

Федеральное государственное бюджетное
образовательное учреждение высшего образования
«Уфимский государственный нефтяной технический университет»

На правах рукописи



Бачурина Ольга Владимировна

**НЕЛИНЕЙНЫЕ ПРОСТРАНСТВЕННО-ЛОКАЛИЗОВАННЫЕ
КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ МОДЫ В МЕТАЛЛАХ**

Специальность:

01.04.07 — физика конденсированного состояния

Диссертация

на соискание ученой степени

кандидата физико-математических наук

Научный руководитель

доктор физико-математических наук

профессор

Дмитриев Сергей Владимирович

Уфа – 2019

СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ.....	4
ГЛАВА 1. ОБЗОР ЛИТЕРАТУРЫ ПО НЕЛИНЕЙНОЙ ДИНАМИКЕ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ	13
1.1. Колебания атомов кристаллической решетки. Основные понятия	13
1.2. Делокализованные нелинейные колебательные моды в кристаллах.....	20
1.3. История открытия дискретных бризеров.....	22
1.4. Примеры дискретных бризеров в кристаллах	25
1.4.1. Дискретные бризеры в кристаллах с молекулярной связью	26
1.4.2. Дискретные бризеры в кристаллах с ионной связью	27
1.4.3. Дискретные бризеры в кристаллах с ковалентной связью	28
1.4.4. Дискретные бризеры в кристаллах с металлической связью	30
1.5. Молекулярная динамика: основные понятия	33
1.6. Выводы по главе 1	41
ГЛАВА 2. НУЛЬМЕРНЫЕ ДИСКРЕТНЫЕ БРИЗЕРЫ В ГПУ БЕРИЛЛИИ.....	43
2.1. Описание модели и методика компьютерного моделирования.....	43
2.2. Неподвижный дискретный бризер.....	46
2.3. Движущейся дискретный бризер	48
2.4. Выводы по главе 2	50
ГЛАВА 3. ОДНОМЕРНЫЕ ДИСКРЕТНЫЕ БРИЗЕРЫ В ГЦК МЕТАЛЛАХ.....	52
3.1. Описание модели и методика компьютерного моделирования.....	52
3.2. Свойства одномерного дискретного бризера.....	55
Выводы по главе 3	61
ГЛАВА 4. ДВУМЕРНЫЕ ДИСКРЕТНЫЕ БРИЗЕРЫ В МЕТАЛЛАХ	62

4.1. Однокомпонентные делокализованные нелинейные колебательные моды треугольной решетки.....	62
4.1.1. Описание модели и методика компьютерного моделирования	62
4.1.2. Делокализованные нелинейные колебательные моды в ГПУ титане	66
4.1.3. Делокализованные нелинейные колебательные моды в ГЦК металлах	73
4.2. Двухкомпонентные делокализованные нелинейные колебательные моды треугольной решетки.....	78
4.2.1. Описание модели и методика компьютерного моделирования	78
4.2.2. Делокализованные нелинейные колебательные моды в ГЦК никеле	80
4.3. Выводы по главе 4	86
ГЛАВА 5. НУЛЬМЕРНЫЕ ДИСКООБРАЗНЫЕ ДИСКРЕТНЫЕ БРИЗЕРЫ.....	88
5.1. Описание модели и методика компьютерного моделирования.....	88
5.2. Плоский двумерный дискретный бризер	89
5.3. Дiskoобразный нульмерный дискретный бризер	94
5.4. Выводы по главе 5	100
ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ	101
СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ	103

