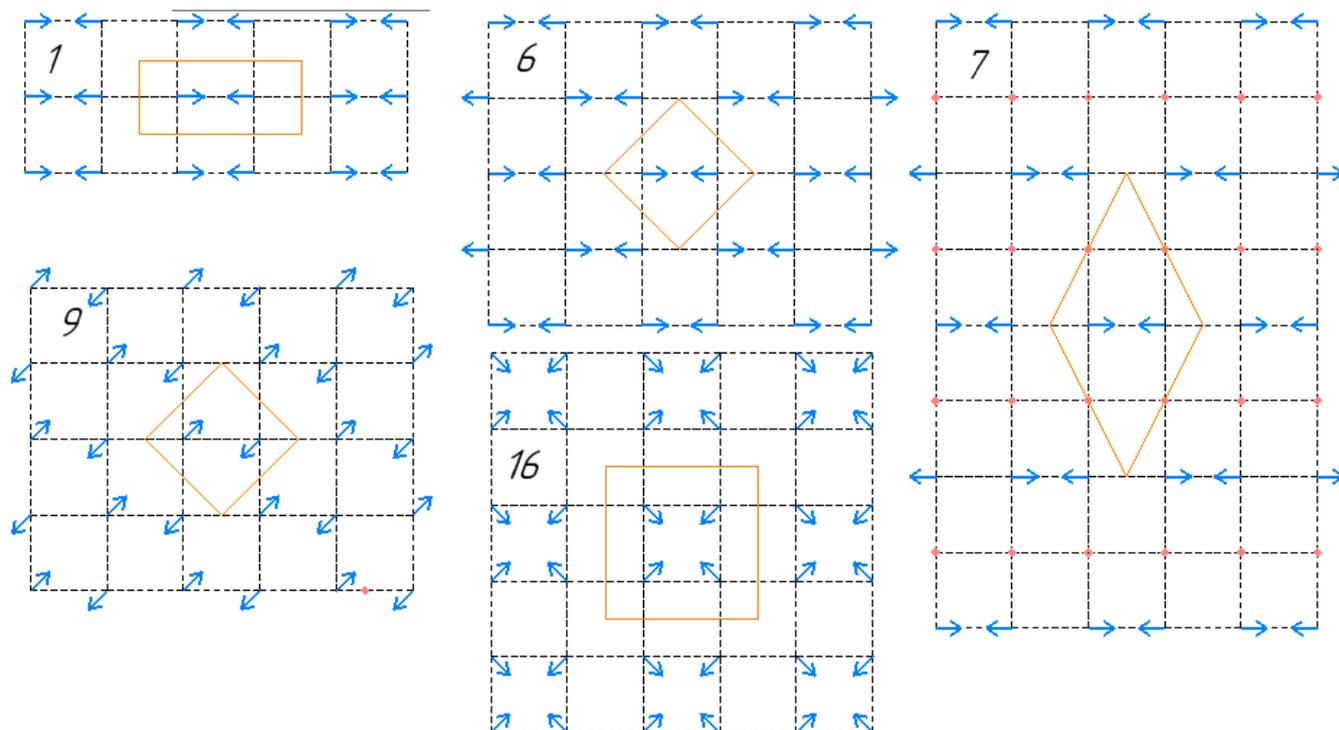


Рисунок 2.1 — Пять однокомпонентных ДНКМ квадратной решетки с волновыми векторами на границе первой зоны Бриллюэна. ДНКМ могут быть возбуждены при начальных перемещениях частиц, показанных стрелками, и нулевых начальных скоростях. Все начальные векторы смещения имеют одинаковую длину A (амплитуда ДНКМ). Периоды трансляции для ДНКМ показаны оранжевыми линиями

линеаризованные уравнения движения

$$\begin{aligned}
m\ddot{u}_{i,j} = & k_1(u_{i-1,j} - 2u_{i,j} + u_{i+1,j}) + \frac{k_2}{2}(u_{i-1,j-1} - 2u_{i,j} + u_{i+1,j+1}) + \\
& + \frac{k_2}{2}(v_{i-1,j-1} - 2v_{i,j} + v_{i+1,j+1}) + \frac{k_2}{2}(u_{i-1,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i+1,j-1}) - \\
& - \frac{k_2}{2}(v_{i-1,j+1} - 2v_{i,j} + v_{i+1,j-1}) + k_3(u_{i-2,j} - 2u_{i,j} + u_{i+2,j}) + \\
& + \frac{4k_4}{5}(u_{i+2,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i-2,j-1}) + \frac{4k_4}{5}(u_{i-2,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i+2,j-1}) + \\
& + \frac{k_4}{5}(u_{i+1,j+2} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j-2}) + \frac{k_4}{5}(u_{i-1,j+2} - 2u_{i,j} + u_{i+1,j-2}) + \\
& + \frac{2k_4}{5}(v_{i+2,j+1} + 2v_{i,j} + v_{i-2,j-1}) + \frac{2k_4}{5}(v_{i+1,j+2} + 2v_{i,j} + v_{i-1,j-2}) - \\
& - \frac{2k_4}{5}(v_{i-1,j+2} + 2v_{i,j} + v_{i+1,j-2}) - \frac{2k_4}{5}(v_{i-2,j+1} + 2v_{i,j} + v_{i+2,j-1}), \quad (2.1)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
m\ddot{v}_{i,j} = & k_1(v_{i,j-1} - 2v_{i,j} + v_{i,j+1}) + \frac{k_2}{2}(u_{i-1,j-1} - 2u_{i,j} + u_{i+1,j+1}) \\
& + \frac{k_2}{2}(v_{i-1,j-1} - 2v_{i,j} + v_{i+1,j+1}) - \frac{k_2}{2}(u_{i-1,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i+1,j-1}) \\
& + \frac{k_2}{2}(v_{i-1,j+1} - 2v_{i,j} + v_{i+1,j-1}) + k_3(v_{i,j-2} - 2v_{i,j} + v_{i,j+2}) \\
& + \frac{4k_4}{5}(v_{i+1,j+2} - 2v_{i,j} + v_{i-1,j-2}) + \frac{4k_4}{5}(v_{i-1,j+2} - 2v_{i,j} + v_{i+1,j-2}) \\
& + \frac{k_4}{5}(v_{i+2,j+1} - 2v_{i,j} + v_{i-2,j-1}) + \frac{k_4}{5}(v_{i-2,j+1} - 2v_{i,j} + v_{i+2,j-1}) \\
& + \frac{2k_4}{5}(u_{i+2,j+1} + 2u_{i,j} + u_{i-2,j-1}) + \frac{2k_4}{5}(u_{i+1,j+2} + 2u_{i,j} + u_{i-1,j-2}) \\
& - \frac{2k_4}{5}(u_{i-1,j+2} + 2u_{i,j} + u_{i+1,j-2}) - \frac{2k_4}{5}(u_{i-2,j+1} + 2u_{i,j} + u_{i+2,j-1}). \quad (2.2)
\end{aligned}$$

Ищем их решение в стандартном виде бегущих волн:

$$\begin{aligned}
u_{i,j} &= U \exp[i(qi + sj - \omega t)], \\
v_{i,j} &= V \exp[i(qi + sj - \omega t)], \quad (2.3)
\end{aligned}$$

где U, V - компоненты собственного вектора, i - мнимая единица, s и q - волновые числа, а ω - частота. Подстановка уравнений (2.3) в линеаризованные

уравнения движения (2.1), (2.2) приводит к системе однородных линейных уравнений:

$$\begin{aligned}(m\omega^2 + A)U + BV &= 0, \\ BU + (m\omega^2 + C)V &= 0,\end{aligned}\tag{2.4}$$

где A , B и C определены уравнениями

$$\begin{aligned}A &= -\gamma - \eta - \theta - a - 4c - 4d - e - f, \\ B &= -\eta + \theta - 2c - 2e + 2f + 2d, \\ C &= -\delta - \eta - \theta - b - 4e - 4f - c - d,\end{aligned}\tag{2.5}$$

в которых

$$\begin{aligned}\gamma &= 4k_1 \sin^2 \frac{q}{2}, & \delta &= 4k_1 \sin^2 \frac{s}{2}, \\ \eta &= 2k_2 \sin^2 \frac{q+s}{2}, & \theta &= 2k_2 \sin^2 \frac{q-s}{2}, \\ a &= 4k_3 \sin^2 q, & b &= 4k_3 \sin^2 s, \\ c &= \frac{4}{5}k_4 \sin^2 \frac{2q+s}{2}, & d &= \frac{4}{5}k_4 \sin^2 \frac{2q-s}{2}, \\ e &= \frac{4}{5}k_4 \sin^2 \frac{q+2s}{2}, & f &= \frac{4}{5}k_4 \sin^2 \frac{q-2s}{2}.\end{aligned}\tag{2.6}$$

Система линейных однородных уравнений (2.4) имеет ненулевое решение тогда и только тогда, когда ее определитель равен нулю. Из этого условия можно найти следующее дисперсионное соотношение квадратной решетки:

$$\omega_{1,2}^2 = \frac{-A - C \pm \sqrt{(A - C)^2 + 4B^2}}{2m}.\tag{2.7}$$

Знаки "плюс" и "минус" в уравнении (2.7) соответствуют продольной и поперечной фононным модам.

Проанализируем частоты фононов в точках X, Z и M первой зоны Бриллюэна, см. рисунок 2.2(а). Все эти точки находятся на прямой $q = \pi$, вдоль которой две ветви дисперсионного соотношения (2.7) упрощаются до выраже-

ний

$$\begin{aligned}\omega_1^2 &= \frac{4}{m} \left(k_1 + \frac{8k_4}{5} \sin^2 \frac{s}{2} + k_2 \cos^2 \frac{s}{2} + \frac{2k_4}{5} \cos^2 s \right), \\ \omega_2^2 &= \frac{4}{m} \left(k_1 \sin^2 \frac{s}{2} + \frac{2k_4}{5} \sin^2 \frac{s}{2} + k_2 \cos^2 \frac{s}{2} + k_3 \sin^2 s + \frac{8k_4}{5} \cos^2 s \right).\end{aligned}\quad (2.8)$$

Частоты фононов в точках X, $(q, s) = (\pm\pi, 0)$ и $(0, \pm\pi)$ рассчитываются по формуле

$$\omega_{1,X}^2 = \frac{4}{m} (k_1 + k_2 + \frac{2}{5}k_4), \quad \omega_{2,X}^2 = \frac{4}{m} (k_2 + \frac{8}{5}k_4).\quad (2.9)$$

В точках M, $(q, s) = (\pm\pi, \pm\pi)$ частоты рассчитываются по формуле

$$\omega_{1,M}^2 = \omega_{2,M}^2 = \frac{4}{m} (k_1 + 2k_4).\quad (2.10)$$

Отметим, что k_3 не входит в уравнения (2.9) и (2.10), а выражение (2.10) не зависит также и от k_2 . Ниже будет показано, что ДНКМ 1, 6, 9 и 16 не деформируют связи между третьими соседями, а ДНКМ 6 и 9 ещё и связи между вторыми соседями, причём, это справедливо не только в пределе малых амплитуд, но и при больших амплитудах колебаний.

В точках Z имеем $(q, s) = (\pm\pi, \pm\pi/2)$ и $(\pm\pi/2, \pm\pi)$, и частоты находятся из следующих уравнений

$$\omega_{1,Z}^2 = \frac{4}{m} \left(\frac{k_1}{2} + \frac{k_2}{2} + k_3 + \frac{1}{5}k_4 \right), \quad \omega_{2,Z}^2 = \frac{4}{m} \left(k_1 + \frac{k_2}{2} + \frac{4}{5}k_4 \right).\quad (2.11)$$

Цель анализа - найти условия, при которых максимальная частота фононов достигается в одной из точек X, Z и M. Начнем с точек X и M. Условие $\omega_{2,X}^2 > \omega_{1,X}^2$ выполняется только в том случае, если $(6/5)k_4 > k_1$, что не противоречит уравнению (1.3), но не отвечает набору 1 параметров модели (см. таблицу 1). Это означает, что только $\omega_{1,X}^2$ следует сравнивать с $\omega_{1,M}^2 = \omega_{2,M}^2$. Это сравнение показывает, что максимальная частота фононов достигается в точке M, которая является волновым вектором ДНКМ 6 и 9, при выполнении условия

$$k_4 > \frac{5}{8}k_2,\quad (2.12)$$

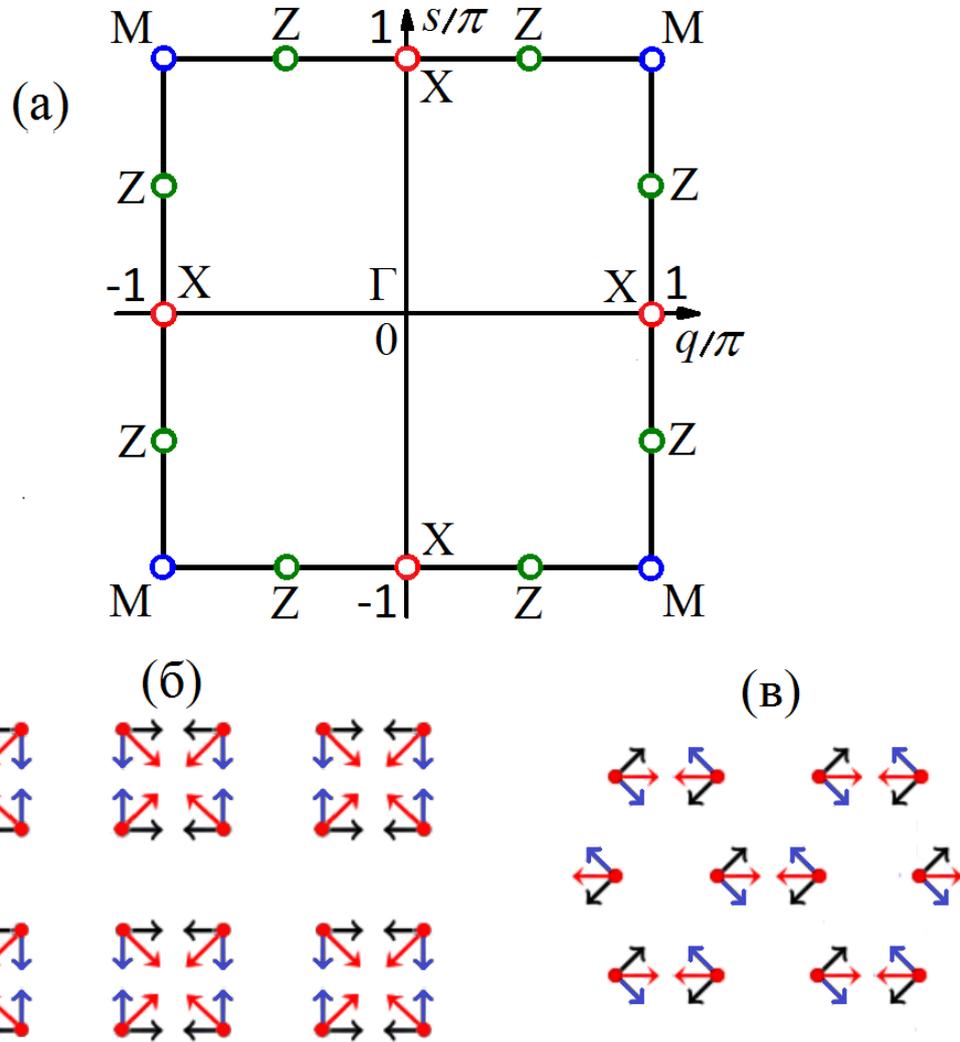


Рисунок 2.2 — (а) Первая зона Бриллюэна квадратной решетки. Высокосимметричные точки обозначены заглавными греческими буквами Γ , X , M и Z . Волновые векторы на изображениях 1 и 16 расположены в точке X (красные точки). ДНКМ 6 и 9 имеют волновые векторы в точке M отмечены синими точками. ДНКМ 7 имеет волновые векторы в точке Z (зеленые очки). (б) ДНКМ 16 - это сумма ДНКМ 1 и её поворота на 90° . (в) ДНКМ 6 - это сумма ДНКМ 9 и её поворота на 90°

Если уравнение (2.12) не выполняется, то максимальная частота фононов реализуется в точке X, которая является волновым вектором ДНКМ 1 и 16.

В частности, условие (2.12) выполняется для набора параметров $k_1 = 1,0$, $k_2 = 0,9$, $k_3 = 0,8$ и $k_4 = 0,7$, называемого набором 1, см. таблицу 1.

Дисперсионные кривые показаны на рисунке 2.3 вдоль линии $q = \pi$ для различных наборов параметров модели. Черным, красным и синим цветами показаны результаты для наборов параметров 1, 2 и 3, соответственно.

Если $k_4 = 0$, то условие (2.12) не выполняется для положительных значений k_2 , и ДБ, основанные на ДНКМ 6 и 9, невозможны. ДБ, основанные на этих ДНКМ возможны при выполнении условия (1.3) только для $k_4 = 0$, например, для набора параметров $k_1 = 1,0$, $k_2 = 0,9$, $k_3 = 0,0$ и $k_4 = 0,0$, называемого набором 2, см. таблицу 1 и кривую красного цвета на рисунке 2.3.

Что касается точки Z, то условием, при котором в этой точке дисперсионные соотношения (2.8), достигают максимума, является

$$\left. \frac{d\omega_2^2}{ds} \right|_{s=\pi/2} = k_1 + \frac{2k_4}{5} - k_2 = 0. \quad (2.13)$$

Из уравнения (2.13) видно, что если $k_1 > k_2$, то $k_4 < 0$, что не согласуется с условием (1.3). Если не учитывать взаимодействия четвертых соседей ($k_4 = 0$), то уравнение (2.13) требует $k_1 = k_2 = 1$. Можно сделать вывод, что при физически обоснованном ограничении на параметры модели (1.3), максимум фононной частоты не может быть достигнут в точке Z первой зоны Бриллюэна. Максимум может быть достигнут только для случая $k_1 = k_2 = 1$, $k_3 > 1$, $k_4 = 0$, см. синюю кривую на рисунке 2.3. Это множество параметров модели будем называть набор 3, см. таблицу 1.

2.2 Аналитические результаты для однокомпонентных ДНКМ

Ниже приведены точные гамильтонианы и их кубические аппроксимации для ДНКМ 1, 6, 9 и 16. Получены уравнения движения с учетом членов не старше кубических и зависимости частоты от амплитуды в данном приближении. Затем амплитудно-частотные характеристики находятся численно, чтобы

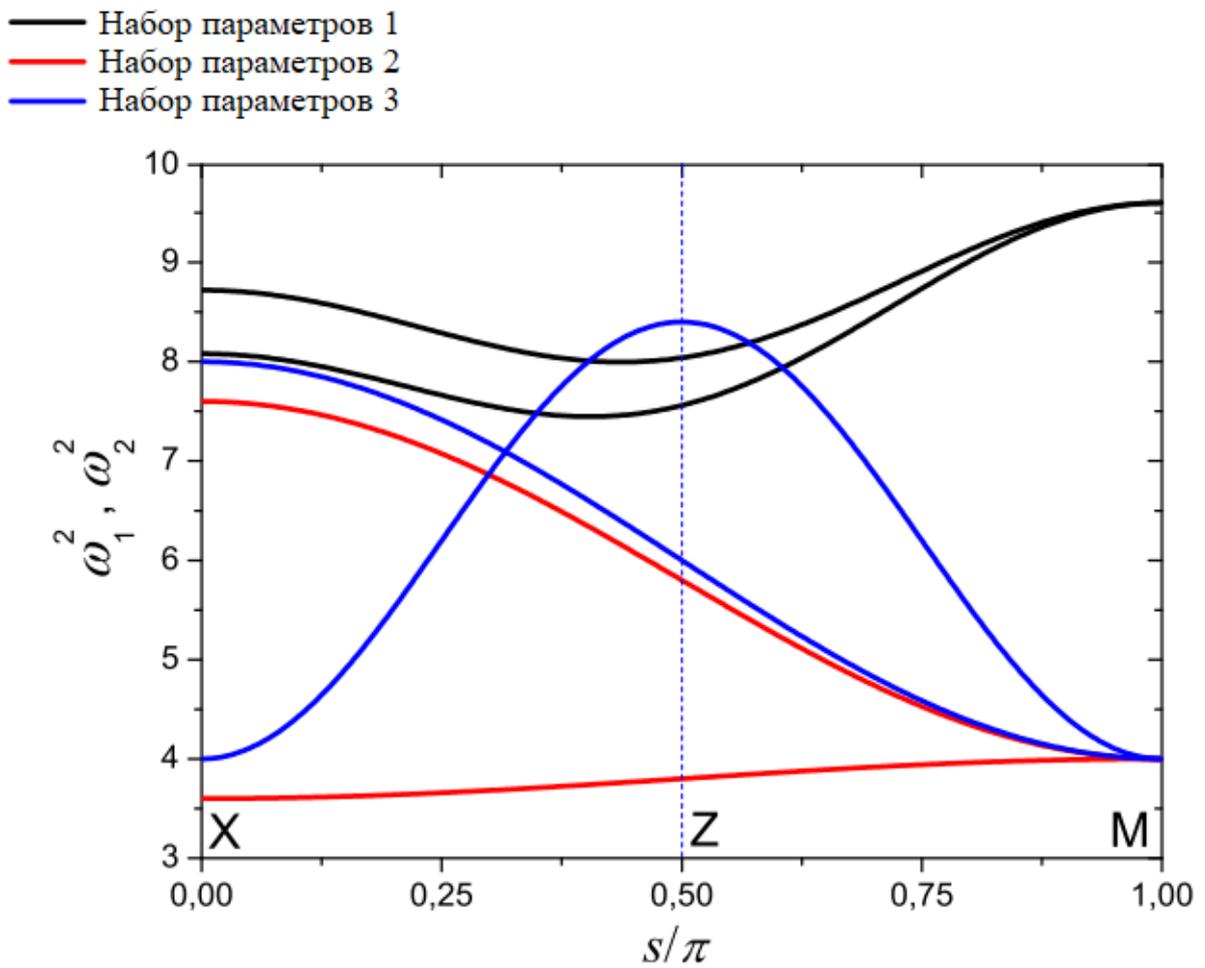


Рисунок 2.3 — Дисперсионные соотношения вдоль линии $q = \pi$ в первой зоне Бриллюэна для трех наборов параметров модели, представленных в таблице 1

оценить точность приближенных аналитических решений. ДНКМ 7 не анализируется, поскольку она не может иметь частоту выше фононного спектра при условии (1.3) и, следовательно, не может быть использована для получения ДБ в квадратной решетке с жесткостями связей, удовлетворяющими этому условию.

Однокомпонентная ДНКМ - это колебательная система с одной степенью свободы, полностью описываемая расстоянием движущейся частицы от ее положения равновесия как функцией времени, $a(t)$, с начальными условиями $a(0) = A$ и $\dot{a}(0) = 0$, где A - амплитуда ДНКМ.

Точный Гамильтониан для рассматриваемой ДНКМ имеет вид

$$2H = m\dot{a}^2 + \sum_{k=1}^4 \varphi_1(L_k) + \sum_{k=5}^8 \varphi_2(L_k) + \sum_{k=9}^{12} \varphi_3(L_k) + \sum_{k=13}^{20} \varphi_4(L_k), \quad (2.14)$$

где $L_k(a)$, $k = 1, \dots, 20$ - длины связей между частицами в момент времени $t = 0$, которые выписаны ниже для каждой из исследуемых ДНКМ, вместе с кубическими разложениями $L_k(a)$ по a . Эти длины связей получены с учетом закономерностей перемещения частиц, показанных на рисунке 2.1.

2.2.1 ДНКМ 1

Для ДНКМ 1 длины связей $L_k(a)$, $k = 1, \dots, 20$, рассчитываются из следующих соотношений, где помимо точных выражений приведены их разложения в ряд Тейлора, учитывающие члены не старше кубических:

$$\begin{aligned}
L_1 &= h + 2a, & L_2 &= L_4 = h, & L_3 &= h - 2a, \\
L_5 &= L_8 = \sqrt{(h + 2a)^2 + h^2} \approx \\
&\approx \sqrt{2}h + \sqrt{2}a + \frac{a^2}{\sqrt{2}h} - \frac{a^3}{\sqrt{2}h^2}, \\
L_6 &= L_7 = \sqrt{(h - 2a)^2 + h^2} \approx \sqrt{2}h - \sqrt{2}a + \frac{a^2}{\sqrt{2}h} + \frac{a^3}{\sqrt{2}h^2}, \\
L_9 &= L_{10} = L_{11} = L_{12} = 2h, \\
L_{13} &= L_{16} = L_{17} = L_{20} = \sqrt{5}h, \\
L_{14} &= L_{19} = \sqrt{(h + 2a)^2 + 4h^2} \approx \sqrt{5}h + \frac{2a}{\sqrt{5}} + \frac{8a^2}{(\sqrt{5})^3h} - \frac{16a^3}{(\sqrt{5})^5h^2}, \\
L_{15} &= L_{18} = \sqrt{(h - 2a)^2 + 4h^2} \approx \sqrt{5}h - \frac{2a}{\sqrt{5}} + \frac{8a^2}{(\sqrt{5})^3h} + \frac{16a^3}{(\sqrt{5})^5h^2}. \tag{2.15}
\end{aligned}$$

Подстановка кубических разложений $L_k(a)$ в гамильтониан (2.14) после удержания членов не старше четвертой степени даёт приближенный гамильтониан:

$$\begin{aligned}
H &= \frac{m\dot{a}^2}{2} + 2\left(k_1 + k_2 + \frac{2}{5}k_4\right)a^2 \\
&+ \left(4\beta_1 + 2\beta_2 + \frac{8}{25}\beta_4 - \frac{3k_2}{2h^2}\right)a^4. \tag{2.16}
\end{aligned}$$

Следующее кубическое уравнение движения может быть получено из гамильтониана (2.16)

$$m\ddot{a} = -4\left(k_1 + k_2 + \frac{2}{5}k_4\right)a - \left(16\beta_1 + 8\beta_2 + \frac{32}{25}\beta_4 - \frac{6k_2}{h^2}\right)a^3. \tag{2.17}$$

Приближенное решение уравнения (2.17) можно представить в виде $a(t) = A \sin(\omega t) + A_1 \sin(3\omega t)$, где $A_1 \ll A$. Подставляя эту форму решения в уравнение (2.17), находим частоту как функцию амплитуды для ДНКМ 1

$$\begin{aligned}
\omega^2 &\approx \frac{4}{m}\left(k_1 + k_2 + \frac{2}{5}k_4\right) \\
&+ \frac{3}{4m}\left(16\beta_1 + 8\beta_2 + \frac{32}{25}\beta_4 - \frac{6k_2}{h^2}\right)A^2. \tag{2.18}
\end{aligned}$$

В зависимости от параметров модели, ДНКМ 1 может иметь нелинейность мягкого типа, если знак коэффициента перед A^2 в уравнении (2.18) отрицательный. Параметры модели всегда выбираются так, что ДНКМ 1 имеет жесткую нелинейность. Обратим внимание, что k_3 и β_3 не входят в уравнение (2.18), поскольку ДНКМ 1 не деформирует связи между третьими соседями.

2.2.2 ДНКМ 6

Аналогично предыдущему случаю выпишем длины связей и их кубические аппроксимации для ДНКМ 6:

$$\begin{aligned}
L_1 &= h - 2a, & L_3 &= h + 2a, & L_2 &= L_4 = \sqrt{4a^2 + h^2} \approx h + \frac{2a^2}{h}, \\
L_5 &= L_6 = L_7 = L_8 = \sqrt{2}h, & L_9 &= L_{10} = L_{11} = L_{12} = 2h, \\
L_{13} &= L_{20} = \sqrt{4(h-a)^2 + h^2} \approx \sqrt{5}h - \frac{4a}{\sqrt{5}} + \frac{2a^2}{(\sqrt{5})^3h} + \frac{8a^3}{(\sqrt{5})^5h^2}, \\
L_{14} &= L_{19} = \sqrt{(h-2a)^2 + 4h^2} \approx \sqrt{5}h - \frac{2a}{\sqrt{5}} + \frac{8a^2}{(\sqrt{5})^3h} + \frac{16a^3}{(\sqrt{5})^5h^2}, \\
L_{15} &= L_{18} = \sqrt{(h+2a)^2 + 4h^2} \approx \sqrt{5}h + \frac{2a}{\sqrt{5}} + \frac{8a^2}{(\sqrt{5})^3h} - \frac{16a^3}{(\sqrt{5})^5h^2}, \\
L_{16} &= L_{17} = \sqrt{4(h+a)^2 + h^2} \approx \sqrt{5}h + \frac{4a}{\sqrt{5}} + \frac{2a^2}{(\sqrt{5})^3h} - \frac{8a^3}{(\sqrt{5})^5h^2}. \tag{2.19}
\end{aligned}$$

С учетом уравнений (2.19), приближенный гамильтониан для ДНКМ 6 имеет вид

$$\begin{aligned}
H &= \frac{m\dot{a}^2}{2} + 2(k_1 + 2k_4)a^2 \\
&+ \left(4\beta_1 + \frac{136}{25}\beta_4 + \frac{2k_1}{h^2} - \frac{12k_4}{25h^2}\right)a^4. \tag{2.20}
\end{aligned}$$

Выпишем соответствующее уравнение движения:

$$m\ddot{a} = -4(k_1 + 2k_4)a - \left(16\beta_1 + \frac{544}{25}\beta_4 + \frac{8k_1}{h^2} - \frac{48k_4}{25h^2}\right)a^3, \tag{2.21}$$

и амплитудно-частотную характеристику для ДНКМ 6:

$$\begin{aligned}\omega^2 &\approx \frac{4}{m}(k_1 + 2k_4) \\ &+ \frac{3}{4m} \left(16\beta_1 + \frac{544}{25}\beta_4 + \frac{8k_1}{h^2} - \frac{48k_4}{25h^2} \right) A^2.\end{aligned}\quad (2.22)$$

Эта амплитудно-частотная характеристика не является функцией k_2 , k_3 и β_2 , β_3 , поскольку при колебании данной моды связи между вторыми и третьими соседями не деформируются.

2.2.3 ДНКМ 9

Длины связей $L_k(a)$, $k = 1, \dots, 20$, для ДНКМ 9 имеют вид:

$$\begin{aligned}L_1 &= L_2 = h - \sqrt{2}a, \\ L_3 &= L_4 = h + \sqrt{2}a, \quad L_5 = L_6 = L_7 = L_8 = \sqrt{2}h, \\ L_9 &= L_{10} = L_{11} = L_{12} = 2h, \\ L_{13} &= L_{14} = \sqrt{(2h - \sqrt{2}a)^2 + (h - \sqrt{2}a)^2} \approx \\ &\approx \sqrt{5}h - \frac{3\sqrt{2}a}{\sqrt{5}} + \frac{a^2}{(\sqrt{5})^3h} + \frac{3\sqrt{2}a^3}{(\sqrt{5})^5h^2}, \\ L_{15} &= L_{20} = \sqrt{(h + \sqrt{2}a)^2 + (2h - \sqrt{2}a)^2} \approx \\ &\approx \sqrt{5}h - \frac{\sqrt{2}a}{\sqrt{5}} + \frac{9a^2}{(\sqrt{5})^3h} + \frac{18a^3}{\sqrt{2}(\sqrt{5})^5h^2}, \\ L_{16} &= L_{19} = \sqrt{(2h + \sqrt{2}a)^2 + (h - \sqrt{2}a)^2} \approx \\ &\approx \sqrt{5}h + \frac{\sqrt{2}a}{\sqrt{5}} + \frac{9a^2}{(\sqrt{5})^3h} - \frac{9\sqrt{2}a^3}{(\sqrt{5})^5h^2}, \\ L_{17} &= L_{18} = \sqrt{(2h + \sqrt{2}a)^2 + (h + \sqrt{2}a)^2} \approx \\ &\approx \sqrt{5}h + \frac{3\sqrt{2}a}{\sqrt{5}} + \frac{a^2}{(\sqrt{5})^3h} - \frac{3\sqrt{2}a^3}{(\sqrt{5})^5h^2}.\end{aligned}\quad (2.23)$$

При этом приближенный гамильтониан с точностью до членов четвертого порядка принимает вид

$$H = \frac{m\dot{a}^2}{2} + 2(k_1 + 2k_4)a^2 + \left(2\beta_1 + \frac{164}{25}\beta_4 + \frac{2k_4}{25h^2}\right)a^4, \quad (2.24)$$

а соответствующее уравнение движения принимает форму:

$$m\ddot{a} = -4(k_1 + 2k_4)a - \left(8\beta_1 + \frac{656}{25}\beta_4 + \frac{8k_4}{25h^2}\right)a^3. \quad (2.25)$$

Амплитудно-частотная характеристика для ДНКМ 9 представлена следующим выражением:

$$\omega^2 \approx \frac{4}{m}(k_1 + 2k_4) + \frac{3}{4m}\left(8\beta_1 + \frac{656}{25}\beta_4 + \frac{8k_4}{25h^2}\right)A^2. \quad (2.26)$$

Эта амплитудно-частотная характеристика также не зависит от k_2 , k_3 и β_2 , β_3 .

2.2.4 ДНКМ 16

Длины связей $L_k(a)$, $k = 1, \dots, 20$, для ДНКМ 16 выражены следующим образом:

$$\begin{aligned}
L_1 = L_4 &= h + \sqrt{2}a, & L_2 = L_3 &= h - \sqrt{2}a, \\
L_5 = L_7 &= \sqrt{4a^2 + 2h^2} \approx \sqrt{2}h + \frac{2a^2}{\sqrt{2}h}, \\
L_6 &= \sqrt{2}h - 2a, & L_8 &= \sqrt{2}h + 2a, \\
L_9 &= L_{10} = L_{11} = L_{12} = 2h, \\
L_{13} = L_{15} = L_{16} = L_{18} &= \sqrt{(h - \sqrt{2}a)^2 + 4h^2} \approx \\
&\approx \sqrt{5}h - \frac{\sqrt{2}a}{\sqrt{5}} + \frac{4a^2}{(\sqrt{5})^3h} + \frac{4\sqrt{2}a^3}{(\sqrt{5})^5h^2}, \\
L_{14} = L_{17} = L_{19} = L_{20} &= \sqrt{(h + \sqrt{2}a)^2 + 4h^2} \approx \\
&\approx \sqrt{5}h + \frac{\sqrt{2}a}{\sqrt{5}} + \frac{4a^2}{(\sqrt{5})^3h} - \frac{4\sqrt{2}a^3}{(\sqrt{5})^5h^2}.
\end{aligned} \tag{2.27}$$

Принимая во внимание эти выражения, гамильтониан (2.14) с точностью до членов четвертого порядка принимает вид

$$H = \frac{m\dot{a}^2}{2} + 2(k_1 + k_2 + \frac{2}{5}k_4)a^2 + \left(2\beta_1 + 4\beta_2 + \frac{4}{25}\beta_4 + \frac{k_2}{h^2}\right)a^4. \tag{2.28}$$

Тогда уравнение движения имеет следующий вид

$$m\ddot{a} = -4(k_1 + k_2 + \frac{2}{5}k_4)a - \left(8\beta_1 + 16\beta_2 + \frac{16}{25}\beta_4 + \frac{4k_2}{h^2}\right)a^3. \tag{2.29}$$

Частотная характеристика для ДНКМ 16 запишется как

$$\omega^2 \approx \frac{4}{m}(k_1 + k_2 + \frac{2}{5}k_4) + \frac{3}{4m}\left(8\beta_1 + 16\beta_2 + \frac{16}{25}\beta_4 + \frac{4k_2}{h^2}\right)A^2. \tag{2.30}$$

Эта частотная характеристика не является функцией k_3 и β_3 .

Отметим интересный факт, который требует объяснения, а именно то, что в пределе $A \rightarrow 0$ значения частот ДНКМ 1 и 16 совпадают, как следует из сравнения уравнений (2.18) и (2.30). То же самое можно заключить относительно частот ДНКМ 6 и 9, как видно из сравнения уравнений (2.22) и (2.26). Всё дело в том, что, как показано на рисунке 2.2(б), ДНКМ 16 - это сумма ДНКМ 1 и её

поворота на 90° . А как видно из рисунка 2.2(в), ДНКМ 6 - это сумма ДНКМ 9 и её поворота на 90°

2.3 Сравнение аналитических и численных результатов

Численно найденные частоты ДНКМ в зависимости от амплитуды сравниваются на рисунке 2.4 с аналитическими оценками, полученными в кубическом приближении, см. уравнения (2.18), (2.22), (2.26), и (2.30). Горизонтальные пунктирные линии показывают верхнюю границу спектра фононов, определяемую уравнением (2.7).

Параметры модели выбраны так, что все ДНКМ имеют одинаковую частоту $\omega = 3$ в пределе малой амплитуды, а именно: $k_1 = k_2 = 1$, $k_3 = 4/5$ и $k_4 = 5/8$. Фактически, параметр k_3 не влияет на частоты ДНКМ 1, 6, 9 и 16, поскольку эти моды не деформируют связи между третьими соседями. Как видно из представленных данных, кубическая аппроксимация даёт достаточно хороший результат для амплитуд до $A = 0,3$.

2.4 Выводы по главе

Была проанализирована квадратная β -ФПУЦ решетка с числом взаимодействий до четырех соседей. Это исследование является продолжением работы [161], в которой рассматривались только взаимодействия первого и второго соседей.

Было получено дисперсионное соотношение для решетки с линейными константами жесткости k_l , $l = 1, \dots, 4$, удовлетворяющее физически обоснованному ограничению (1.3). Было обнаружено, что в зависимости от значений k_l при ограничении уравнения (1.3) максимальная частота фононов может быть достигнута в точке X или M первой зоны Бриллюэна, но не в точке Z, см. рисунок 2.2(а). Частоты фононов в точках X и M не зависят от жесткости k_3 .

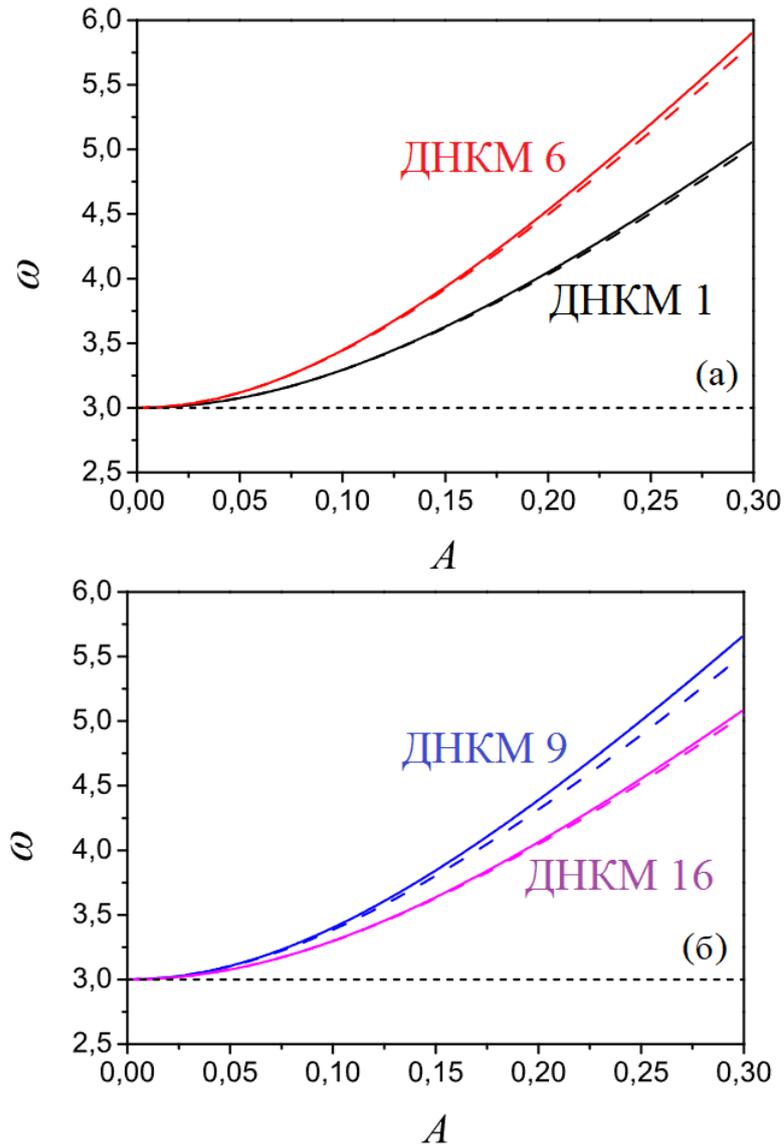


Рисунок 2.4 — Амплитудно-частотные характеристики для ДНКМ (а) 1 и 6, (б) 9 и 16. Сплошными линиями показана аналитическая оценка с использованием кубического приближения, см. уравнения (2.18), (2.22), (2.26) и (2.30), в то время как пунктирные линии показывают численный (точный) результат. Горизонтальная линия показывает максимальную частоту фононов. Для выбранных параметров $k_1 = k_2 = 1$, $k_3 = 4/5$ и $k_4 = 5/8$, частоты ДНКМ имеют одинаковую частоту $\omega = 3$ в пределе малых амплитуд

Если $k_4 = 0$, то максимальная частота фононов может быть достигнута только в точке X, а при $k_4 > 0$ либо в точке X, либо в точке M.

Были проанализированы свойства всех однокомпонентных зонно-граничных ДНКМ в квадратной решетке (см. рисунок 2.1)). Построение ДНКМ, как говорилось выше, опирается только на симметрию квадратной решетки, ввиду этого ДНКМ являются точными решениями в решетках с любыми межчастичными взаимодействиями и для произвольных амплитуд колебаний [159]. Однако свойства ДНКМ, например, частота их колебаний зависит от межчастичного потенциала, и здесь рассматривался потенциал β -ФПУЦ. Частотная характеристика ДНКМ 1, 6, 9 и 16 была получена с использованием кубического приближения и сравнена с численными результатами, см. раздел 2.3 и рисунок 2.4. Аналитические оценки хорошо согласуются с численными результатами в диапазоне амплитуд ДНКМ до $A = 0,3$. Обратите внимание, что ДНКМ 1 и 16 имеют волновой вектор в точке X, а ДНКМ 6 и 9 - в точке M первой зоны Бриллюэна. Нелинейные частоты ДНКМ 1 и 16 зависят от k_1 , k_2 и k_4 , но не от k_3 , поскольку эти моды не деформируют связи между третьими соседями. Частоты ДНКМ 6 и 9 зависят только от k_1 и k_4 , поскольку они не деформируют связи между вторым и третьим соседями.

Глава 3. Супратрансмиссия в квадратной решетке β -ФПУЦ с дальнодействием

В данной главе анализируется квадратная решетка с учетом взаимодействий между первыми и вторыми соседями, то есть эффект дальнодействия не учитывается, см. рисунок 3.1. Это связано с тем, что передача энергии квадратной решетке от пары частиц и от плотноупакованного ряда частиц, совершающих вынужденные колебания, ранее не рассматривалась. Первые работы в этом направлении естественно выполнить для простейшей модели квадратной решетки.

Ниже, в разделе 3.1, представлена модель квадратной решетки без учета дальнодействия, далее в разделе 3.2 приводятся дисперсионные соотношения для фоновых волн в квадратной решетке без учета дальнодействия, которые по-сути являются частным случаем дисперсионных соотношений, полученных в главе 2 для решетки с дальнодействием. Затем, в разделе 3.3 моделируется процесс передачи энергии квадратной решетке β -ФПУЦ от пары соседних частиц, совершающих вынужденные колебания по гармоническому закону, см. рисунок 3.2(а). Далее, в разделе 3.4 рассматривается вынужденное движение одного плотноупакованного ряда квадратной решетки, см. рисунок 3.2(б). Анализируется влияние амплитуды и частоты вынужденных колебаний на передачу энергии решетке. Определяется роль дискретных бризеров в данном процессе. В разделе 2.4 изложены выводы и описаны задачи для будущих исследований.

3.1 Описание модели

Энергия может передаваться решетке либо кинематическим, либо силовым воздействием [162], и в данном исследовании используется первый подход. Две частицы в центре расчетной ячейки совершают вынужденное движение следующим образом, см. рисунок 3.2(а)

$$\begin{aligned} u_{\frac{I}{2}, \frac{J}{2}} &= A \sin(\Omega \omega_{\max} t), & v_{\frac{I}{2}, \frac{J}{2}} &= 0, \\ u_{\frac{I}{2}+1, \frac{J}{2}} &= -A \sin(\Omega \omega_{\max} t + \phi), & v_{\frac{I}{2}+1, \frac{J}{2}} &= 0, \end{aligned} \quad (3.1)$$

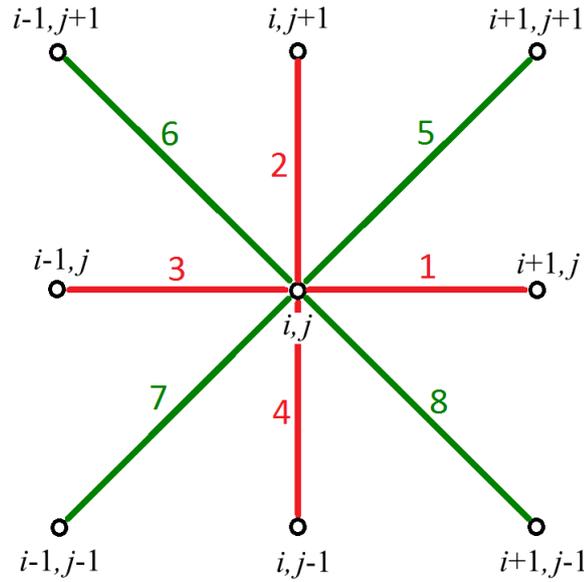


Рисунок 3.1 — Квадратная решетка частиц с нумерацией узлов индексами i, j . Рассматриваются связи только с ближайшими (красные линии) и вторыми (зелёные линии) соседями. Показана принятая нумерация связей

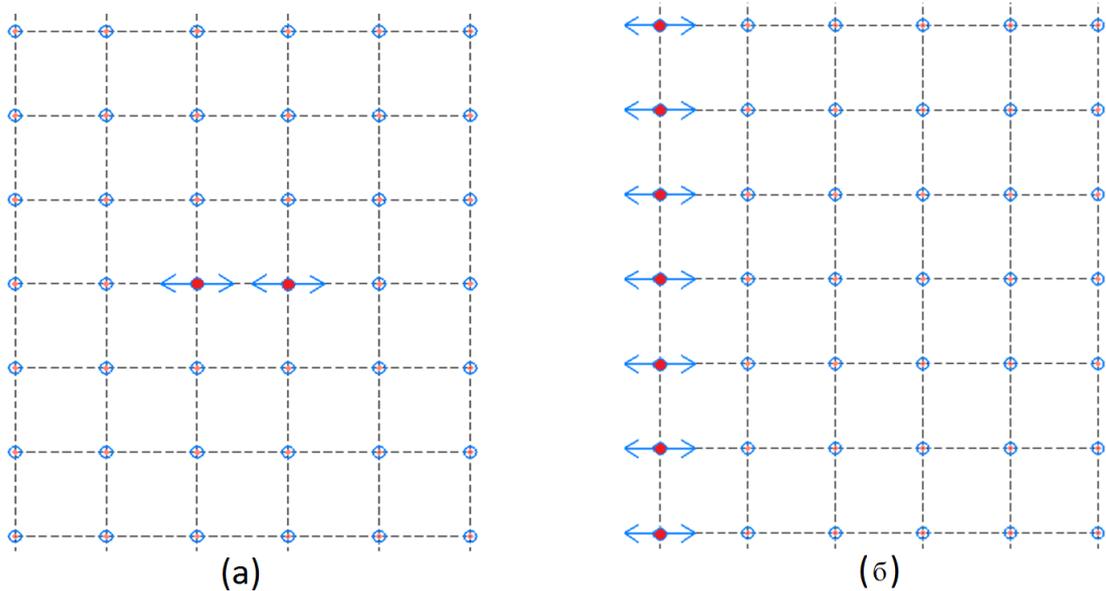


Рисунок 3.2 — Два способа внешнего воздействия на квадратную решетку, исследуемые в данной работе: (а) пара атомов совершает вынужденные колебания в противофазе или с некоторым сдвигом фазы по гармоническому закону; (б) плотноупакованный ряд частиц движется вынужденно по гармоническому закону

где A и $\Omega\omega_{\max}$ - амплитуда и частота колебаний, соответственно. Параметр ϕ управляет относительным сдвигом фаз для двух колеблющихся частиц; при $\phi = 0$ частицы колеблются в противофазе. Рассмотрение не одной, а двух частиц, совершающих вынужденные колебания, позволяет изучить влияние сдвига фазы и получить асимметричный поток энергии в решетку.