ВВЕДЕНИЕ

Актуальность темы исследования. Изучение динамики кристаллической решетки представляет собой одну из важнейших задач физики конденсированного состояния. Малоамплитудные колебания атомов могут быть описаны в рамках линейной теории, однако при интенсивных термомеханических или иных воздействиях на кристаллы, атомы значительно отклоняются от своих равновесных положений, вследствие чего возникает необходимость учета нелинейности межатомных взаимодействий. Нелинейность межатомных связей приводит к обмену энергией между нормальными колебательными модами, к зависимости макроскопических свойств кристаллов от температуры, к возникновению и эволюции дефектов кристаллической структуры. В последние два десятилетия активно изучаются механизмы пространственной локализации колебательной энергии в виде дискретных бризеров. Отметим, что дискретный бризер (ДБ) – это пространственно локализованная колебательная мода большой амплитуды в бездефектном кристалле [1, 2]. Принципиальное отличие ДБ от колебательных мод локализованных на дефектах кристаллической структуры состоит в том, что первые существуют только при наличии нелинейности межатомных взаимодействий, а вторые могут существовать и в кристаллах с гармоническими связями. ДБ могут иметь сравнительно большие времена жизни (сотни и тысячи периодов атомных колебаний, то есть десятки пикосекунд). Это связано с тем, что ДБ совершают колебания на частотах вне спектра малоамплитудных колебаний кристалла и, не резонируя с бегущими малоамплитудными волнами (фононами), они не расходуют свою энергию на их возбуждение. Выход частоты колебания ДБ из спектра обусловлен нелинейной зависимостью частоты колебательной моды от ее амплитуды. Межатомные взаимодействия могут проявлять как мягкий, так и жесткий тип нелинейности, приводя соответственно либо к уменьшению, либо к росту частоты моды с увеличением амплитуды. В кристаллах, не имеющих запрещенной зоны (щели) в

фононном спектре, могут существовать лишь ДБ с жестким типом нелинейности, поскольку их частота должна возрастать с амплитудой для того, чтобы оказаться выше верхней границы фононного спектра. В кристаллах со щелью в спектре, кроме того, могут существовать так называемые щелевые ДБ, имеющие частоты в щели спектра. Такие ДБ могут иметь как жесткий, так и мягкий тип нелинейности [3, 4].

После публикации работы [5] в 1993 г. долгое время считалось, что кристаллы не могут поддерживать ДБ с частотами выше фононного спектра, поскольку межатомные потенциалы проявляют мягкий тип нелинейности. На основе проведенных расчетов, авторы этой работы сделали вывод, что ДБ могут существовать лишь в кристаллах со щелью в фононном спектре, и первые исследования, как теоретические [6], так и экспериментальные [7], были посвящены щелочно-галогидному кристаллу NaI, который отвечает данному требованию. Активно исследовались щелевые ДБ в упорядоченных сплавах с большой разницей масс компонент, которая обеспечивает наличие достаточно широкой щели в фононном спектре [8-11]. Первая работа, где методом молекулярной динамики была показана возможность существования ДБ в чистых металлах с бесщелевым спектром, датируется 2011 годом [12]. Авторы, однако, не подвергли сомнению выводы работы [5] и объяснили полученные результаты эффектом экранирования зарядов в металлах. И лишь в работах [13, 14] было показано, что запрет на существование ДБ в кристаллах справедлив лишь для одномерных кристаллов (именно они рассматривались в [5]), а в двумерных и трехмерных кристаллах ДБ могут существовать даже в отсутствие экранирования электрических зарядов. Причина состоит в том, что межатомные связи проявляют мягкий тип нелинейности на больших расстояниях, где основной вклад дает взаимодействие их электронных оболочек, но на меньших расстояниях существенный вклад дает межъядерное взаимодействие с жестким типом нелинейности. Для того чтобы частота ДБ росла с амплитудой, необходимо обеспечить большой вклад в динамику от жесткого ядра потенциала, что

невозможно для одномерной нелинейной цепочки без локального потенциала, но оказывается возможным для кристаллов более высокой размерности.

Возможно ли существование ДБ различного типа в одном и том же кристалле? Положительный ответ на этот вопрос был дан для графена [15] и для двумерного кристалла Морзе [13, 16]. Интересно, что в этих работах для возбуждения ДБ в молекулярно-динамических расчетах применялся достаточно общий подход, основанный на наложении локализирующих функций на различные делокализованные нелинейные колебательные моды (ДНКМ), полученные в работах Чечина с соавторами на основе теоретико-групповых методов [17, 18]. ДНКМ (иными словами, буши нормальных нелинейных мод [17, 18]) – это делокализованные колебательные моды большой амплитуды, являющиеся точными решениями нелинейных динамических уравнений, обусловленные точечной симметрией кристаллической решетки. В настоящей работе, для решения поставленных задач, также будут широко использоваться ДНКМ.

При изучении нелинейных колебаний в кристаллических решетках большое значение имеет их пространственная размерность. Существуют как одномерные кристаллы (полимерные цепочки, карбин и др.), так и двумерные (графен, силицен, фосфорен, нитрид бора, дисульфид молибдена и др.), однако подавляющее большинство кристаллов, используемых на практике, трехмерны. В одномерных кристаллах, экспоненциально локализованные в пространстве ДБ являются нульмерными объектами. В двумерных кристаллах возможны как нульмерные ДБ, то есть пространственно локализованные вдоль обоих координатных направлений, так и одномерные ДБ, локализованные вдоль одного направления и делокализованные вдоль другого. По-видимому, впервые одномерные ДБ в двумерном кристалле графена исследовались в работе [19]. По аналогии, в трехмерных кристаллах можно говорить о нульмерных, одномерных и двумерных ДБ. В последнем случае предполагается возбуждение атомов вдоль некоторой плоскости, причем, с удалением от данной плоскости, амплитуда их колебаний должна экспоненциально уменьшаться. Следует заметить, что о

возможности существования и свойствах одномерных и двумерных ДБ в трехмерных кристаллах до настоящего времени ничего не было известно и работы в данном направлении не велись. Описание новых долгоживущих пространственно локализованных нелинейных колебательных мод в трехмерных кристаллах представляет несомненный интерес для широкого круга исследователей и является **актуальной** задачей физики твердого тела.

В настоящей диссертационной работе в качестве *объекта исследования* выбраны чистые металлы с различной кристаллической решеткой, а *предметом исследования* являются ДБ в этих металлах. Следует отметить, что нульмерные ДБ в чистых металлах активно изучаются [20-27] после пионерской работы [12]. Имеются и экспериментальные работы, свидетельствующие о существовании ДБ в кристаллической решетке урана [28, 29]. Представляется интересным и важным описание новых, ранее не исследованных типов ДБ, имеющих различную пространственную размерность.

Целью диссертационной работы является изучение свойств нелинейных локализованных колебательных мод различной пространственной размерности в ГПУ и ГЦК металлах при помощи молекулярно-динамического моделирования.

Поставленная цель была достигнута в результате решения следующих **задач**:

1. Построение молекулярно-динамических моделей для исследования нелинейных колебательных мод в металлах с ГПУ и ГЦК решеткой.
2. Исследование неподвижных и движущихся нульмерных стречневых дискретных бризеров в ГПУ бериллии.
3. Изучение свойств одномерных дискретных бризеров в кристаллах с ГЦК решеткой (медь, алюминий, никель).
4. Изучение свойств двумерных (плоских) дискретных бризеров в кристаллах с ГПУ (титан) и ГЦК решеткой (медь, алюминий, никель).
5. Изучение свойств нульмерных дискообразных дискретных бризеров в кристаллах с ГЦК решеткой (медь, алюминий, никель).

Методы исследования. Поставленные задачи решались методами классической молекулярной динамики с использованием апробированных многочастичных межатомных потенциалов взаимодействия.

Научная новизна.

1. Показано, что в трехмерных кристаллах могут существовать дискретные бризеры различной размерности $k < 3$.
2. Установлено, что один и тот же металл допускает существование дискретных бризеров, различающихся как размерностью, так и структурой атомных колебаний.
3. В чистых металлах (алюминий, медь, никель) впервые возбуждены дискретные бризеры новых типов: нульмерные, одномерные и двумерные.
4. Рассчитаны характеристики этих дискретных бризеров: зависимость частоты от амплитуды, степень пространственной локализации, время жизни, диапазон возможных энергий.
5. Установлено какие из восьми делокализованных нелинейных колебательных мод двумерной треугольной решетки порождают двумерные дискретные бризеры в ГЦК металлах (алюминий, медь, никель) и ГПУ титане.

Научная и практическая значимость работы заключается в том, что в работе впервые показана возможность существования дискретных бризеров различной пространственной размерности с жестким типом нелинейности в трехмерных кристаллах с ГЦК и ГПУ решеткой, что расширяет наши представления о возможных типах пространственно локализованных нелинейных колебательных модах в кристаллах. Следовательно, в диссертации наглядно продемонстрировано нетривиальное значение пространственной размерности кристаллов в вопросах существования и изучения свойств дискретных бризеров. Настоящая работа стимулирует постановку экспериментальных исследований по обнаружению дискретных бризеров с жестким типом нелинейности в кристаллах с простой структурой, не имеющих щели в фононном спектре, в частности, в

чистых металлах, а также исследования влияния дискретных бризеров на различные свойства материалов.