Две движущиеся частицы рассматриваются как источник энергии, а полная энергия решетки H , определяемая уравнением (3.2), вычисляется как функция времени для различных параметров вынужденного движения A , Ω и ϕ , входящих в уравнение (3.1).

Гамильтониан квадратной решетки без учета дальнего действия имеет вид

$$H = K + P_1 + P_2 = \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \frac{m}{2} |\dot{\mathbf{r}}_{i,j}|^2 + \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \left(\sum_{k=1}^2 \varphi_1(|\mathbf{R}_{i,j,k}|) + \sum_{l=5}^6 \varphi_2(|\mathbf{R}_{i,j,l}|) \right), \quad (3.2)$$

где K - кинетическая энергия, а P_1 , P_2 - потенциальные энергии связей между первым и вторым соседями соответственно. Используется следующее обозначение $\dot{\mathbf{r}}_{i,j} = d\mathbf{r}_{i,j}/dt$ для скорости частицы. φ_1 и φ_2 - потенциалы β -ФПУЦ для взаимодействий между первыми и вторыми соседями, заданные выражением (1.2). В гамильтониан (3.2) входят вектора, соединяющие частицу i,j с первыми и вторыми соседями:

$$\begin{aligned} \mathbf{R}_{i,j,1} &= \mathbf{r}_{i+1,j} - \mathbf{r}_{i,j}, & \mathbf{R}_{i,j,2} &= \mathbf{r}_{i,j+1} - \mathbf{r}_{i,j}, \\ \mathbf{R}_{i,j,3} &= \mathbf{r}_{i-1,j} - \mathbf{r}_{i,j}, & \mathbf{R}_{i,j,4} &= \mathbf{r}_{i,j-1} - \mathbf{r}_{i,j}, \\ \mathbf{R}_{i,j,5} &= \mathbf{r}_{i+1,j+1} - \mathbf{r}_{i,j}, & \mathbf{R}_{i,j,6} &= \mathbf{r}_{i-1,j+1} - \mathbf{r}_{i,j}, \\ \mathbf{R}_{i,j,7} &= \mathbf{r}_{i-1,j-1} - \mathbf{r}_{i,j}, & \mathbf{R}_{i,j,8} &= \mathbf{r}_{i+1,j-1} - \mathbf{r}_{i,j}. \end{aligned} \quad (3.3)$$

Полная энергия частицы i,j определяется следующим образом

$$e_{i,j} = \frac{m}{2} |\dot{\mathbf{r}}_{i,j}|^2 + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^4 \varphi_1(|\mathbf{R}_{i,j,k}|) + \frac{1}{2} \sum_{l=5}^8 \varphi_2(|\mathbf{R}_{i,j,l}|). \quad (3.4)$$

Гамильтониану (3.2) соответствуют следующие уравнения движения:

$$\begin{aligned} m\ddot{u}_{i,j} &= \sum_{k=1}^4 D_1 R_{i,j,k,x} + \sum_{l=5}^8 D_2 R_{i,j,l,x}, \\ m\ddot{v}_{i,j} &= \sum_{k=1}^4 D_1 R_{i,j,k,y} + \sum_{l=5}^8 D_2 R_{i,j,l,y}, \end{aligned} \quad (3.5)$$

где

$$D_1 = \frac{\varphi'_1(|\mathbf{R}_{i,j,k}|)}{|\mathbf{R}_{i,j,k}|}, \quad D_2 = \frac{\varphi'_2(|\mathbf{R}_{i,j,l}|)}{|\mathbf{R}_{i,j,l}|}. \quad (3.6)$$

Периодические граничные условия, используемые при моделировании, означают, что $\mathbf{r}_{i,j} = \mathbf{r}_{i+I,j} = \mathbf{r}_{i,j+J}$. Размер ячейки моделирования задается равным $I = J = 500$. Время моделирования выбирается таким образом, чтобы возмущение от частиц, совершающих вынужденное движение, не успевало достичь границ ячейки моделирования.

Очевидно, что приведённые в данном разделе соотношения являются частным случаем модели с дальнодействием (см. главу 2) и могут быть получены из неё полагая $k_3 = k_4 = 0$.

Параметры модели задаются следующим образом: масса частиц нормируется выбором единицы времени $m = 1$; параметр решетки нормируется выбором единицы расстояния $h = 1$; линейная жесткость связей между ближайшими частицами нормируется выбором единицы энергии $k_1 = 1$. Линейная жесткость связей между вторыми соседями задается равной $k_2 = 0,9$, поскольку жесткость химических связей в кристаллах уменьшается с расстоянием. Для связей всех типов приняты равные значения нелинейной жесткости, $\beta_1 = \beta_2 = 10$.

3.2 Дисперсионное соотношение фононных волн в квадратной решетке без учета дальнодействия

Дисперсионные соотношения, приводимые в данном разделе, были представлены в работе [159], здесь они будут получены как частный случай дисперсионных соотношений для решетки с дальнодействием, выведенные в разделе 2.1.

Для малых перемещений, $u_{i,j}, v_{i,j} \ll h$, можно вывести линеаризованные уравнения движения частиц квадратной решетки. Они могут быть получены из уравнений (2.1) и (2.2) просто полагая $k_3 = k_4 = 0$. В результате получим

$$\begin{aligned}
m\ddot{u}_{i,j} &= k_1(u_{i-1,j} - 2u_{i,j} + u_{i+1,j}) + \frac{k_2}{2}(u_{i-1,j-1} - 2u_{i,j} + u_{i+1,j+1}) \\
&+ \frac{k_2}{2}(v_{i-1,j-1} - 2v_{i,j} + v_{i+1,j+1}) + \frac{k_2}{2}(u_{i-1,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i+1,j-1}) \\
&- \frac{k_2}{2}(v_{i-1,j+1} - 2v_{i,j} + v_{i+1,j-1}), \\
m\ddot{v}_{i,j} &= k_1(v_{i,j-1} - 2v_{i,j} + v_{i,j+1}) + \frac{k_2}{2}(u_{i-1,j-1} - 2u_{i,j} + u_{i+1,j+1}) \\
&+ \frac{k_2}{2}(v_{i-1,j-1} - 2v_{i,j} + v_{i+1,j+1}) - \frac{k_2}{2}(u_{i-1,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i+1,j-1}) \\
&+ \frac{k_2}{2}(v_{i-1,j+1} - 2v_{i,j} + v_{i+1,j-1}). \quad (3.7)
\end{aligned}$$

Эти уравнения допускают решения в виде бегущих фононных волн, $u_{i,j} = U \exp[i(qi + sj - \omega t)]$, $v_{i,j} = V \exp[i(qi + sj - \omega t)]$, где U, V - компоненты волнового вектора, i - мнимая единица, q, s - волновые числа, а ω - частота. Подстановка этих выражений в уравнение (3.7) дает следующее дисперсионное соотношение

$$\omega_{1,2}^2(q, s) = \frac{\gamma + \delta + \eta + \theta \pm \sqrt{(\gamma - \delta)^2 + (\eta - \theta)^2}}{2m}, \quad (3.8)$$

где значения γ, δ, η и θ находятся из уравнений

$$\begin{aligned}
\gamma &= 4k_1 \sin^2 \frac{q}{2}, & \delta &= 4k_1 \sin^2 \frac{s}{2}, \\
\eta &= 4k_2 \sin^2 \frac{q+s}{2}, & \theta &= 4k_2 \sin^2 \frac{q-s}{2}. \quad (3.9)
\end{aligned}$$

Для волновых чисел $(q, s) = (\pm\pi, 0)$ и $(0, \pm\pi)$ частоты фононов представлены следующим выражением

$$\omega_1 = 2\sqrt{(k_1 + k_2)/m}, \quad \omega_2 = 2\sqrt{k_2/m}, \quad (3.10)$$

а для волновых чисел $(q, s) = (\pm\pi, \pm\pi)$ следующим

$$\omega_1 = \omega_2 = 2\sqrt{k_1/m}. \quad (3.11)$$

Частота ω_1 , представленная первой формулой в уравнении (3.10), - это максимальная частота фононов. Для параметров модели, принятых в этом исследовании, $k_1 = 1$, $k_2 = 0,9$, $m = 1$, можно найти следующее значение максимальной частоты фононов в рассматриваемой решетке

$$\omega_{\max} = 2,757. \quad (3.12)$$

3.3 Передача энергии квадратной решетке от пары колеблющихся частиц

Несколько примеров графиков зависимости $H(t)/N$, где $N = IJ$ - количество частиц в расчетной ячейке, показаны на рисунке 3.3. На (а) амплитуда внешнего воздействия равна $A = 0,02$, а на (б) $A = 0,09$; сдвиг фазы равен $\phi = 0$ в обоих случаях. Различные кривые показывают результаты для разных значений Ω , как указано в легенде. Значению $\Omega = 1$ соответствует внешнее воздействие на частоте равной верхнему краю фононного спектра.

Как видно из рисунка 3.3, существует критическое значение $\Omega = \Omega^*$, выше которого энергия перестает поступать в решетку и $H(t)$ достигает насыщения. При $\Omega \leq \Omega^*$ энергия решетки увеличивается со временем, что означает, что энергия постоянно передается от движущихся частиц к решетке. На панелях (а) и (б) критическими значениями являются $\Omega^* = 1,001$ и $\Omega^* = 1,017$ соответственно. По мере того, как Ω уменьшается и приближается к фононной зоне, скорость потока энергии к решетке от движущихся частиц увеличивается.

Критические значения Ω^* для различных амплитуд возбуждения A и различных сдвигов фаз ϕ представлены на рисунке 3.4. Супратрансмиссия происходит выше фононного диапазона и ниже критических значений Ω^* . Функция $\Omega^*(A)$ растет и не показывает четкой зависимости от ϕ , например, для $A = 0,07$ и $0,08$ критическое значение Ω^* уменьшается с увеличением ϕ , но для $A = 0,10$ и $0,11$ критическое значение Ω^* растёт с увеличением ϕ .

Интересно проанализировать механизм передачи энергии решетке. Для этой цели распределение плотности энергии по решетке во время моделирования $t = 250$ показано на рисунках 3.5, 3.6, и 3.7 для амплитуд возбуждения $A = 0,07$, $0,09$ и $0,11$ соответственно. Во всех случаях сдвиг фазы равен $\phi = 0$,

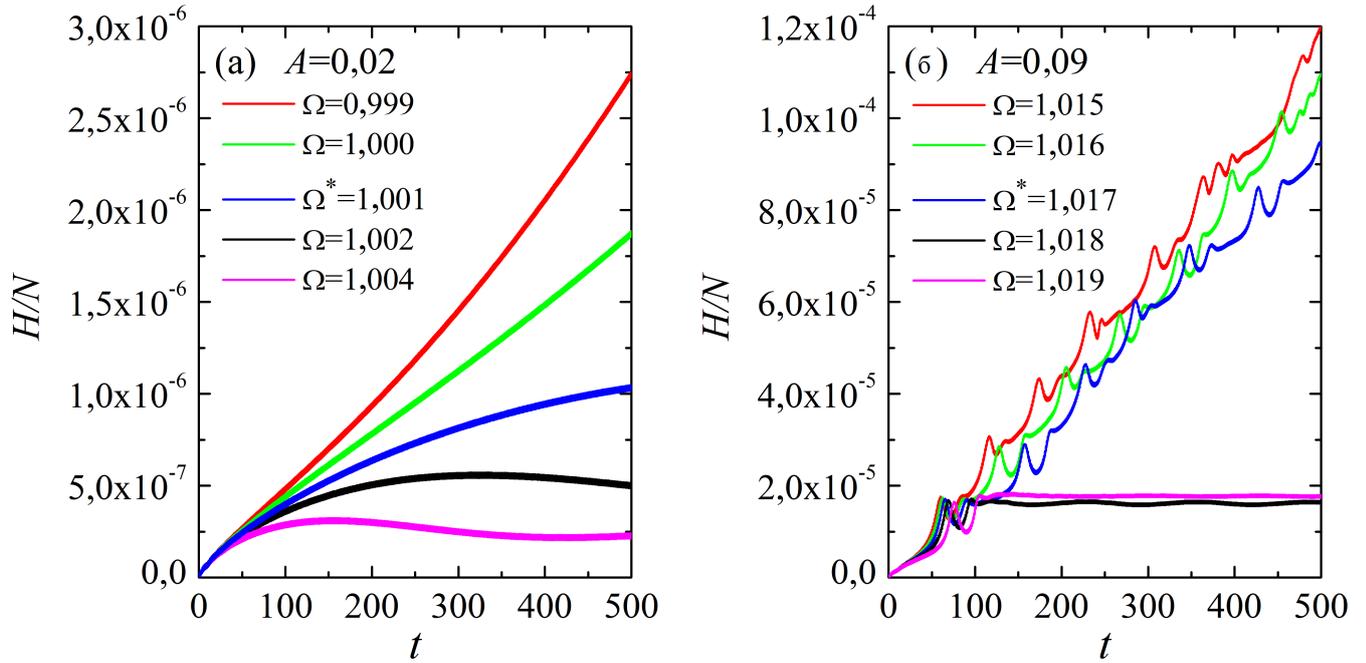


Рисунок 3.3 — Зависимость полной энергии частиц решетки, нормированной на число частиц, от времени для (а) $A=0,02$ и (б) $A=0,09$. Результаты для разных значений Ω показаны кривыми разных цветов в соответствии с условными обозначениями. Напомним, что согласно уравнению (3.1) случай $\Omega = 1$ соответствует возбуждению с частотой на верхнем краю фононного спектра. Две приводимые в движение частицы колеблются в противофазе, поскольку задано значение $\phi = 0$

и рассматриваются различные значения параметра Ω , управляющего частотой внешнего воздействия, как указано на каждой панели. Две возбуждаемые частицы показаны черным цветом, они расположены в центре рисунка. Остальные частицы окрашены в соответствии с их суммарной энергией с градиентом от белого к красному. Белый цвет соответствует нулевой энергии, а красный - максимальной энергии.

Панели (а) на рисунках 3.5, 3.6 и 3.7 представляют результаты для Ω близких к Ω^* , в то время как на (б) и (в) рассматриваются меньшие значения Ω , но выше фононной полосы. Можно видеть, что на рисунке (а) ДБ периодически испускаются источником энергии и продолжают свое движение в разные стороны параллельно оси x . Поток энергии к решетке на рисунке (а) симметричен относительно вертикальной линии, проходящей между двумя движущимися частицами. На (б) и особенно на (в), при меньших значениях Ω , испускание ДБ является менее периодичным и менее симметричным. Можно сделать вы-

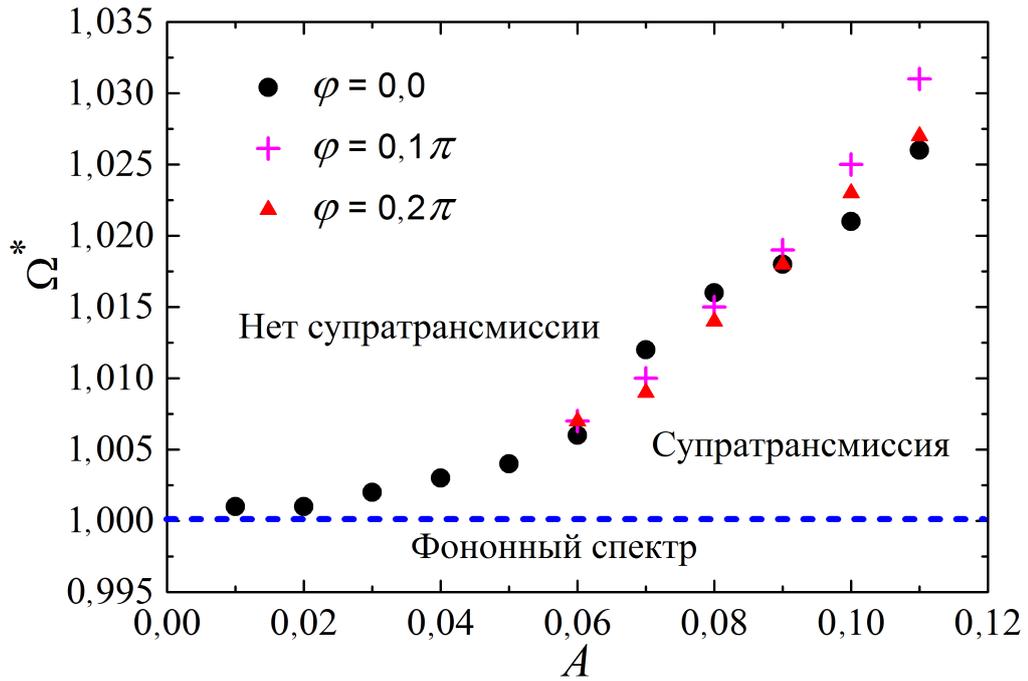


Рисунок 3.4 — Критическое значение Ω^* как функция амплитуды возбуждения A для различных значений ϕ , указанных в легенде

вод, что при меньших значениях Ω симметричное излучение энергии становится нестабильным, даже если две движущиеся частицы движутся строго в противофазе, то есть симметрично. Для $\phi \neq 0$, как и ожидалось, излучение энергии движущимися частицами асимметрично даже для Ω очень близкого к Ω^* .

Как видно из рисунков 3.5, 3.6 и 3.7, в случае когда Ω лишь немного меньше, чем Ω^* , супратрансмиссия происходит посредством симметричного и квазипериодического излучения ДБ, удаляющихся от источника энергии с четко определенной скоростью. На рисунке 3.8 скорость ДБ $V_{\text{ДБ}}$ показана как функция амплитуды вынужденного движения частиц A для частоты Ω немного ниже Ω^* . Видно, что скорость увеличивается с увеличением A .

Когда Ω лишь немного ниже Ω^* , ДБ, излучаемые источником энергии, перемещаются параллельно оси x . По мере уменьшения Ω излучение ДБ может происходить вдоль оси y , как показано на рисунке 3.5(б), или может излучаться в разных направлениях, как показано на рисунке 3.5(в).

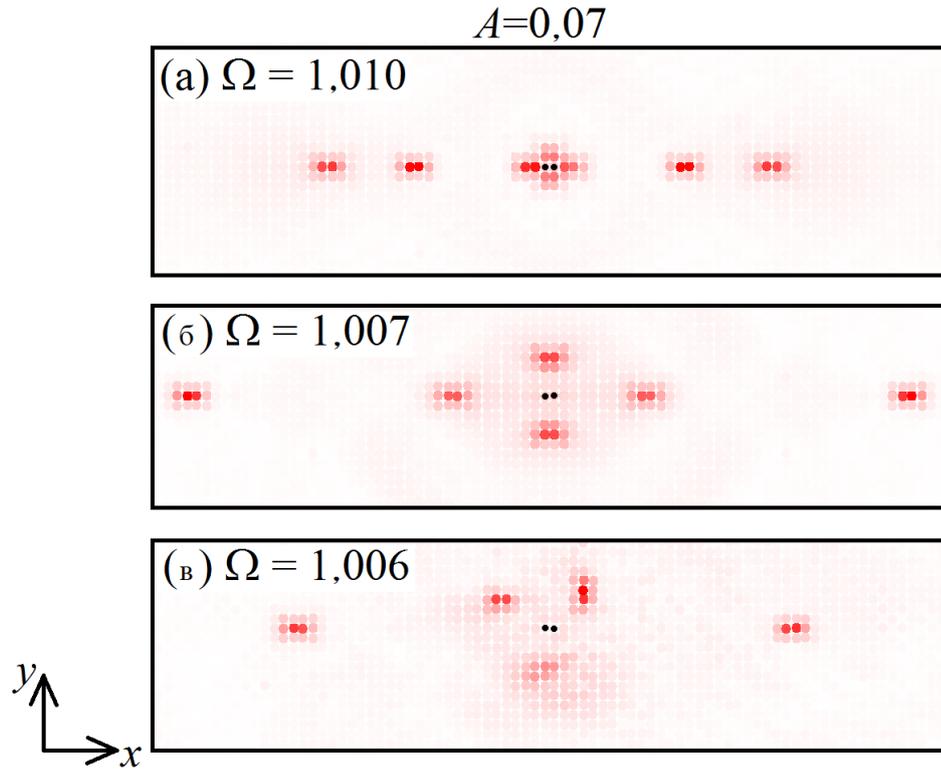


Рисунок 3.5 — Распределение энергии в вычислительной ячейке в момент времени $t = 250$ для вынужденного движения пары частиц с амплитудой $A = 0,07$, сдвигом фазы $\varphi = 0$ и значением Ω , указанным на каждой панели.