Достоверность результатов диссертации гарантируется использованием стандартных, хорошо апробированных алгоритмов метода молекулярной динамики и межатомных потенциалов для решения задач нелинейной динамики кристаллических решеток различного типа и размерности. Полученные результаты всесторонне тестировались на сходимость при изменении размеров расчетной ячейки и уменьшении шага численного интегрирования уравнений движения атомов. Проводилось сопоставление результатов, полученных с использованием схем численного интегрирования различной точности. Контроль точности вычислений осуществлялся, в том числе, по точности сохранения полной энергии системы в задачах для NVE ансамблей. Полученные численные результаты не противоречат базовым физическим законам и ранее опубликованным результатам по изучению нелинейной динамики модельных и реальных кристаллов.

Положения выносимые на защиту:

1. Результаты исследования свойств неподвижных и движущихся нульмерных срежневых дискретных бризеров в ГПУ металле бериллии.
2. Результаты исследования одномерных дискретных бризеров в металлах с ГЦК решеткой (алюминий, медь, никель).
3. Результаты исследования двумерных (плоских) дискретных бризеров в трехмерном ГПУ кристалле титана и в металлах с ГЦК решеткой (алюминий, медь, никель).
4. Результаты исследования двумерных и нульмерных дискообразных дискретных бризеров в металлах с ГЦК решеткой (алюминий, медь, никель).

Апробация работы. Результаты диссертационной работы были доложены на следующих конференциях и семинарах: 14-я международная Школа-симпозиум «Фундаментальные основы атомистического многомасштабного моделирования» (Новый Афон, 2016), LX Международная конференция

«Актуальные проблемы прочности» (Витебск, Беларусь, 2018), XII Всероссийская научная конференция молодых ученых «Нанoeлектроника, нанофотоника и нелинейная физика» (Саратов, 2018), XV Международная школа-семинар «Эволюция дефектных структур в конденсированных средах» (Барнаул, 2018), открытая школа-конференция стран СНГ «Ультрамелкозернистые и наноструктурные материалы – 2018» (Уфа, 2018), The 12th CHAOS International Conference on Non Linear Analysis and Modeling: Theory and Applications (Greece, Crete, Chania 2019).

Личный вклад автора заключался в выборе методов решения задач, построении алгоритмов программных комплексов, проведении модельных расчетов, анализе и интерпретации результатов, формулировке выводов. Диссертация является самостоятельной работой, обобщившей результаты, полученные лично автором, либо при его непосредственном участии. Автор самостоятельно осуществлял подготовку и представление докладов по полученным результатам на научных конференциях и семинарах.

Публикации. По теме диссертации опубликовано 9 статей в отечественных и международных изданиях, рекомендованных ВАК РФ, пять из которых индексируются в Web of Science и Scopus, а также тезисы на перечисленных выше конференциях и семинарах.

Объём и структура работы. Диссертация состоит из введения, 5 глав, изложена на 118 страницах, содержит 35 рисунков, 7 таблиц и библиографию из 144 наименований.

Содержание работы по главам.

В первой главе дан обзор литературы по теме диссертации и современным методам компьютерного моделирования нелинейной динамики кристаллической решетки. Кратко изложены результаты экспериментальных и теоретических работ, посвященных изучению дискретных бризеров в различных кристаллических структурах, и более подробно в металлах и упорядоченных

сплавах. Представлена существующая классификация ДБ, учитывающая тип химической связи в кристалле, его пространственную размерность.

Во второй главе обсуждаются неподвижные и движущиеся нульмерные ДБ в трехмерной модели ГПУ бериллия с потенциалом многочастичного взаимодействия, основанным на методе погруженного атома. Показывается возможность существования неподвижного и движущегося ДБ и определяются их свойства в широком интервале амплитуд, в том числе степень пространственной локализации и максимальная скорость движения ДБ в монокристалле бериллия.

В третьей главе исследуются одномерные ДБ в трехмерных моделях ГЦК металлов (Al, Cu, Ni). Впервые вводится понятие одномерного ДБ, то есть делокализованного вдоль одного кристаллографического направления и локализованного вдоль двух других. Рассчитываются фононные спектры для исследуемых ГЦК металлов. Определяются характеристики данных ДБ, такие как диапазон возможных частот и связанная с ними энергия колебаний.

В четвёртой главе изучаются двумерные ДБ в трехмерных моделях кристаллов с ГПУ (Ti) и ГЦК (Al, Cu, Ni) решетками, возбужденные на основе восьми однокомпонентных ДНКМ и одной двухкомпонентной ДНКМ, полученными ранее Г.М. Чечиным и соавторами для двумерной треугольной решетки. Моделирование для Ti проводится при помощи двух потенциалов межатомного взаимодействия. Определяются зависимости времени жизни, частоты и колебательной энергии всех ДНКМ от амплитуды атомных колебаний.

В пятой главе показывается, что на основе двумерных ДБ в трехмерных моделях ГЦК металлов (Al, Cu, Ni) возможно возбуждение устойчивых нульмерных ДБ нового типа, которые получаются путем наложения локализирующих функций с радиальной симметрией. Впервые вводится понятие дискообразных нульмерных ДБ. Определяется максимальное время жизни таких ДБ, степень их пространственной локализации, частота и энергия в зависимости от амплитуды атомных колебаний.

Для удобства чтения нумерация математических выражений, рисунков и таблиц проведена отдельно по главам, а ссылки на работы являются сквозными и приводятся в конце настоящей диссертации.

Благодарности

Автор выражает глубочайшую признательность научному руководителю профессору, д.ф.-м.н. Дмитриеву Сергею Владимировичу за четко поставленные задачи исследования, постоянную помощь при анализе и обсуждении полученных результатов, а также вдохновение на всех этапах работы над диссертацией.

Автор искренне благодарен к.ф.-м.н. Мурзаеву Рамилю Тухватовичу за ценные советы и неоценимую помощь при подготовке исходных структур для молекулярно-динамического моделирования.

Автор признателен всем коллегам за замечания и комментарии, которые позволили существенно улучшить диссертационную работу.

ГЛАВА 1. ОБЗОР ЛИТЕРАТУРЫ ПО НЕЛИНЕЙНОЙ ДИНАМИКЕ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ

В данной главе рассмотрены общие понятия связанные теорией колебаний кристаллической решетки и с методами молекулярной динамики. Проведен анализ научной литературы опубликованной в последние десятилетия в области дискретных брэггов (ДБ). Представлены основные результаты исследования ДБ в кристаллах с различным типом связи, полученные в последнее время при помощи компьютерного моделирования методом молекулярной динамики, а также обсуждение их роли в физике конденсированного состояния.

1.1. Колебания атомов кристаллической решетки. Основные понятия

В твердом теле при любой температуре все атомы совершают колебания около их положений равновесия – узлов кристаллической решетки. Такие колебания можно считать гармоническими при небольших амплитудах. С повышением температуры происходит увеличение амплитуды колебаний около решеточных положений, а также колебательной энергии атомов. В связи с тем, что атомы в твердом теле сильно связаны друг с другом, возбуждение колебаний одного из атомов передается ближайшим атомам, которые затем передают это возбуждение своим соседям и т. д. Этот процесс передачи возбуждений подобен процессу распространения звуковых волн в твердом теле. Все возможные колебания сильно связанных между собой атомов можно представить как совокупность взаимодействующих упругих волн различной длины, распространяющихся по всему объёму кристалла [30]. Такое коллективное движение атомов в кристалле называется *нормальным колебанием (модой)* решетки, а соответствующие им возбуждения – кванты звука или фононы. Число

подобных колебаний, которое может возникнуть в решетке, равно числу степеней свободы частиц кристалла ($3N$), где N число частиц.

Характер колебаний кристаллической решетки зависит от симметрии кристалла, типа химической связи, вида и концентрации дефектов в кристаллах. Смещения атомов в процессе колебаний тем больше, чем выше температура, но они гораздо меньше постоянной решетки вплоть до температуры плавления. Силы, которые стремятся удерживать атомы в положениях равновесия, пропорциональны их относительным смещениям так, как если бы они были связаны друг с другом упругими пружинами (см. рисунок 1.1). Представление кристалла в виде совокупности частиц, связанных идеально упругими силами, называется гармоническим приближением [30].