Критическое значение частоты составляет $\Omega^* = 0,012$. Интенсивность красного цвета увеличивается с увеличением суммарной энергии частиц. Можно видеть ДБ, излучаемые двумя движущимися частицами, которые показаны черным цветом в середине рисунков

3.4 Передача энергии квадратной решетке от ряда колеблющихся частиц

В данном разделе, так же как и в предыдущем, применяется кинематическое внешнее воздействие на один ряд частиц. В вычислительной ячейке, включающей $I \times J$ частиц, ряд частиц с $i = 0$ совершает вынужденное движение по синусоидальному закону в направлении оси x , см. рисунок 3.2(б),

$$u_{0,j}(t) = A \sin(\Omega t), \quad v_{0,j}(t) = 0, \quad j = 0, \dots, J - 1, \quad (3.13)$$

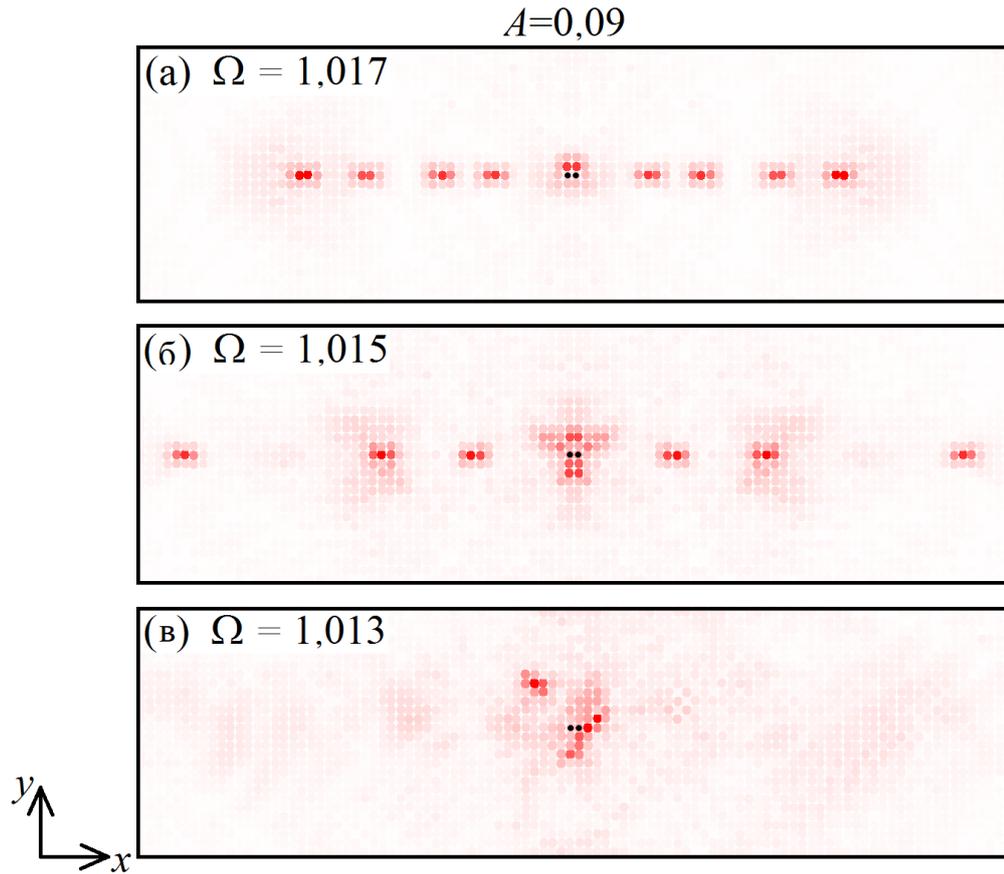


Рисунок 3.6 — То же, что и на рисунке 3.5, но для амплитуды возбуждения $A = 0,09$. В этом случае критическая частота равна $\Omega^* = 1,018$

где A и Ω - это амплитуда и частота вынужденного движения. Все частицы с $i \neq 0$ при $t = 0$ находятся в своих равновесных положениях и имеют нулевую начальную скорость, $\dot{u}_{i,j}(0) = \dot{v}_{i,j}(0) = 0$, для $i \neq 0$.

Будут изучены относительно небольшие значения амплитуды вынужденных колебаний A , при этом будем в основном интересоваться частотами вынужденного движения внутри фонованного спектра, $0 < \Omega \leq \omega_{\max}$, хотя частотам выше фонованного диапазона также будет уделено внимание.

Решается задача о передаче энергии решетке от ряда вынужденно колеблющихся частиц, и мощность этого источника, то есть энергия передаваемая решетке за единицу времени, определяется для различных значений A и Ω .

В пределе малых значений амплитуды вынужденного движения, $A \ll h$, задачу можно решить аналитически, рассмотрев её как одномерную, считая, что $u_{i,j} = u_i$, $v_{i,j} = 0$. В таком предположении уравнения (3.7) сводятся к следующему уравнению движения относительно $u_i(t)$:

$$m\ddot{u}_i = (k_1 + k_2)(u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}). \quad (3.14)$$

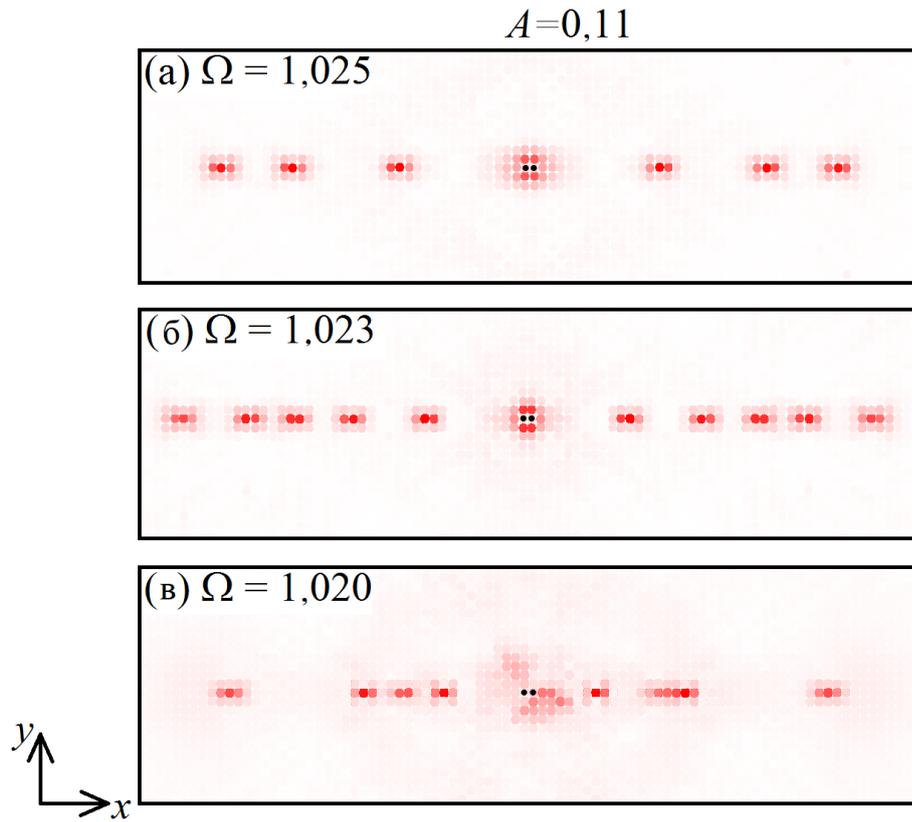


Рисунок 3.7 — То же, что и на рисунке 3.5, но для амплитуды возбуждения $A = 0,11$. В этом случае критическая частота равна $\Omega^* = 1,026$

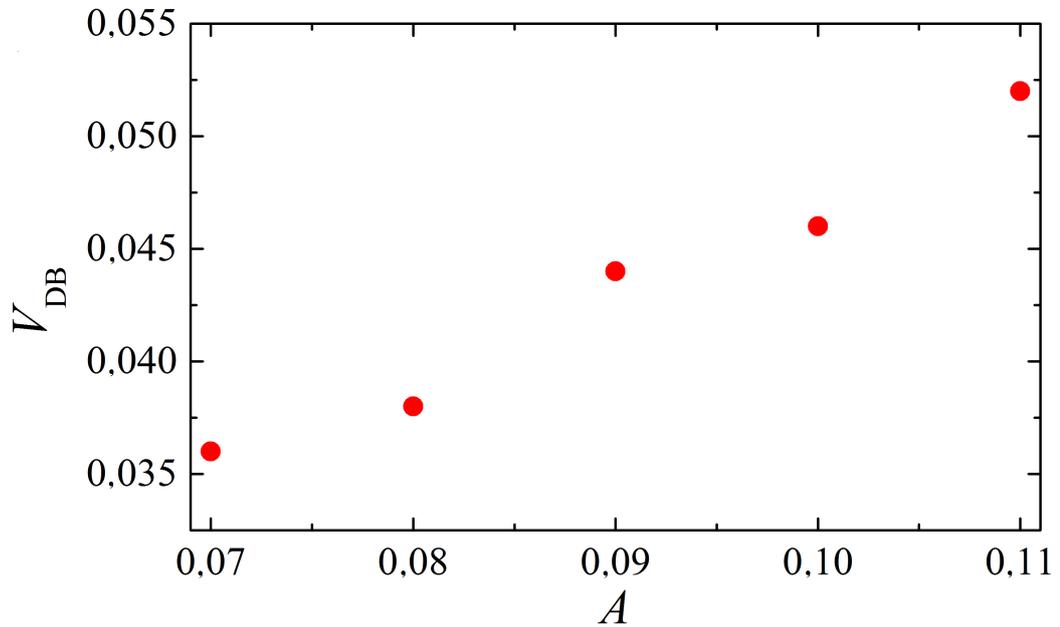


Рисунок 3.8 — Скорость первого ДБ, испущенного парой частиц, совершающих вынужденное движение с амплитудой A , частотой Ω немного ниже Ω^* и сдвигом фазы $\phi = 0$.

Фонон с амплитудой A и частотой Ω имеет плотность энергии

$$e = \frac{1}{2}mA^2\Omega^2, \quad (3.15)$$

при этом зависимость Ω от волнового числа q имеет вид

$$\Omega^2 = \frac{4(k_1 + k_2)}{m} \sin^2 \frac{q}{2}, \quad (3.16)$$

что получается из уравнений (3.8) и (3.9) при $s = 0$.

Далее вычислим групповую скорость фононов

$$v(q) = h \frac{d\omega}{dq} = \frac{h}{2} \sqrt{\frac{k_1 + k_2}{m} \frac{\sin q}{\sin \frac{q}{2}}}. \quad (3.17)$$

Исключив с помощью дисперсионного соотношения (3.16) волновое число q из уравнения (3.17), групповую скорость можно записать как функцию частоты Ω .

Фонон, распространяющийся от источника энергии с групповой скоростью v в вычислительной ячейке с поперечным размером J , за время t передает решетке энергию

$$E(A, \Omega) = tJev(\Omega) = tJv(\Omega) \frac{1}{2} mA^2 \Omega^2. \quad (3.18)$$

Мощность такого источника энергии будет

$$W(A, \Omega) = \frac{dE}{dt} = Jev(\Omega) = \frac{J}{2} mA^2 \Omega^2 v(\Omega). \quad (3.19)$$

Анализ зависимости (3.19) показывает, что мощность источника отлична от нуля в диапазоне частот возбуждения $0 < \Omega < \omega_{\max}$, см. рисунок 3.9, а вне этого диапазона она равна нулю, поскольку фонон не испускается при частотах внешнего воздействия вне фононного спектра. Этот вывод справедлив для гармонического приближения, но с ростом амплитуды внешнего воздействия A наблюдается отклонение мощности источника от формулы (3.19) за счет влияния нелинейности взаимодействия между частицам.

Из рисунка 3.9 видно, что с увеличением частоты внешнего воздействия мощность источника сначала возрастает, а потом убывает до нуля при $\Omega = \omega_{\max}$. Такое поведение объясняется тем, что при малых Ω мощность растет квадратично, поскольку групповая скорость длинных волн почти не зависит от длины волны, а энергия волн пропорциональна Ω^2 . Для коротких волн W

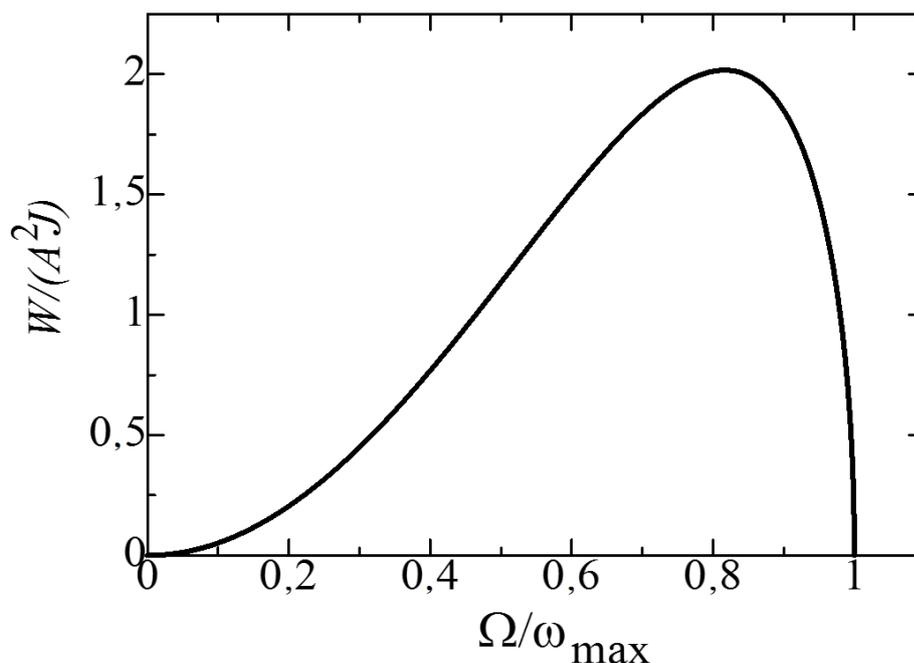


Рисунок 3.9 — Нормированная мощность источника энергии в виде ряда частиц, совершающих вынужденные колебания по закону (3.13), как функция частоты внешнего воздействия Ω , нормированной на максимальную частоту фононного спектра. Данный результат получен в гармоническом приближении и выражен уравнением (3.19)

быстро падает с увеличением Ω , поскольку их групповая скорость стремится к нулю при приближении к границе первой зоны Бриллюэна.

Проведённые численные расчёты с учетом нелинейности показали, что, во-первых, мощность в диапазоне $0 < \Omega < \omega_{\max}$ оказывается выше, чем предсказывает линейная теория и, во вторых, положительная мощность источника наблюдается также в узком диапазоне частот выше фононного спектра, что и является эффектом супратрансмиссии [85–87]. Чем выше амплитуда A , тем шире интервал частот выше фононной полосы, где $W > 0$.

Как сказано выше, особый интерес представляет передача энергии на частотах внутри фононного спектра. Покажем как энергия передается решетке в случае частот внешнего воздействия $0,9\omega_{\max}$ и $0,97\omega_{\max}$, см. рисунок 3.10(а) и (б), соответственно. И в том и в другом случае частота лежит в пределах фононного спектра. В обоих случаях амплитуда внешнего воздействия составляет $A = 0,05$.

Как видно из рисунка 3.10(а) и (б), несмотря на то, что частота внешнего воздействия в обоих случаях находится в фононном спектре, распространение

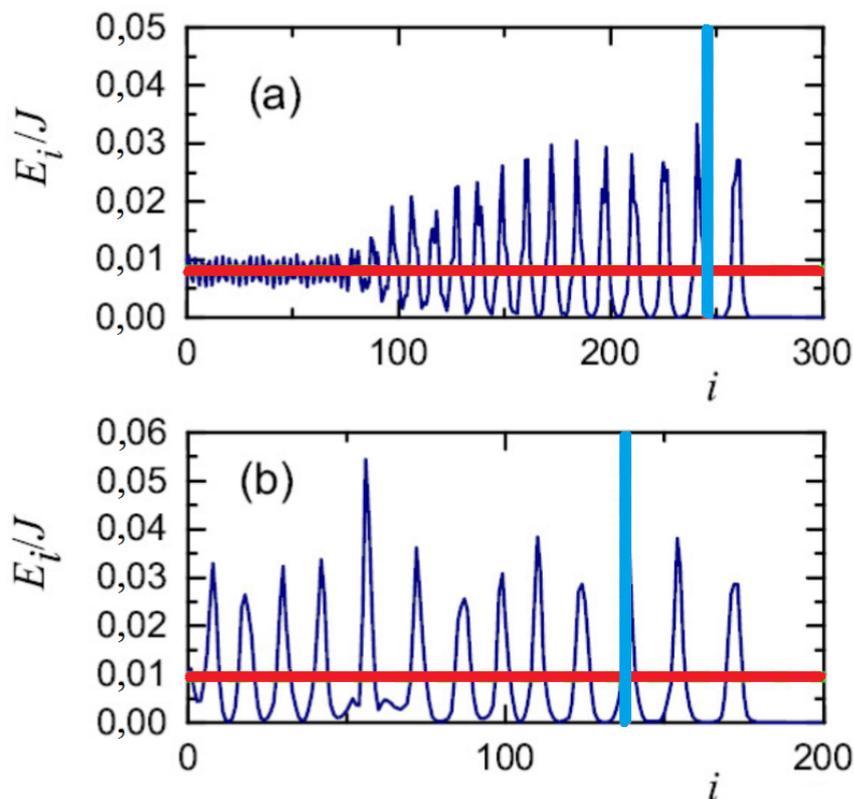


Рисунок 3.10 — Плотность энергии как функция номера ряда частиц i в момент времени $t = 400$. Атомный ряд, совершающий вынужденное движение, находится слева при $i = 0$. Амплитуда вынужденного движения равна $A = 0,05$, а частота (а) $\Omega = 0,9\omega_{\max}$ и (б) $\Omega = 0,97\omega_{\max}$. Представлены результаты для одномерной модели ($J = 1$). Горизонтальные красные линии показывают плотность энергии фона: (а) $e = 0,0081$ и (б) $e = 0,0094$, рассчитанные по (3.15). Предполагаемое из линейной теории положение фронта волны, рассчитанное из (3.17), показано вертикальной голубой линией.

На (а), излучаемая фононная волна неустойчива, в результате чего она распадается на волновые пакеты с основной частотой колебаний $0,9292\omega_{\max}$, то есть внутри фононного спектра. На (б) излучаются ДБ с основной частотой колебаний $1,001\omega_{\max}$, то есть выше фононного спектра

энергии в системе происходит по-разному, причем, различия носят качественный характер. На (а) источник энергии испускает бегущую волну, которая через какое-то время распадается на волновые пакеты из-за модуляционной неустойчивости. На (б) энергия передается решетке периодически испускаемыми локализованными возбуждениями. Расчет частоты колебаний частиц в пределах данных локализованных возбуждений показал, что на (б) они представляют собой ДБ, поскольку их основная частота колебаний превышает частоту внешнего воздействия, $\Omega = 0,97\omega_{\max}$, и лежит выше фононного спектра, составляя $1,001\omega_{\max}$. На (а) волновые пакеты имеют основную частоту колебаний $0,9292\omega_{\max}$, что также превышает частоту внешнего воздействия $\Omega = 0,9\omega_{\max}$, но лежит в пределах фононного спектра.

Плотность энергии, испускаемой источником, можно оценить в гармоническом приближении с помощью уравнения (3.15); она показана горизонтальными красными линиями на рисунке 3.10. Скорость распространения волны, согласно линейной теории, оценивается по уравнению (3.17). Вертикальные голубые линии показывают фронт волны по этой оценке. Видно, что локализованные возбуждения на (а) и (б) движутся быстрее, чем предсказывает линейная теория, обгоняя вертикальную голубую линию. Тот факт, что частота волновых пакетов на (а) и ДБ на (б) выше частоты внешнего воздействия имеет простое объяснение. Потенциал β -ФПУЦ, используемый в модели, имеет жесткий тип нелинейности и рост амплитуды локализованных волн по сравнению с фононной волной приводит к росту частоты колебаний.

Таким образом, установлено, что формирование ДБ источником энергии возможно и в том случае, когда частота внешнего воздействия находится внутри, но недалеко от края фононного спектра. Этот факт дополняет наши представления о явлении супратрансмиссии, которое предполагает испускание ДБ при воздействии на решетку на частотах вне фононного спектра.

Численно исследовался и двумерный случай, когда размер вычислительной ячейки составлял $I = 200$ и $J = 160$. Параметры внешнего воздействия были выбраны равными $A = 0,05$, $\Omega = 0,9\omega_{\max}$ и $\Omega = 0,97\omega_{\max}$, как в одномерной модели, см. рисунок 3.10.

Результаты для двумерного случая при относительно малых временах моделирования практически совпадали с тем, что наблюдалось в одномерном случае, а именно, для частоты внешнего воздействия $\Omega = 0,9\omega_{\max}$, испускался

фонон, который затем распадался на волновые пакеты, а для $\Omega = 0,97\omega_{\max}$ наблюдалось испускание линейных ДБ. С течением времени, линейные ДБ распадались на обычные ДБ, локализованные в обоих пространственных измерениях, распространяющиеся вдоль направлений $y = \pm x$. Такие движущиеся ДБ представлены на рисунке 10 статьи [163].

Отметим, что результаты, представленные на рисунке 3.10 были получены для модели квадратной решетки без учета дальнего действия, см. рисунок 3.1. Однако для изучения ДБ в кристаллах, как отмечалось выше, важно рассмотреть влияние дальнедействующих взаимодействий. С этой целью, задача о супратрансмиссии в квадратной решетке от ряда вынужденно колеблющихся атомов была рассмотрена также и в рамках модели с дальним действием, см. рисунок 1.2. Результаты, полученные в рамках обеих моделей, различаются лишь количественно. Вывод о том, что возбуждение ДБ возможно при вынужденном периодическом воздействии на квадратную решетку внутри фононного спектра, сохраняется и для случая решетки с дальнедействующими взаимодействиями.

3.5 Выводы по главе

Передача энергии квадратной решетке от пары колеблющихся атомов (раздел 3.3).

Численно изучена передача энергии квадратной решетке β -ФПУЦ от гармонически возбуждаемой пары соседних частиц на частотах выше фононного спектра. Найдена критическая частота возбуждения в зависимости от амплитуды возбуждения, см. рисунок 3.4. Когда параметр Ω превышает пороговое значение Ω^* , энергия не поступает от движущихся частиц к решетке. В интервале частот внешнего воздействия $1 \leq \Omega \leq \Omega^*$, где $\Omega = 1$ соответствует верхней границе фононного спектра, наблюдается явление супратрансмиссии и энергия поступает в решетку.

Показано, что когда Ω лишь немного ниже Ω^* , вынужденно движущиеся в противофазе частицы испускают ДБ почти периодически и симметрично влево и вправо, см. панели (а) на рисунках с 3.5 по 3.7. Если вынужденно движущиеся

еся частицы колеблются со сдвигом фазы ($\phi \neq 0$), то ДБ, как и ожидалось, излучаются асимметрично.

Для Ω значительно ниже Ω^* , но выше фононного спектра, механизм супратрансмиссии другой. Симметричный поток энергии от движущихся частиц к решетке становится нестабильным даже при $\phi = 0$, см. панели (в) на рисунках с 3.5 по 3.7. Испускаемые ДБ могут перемещаться в разных направлениях и иметь гораздо меньшее время жизни, излучая энергию и быстрее распадаясь.

Тот факт, что ДБ регулярно генерируются только для Ω , близких к Ω^* , может быть объяснен тем, что рассматриваемая квадратная решетка поддерживает множество различных ДБ [163]. В узком диапазоне частот вынужденного воздействия, близком к пороговому значению Ω^* , формируется только один тип ДБ. Когда частота вынужденного воздействия находится ближе к фононному диапазону, могут формироваться различные типы ДБ, которые создают помехи друг другу, что приводит к менее регулярной динамике.

Передача энергии квадратной решетке от ряда колеблющихся атомов (раздел 3.4).

Проанализирована передача энергии квадратной решетке β -ФПУЦ от ряда частиц, совершающих вынужденные гармонические колебания с частотой Ω и амплитудой A . Акцент сделан на анализе частот внешнего воздействия ниже и выше границы фононного спектра ω_{\max} , блико к этой границе. Для случая $\beta > 0$ выявлены различные механизмы передачи энергии решетке даже в случае $\Omega < \omega_{\max}$. Последовательно рассмотрены одномерный и двумерный случаи, а также рассмотрены случаи решетки со взаимодействиями между двумя и четырьмя ближайшими соседями.

Для одномерного случая задача решена точно в рамках линейной теории. Анализ полученного решения показывает, что мощность источника отлична от нуля в диапазоне частот возбуждения $0 < \Omega < \omega_{\max}$, а вне этого диапазона она равна нулю, поскольку фонон не испускается при частотах внешнего воздействия вне фононного спектра. Однако с ростом амплитуды внешнего воздействия A наблюдается отклонение мощности источника от предсказания линейной теории (3.19) за счет влияния нелинейности взаимодействия между частицам. Численный анализ с учетом нелинейности показал, что, во-первых, мощность в диапазоне $0 < \Omega < \omega_{\max}$ оказывается выше, чем предсказывает линейная теория и, во-вторых, положительная мощность источника наблюдается также в узком

диапазоне частот выше фононного спектра, что и является эффектом супратрансмиссии [85—87].