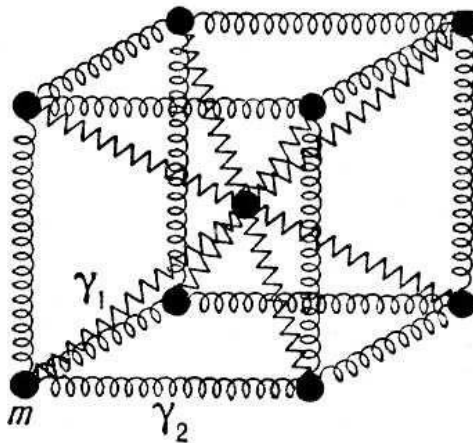


Рисунок 1.1 – Представление ОЦК кристалла в виде совокупности частиц с массой m , связанных между собой пружинами жесткостью γ_1, γ_2 . Взято из [31].

Подобно простому гармоническому осциллятору, все частицы кристалла в процессе нормального колебания колеблются около своих положений равновесия с постоянной частотой ω по закону $u \sim \sin \omega t$. Одновременно в кристалле могут присутствовать все возможные нормальные колебания, которые являются независимыми друг от друга.

Согласно принципу суперпозиции, любую стоячую волну нормального колебания можно представить в виде двух упругих плоских бегущих волн, распространяющихся в противоположных направлениях (нормальные волны). Другой характеристикой плоской бегущей волны является волновой вектор k , определяющий направление движения фронта волны, длину волны λ и поляризацию, которая определяет характер индивидуального движения частиц. В таком случае, имеет место эллиптическая поляризация, то есть каждый атом описывает эллипс около своего положения равновесия (см. рисунок 1.2), а нормаль к плоскости эллипса не совпадает по направлению с k [31].

В кристаллической решётке эллиптические орбиты атомов, занимающие эквивалентные положения одинаковы. В кристаллах, где каждый узел является центром симметрии, все нормальные волны плоскополяризованы. Это означает, что атомы в любом нормальном колебании совершают возвратно-поступательные движения около своих положений равновесия.

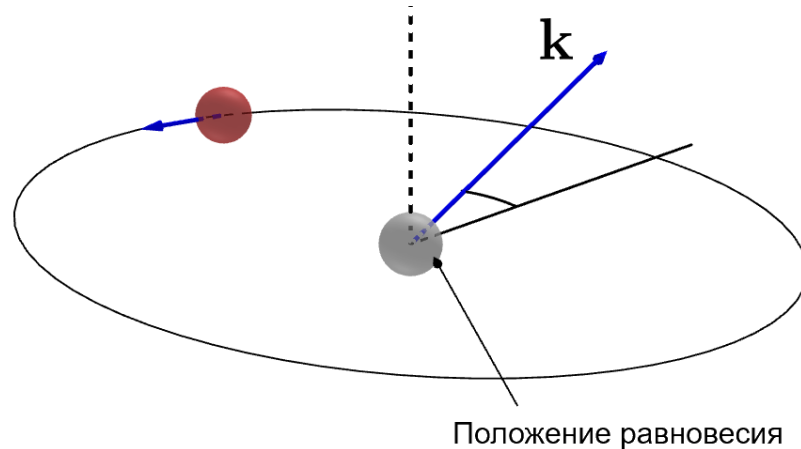


Рисунок 1.2 – Эллиптическая поляризация упругих волн в кристалле, где k – волновой вектор.

Для любого значения волнового вектора k существует $3n$ типов нормальных волн с различной поляризацией. Они нумеруются целочисленной переменной $s = 1, 2, \dots, 3n$ и называется ветвями нормальных колебаний. Для волн типа s , параметры ω и k являются фиксированными и связаны между собой *законом*

дисперсии: $\omega = \omega(k, s)$. Например, если представить кристалл в виде совокупности одинаковых атомов массы m , расположенных на равных расстояниях a друг от друга и связанных попарно пружинами с жёсткостью γ так, что они образуют бесконечную цепочку и могут смещаться только вдоль её оси (рисунок 1.3а), то элементарная ячейка состоит из одной частицы и существует только одна ветвь частоты нормальных колебаний с законом дисперсии [30]:

$$\omega(k) = 2\sqrt{\frac{\gamma}{m}} \left| \sin\left(\frac{ka}{2}\right) \right| \quad (1.1)$$

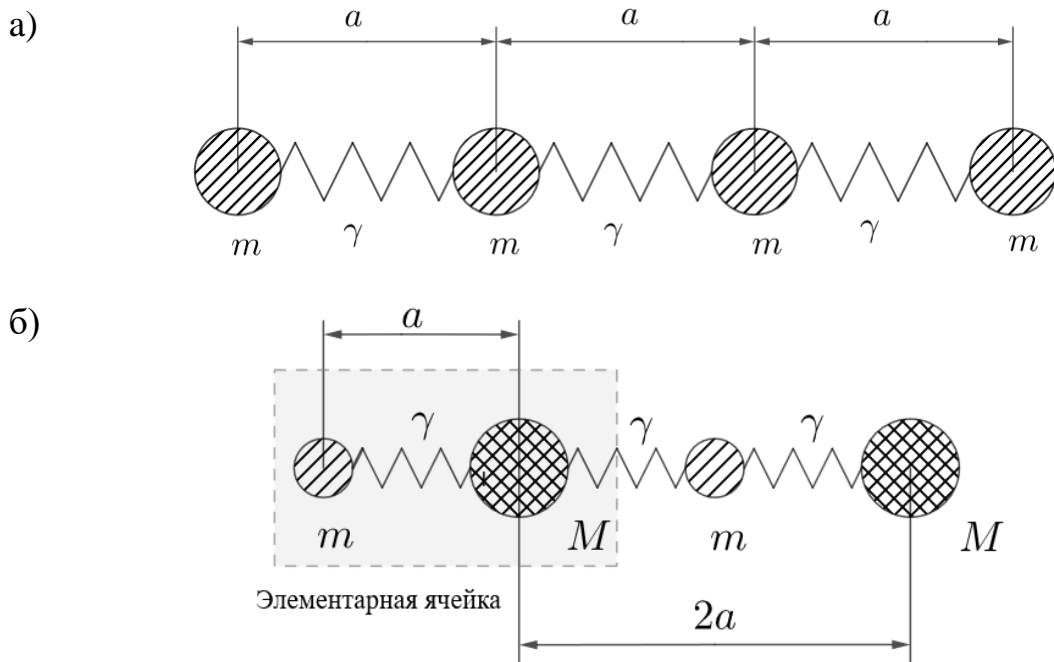


Рисунок 1.3 – Простейшие модели движения атомов кристаллической решетки: а) линейная цепочка из одинаковых атомов, б) линейная двухатомная цепочка, в элементарной ячейке параметра $2a$ содержится два атома массы M и m . Жесткость пружины γ .

Ячейка двухатомной линейной цепочки (рисунок 1.3 б) содержит 2 частицы с массами m и M и тогда имеется 2 ветви с более сложным дисперсионным соотношением (см. рисунок 1.4):

$$\omega^2 = \gamma \left(\frac{M+m}{Mm} \right) \mp \gamma \sqrt{\left(\frac{M+m}{Mm} \right)^2 - \frac{4}{Mm} \sin^2(ka)}, \quad M > m \quad (1.2)$$

$$\omega_1 = 2\sqrt{\frac{\gamma}{m}}, \quad \omega_2 = 2\sqrt{\frac{\gamma}{M}}, \quad \omega_3 = \sqrt{2\gamma \left(\frac{1}{M} + \frac{1}{m} \right)} \quad (1.3)$$