Внешнее воздействие на частоте Ω ниже границы фононного спектра ω_{\max} , генерирует фононную волну, которая ввиду модуляционной неустойчивости распадается на волновые пакеты, см. рисунок 3.10(а). Частота волновых пакетов немного превышает частоту внешнего воздействия, что объясняется жестким типом нелинейности потенциала β -ФПУЦ, когда рост амплитуды колебаний связан с ростом частоты колебаний.

Приближение частоты внешнего воздействия снизу к верхнему краю фононного спектра приводит к испусканию не фононной волны, а серии ДБ, см. рисунок 3.10(б). Частота ДБ находится выше верхнего края фононного спектра.

Приходим к выводу, что в решетке с жестким типом нелинейности ДБ могут генерироваться рядом частиц, совершающих вынужденные колебания на частоте внешнего воздействия в пределах фононного спектра, но недалеко от его края. С увеличением амплитуды внешнего воздействия расширяется диапазон частот внешнего воздействия внутри фононного спектра, где формируются ДБ. Данный вывод справедлив как для решетки с дальнедействующими взаимодействиями, так и для случая учета взаимодействий между двумя ближайшими соседями.

Численный анализ для двумерного случая показал, что испускаемые линейные бризеры неустойчивы, что приводит к их распаду на обычные нульмерные ДБ, которые локализованы в двух пространственных измерениях. Интересно, что линейные ДБ перемещаются вдоль оси x , но нульмерные ДБ в диагональных направлениях решетки, $y = x$ или $y = -x$. Столкновение таких ДБ приводит к их более быстрому, чем в одномерном случае, затуханию.

В заключении отметим, что ДБ могут возникать и перемещаться по решетке, осуществляя транспорт энергии, не только тогда, когда частота внешнего воздействия лежит вне фононного спектра, как постулировалось в классической супратрансмиссии [85—87], но и когда она находится внутри спектра, близко к краю. Еще один вывод, сделанный при изучении классической супратрансмиссии, является наличие критической амплитуды вынужденного внешнего воздействия, ниже которой явление не наблюдается. Этот вывод справедлив и для возбуждения ДБ на частотах внутри фононного спектра. Кроме того, это справедливо также и при учете дальнедействующих взаимодействий.

В будущем было бы интересно изучить явление супратрансмиссии в трехмерных решетках, а также в ОЦК, ГЦК и ГПУ металлах; такие результаты были бы интересны с практической точки зрения.

Глава 4. Дискретные бризеры в квадратной решетке с дальнодействующими взаимодействиями

4.1 Новые дискретные бризеры, основанные на ДНКМ 6 и 9, полученные с помощью функций локализации

О ДБ, основанных на ДНКМ 1 и 16, сообщалось в работе [161], в которой рассматривалась квадратная решетка с ближайшими и вторыми соседями. Здесь мы покажем, что ДНКМ 6 и 9 могут иметь частоты выше фононного спектра только тогда, когда $k_4 > 0$, точнее, когда выполняется условие (2.12). В соответствии с этим условием новые линейные ДБ будут найдены в данном разделе путем применения функций локализации к ДНКМ 6 и 9.

Применим известный и весьма продуктивный подход к нахождению ДБ, разработанный для решеток высокой размерности [8]. Основная идея очень проста. Поскольку частота ДБ должна быть выше фононного спектра, можно изучить все ДНКМ рассматриваемой решетки, а их число конечно, так как конечно число преобразований симметрии, которые используются для нахождения ДНКМ, и выделить те из них, которые имеют частоту выше фононного спектра. Можно далее пытаться получить долгоживущий ДБ, накладывая на ДНКМ функцию локализации, экспоненциально убывающую с расстоянием от центра ДБ. Разумеется, что при таком подходе не ставится задача нахождения точных бризерных решений, имеющих одну частоту колебаний для всех частиц, а осуществляется поиск долгоживущих квазибризеров [164].

Функции локализации имеют три основных параметра: амплитуду A , параметры, описывающие центр локализации дискретного бризера относительно точек решетки, и степень пространственной локализации. Амплитуда принимается равной порядка $A \sim 0,1$, поскольку этого достаточно для проявления эффектов ангармонизма при принятом выборе параметров $\beta_l = 10$, $l = 1, \dots, 4$ в β -ФПУЦ потенциале (1.2). Центр функции локализации выбирается на высоко-симметричных линиях или точках квадратной решетки. Степень локализации выбирается путем минимизации энергии, излучаемой ДБ во время его стабилизации. Выброс части энергии от ДБ в решетку происходит из-за неточных начальных условий, и чем меньше выброс, тем лучше начальные условия.

Мы берем значения жесткостей связей из набора 1, см. таблицу 1, потому что в этом случае ДНКМ 6 и 9 имеют частоты выше фононного спектра и, более того, выполняется физически обоснованное требование уменьшения жесткости связи с расстоянием между частицами. Хотя k_z не влияет на частоты ДНКМ 6 и 9, этот коэффициент вносит (слабый) вклад в динамику ДБ, поскольку симметрия локализованных мод ниже, чем симметрия ДНКМ, и связи, которые не включались при колебании ДНКМ, начинают работать при запуске ДБ.

Важно отметить, что в наши задачи не входит доказательство того, что полученные локализованные решения являются точными периодическими во времени решениями уравнений движения. Мы ищем долгоживущие локализованные колебательные моды, называемые квазибризерами [161].

4.1.1 Одномерные дискретные бризеры

Мы начинаем с одномерных дискретных бризеров, локализованных вдоль прямой, заданной уравнением

$$p_1x + p_2y + p_3 = 0. \quad (4.1)$$

Известно, что ДБ экспоненциально локализован в пространстве, то есть амплитуды колебаний частиц убывают по экспоненциальному закону с удалением от этой прямой. Для удовлетворения этого условия функцию локализации берем в следующем виде

$$a_{ij} = \frac{A}{\cosh(\kappa d_{ij})}, \quad (4.2)$$

здесь a_{ij} обозначает длину вектора начального смещения частицы с радиус-вектором решеточного положения $\xi_{i,j}$, A - это амплитуда ДНКМ, параметр κ задает степень пространственной локализации ДБ, а d_{ij} - это расстояние от узла решетки i,j до прямой,

$$d_{ij} = \frac{|p_1x_{ij} + p_2y_{ij} + p_3|}{\sqrt{p_1^2 + p_2^2}}. \quad (4.3)$$

Из уравнения (4.3) следует, что p_1 и p_2 в уравнении прямой (4.1) не обращаются в нуль одновременно, иначе обратится в нуль знаменатель данного выражения. Все частицы в момент времени $t = 0$ имеют нулевую начальную скорость.

Например, для линии $y = 0$ из уравнения (4.1) получаем $p_1 = p_3 = 0$ и $p_2 = 1$, а из уравнения (4.3) $d_{ij} = y_{ij}$. Функция локализации принимает вид

$$a_{ij} = \frac{A}{\cosh(\kappa y_{ij})}. \quad (4.4)$$

Для линии $y = h/2$ получаем $p_1 = 0$, $p_2 = 1$ и $p_3 = -h/2$. Функция локализации приобретает вид

$$a_{ij} = \frac{A}{\cosh(\kappa(y_{ij} - h/2))}. \quad (4.5)$$

Мода Сиверса-Такено [165] и мода Пэйджа [166] показаны на рисунке 4.1(а) и (б), соответственно; они получены с использованием функций локализации (4.4) и (4.5), соответственно. В первом случае ДБ локализован на частицах, а во втором - центр локализации находится посередине между двумя плотноупакованными рядами частиц. Они были получены из ДНКМ 6 с параметрами, указанными в подрисуночной подписи. В этом одномерном ДБ частицы колеблются вдоль линии локализации, которая показана красным цветом.

Два других линейных ДБ, основанных на ДНКМ 6, показаны на рисунке 4.2. Здесь частицы колеблются перпендикулярно линии локализации (показана красным). На панелях (а) и (б) показаны ДБ Сивера-Такено и Пейджа, соответственно. ДБ на рисунке 4.2 имеют меньшую степень пространственной локализации, чем на рисунке 4.1.

ДБ Сиверса-Такено и Пэйджа также могут быть получены для ДНКМ 9, как показано на рисунках 4.3(а,б) и 4.4(а,б). Отличие от ДНКМ 6 состоит в том, что теперь линиями локализации выступают $y = \pm x$, а не $y = \text{const}$ и $x = \text{const}$. Параметры линии локализации (4.1) и функции локализации (4.2) указаны в подрисуночных подписях. На рисунке 4.3 частицы колеблются вдоль линии локализации, в то время как на рисунке 4.4 они колеблются перпендику-

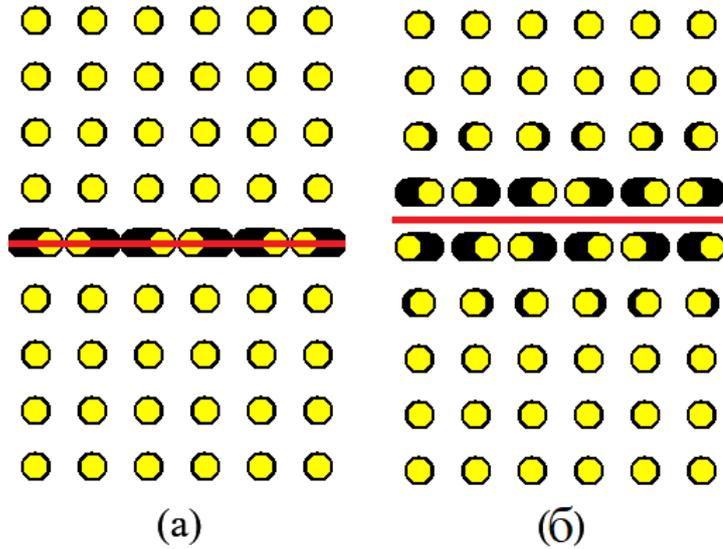


Рисунок 4.1 — Линейные ДБ основанные на ДНКМ 6. Траектории частиц показаны черным цветом. Параметры уравнения, задающего линию локализации (4.1) и функцию локализации (4.2) равны (а) $p_1 = 0$, $p_2 = 1$, $p_3 = 0$, $A = 0,25$ и $\kappa = 2,99$; (б) $p_1 = 0$, $p_2 = 1$, $p_3 = h/2$, $A = 0,25$ и $\kappa = 2,01$.

Функции локализации заданы уравнениями (4.4) и (4.5), соответственно. Линии около которых локализованы ДБ показаны красным. В данном случае частицы колеблются вдоль линии локализации. Частицы показаны в момент максимального отклонения от равновесных положений. На рисунках (а) и (б) показаны моды Сиверса-Такено и Пейджа соответственно

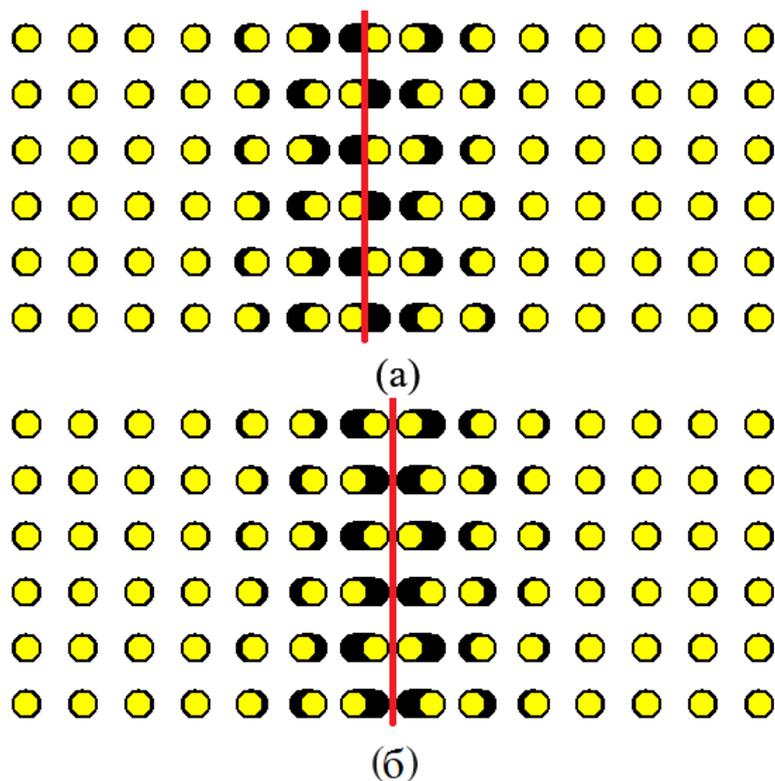


Рисунок 4.2 — Линейные ДБ, основанные на ДНКМ 6, с частицами, колеблющимися перпендикулярно линии локализации, показанной красным цветом. Параметрами линии локализации (4.1) и функции локализации (4.2) являются (а) $p_1 = 1$, $p_2 = 0$, $p_3 = 0$, $A = 0,15$ и $\kappa = 0,94$; (б) $p_1 = 1$, $p_2 = 0$, $p_3 = h/2$, $A = 0,15$ и $\kappa = 0,89$. Смещения частиц для наглядности умножены на коэффициент 2

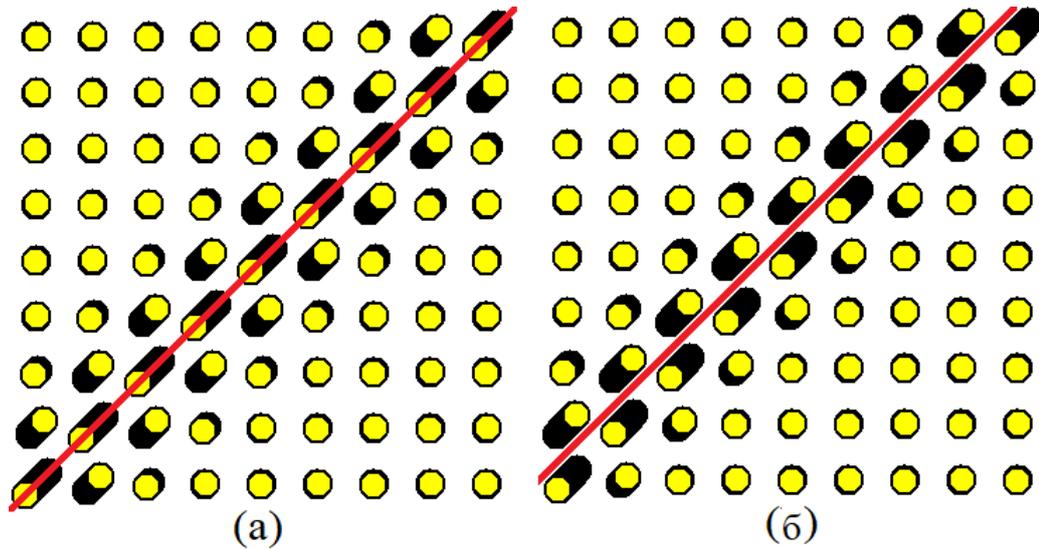


Рисунок 4.3 — Линейные ДБ, основанные на ДНКМ 9, с частицами, колеблющимися вдоль линии локализации, которая показана красным цветом.

Траектории частиц показаны черным цветом. Параметрами линии локализации (4.1) и функции локализации (4.2) на (а) являются $p_1 = -1$, $p_2 = 1$, $p_3 = 0$, $A = 0,15$ и $\kappa = 1,25$; и на (б) $p_1 = -1$, $p_2 = 1$, $p_3 = h/2$, $A = 0,15$ и $\kappa = 1,25$. Смещения частиц умножены на 2 для наглядности

лярно линии локализации. В последнем случае степень локализации линейных дискретных бризеров меньше, чем в первом.

Параметры линий (4.6) приведены в подписи к рисунку. Анализ перемещений частиц на рисунках 4.3 и 4.4 показывает, что степень локализации меньше в случае, когда частицы колеблются параллельно линии локализации.

4.1.2 Дискретные бризеры

Рассмотрим ДБ локализованные в двух пространственных измерениях. Пусть центр локализации ДБ находится в точке пересечения двух ортогональных прямых

$$\begin{aligned} p_1x + p_2y + p_3 &= 0, \\ p_2x - p_1y + p_4 &= 0, \end{aligned} \tag{4.6}$$

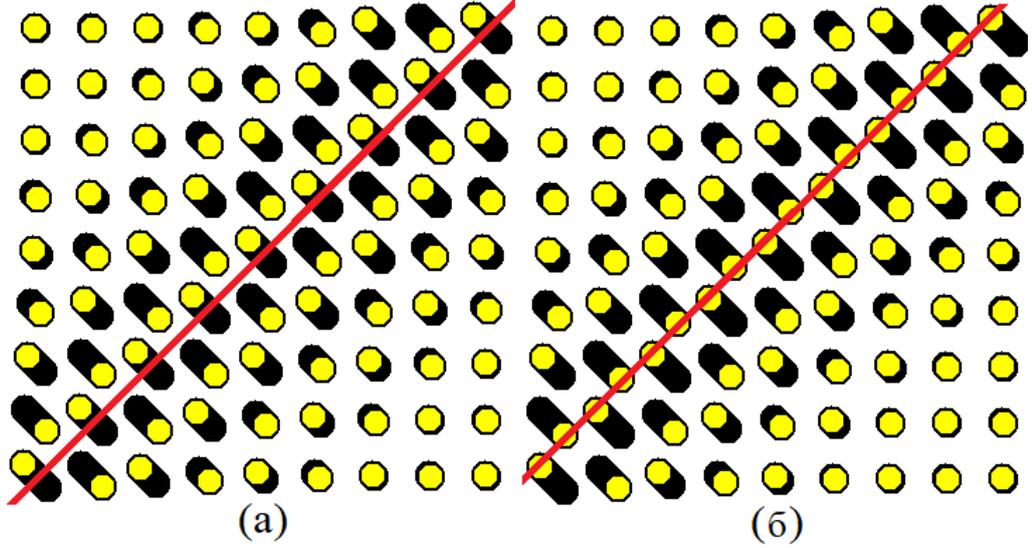


Рисунок 4.4 — Линейные ДБ, основанные на ДНКМ 9, с частицами, колеблющимися перпендикулярно линии локализации, показанной красным цветом. Параметрами линии локализации (4.1) и функции локализации (4.2) являются (а) $p_1 = -1$, $p_2 = 1$, $p_3 = 0$, $A = 0,15$ и $\kappa = 0,48$; (б) $p_1 = -1$, $p_2 = 1$, $p_3 = h/2$, $A = 0,15$ и $\kappa = 0,48$. Смещения частиц умножены на 2 для большей наглядности

где, как и ранее, p_1 и p_2 не обращаются в нуль одновременно. Выразим координаты точки пересечения двух прямых, решив систему уравнений (4.6):

$$x_0 = \frac{-p_1 p_3 - p_2 p_4}{p_1^2 + p_2^2}, \quad y_0 = \frac{-p_2 p_3 + p_1 p_4}{p_1^2 + p_2^2}. \quad (4.7)$$

Для построения ДБ функция локализации берется в виде, обеспечивающим экспоненциальное уменьшение амплитуд с удалением от обеих пересекающихся прямых:

$$a_{ij} = \frac{A}{\cosh(\kappa_1 d_{ij}) \cosh(\kappa_2 f_{ij})}, \quad (4.8)$$

где a_{ij} - длина вектора начального смещения частицы, имеющей радиус-вектор решеточного положения $\xi_{i,j}$, A - это амплитуда ДНКМ, κ_1 и κ_2 - параметры, определяющие степень локализации ДБ по двум измерениям, d_{ij} и f_{ij} - это расстояния от точки решетки i,j до прямых (4.6), которые определяются уравнениями (4.3) и

$$f_{ij} = \frac{|p_2 x_{ij} - p_1 y_{ij} + p_4|}{\sqrt{p_1^2 + p_2^2}}. \quad (4.9)$$

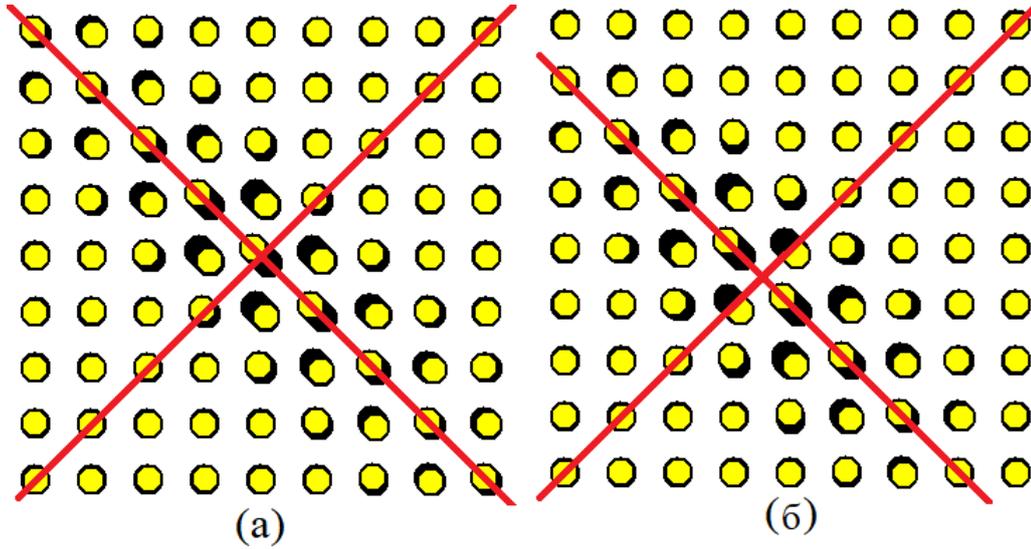


Рисунок 4.5 — ДБ основанные на ДНКМ 9; ортогональные линии локализации показаны красным, а траектории частиц - черным. Параметрами прямых (4.6) и функции локализации (4.8) являются: (а) $p_1 = -1$, $p_2 = 1$, $p_3 = 0$, $p_4 = 0$, $A = 0,15$, $\kappa_1 = 0,65$ и $\kappa_2 = 1,7$; (б) $p_1 = -1$, $p_2 = 1$, $p_3 = 0$, $p_4 = -h$, $A = 0,15$ и $\kappa_1 = 0,65$, $\kappa_2 = 1,7$. Смещения частиц умножены на коэффициент 2

Попытки возбудить ДБ путем наложения функции локализации (4.8) на ДНКМ 6 не привели к появлению долгоживущей колебательной моды. После нескольких десятков периодов колебаний происходила делокализация колебательной энергии из-за проявления неустойчивости.

С другой стороны, ДБ Сиверса-Такено и Пейджа были успешно получены путем применения функции локализации (4.8) к ДНКМ 9, см. рисунок 4.5(а,б), соответственно. Полученные ДБ слабее локализованы в направлении колебаний частиц по сравнению со степенью локализации в поперечном направлении.

4.2 Движущиеся одномерные дискретные бризеры

Без особых трудностей в квадратной решетке удалось возбудить одномерные движущиеся ДБ с использованием следующей функции локализации

$$a_{ij}(t) = \frac{\pm A \cos(\omega_{\text{DB}}t + \rho d_{ij})}{\cosh(\kappa d_{ij})}. \quad (4.10)$$

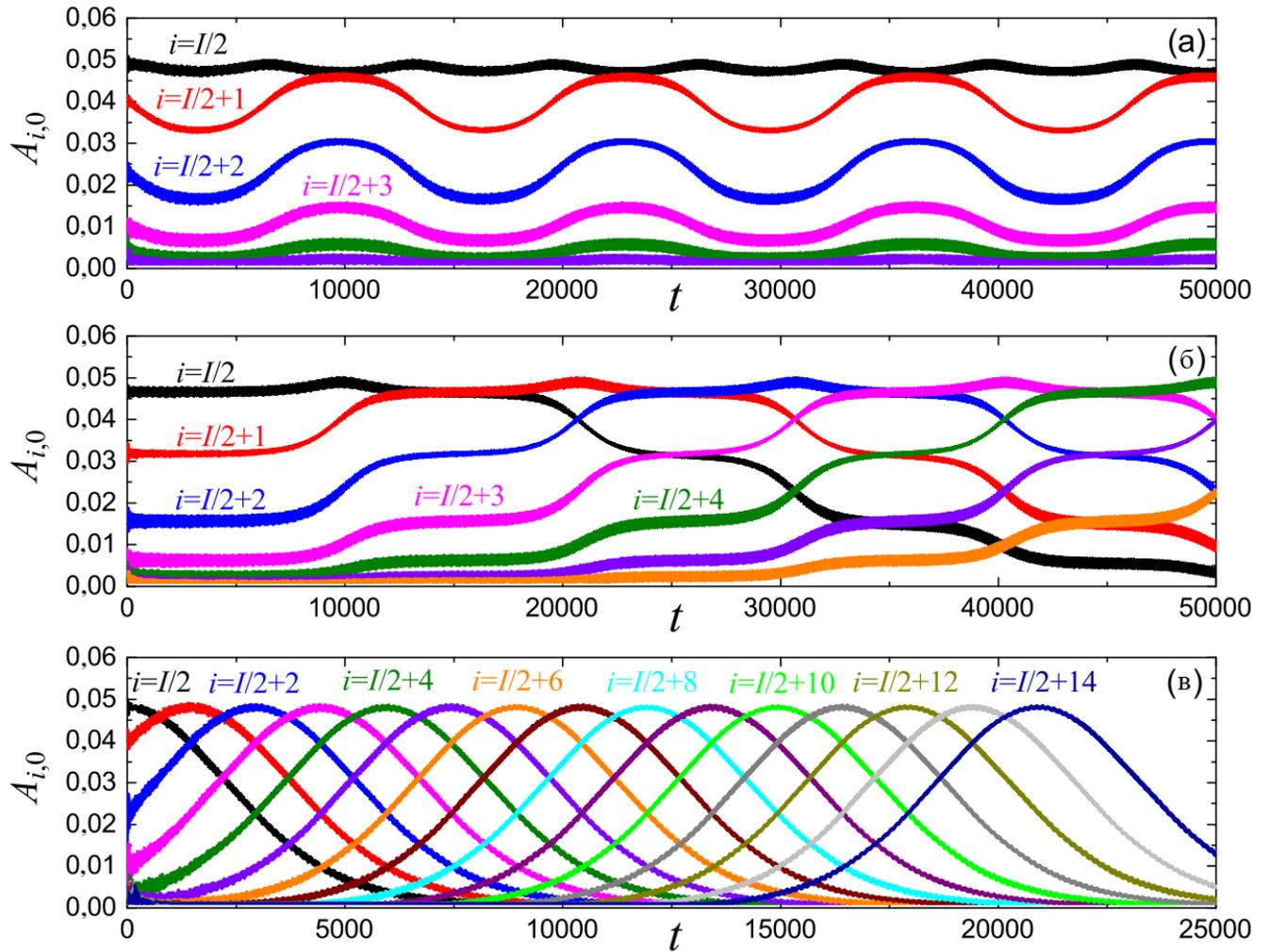


Рисунок 4.6 — Движущийся ДБ основанный на ДНКМ 6. Показаны амплитуды колебаний частиц ряда $j = 0$ в зависимости от времени. Частицы пронумерованы индексом i , как указано для каждой кривой. Параметры линейной жесткости соответствуют набору параметров 1 из таблицы 1. Параметрами функции локализации (4.10) являются: $A = 0,05$, $\omega_{\text{ДВ}} = 3,05$, $\kappa = 0,35$, и рассматриваются различные значения сдвига фазы ρ : (а,б) 0,06 и (в) 0,15. Параметры уравнения прямой локализации (4.1) следующие: на (а) $p_1 = 1$, $p_2 = 0$, $p_3 = 0$ (центр локализации помещен на вертикальный ряд частиц); на (б,в) то же, кроме $p_3 = h/2$ (центр локализации располагается посередине между двумя вертикальными рядами частиц)

Эта функции локализации, зависящая от времени, была использована для возбуждения движущихся ДБ в нелинейной цепочке в работе [167]. Здесь A - амплитуда ДНКМ, знак плюс или минус выбирается в соответствии с паттерном смещений ДНКМ; $\omega_{\text{ДВ}}$ - это частота ДБ, которая определяется численно для стационарного ДБ; сдвиг фазы ρ вводится для приведения ДБ в движение; κ - степень пространственной локализации, которая также оценивается для стационарного ДБ; d_{ij} - это расстояние от точки решетки i, j до линии локализации ДБ, см. уравнение (4.1), которое определяется уравнением (4.3). Важно отметить, что сдвиг фазы $\rho = 0$ соответствует стационарному ДБ, поскольку именно набег фазы колебаний частиц приводит к движению ДБ. Функция локализации, заданная уравнением (4.10), используется для возбуждения движущихся одномерных ДБ на основе ДНКМ 6 и 9, см. рисунок 4.2 и 4.4, соответственно.

Начнем с приведения в движение одномерного ДБ на основе ДНКМ 6, стационарная конфигурация которого в двух вариантах показана на рисунке 4.2. Для стационарного ДБ амплитуды $A = 0,05$ были найдены следующие параметры, обеспечивающие минимальное излучение энергии: $\omega_{\text{ДВ}} = 3,05$, $\kappa = 0,35$. Эти же значения используются для возбуждения движущегося ДБ. На рисунке 4.6 представлены попытки заставить ДБ двигаться. На (а) и (б) сдвиг фазы ρ равен 0,06, и единственным отличием в начальных условиях является исходное положение центра локализирующей функции. Обратим внимание, что на (а) ДБ не перемещается, но он перемещается на (б). Это связано с тем, что на (а) ДБ изначально центрирован на вертикальном ряду частиц, при этом $p_1 = 1$, $p_2 = 0$ и $p_3 = 0$ в уравнении (4.1), но на (б) ДБ был центрирован между двумя вертикальными рядами частиц, $p_1 = 1$, $p_2 = 0$ и $p_3 = 0$ в уравнении (4.1). Очевидно, что ДБ, центрированный на вертикальном ряду частиц, находится в яме потенциала Пайерлса-Набарро (ПН), и малое значение параметра ускорения $\rho = 0,06$ привело к колебаниям ДБ вблизи этой ямы. То же самое значение ускорения для ДБ центрированного между двумя рядами привел к его движению, см. рисунок 4.6(б). Когда $\rho = 0,15$, см. рисунок 4.6(в), ДБ движется плавно с очень небольшим излучением энергии. Период колебаний ДБ равен $T = 2\pi/\omega_{\text{ДВ}} \approx 2,06$. Из рисунка 4.6(в) видно, что ДБ проходит одно расстояние между частицами примерно за 1500 единиц времени, или за 730 периодов колебаний. В течение всего численного прогона на рисунке 4.6(в) ДБ совершил около 12000 периодов колебаний.

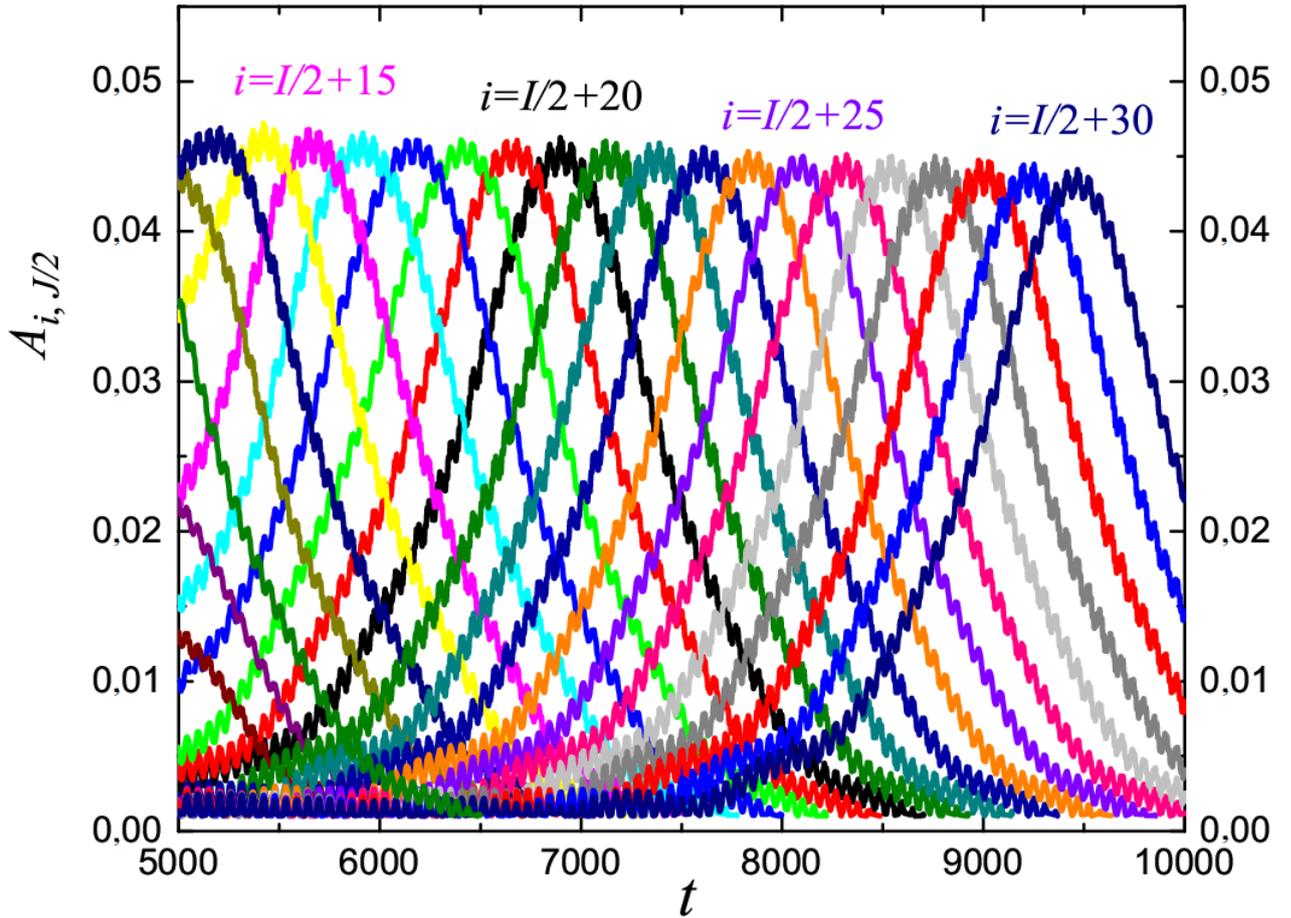


Рисунок 4.7 — Движущийся ДБ основанный на ДНКМ 9. Показаны амплитуды колебаний частиц ряда $j = J/2$ как функции времени. Частицы пронумерованы индексом i , как указано для каждой кривой. Параметры линейной жесткости соответствуют набору 1 из таблицы 1. Параметры уравнения (4.10) следующие: $A = 0,05$, $\omega_{\text{ДБ}} = 3,04$, $\kappa = 0,33$ и сдвиг фазы $\rho = 0,15$. Параметры прямой локализации (4.1) следующие: $p_1 = -1$, $p_2 = 1$, $p_3 = 0$ (начальная конфигурация на диагональном ряду частиц)

Переходим к одномерному ДБ на основе ДНКМ 9, две стационарные версии которого можно видеть на рисунок 4.4. Функция локализации, заданная уравнением (4.10), применяется теперь для ускорения ДБ вдоль направления $y = -x$. Устойчивое движение одномерного ДБ представлено на рисунке 4.7, а параметры уравнения (4.10) описаны в подрисуночной подписи. Этот ДБ движется быстрее и излучает энергию быстрее, чем ДБ показанный на рисунке 4.6. Он проходит одно расстояние между частицами примерно за 240 единиц времени, или за 115 периодов колебаний. О более быстром излучении энергии данным ДБ свидетельствует заметное уменьшение амплитуды ДБ со временем.

ДБ, показанный на рисунке 4.5, менее интересен в контексте данного исследования из-за его ограниченного времени жизни, которое составляет всего несколько сотен периодов колебаний. Такого времени жизни недостаточно для пробега по решетке, ведь, как мы видели, движущийся ДБ, изображенный на рисунке 4.6, преодолевает одно расстояние между частицами за 730 периодов колебаний, а ДБ, показанный на рисунке 4.7, проходит то же расстояние за 115 периодов. Короткое время жизни ДБ на рисунке 4.5 не позволяет наблюдать его устойчивое движение. Движущийся ДБ, полученный на основе ДНКМ 6, более перспективен в рамках проведенного исследования в связи с тем, что его время жизни больше, чем у движущегося ДБ на основе ДНКМ 9.

4.3 Выводы по главе

В главе 4 применён эффективный способ построения стационарных и движущихся ДБ, основанный на применении функции локализации к ДНКМ с частотами выше фононного спектра. Линейные ДБ локализованы вдоль прямой (4.1), а обычные ДБ около точки пересечения двух ортогональных прямых, заданных уравнением (4.6). Данный подход с успехом применялся ранее для получения ДБ на основе ДНКМ 1 и 16 в работе [161], где дальное действие межчастичных сил не учитывалось. В главе 2, из анализа дисперсионных кривых квадратной решетки с дальным действием, было показано, что учет дального действия позволяет ДНКМ 6 и 9 иметь частоты выше фононного спектра и, следовательно, открывается возможность получения новых ДБ, основанных на этих

ДНКМ. Для физики кристаллов важно, что такая возможность имеется даже при наложении физически обоснованного ограничения на параметры жесткости связей (1.3), отражающего их ослабление с увеличением расстояния между частицами.

В ходе работы были получены одномерные ДБ Сиверса-Такено [165] и Пэйджа [166], основанные на ДНКМ 6, см. рисунки 4.1 и 4.2. В первом случае частицы колеблются вдоль линии локализации, а во втором - поперек. Аналогично были получены одномерные ДБ Сиверса-Такено и Пэйджа, основанные на ДНКМ 9, см. рисунки 4.3 и 4.4 с колебаниями частиц вдоль и поперек линии локализации, соответственно. При этом ДБ, основанные на ДНКМ 6 локализованы вдоль линии $x = \text{const}$ или $y = \text{const}$, а ДБ, основанные на ДНКМ 9, вдоль линии $y = x$ или $y = -x$.

Получен и обычный ДБ, локализованный в обоих пространственных измерениях, см. рисунок 4.5. Данный ДБ основан на ДНКМ 9 и имеет время жизни сотни периодов колебаний. Получить аналогичный ДБ на основе ДНКМ 6 не удалось, поскольку он показывал значительно меньшее время жизни.

Движущиеся одномерные ДБ были получены как на основе ДНКМ 6, так и ДНКМ 9, см. рисунки 4.6 и 4.7. Движущийся ДБ, изображенный на рисунке 4.6, преодолевает одно расстояние между частицами за 730 периодов колебаний, а ДБ, показанный на рисунке 4.7, проходит то же расстояние за 115 периодов колебаний.

Заключение

Основные результаты работы можно сформулировать следующим образом:

1. Аналитически получено дисперсионное соотношение, а также амплитудно-частотные характеристики 16-и возможных ДНКМ квадратной решетки с дальнедействующим потенциалом β -ФПУЦ; доказано, что 5 из 16-и ДНКМ могут иметь частоту выше фононного спектра, а именно ДНКМ 1, 6, 7, 9 и 16. Данные ДНКМ могут использоваться для поиска ДБ.
2. Путем наложения локализирующих функций на ДНКМ в квадратной решетке с дальнедействующим потенциалом получены новые стационарные ДБ на основе ДНКМ 6 и 9. Такие ДБ не могут существовать в решетке без учета дальнедействующих сил, что открывает возможность поиска новых типов ДБ в кристаллах с дальнедействующими взаимодействиями, например, с металлической и ионной связью. Показано, что при смещении центра локализирующей функции из высоко-симметричного положения решетки, на основе ДНКМ 16 может быть получен движущийся ДБ.
3. Исследован эффект супратрансмиссии от пары колеблющихся атомов, при этом найдены критические частоты в зависимости от амплитуды вынужденных колебаний, при превышении которых энергия перестает поступать в решетку. Если частота вынужденных колебаний близка к критической, то ДБ испускаются почти периодически и симметрично, а при приближении частоты воздействия к границе фононного спектра испускание ДБ становится асимметричным, что связано с возбуждением ДБ различной симметрии.
4. При изучении супратрансмиссии от ряда колеблющихся атомов ранее было установлено, что ДБ могут испускаться при внешнем воздействии на частоте внутри фононного спектра близко к его верхней границе. Показано, что данный вывод сохраняется и при учете дальнедействующих взаимодействий.

Исходя из представленных выводов по задачам, поставленным в рамках данного исследования, можно заключить, что в условиях нелинейности рассматриваемых решеток при учете дальнедействующего потенциала β -ФПУЦ возможны новые типы ДБ, которые не реализуются в решетке со взаимодействием только между первыми и вторыми соседями. Дальнедействующие взаимодействия реализуются, например, в кристаллах с металлической и ионной связью. Данная работа также вносит вклад в развитие знаний о транспорте энергии в квадратной решетке. Доказано, что при наложении функций локализации на делокализованные нелинейные колебательные моды и при помощи механизма супратрансмиссии возможно численное возбуждение движущихся дискретных бризеров, способных к переносу энергии. Перспективой дальнейшего развития существующей работы является использование разработанных методов численного возбуждения стационарных и движущихся дискретных бризеров в трехмерных решетках.

Благодарности

Автор выражает огромную благодарность и признательность научному руководителю, профессору, доктору физико-математических наук, главному научному сотруднику лаборатории нелинейной физики и механики материалов ИПСМ РАН Дмитриеву Сергею Владимировичу за постановку задач исследования, помощь в проведении расчётов и обсуждении полученных результатов.

Отдельная благодарность доктору физико-математических наук Корзниковой Елене Александровне за консультирование и помощь в анализе полученных результатов.

В заключение хочу поблагодарить свою маму Наумову Марину Николаевну и жену Наумову Дарью Михайловну за всестороннюю поддержку и помощь.

Работа была поддержана Российским научным фондом, гранты №№ 21-19-00813, 21-12-00229 и 24-11-00139.

Список сокращений и условных обозначений

БНМ - Буш нелинейных нормальных мод

ГПУ решетка - Гексагональная плотноупакованная решетка

ГЦК решетка - Гранецентрированная кубическая решетка

ДБ - Дискретный бризер

ДНКМ - Делокализованная нелинейная колебательная мода

ОЦК решетка - Объемноцентрированная кубическая решетка

Потенциал ФПУЦ - Потенциал Ферми-Паста-Улама-Цингоу

Список литературы

1. *Dolgov A. S.* On localization of oscillations in nonlinear crystal structure / A. S. Dolgov // Sov. Phys. Solid State. — 1986. — т. 28. — с. 907.
2. *Sievers A. J.* Intrinsic localized modes in anharmonic crystals / A. J. Sievers, S. Takeno // Physical Review Letters. — 1988. — т. 61, № 8. — с. 970—973.
3. *Flach S.* Discrete breathers — Advances in theory and applications / S. Flach, A. V. Gorbach // Physics Reports. — 2008. — т. 467, № 1. — с. 1—116.
4. *Chechin G. M.* Interactions between normal modes in nonlinear dynamical systems with discrete symmetry. Exact results / G. M. Chechin, V. P. Sakhnenko // Phys. D. — NLD, 1998. — т. 117, № 1—4. — с. 43—76.
5. *Bezuglova G. S.* Discrete breathers on symmetry-determined invariant manifolds for scalar models on the plane square lattice / G. S. Bezuglova, G. M. Chechin, P. P. Goncharov // Physical Review E. — 2011. — т. 84, № 3. — с. 036606.
6. Discrete breathers in scalar dynamical models on the plane square lattice / G. S. Bezuglova, P. P. Goncharov, Y. V. Gurov, G. M. Chechin // Izvestiya Vysshikh Uchebnykh Zavedeniy. Prikladnaya Nelineynaya Dinamika. — 2011. — т. 19, № 3. — с. 89—103.
7. Surface discrete breathers in Pt₃Al intermetallic alloy / P. V. Zakharov, E. A. Korznikova, S. V. Dmitriev, E. G. Ekomasov, K. Zhou // Surf. Sci. — 2019. — т. 679, № 2. — с. 1.
8. Discrete breathers in crystals / S. V. Dmitriev, E. A. Korznikova, J. A. Baimova, M. G. Velarde // Physics–Uspekhi. — 2016. — т. 59, № 5. — с. 446—461.
9. *Hema P.* Quasi discreteness analysis of a two dimensional ferromagnetic spin system / P. Hema, M. M. Latha // Chinese Journal of Physics. — 2023. — т. 82. — с. 75—88.
10. *Bajars J.* Two-dimensional mobile breather scattering in a hexagonal crystal lattice. / J. Bajars, C. Eilbeck, B. J. Leimkuhler // Physical review. E. — 2021. — т. 103 2—1. — с. 022212.

11. *McGurn A. R.* Transmission through Kerr media barriers within waveguides: Device applications / A. R. McGurn. — 2011. — с. 149—171.
12. *Burlakov V. M.* Computer simulation of intrinsic localized modes in one-dimensional and two-dimensional anharmonic lattices / V. M. Burlakov, S. A. Kiselev, V. N. Pyrkov // *Phys. Rev. B.* — 1990. — т. 42, вып. 8. — с. 4921—4927.
13. *Lu B.* Discrete breathers in a two-dimensional Morse lattice with an on-site harmonic potential / B. Lu, Q. Tian // *Frontiers of Physics in China.* — 2009. — т. 4, № 4. — с. 497—504.
14. *Kevrekidis P. G.* Two-dimensional discrete breathers: Construction, stability, and bifurcations / P. G. Kevrekidis, K. O. Rasmussen, A. R. Bishop // *Physical Review E - Statistical Physics, Plasmas, Fluids, and Related Interdisciplinary Topics.* — 2000. — т. 61, № 2. — с. 2006—2009.
15. Influence of the relative stiffness of second-neighbor interactions on chaotic discrete breathers in a square lattice / I. A. Shepelev, E. G. Soboleva, A. A. Kudreyko, S. V. Dmitriev // *Chaos, Solitons and Fractals.* — 2024. — т. 183.
16. *Page J. B.* Asymptotic solutions for localized vibrational modes in strongly anharmonic periodic systems / J. B. Page // *Phys. Rev. B.* — 1990. — т. 41, вып. 11. — с. 7835—7838.
17. *Flach S.* Discrete breathers / S. Flach, C. R. Willis // *Physics Reports.* — 1998. — т. 295, № 5. — с. 181—264.
18. *Manley M. E.* Impact of intrinsic localized modes of atomic motion on materials properties / M. E. Manley // *Acta Materialia.* — 2010. — т. 58, № 8. — с. 2926—2935.
19. *Dubinko V. I.* Reaction-rate theory with account of the crystal anharmonicity / V. I. Dubinko, P. A. Selyshchev, J. F. Archilla // *Phys. Rev. E.* — 2011. — т. 83. — с. 041124.
20. *Kistanov A. A.* Properties of moving discrete breathers in a monoatomic two-dimensional crystal / A. A. Kistanov, A. S. Semenov, S. V. Dmitriev // *Journal of Experimental and Theoretical Physics.* — 2014. — т. 119, № 4. — с. 766—771.

21. Moving discrete breathers in bcc metals V, Fe and W / R. T. Murzaev, A. A. Kistanov, V. I. Dubinko, D. A. Terentyev, S. V. Dmitriev // *Comp. Mater. Sci.* — 2015. — т. 98. — с. 88.
22. *Marin J. L.* Localized moving breathers in a 2D hexagonal lattice / J. L. Marin, J. C. Eilbeck, F. M. Russell // *Phys. Lett. A.* — 1998. — т. 248, № 2—4. — с. 225—229.
23. Properties of moving discrete breathers in beryllium / O. V. Bachurina, R. T. Murzaev, A. S. Semenov, E. A. Korznikova, S. V. Dmitriev // *Phys. Solid State.* — 2018. — т. 60. — с. 989.
24. Long range annealing of defects in germanium by low energy plasma ions / J. F. Archilla, S. M. Coelho, F. D. Auret, V. I. Dubinko, V. Hizhnyakov // *Physica D.* — 2015. — т. 297. — с. 56.
25. Interaction of propagating discrete breathers with a vacancy in a two-dimensional crystal / A. A. Kistanov, S. V. Dmitriev, A. S. Semenov, V. I. Dubinko, D. A. Terentev // *Technical Physics Letters.* — 2014. — т. 40, № 8. — с. 657—661.
26. Interaction of discrete breathers with primary lattice defects in bcc Fe / D. A. Terentyev, A. V. Dubinko, V. I. Dubinko, S. V. Dmitriev, E. E. Zhurkin, M. V. Sorokin // *Model. Simul. Mater. Sc.* — 2015. — т. 23, № 2. — с. 085007.
27. *Velarde M. G.* Thermal solitons and solectrons in 1D anharmonic lattices up to physiological temperature / M. G. Velarde, W. Ebeling, A. P. Chetverikov // *Int. J. Bifurc. Chaos.* — 2008. — т. 18. — с. 3815.
28. *Velarde M. G.* From polaron to solectron: The addition of nonlinear elasticity to quantum mechanics and its possible effect upon electric transport / M. G. Velarde // *J. Comput. Appl. Math.* — 2010. — т. 233. — с. 1432.
29. Discrete-breather-assisted charge transport along DNA-like molecular wires / A. P. Chetverikov, W. Ebeling, V. D. Lakhno, M. G. Velarde // *Phys. Rev. E.* — 2019. — т. 100. — с. 052203.
30. *Chetverikov A. P.* Nonlinear soliton-like excitations in two-dimensional lattices and charge transport / A. P. Chetverikov, W. Ebeling, M. G. Velarde // *Eur. Phys. J.: Special Topics.* — 2013. — т. 222. — с. 2531.

31. *Xiong D.* Crossover from ballistic to normal heat transport in the phi4 lattice: If nonconservation of momentum is the reason what is the mechanism? / D. Xiong, D. Saadatmand, S. V. Dmitriev // *Phys. Rev. E.* — 2017. — т. 96. — с. 042109.
32. *Wang J.* Thermal transport in long-range interacting Fermi-Pasta-Ulam chains / J. Wang, S. V. Dmitriev, D. Xiong // *Phys. Rev. Research.* — 2020. — т. 2. — с. 013179.
33. Effect of discrete breathers on the specific heat of a nonlinear chain / M. Singh [и др.] // *J. Nonlinear Sci.* — 2021. — т. 31. — с. 12.
34. Effect of discrete breathers on macroscopic properties of the Fermi-Pasta-Ulam chain / E. A. Korznikova [и др.] // *Eur. Phys. J. B.* — 2020. — т. 93. — с. 123.
35. *Rosenberg R. M.* The normal modes of nonlinear n -degree-of-freedom systems / R. M. Rosenberg // *Journal of Applied Mechanics, Transactions ASME.* — 1960. — т. 29, № 1. — с. 7–14.
36. *Sakhnenko V.* Symmetrical selection rules in nonlinear dynamics of atomic systems / V. Sakhnenko, G. M. Chechin, S. J. Amoretty // *Doklady Physics.* — 1993. — т. 38. — с. 219–221.
37. *Sakhnenko V.* Bushes of modes and normal modes for nonlinear dynamical systems with discrete symmetry / V. Sakhnenko, G. M. Chechin // *Doklady Physics.* — 1994.
38. Delocalized nonlinear vibrational modes of triangular lattices / D. S. Ryabov, G. M. Chechin, A. Upadhyaya, E. A. Korznikova, V. I. Dubinko, S. V. Dmitriev // *Nonlinear Dynamics.* — 2020. — т. 102. — с. 2793–2810.
39. Dynamics of a three-component delocalized nonlinear vibrational mode in graphene / S. A. Shcherbinin, M. N. Semenova, A. S. Semenov, E. A. Korznikova, G. M. Chechin, S. V. Dmitriev // *Physics of the Solid State.* — 2019. — т. 61. — с. 2139–2144.
40. Delocalized nonlinear vibrational modes in fcc metals / S. A. Shcherbinin, K. A. Krylova, G. M. Chechin, E. G. Soboleva, S. V. Dmitriev // *Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simul.* — 2022. — т. 104. — с. 106039.

41. *Chechin G. M.* Nonlinear normal mode interactions in the SF₆ molecule studied with the aid of density functional theory. / G. M. Chechin, D. S. Ryabov, S. A. Shcherbinin // Physical review. E, Statistical, nonlinear, and soft matter physics. — 2015. — т. 92 1. — с. 012907.
42. *Chechin G. M.* Bushes of vibrational modes for Fermi–Pasta–Ulam chains / G. M. Chechin, V. Novikova, A. A. Abramenko // Physica D: Nonlinear Phenomena. — 2002. — т. 166. — с. 208–238.
43. *Chechin G. M.* Delocalized periodic vibrations in nonlinear LC and LCR electrical chains / G. M. Chechin, S. A. Shcherbinin // Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simul. — 2015. — т. 22. — с. 244–262.
44. *Chechin G. M.* Stability of low-dimensional bushes of vibrational modes in the Fermi-Pasta-Ulam chains / G. M. Chechin, K. G. Zhukov, D. S. Ryabov // Physica D: Nonlinear Phenomena. — 2004. — т. 203. — с. 121–166.
45. *Bachurina O. V.* Plane and plane-radial discrete breathers in fcc metals / O. V. Bachurina // Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering. — 2019. — т. 27.
46. *Bachurina O. V.* Two-dimensional discrete breathers in fcc metals / O. V. Bachurina, A. A. Kudreyko // Computational Materials Science. — 2020. — т. 182. — с. 109737.
47. *Bachurina O. V.* Linear discrete breather in fcc metals / O. V. Bachurina // Computational Materials Science. — 2019.
48. Moving discrete breathers in a monoatomic two-dimensional crystal / A. A. Kistanov, R. T. Murzaev, S. V. Dmitriev, V. I. Dubinko, V. V. Khizhnyakov // JETP Letters. — 2014. — т. 99. — с. 353–357.
49. Highly symmetric discrete breather in a two-dimensional Morse crystal / E. A. Korznikova, S. Y. Fomin, E. G. Soboleva, S. V. Dmitriev // JETP Letters. — 2016. — т. 103. — с. 277–281.
50. Spherically localized discrete breathers in bcc metals V and Nb / K. A. Krylova, I. Lobzenko, A. S. Semenov, A. A. Kudreyko, S. V. Dmitriev // Computational Materials Science. — 2020. — т. 180. — с. 109695.
51. Discrete breathers in a triangular β -Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou lattice. / R. I. Babicheva, A. S. Semenov, E. G. Soboleva, A. A. Kudreyko, K. Zhou, S. V. Dmitriev // Physical review. E. — 2021. — т. 103 5–1. — с. 052202.

52. *Chechin G. M.* Large-amplitude in-plane atomic vibrations in strained graphene monolayer: bushes of nonlinear normal modes / G. M. Chechin, D. S. Ryabov, S. A. Shcherbinin // *Letters on Materials*. — 2017. — т. 7. — с. 367—372.
53. *Liu B.* Recent progress on graphene-analogous 2D nanomaterials: Properties, modeling and applications / B. Liu, K. Zhou // *Progress in Materials Science*. — 2019.
54. Gap discrete breathers in strained boron nitride / E. Barani, E. A. Korznikova, A. P. Chetverikov, K. Zhou, S. V. Dmitriev // *Physics Letters A*. — 2017. — т. 381. — с. 3553—3557.
55. Transverse discrete breathers in unstrained graphene / E. Barani [и др.] // *The European Physical Journal B*. — 2017. — т. 90. — с. 1—5.
56. Stability of delocalized nonlinear vibrational modes in graphene lattice / D. U. Abdullina, M. N. Semenova, A. S. Semenovl, E. A. Korznikova, S. V. Dmitriev // *The European Physical Journal B*. — 2019. — т. 92. — с. 1—5.
57. Delocalized Nonlinear Vibrational Modes in Graphene: Second Harmonic Generation and Negative Pressure / E. A. Korznikova [и др.] // *physica status solidi (b)*. — 2018. — т. 256.
58. *Stearrett R.* Experimental generation of intrinsic localized modes in a discrete electrical transmission line / R. Stearrett, Q. Lars // *Journal of Physics D: Applied Physics*. — 2007. — т. 40. — с. 5394—5398.
59. Instability of vibrational modes in hexagonal lattice / E. A. Korznikova, D. V. Bachurin, S. Y. Fomin, A. P. Chetverikov, S. V. Dmitriev // *The European Physical Journal B*. — 2017. — т. 90. — с. 1—8.
60. Modulational instability and nano-scale energy localization in ferromagnetic spin chain with higher order dispersive interactions / L. Kavitha, A. Mohamadou, E. Parasuraman, D. Gopi, N. Akila, A. Prabhu // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. — 2016. — т. 404. — с. 91—118.
61. Nonlinear nano-scale localized breather modes in a discrete weak ferromagnetic spin lattice / L. Kavitha, E. Parasuraman, D. Gopi, A. Prabhu, R. A. Vicencio // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. — 2016. — т. 401. — с. 394—405.

62. Chaotic breathers of two types in a two-dimensional Morse lattice with an on-site harmonic potential / K. Ikeda, Y. Doi, B. Feng, T. Kawahara // *Physica D: Nonlinear Phenomena*. — 2007. — т. 225. — с. 184–196.
63. Effect of discrete breathers on macroscopic properties of the Fermi-Pasta-Ulam chain / E. A. Korznikova [и др.] // *The European Physical Journal B*. — 2019. — т. 93.
64. *Russell F. M.* Evidence for moving breathers in a layered crystal insulator at 300 K / F. M. Russell, J. C. Eilbeck // *EPL (Europhysics Letters)*. — 2006. — т. 78. — с. 10004.
65. Linking tracks in mica crystals with phase transitions in a bistable lattice / K. A. Krylova, E. A. Korznikova, A. S. Semenov, D. V. Bachurin, S. V. Dmitriev // *The European Physical Journal B*. — 2020. — т. 93. — с. 1–8.
66. *Bajars J.* Nonlinear propagating localized modes in a 2D hexagonal crystal lattice / J. Bajars, E. C. J., B. J. Leimkuhler // *Physica D: Nonlinear Phenomena*. — 2014. — т. 301. — с. 8–20.
67. Lattice with vacancies: elastic fields and effective properties in frameworks of discrete and continuum models / V. A. Kuzkin, A. M. Krivtsov, E. A. Podolskaya, M. Kachanov // *Philosophical Magazine*. — 2016. — т. 96. — с. 1538–1555.
68. Room-temperature ferromagnetism in two-dimensional Fe₂Si nanosheet with enhanced spin-polarization ratio / Y. Sun, Z. Zhuo, W. X., J. Yang // *Nano letters*. — 2017. — т. 17 5. — с. 2771–2777.
69. Diffusive and martensitic nucleation kinetics in solid-solid transitions of colloidal crystals / Y. Peng, W. Li, F. Wang, T. Still, A. G. Yodh, Y. Han // *Nature Communications*. — 2017. — т. 8.
70. Nonlinear localized modes in two-dimensional hexagonally-packed magnetic lattices / C. Chong [и др.] // *New Journal of Physics*. — 2020. — т. 23. — с. 043008.
71. Delocalized nonlinear vibrational modes in graphene: Second harmonic generation and negative pressure / E. A. Korznikova [и др.] // *Phys. Status Solidi B*. — 2019. — т. 256. — с. 1800061.

72. Moving breathers in a DNA model with competing short-and long-range dispersive interactions / J. Cuevas, J. F. Archilla, Y. B. Gaididei, F. R. Romero // *Physica D.* — 2002. — т. 163, № 1/2. — с. 106—126.
73. *Gorbach A. V.* Compactlike discrete breathers in systems with nonlinear and nonlocal dispersive terms / A. V. Gorbach, S. Flach // *Phys. Rev. E.* — 2005. — т. 72, № 5. — с. 056607.
74. Multibreathers in Klein-Gordon chains with interactions beyond nearest neighbors / V. Koukouloyannis, P. G. Kevrekidis, J. Cuevas, V. Rothos // *Physica D.* — 2013. — т. 242, № 1. — с. 16—29.
75. *Christodoulidi H.* The effect of long-range interactions on the dynamics and statistics of 1D Hamiltonian lattices with on-site potential / H. Christodoulidi, A. Bountis, L. Drossos // *Eur. Phys. J. Spec. Top.* — 2018. — т. 227, № 5/6. — с. 563—573.
76. *Gninzanlong C. L.* Forward and backward propagating breathers in a DNA model with dipole-dipole long-range interactions / C. L. Gninzanlong, F. T. Ndjomatchoua, C. Tchawoua // *Phys. Rev. E.* — 2020. — т. 102, № 5. — с. 052212.
77. *Bonart D.* Intrinsic localized modes in linear chains with Coulomb interaction / D. Bonart // *Phys. Lett. A.* — 1997. — т. 231, № 3/4. — с. 201—207.
78. *Bonart D.* Intrinsic localized modes in complex lattice dynamical systems / D. Bonart, T. Rossler, J. B. Page // *Physica D.* — 1998. — т. 113, № 2—4. — с. 123—128.
79. Effects of competing short- and long-range dispersive interactions on discrete breathers / P. G. Kevrekidis, Y. B. Gaididei, A. R. Bishop, A. Saxena // *Phys. Rev. E.* — 2001. — т. 64, № 6 II. — с. 66606/1—66606/8.
80. *Bagchi D.* Energy transport in the presence of long-range interactions / D. Bagchi // *Phys. Rev. E.* — 2017. — т. 96, № 4. — с. 042121.
81. Heat transport in oscillator chains with long-range interactions coupled to thermal reservoirs / S. Iubini, D. C., S. Lepri, R. Livi, L. Casetti // *Phys. Rev. E.* — 2018. — т. 97, № 3. — с. 032102.

82. *Daxing X.* Slow energy relaxation in anharmonic chains with and without on-site potentials: Roles of distinct types of discrete breathers / X. Daxing, S. V. Dmitriev // *Physica A.* — 2024. — c. 129902.
83. *Doi Y.* Construction of nonlinear lattice with potential symmetry for smooth propagation of discrete breather / Y. Doi, K. Yoshimura // *Nonlinearity.* — 2020. — т. 33, № 10. — c. 5142–5175.
84. *Yoshiyuki Y.* Low-frequency discrete breathers in long-range systems without on-site potential / Y. Yoshiyuki, Y. Doi // *Phys. Rev. E.* — 2018. — т. 97, № 6. — c. 062218.
85. *Caputo J. G.* Nonlinear energy transmission in the gap / J. G. Caputo, J. Leon, A. Spire // *Phys. Lett. A.* — 2001. — т. 283, № 1/2. — c. 129–135.
86. *Geniet F.* Energy transmission in the forbidden band gap of a nonlinear chain / F. Geniet, J. Leon // *Phys. Rev. Lett.* — 2002. — т. 89, № 13. — c. 1341021–1341024.
87. *Geniet F.* Nonlinear supratransmission / F. Geniet, J. Leon // *J. Phys. Condensed Matter.* — 2003. — т. 15, № 17. — c. 2933–2949.
88. *Leon J.* Nonlinear supratransmission as a fundamental instability / J. Leon // *Phys. Lett. A.* — 2003. — т. 319, № 1/2. — c. 130–136.
89. *Khomeriki R.* Nonlinear supratransmission and bistability in the Fermi-Pasta-Ulam model / R. Khomeriki, S. Lepri, S. Ruffo // *Phys. Rev. E.* — 2004. — т. 70, № 6 2. — c. 066626.
90. *Khomeriki R.* Nonlinear supratransmission and bistability in the Fermi-Pasta-Ulam model / R. Khomeriki, S. Lepri, S. Ruffo // *Phys. Rev. E.* — 2004. — т. 70, № 6. — c. 7.
91. *Chevriaux D.* Theory of a Josephson junction parallel array detector sensitive to very weak signals / D. Chevriaux, R. Khomeriki, J. Leon // *Phys. Rev. B.* — 2006. — т. 73, № 21. — c. 214516.
92. *Malishava M.* All-phononic digital transistor on the basis of gap-soliton dynamics in an anharmonic oscillator ladder / M. Malishava, R. Khomeriki // *Phys. Rev. Lett.* — 2015. — т. 115, № 10. — c. 104301.
93. *Macias-Diaz J. E.* On the propagation of binary signals in damped mechanical systems of oscillators / J. E. Macias-Diaz, A. Puri // *Physica D.* — 2007. — т. 228, № 2. — c. 112–121.

94. *Macias-Diaz J. E.* An application of nonlinear supratransmission to the propagation of binary signals in weakly damped, mechanical systems of coupled oscillators / J. E. Macias-Diaz, A. Puri // *Phys. Lett. A.* — 2007. — т. 366, № 4/5. — с. 447–450.
95. Experimental observation on asymmetric energy flux within the forbidden frequency band in the LC transmission line / F. Tao, W. Chen, J. Pan, W. Xu, S. Du // *Chaos, Solitons and Fractals.* — 2012. — т. 45, № 6. — с. 810–814.
96. *Bountis A.* Complex dynamics and statistics of 1-d hamiltonian lattices: Long range interactions and supratransmission / A. Bountis // *Nonlinear Phenomena in Complex Systems.* — 2020. — т. 23, № 2. — с. 133–148.
97. *Bountis T.* The effect of on-site potentials on supratransmission in one-dimensional hamiltonian lattices / T. Bountis, J. E. Macias-Diaz // *Entropy.* — 2023. — т. 25, № 3. — с. 423.
98. *Macias-Diaz J. E.* Energy transmission in nonlinear chains of harmonic oscillators with long-range interactions / J. E. Macias-Diaz, A. B. Togeu Motcheyo // *Results Phys.* — 2020. — т. 18. — с. 103210.
99. *Macias-Diaz J. E.* Supratransmission in β -Fermi-Pasta-Ulam chains with different ranges of interactions / J. E. Macias-Diaz, A. Bountis // *Commun. Nonlinear Sci.* — 2018. — т. 63. — с. 307–321.
100. *Macias-Diaz J. E.* Nonlinear supratransmission in quartic hamiltonian lattices with globally interacting particles and on-site potentials / J. E. Macias-Diaz, A. Bountis // *Journal of Computational and Nonlinear Dynam.* — 2021. — т. 16, № 2. — с. 021001.
101. *Zhang Q.* Tunable supra-transmission of a stacked miura-origami based meta-structure / Q. Zhang, H. Fang // *Theoretical and Applied Mechanics Letters.* — 2024. — т. 14, № 6. — с. 100523.
102. *Wang Y.* Highly intensive and controllable supratransmission in a Kresling-origami metastructure / Y. Wang, X. Zhang, S. Zhu // *Extreme Mechanics Letters.* — 2023. — т. 59. — с. 101964.
103. *Togeu Motcheyo A. B.* Nonlinear bandgap transmission with zero frequency in a cross-stitch lattice / A. B. Togeu Motcheyo, J. E. Macias-Diaz // *Chaos, Solitons and Fractals.* — 2023. — т. 170. — с. 113349.

104. *Bader A.* Supratransmission in a vibro-impact chain / A. Bader, O. V. Gendelman // *J. Sound Vib.* — 2023. — т. 547. — с. 117493.
105. Nonlinear generation modes in easy-axis anisotropy ferromagnetic spin chains with nearest-neighbor coupling / A. Houwe, S. Abbagari, Y. Saliou, L. Akinyemi, D. S. Yamigno // *Eur. Phys. J. Plus.* — 2023. — т. 138, № 2. — с. 133.
106. Wave propagation with longitudinal dust grain oscillations in dusty plasma crystals / E. Nkendji Kenkeu, A. B. Togueu Motcheyo, T. Kanaa, C. Tchawoua // *Physics of Plasmas.* — 2022. — т. 29, № 4. — с. 043702.
107. *Macias-Diaz J. E.* Nonlinear wave transmission in harmonically driven hamiltonian sine-Gordon regimes with memory effects / J. E. Macias-Diaz // *Chaos, Solitons and Fractals.* — 2021. — т. 142. — с. 110362.
108. Energy transport in one-dimensional oscillator arrays with hysteretic damping / T. Bountis, K. Kaloudis, J. Shena, C. Skokos, C. Spitas // *European Physical Journal: Special Topics.* — 2022. — т. 231, № 3. — с. 225—236.
109. Interaction effects of driving amplitudes and frequencies on transitivity in a granular chain / J.-G. Cui, T. Yang, M.-Q. Niu, L.-Q. Chen // *J. Sound Vib.* — 2022. — т. 529. — с. 116966.
110. Generation of travelling sine-Gordon breathers in noisy long Josephson junctions / D. De Santis, C. Guarcello, B. Spagnolo, A. Carollo, D. Valenti // *Chaos, Solitons and Fractals.* — 2022. — т. 158. — с. 112039.
111. Supratransmission-induced traveling breathers in long Josephson junctions / D. De Santis, C. Guarcello, B. Spagnolo, A. Carollo, D. Valenti // *Commun. Nonlinear Sci.* — 2022. — т. 115. — с. 106736.
112. *Mosquera-Sanchez J. A.* Dynamics and wave propagation in nonlinear piezoelectric metastructures / J. A. Mosquera-Sanchez, C. De Marqui // *Nonlinear Dynam.* — 2021. — т. 105, № 4. — с. 2995—3023.
113. Discrete modulation instability and localized modes in chiral molecular chains with first- and third-neighbor interactions / S. Abbagari, A. Houwe, L. Akinyemi, M. Inc, T. Bouetou Bouetou // *Physica Scripta.* — 2023. — т. 98, № 2. — с. 025210.

114. *Pechac J. E.* Non-reciprocal supratransmission in mechanical lattices with non-local feedback control interactions / J. E. Pechac, M. J. Frazier // Crystals. — 2021. — т. 11, № 2. — с. 94.
115. Supratransmission in transversely connected nonlinear pendulum pairs / A. Kamdoun Kuitche, A. B. Togueu Motcheyo, T. Kanaa, C. Tchawoua // Chaos, Solitons and Fractals. — 2022. — т. 160. — с. 112196.
116. Collective escape and supratransmission phenomena in a nonlinear oscillators chain / M. M. Foudjio, F. T. Ndjomatchoua, C. L. Gninzanlong, C. Tchawoua // Chaos. — 2020. — т. 30, № 12. — с. 123122.
117. Nonlinear supratransmission in a Pt 3 Al crystal at intense external influence / A. I. Cherednichenko, P. V. Zakharov, M. D. Starostenkov, M. O. Sysoeva, A. M. Eremin // Computer Research and Modeling. — 2019. — т. 11, № 1. — с. 109—117.
118. Influence of a nonlinear coupling on the supratransmission effect in modified sine-Gordon and Klein-Gordon lattices / R. Alima, S. Morfu, P. Marquie, B. Bodo, B. Z. Essimbi // Chaos, Solitons and Fractals. — 2017. — т. 100. — с. 91—99.
119. Supratransmission in discrete one-dimensional lattices with the cubic-quintic nonlinearity / A. B. Togueu Motcheyo, M. Kimura, Y. Doi, C. Tchawoua // Nonlinear Dynam. — 2019. — т. 95, № 3. — с. 2461—2468.
120. Nonlinear supratransmission in a discrete nonlinear electrical transmission line: Modulated gap peak solitons / F. Kenmogne, G. Ndombou, D. Yemele, A. Fomethe // Chaos, Solitons and Fractals. — 2015. — т. 75. — с. 263—271.
121. Supratransmission phenomenon in a discrete electrical lattice with nonlinear dispersion / A. B. Togueu Motcheyo, C. Tchawoua, M. Siewe Siewe, J. D. Tchintang Tchameu // Commun. Nonlinear Sci. — 2013. — т. 18, № 4. — с. 946—952.
122. *Yousefzadeh B.* Supratransmission in a disordered nonlinear periodic structure / B. Yousefzadeh, A. S. Phani // J. Sound Vib. — 2016. — т. 380. — с. 242—266.
123. *Macias-Diaz J. E.* Numerical simulation of the Nonlinear Dynam. of harmonically driven Riesz-fractional extensions of the Fermi-Pasta-Ulam

- chains / J. E. Macias-Diaz // Commun. Nonlinear Sci. — 2018. — т. 55. — с. 1339—1351.
124. *Frazier M. J.* Band gap transmission in periodic bistable mechanical systems / M. J. Frazier, D. M. Kochmann // J. Sound Vib. — 2017. — т. 388. — с. 315—326.
125. *Macias-Diaz J. E.* Numerical study of the process of nonlinear supratransmission in Riesz space-fractional sine-Gordon equations / J. E. Macias-Diaz // Commun. Nonlinear Sci. — 2017. — т. 46. — с. 89—102.
126. A piezo-metastucture with bistable circuit shunts for adaptive nonreciprocal wave transmission / Y. Zheng, Z. Wu, X. Zhang, K. W. Wang // Smart Materials and Structures. — 2019. — т. 28, № 4. — с. 045005.
127. *Wu Z.* On the wave propagation analysis and supratransmission prediction of a metastable modular metastucture for non-reciprocal energy transmission / Z. Wu, K. W. Wang // J. Sound Vib. — 2019. — т. 458. — с. 389—406.
128. *Ruiz-Ramirez J.* On the propagation of binary signals in a two-dimensional nonlinear lattice with nearest-neighbor interactions / J. Ruiz-Ramirez, J. E. Macias-Diaz // Journal of Nonlinear Mathematical Physics. — 2010. — т. 17, № 2. — с. 127—136.
129. *Macias-Diaz J. E.* Computational study of the transmission of energy in a two-dimensional lattice with nearest-neighbor interactions / J. E. Macias-Diaz, J. Ruiz-Ramirez, L. A. Flores-Oropeza // International Journal of Modern Physics C. — 2009. — т. 20, № 12. — с. 1933—1943.
130. *Zakharov P. V.* The effect of nonlinear supratransmission in discrete structures: a review / P. V. Zakharov // Computer Research and Modeling. — 2023. — т. 15, № 3. — e599—e617.
131. *Togueu Motcheyo A. B.* Supratransmission induced by waves collisions in a discrete electrical lattice / A. B. Togueu Motcheyo, C. Tchawoua, J. D. Tchingang Tchameu // Physical Review E. — 2013. — т. 88, № 4. — с. 040901.
132. Homoclinic nonlinear band gap transmission threshold in discrete optical waveguide arrays / A. B. Togueu Motcheyo, J. D. Tchingang Tchameu, M. Siewe Siewe, C. Tchawoua // Commun. Nonlinear Sci. — 2017. — т. 50. — с. 29—34.

133. *Susantot H.* Boundary driven waveguide arrays: Supratransmission and saddle-node bifurcation / H. Susantot // SIAM Journal on Applied Mathematics. — 2008. — т. 69, № 1. — с. 111–125.
134. *Susanto H.* Calculated threshold of supratransmission phenomena in waveguide arrays with saturable nonlinearity / H. Susanto, N. Karjanto // J. Nonlinear Opt. Phys. — 2008. — т. 17, № 2. — с. 159–165.
135. Dynamics of N -elastically longitudinal coupled rotating pendulums with smooth and discontinuous nonlinearities: Generation of chaotic bursting with many orbits as a solution / M. Fan, J. A. Ambassa, M. J. Gouajio, F. Kenmogne // Chinese Journal of Physics. — 2024. — т. 92. — с. 1331–1360.
136. Discrete breathers in a two-dimensional spring-mass lattice / X. Yi, J. A. Wattis, H. Susanto, L. J. Cummings // Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical. — 2009. — т. 42, № 35. — с. 355207.
137. *Butt I. A.* Discrete breathers in a two-dimensional hexagonal Fermi-Pasta-Ulam lattice / I. A. Butt, J. A. Wattis // Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical. — 2007. — т. 40, № 6. — с. 1239–1264.
138. *Butt I. A.* Discrete breathers in a two-dimensional Fermi-Pasta-Ulam lattice / I. A. Butt, J. A. Wattis // Journal of Physics A: Mathematical and General. — 2006. — т. 39, № 18. — с. 4955–4984.
139. *Aleksandrova N. I.* The propagation of transient waves in two-dimensional square lattices / N. I. Aleksandrova // International Journal of Solids and Structures. — 2022. — т. 234/235. — с. 111194.
140. Breathing subsonic crowdion in Morse lattices / A. P. Chetverikov, I. A. Shepelev, E. A. Korznikova, A. A. Kistanov, S. V. Dmitriev, M. G. Velarde // Computational Condensed Matter. — 2017. — т. 13. — с. 59–64.
141. Chaotic discrete breathers in bcc lattice / I. D. Kolesnikov [и др.] // Chaos, Solitons and Fractals. — 2024. — т. 178. — с. 114339.
142. An approach to evaluate the accuracy of interatomic potentials as applied to tungsten / I. V. Kosarev, S. A. Shcherbinin, A. A. Kistanov, R. I. Babicheva, E. A. Korznikova, S. V. Dmitriev // Comp. Mater. Sci. — 2024. — т. 231. — с. 112597.

143. Localized vibrational modes in diamond / R. T. Murzaev, D. V. Bachurin, E. A. Korznikova, S. V. Dmitriev // *Phys. Lett. A.* — 2017. — т. 381, № 11. — с. 1003—1008.
144. Mechanical response of carbon nanotube bundle to lateral compression / D. U. Abdullina [и др.] // *Computation.* — 2020. — т. 8, № 2. — с. 27.
145. Rotobreather in a carbon nanotube bundle / S. V. Dmitriev, A. S. Semenov, A. V. Savin, M. A. Ilgamov, D. V. Bachurin // *Journal of Micromechanics and Molecular Physics.* — 2020. — т. 5, № 3. — с. 964—967.
146. Evolution of the carbon nanotube bundle structure under biaxial and shear strains / L. K. Rysaeva [и др.] // *Facta Universitatis, Series: Mechanical Engineering.* — 2020. — т. 18, № 4. — с. 525—536.
147. Elastic damper based on the carbon nanotube bundle / L. K. Rysaeva [и др.] // *Facta Universitatis, Series: Mechanical Engineering.* — 2020. — т. 18, № 1. — с. 1—12.
148. Chain model for carbon nanotube bundle under plane strain conditions / E. A. Korznikova [и др.] // *Materials.* — 2019. — т. 12, № 23. — с. 3951.
149. *Fang C.* Tunable band gap in distorted square lattice's phonon spectrum / C. Fang, N. Wang, X. Shen // *Results in Physics.* — 2021. — т. 29. — с. 104697.
150. Nonlinear localized excitations in a topological ferromagnetic honeycomb lattice / W. Feng [и др.] // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials.* — 2021. — т. 536. — с. 168089.
151. *Bak S. M.* Existence of periodic traveling waves in Fermi-Pasta-Ulam type systems on 2D-lattice with saturable nonlinearities / S. M. Bak, G. M. Kovtonyuk // *Journal of Mathematical Sciences (United States).* — 2022. — т. 260, № 5. — с. 619—629.
152. Energy dispersion of localized disturbance in continuum and discrete media / J. A. Baimova, N. M. Bessonov, A. M. Krivtsov, I. N. Trunova // *Physical Review E.* — 2024. — т. 110, № 6. — с. 065004.
153. *Krivtsov A. M.* Dynamics of matter and energy / A. M. Krivtsov // *ZAMM Zeitschrift fur Angewandte Mathematik und Mechanik.* — 2023. — т. 103, № 4. — e202100496.
154. *Maldovan M.* Sound and heat revolutions in phononics / M. Maldovan // *Nature.* — 2013. — т. 503, № 7475. — с. 209—217.

155. *Banerjee A.* Waves in structured mediums or metamaterials: A review / A. Banerjee, R. Das, E. P. Calius // Archives of Computational Methods in Engineering. — 2019. — т. 26, № 4. — с. 1029—1058.
156. Progress and perspectives on phononic crystals / T. Vasileiadis, J. Varghese, V. Babacic, J. Gomis-Bresco, D. Navarro Urrios, B. Graczykowski // J. Appl. Phys. — 2021. — т. 129, № 16. — с. 160901.
157. *Patil G. U.* Review of exploiting nonlinearity in phononic materials to enable nonlinear wave responses / G. U. Patil, K. H. Matlack // Acta Mech. — 2022. — т. 233, № 1. — с. 1—46.
158. *Tsuruta K.* Acoustic metasurfaces and topological phononics for acoustic/elastic device design / K. Tsuruta // Jpn. J. Appl. Phys. — 2023. — т. 62, SJ. — SJ0803.
159. One-component delocalized nonlinear vibrational modes of square lattices / D. S. Ryabov, G. M. Chechin, E. K. Naumov, Y. V. Bebikhov, E. A. Korznikova, S. V. Dmitriev // Nonlinear Dynamics. — 2023. — т. 111. — с. 8135—8153.
160. *Bakhvalov N. S.* Numerical methods: analysis, algebra, ordinary differential equations / N. S. Bakhvalov. — Moscow: MIR Publishers, 1977.
161. Discrete breathers in square lattices from delocalized nonlinear vibrational modes. / E. K. Naumov, Y. V. Bebikhov, E. G. Ekomasov, E. G. Soboleva, S. V. Dmitriev // Physical review. E. — 2023. — т. 107 3—1. — с. 034214.
162. *Kuzkin V. A.* Energy transfer to a harmonic chain under kinematic and force loadings: Exact and asymptotic solutions / V. A. Kuzkin, A. M. Krivtsov // Journal of Micromechanics and Molecular Physics. — 2018. — т. 3, № 1/2. — с. 1850004.
163. Discrete breathers in square lattices from delocalized nonlinear vibrational modes / E. K. Naumov, Y. V. Bebikhov, E. G. Ekomasov, E. G. Soboleva, S. V. Dmitriev // Phys. Rev. E. — 2023. — т. 107, № 3. — с. 034214.
164. *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. — т. 74, вып. 3. — с. 036608.

165. *Takeo S.* Intrinsic localized vibrational modes in anharmonic crystals : Stationary modes / S. Takeo, K. Kisoda, A. J. Sievers // Progress of Theoretical Physics Supplement. — 1988. — т. 94. — с. 242—269.
166. *Page J. B.* Asymptotic solutions for localized vibrational modes in strongly anharmonic periodic systems. / J. B. Page // Physical review. B, Condensed matter. — 1990. — т. 41 11. — с. 7835—7838.
167. Discrete breathers assist energy transfer to ac-driven nonlinear chains / D. Saadatmand, D. Xiong, V. A. Kuzkin, A. M. Krivtsov, A. V. Savin, S. V. Dmitriev // Physical Review E. — 2018. — т. 97, № 2. — с. 022217.

Список рисунков

- 1.1 Шестнадцать однокомпонентных ДНКМ квадратной решетки [159]. Показаны вектора начальных смещений частиц, приводящих, при нулевых начальных скоростях, к возбуждению ДНКМ. Трансляционные ячейки паттернов смещений выделены оранжевым 17
- 1.2 Частицы квадратной решетки с шагом h , обозначенные черными точками. Частицы пронумерованы индексами i, j ; показана также и нумерация связей. Рассмотрены взаимодействия вплоть до четвертого ближайшего соседа 19
- 2.1 Пять однокомпонентных ДНКМ квадратной решетки с волновыми векторами на границе первой зоны Бриллюэна. ДНКМ могут быть возбуждены при начальных перемещениях частиц, показанных стрелками, и нулевых начальных скоростях. Все начальные векторы смещения имеют одинаковую длину A (амплитуда ДНКМ). Периоды трансляции для ДНКМ показаны оранжевыми линиями 26
- 2.2 (а) Первая зона Бриллюэна квадратной решетки. Высокосимметричные точки обозначены заглавными греческими буквами Γ, X, M и Z . Волновые векторы на изображениях 1 и 16 расположены в точке X (красные точки). ДНКМ 6 и 9 имеют волновые векторы в точке M отмечены синими точками. ДНКМ 7 имеет волновые векторы в точке Z (зеленые очки). (б) ДНКМ 16 - это сумма ДНКМ 1 и её поворота на 90° . (в) ДНКМ 6 - это сумма ДНКМ 9 и её поворота на 90° 30
- 2.3 Дисперсионные соотношения вдоль линии $q = \pi$ в первой зоне Бриллюэна для трех наборов параметров модели, представленных в таблице 1 32

- 2.4 Амплитудно-частотные характеристики для ДНКМ (а) 1 и 6, (б) 9 и 16. Сплошными линиями показана аналитическая оценка с использованием кубического приближения, см. уравнения (2.18), (2.22), (2.26) и (2.30), в то время как пунктирные линии показывают численный (точный) результат. Горизонтальная линия показывает максимальную частоту фононов. Для выбранных параметров $k_1 = k_2 = 1$, $k_3 = 4/5$ и $k_4 = 5/8$, частоты ДНКМ имеют одинаковую частоту $\omega = 3$ в пределе малых амплитуд 40
- 3.1 Квадратная решетка частиц с нумерацией узлов индексами i, j . Рассматриваются связи только с ближайшими (красные линии) и вторыми (зелёные линии) соседями. Показана принятая нумерация связей 43
- 3.2 Два способа внешнего воздействия на квадратную решетку, исследуемые в данной работе: (а) пара атомов совершает вынужденные колебания в противофазе или с некоторым сдвигом фазы по гармоническому закону; (б) плотноупакованный ряд частиц движется вынужденно по гармоническому закону 43
- 3.3 Зависимость полной энергии частиц решетки, нормированной на число частиц, от времени для (а) $A=0,02$ и (б) $A=0,09$. Результаты для разных значений Ω показаны кривыми разных цветов в соответствии с условными обозначениями. Напомним, что согласно уравнению (3.1) случай $\Omega = 1$ соответствует возбуждению с частотой на верхнем краю фононного спектра. Две приводимые в движение частицы колеблются в противофазе, поскольку задано значение $\phi = 0$ 48
- 3.4 Критическое значение Ω^* как функция амплитуды возбуждения A для различных значений ϕ , указанных в легенде 49

- 3.5 Распределение энергии в вычислительной ячейке в момент времени $t = 250$ для вынужденного движения пары частиц с амплитудой $A = 0,07$, сдвигом фазы $\varphi = 0$ и значением Ω , указанным на каждой панели. Критическое значение частоты составляет $\Omega^* = 0,012$. Интенсивность красного цвета увеличивается с увеличением суммарной энергии частиц. Можно видеть ДБ, излучаемые двумя движущимися частицами, которые показаны черным цветом в середине рисунков 50
- 3.6 То же, что и на рисунке 3.5, но для амплитуды возбуждения $A = 0,09$. В этом случае критическая частота равна $\Omega^* = 1,018$. 51
- 3.7 То же, что и на рисунке 3.5, но для амплитуды возбуждения $A = 0,11$. В этом случае критическая частота равна $\Omega^* = 1,026$. 52
- 3.8 Скорость первого ДБ, испущенного парой частиц, совершающих вынужденное движение с амплитудой A , частотой Ω немного ниже Ω^* и сдвигом фазы $\phi = 0$ 52
- 3.9 Нормированная мощность источника энергии в виде ряда частиц, совершающих вынужденные колебания по закону (3.13), как функция частоты внешнего воздействия Ω , нормированной на максимальную частоту фононного спектра. Данный результат получен в гармоническом приближении и выражен уравнением (3.19) 54
- 3.10 Плотность энергии как функция номера ряда частиц i в момент времени $t = 400$. Атомный ряд, совершающий вынужденное движение, находится слева при $i = 0$. Амплитуда вынужденного движения равна $A = 0,05$, а частота (а) $\Omega = 0,9\omega_{\max}$ и (б) $\Omega = 0,97\omega_{\max}$. Представлены результаты для одномерной модели ($J = 1$). Горизонтальные красные линии показывают плотность энергии фонона: (а) $e = 0,0081$ и (б) $e = 0,0094$, рассчитанные по (3.15). Предполагаемое из линейной теории положение фронта волны, рассчитанное из (3.17), показано вертикальной голубой линией. На (а), излучаемая фононная волна неустойчива, в результате чего она распадается на волновые пакеты с основной частотой колебаний $0,9292\omega_{\max}$, то есть внутри фононного спектра. На (б) излучаются ДБ с основной частотой колебаний $1,001\omega_{\max}$, то есть выше фононного спектра . 55

- 4.1 Линейные ДБ основанные на ДНКМ 6. Траектории частиц показаны черным цветом. Параметры уравнения, задающего линию локализации (4.1) и функцию локализации (4.2) равны (а) $p_1 = 0, p_2 = 1, p_3 = 0, A = 0,25$ и $\kappa = 2,99$; (б) $p_1 = 0, p_2 = 1, p_3 = h/2, A = 0,25$ и $\kappa = 2,01$. Функции локализации заданы уравнениями (4.4) и (4.5), соответственно. Линии около которых локализованы ДБ показаны красным. В данном случае частицы колеблются вдоль линии локализации. Частицы показаны в момент максимального отклонения от равновесных положений. На рисунках (а) и (б) показаны моды Сиверса-Такено и Пейджа соответственно 64
- 4.2 Линейные ДБ, основанные на ДНКМ 6, с частицами, колеблющимися перпендикулярно линии локализации, показанной красным цветом. Параметрами линии локализации (4.1) и функции локализации (4.2) являются (а) $p_1 = 1, p_2 = 0, p_3 = 0, A = 0,15$ и $\kappa = 0,94$; (б) $p_1 = 1, p_2 = 0, p_3 = h/2, A = 0,15$ и $\kappa = 0,89$. Смещения частиц для наглядности умножены на коэффициент 2 65
- 4.3 Линейные ДБ, основанные на ДНКМ 9, с частицами, колеблющимися вдоль линии локализации, которая показана красным цветом. Траектории частиц показаны черным цветом. Параметрами линии локализации (4.1) и функции локализации (4.2) на (а) являются $p_1 = -1, p_2 = 1, p_3 = 0, A = 0,15$ и $\kappa = 1,25$; и на (б) $p_1 = -1, p_2 = 1, p_3 = h/2, A = 0,15$ и $\kappa = 1,25$. Смещения частиц умножены на 2 для наглядности 66
- 4.4 Линейные ДБ, основанные на ДНКМ 9, с частицами, колеблющимися перпендикулярно линии локализации, показанной красным цветом. Параметрами линии локализации (4.1) и функции локализации (4.2) являются (а) $p_1 = -1, p_2 = 1, p_3 = 0, A = 0,15$ и $\kappa = 0,48$; (б) $p_1 = -1, p_2 = 1, p_3 = h/2, A = 0,15$ и $\kappa = 0,48$. Смещения частиц умножены на 2 для большей наглядности 67

- 4.5 ДБ основанные на ДНКМ 9; ортогональные линии локализации показаны красным, а траектории частиц - черным. Параметрами прямых (4.6) и функции локализации (4.8) являются: (а) $p_1 = -1, p_2 = 1, p_3 = 0, p_4 = 0, A = 0,15, \kappa_1 = 0,65$ и $\kappa_2 = 1,7$; (б) $p_1 = -1, p_2 = 1, p_3 = 0, p_4 = -h, A = 0,15$ и $\kappa_1 = 0,65, \kappa_2 = 1,7$. Смещения частиц умножены на коэффициент 2 68
- 4.6 Движущийся ДБ основанный на ДНКМ 6. Показаны амплитуды колебаний частиц ряда $j = 0$ в зависимости от времени. Частицы пронумерованы индексом i , как указано для каждой кривой. Параметры линейной жесткости соответствуют набору параметров 1 из таблицы 1. Параметрами функции локализации (4.10) являются: $A = 0,05, \omega_{ДВ} = 3,05, \kappa = 0,35$, и рассматриваются различные значения сдвига фазы ρ : (а,б) 0,06 и (в) 0,15. Параметры уравнения прямой локализации (4.1) следующие: на (а) $p_1 = 1, p_2 = 0, p_3 = 0$ (центр локализации помещен на вертикальный ряд частиц); на (б,в) то же, кроме $p_3 = h/2$ (центр локализации располагается посередине между двумя вертикальными рядами частиц) 69
- 4.7 Движущийся ДБ основанный на ДНКМ 9. Показаны амплитуды колебаний частиц ряда $j = J/2$ как функции времени. Частицы пронумерованы индексом i , как указано для каждой кривой. Параметры линейной жесткости соответствуют набору 1 из таблицы 1. Параметры уравнения (4.10) следующие: $A = 0,05, \omega_{ДВ} = 3,04, \kappa = 0,33$ и сдвиг фазы $\rho = 0,15$. Параметры прямой локализации (4.1) следующие: $p_1 = -1, p_2 = 1, p_3 = 0$ (начальная конфигурация на диагональном ряду частиц) 71

Список таблиц

- 1 Три набора параметров модели, рассматриваемые в данной работе. В последнем столбце указана точка первой зоны Бриллюэна в которой достигается максимальная частота фононного спектра и соответствующие ДНКМ 22

Публикации автора по теме диссертации

Статьи в журналах из Перечня ВАК:

1. Наумов Е.К. Дискретные бризеры в квадратной решетке основанные на делокализованных модах/ Наумов Е.К. , Бебихов Ю.В., Дмитриев С.В. // Фундаментальные проблемы современного материаловедения - 2023 - Т. 20 - № 3 - С. 299–307.

Статьи в журналах, индексируемых в международных базах Scopus и Web of Science:

2. Ryabov D.S. One-component delocalized nonlinear vibrational modes of square lattices / Ryabov D.S., Chechin G.M., Naumov E.K., Bebikhov Yu. V., Korznikova E.A., Dmitriev S.V. // Nonlinear Dynamics - 2023 - Vol. 111. № (9) - P. 8135-8153. (Q1)

3. Naumov E.K. Discrete breathers in square lattices from delocalized nonlinear vibrational modes / Naumov E.K., Bebikhov Yu.V., Ekomasov E.G., Soboleva E.G., Dmitriev S.V. // Physical Review E - 2023 - Vol. 107. № (3) - 034214. (Q1)

4. Bebikhov Y.V. Discrete breathers in a β -FPUT square lattice from in-band external driving / Bebikhov Y.V., Naumov E.K., Semenova M.N., Dmitriev S.V. // Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation - 2024 - Vol. 132 - 107897 (Q1)

5. Naumov E.K. Discrete breathers in a square lattice based on delocalized modes / Naumov E.K., Bebikhov Y.V., Dmitriev S.V. // Physics of the Solid State - 2023 - Vol. 65. № (1) - P. 6-11. (Q4)

6. Abdullina D.U. Supratransmission in a β -FPUT square lattice / Abdullina D.U., Naumov E.K., Bebikhov Y.V., Semenova M.N., Kudreyko A.A., Dmitriev S.V. // Physics Letters A. - 2025 - Vol. 550 - 130587 (Q2)