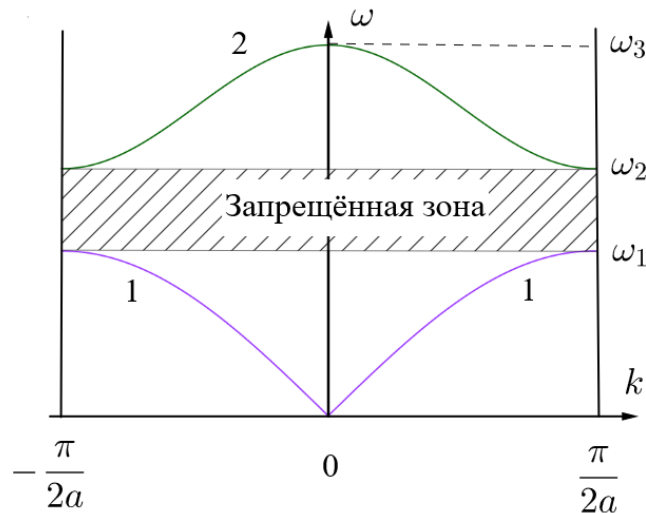


Рисунок 1.4 – Дисперсионные кривые для линейной двухатомной цепочки:

1 – акустическая ветвь, 2 – оптическая ветвь.

Упругие волны в кристалле всегда подчиняются закону дисперсии. В частности фазовая скорость отличается от групповой, с которой по кристаллу переносится энергия колебаний. Увеличение частоты ω упругих волн, распространяющихся в сплошной среде, с одной стороны может неограниченно возрастать с ростом волнового числа, но с другой стороны, конечность энергии связи атомов кристаллической решётки является причиной появления максимальной частоты колебаний $\omega_{\text{макс}}$ (обычно $\sim 10^{13}$ Гц). Таким образом, собственные частоты принадлежат интервалу от 0 до $\omega_{\text{макс}}$, в котором возможно существование пустых участков – запрещенных зон (см. рисунок 1.4). Запрещенной зоны между соседними ветвями нет, если ветви перекрываются. Колебания с частотами $\omega > \omega_{\text{макс}}$ не могут распространяться в кристалле, и являются затухающими.

Аналогично линейной двухатомной цепочке, колебания атомов в трехмерной решетке описываются тремя модами, которые определяют три ветви дисперсионных соотношений [30]:

$$\omega = \omega(k, s), \quad s = 1, 2, 3 \quad (1.5)$$

Три первые ветви колебаний при $s = 1, 2, 3$ называются акустическими. В случае, когда длина волны λ значительно превышает наибольший из периодов пространственной решетки (k – мало), ветви характеризуются линейным законом дисперсии $\omega = ck$. Это обычные звуковые волны, а c – фазовая скорость их распространения, которая зависит от направления распространения фронта волны. Такие волны плоскополяризованы в одном из трёх взаимно перпендикулярных направлений для $s = 1, 2, 3$ и соответствуют колебаниям кристалла как сплошной среды. В анизотропном кристалле ни одно из этих направлений не совпадает с направлением распространения волны, то есть с вектором k . Лишь в упругой изотропной среде звуковые волны имеют только продольную и поперечную поляризации. Акустические ветви принадлежат частотному диапазону от нуля до $\sim 10^{13}$ Гц. С уменьшением длины волны, закон дисперсии становится более сложным.

Для остальных $3 \cdot (n-1)$ ветвей, частоты смещения атомов в колебательном процессе соответствует большей длине волны и происходят так, что центр масс отдельной элементарной ячейки покоится. Элементарная ячейка в ионном кристалле состоит из ионов противоположных знаков. Колебательные движения в них можно возбудить переменным электрическим полем с частотой порядка $2 \cdot 10^{13}$ Гц, принадлежащей инфракрасной области электромагнитного излучения. Такие ветви называются оптическими. Активность оптических мод проявляется испусканием и поглощением инфракрасного излучения [30].

В действительности, возвращающие силы не строго пропорциональны смещениям атомов из положений равновесия и колебания кристалла не являются

строго гармоническими, то есть всегда имеется, так называемый, *ангармонизм* [32]. Малые амплитуды колебаний атомов приводят к слабой нелинейности межатомных сил. Соответственно, отдельные нормальные колебания не являются независимыми, а оказываются связанными друг с другом и между ними, как и в системе связанных маятников возможен резонанс.

Возникновение тепловых потоков происходит при неравномерном нагревании твёрдого тела. Хорошо известно, что в металлах большая часть тепловых потоков переносится электронами, а в диэлектриках – нормальными волнами (фононами). Следовательно, в диэлектриках или решеточной составляющей теплопроводности металлов, в отсутствии ангармонизма тепловой поток распространялся бы со скоростью нормальных волн, то есть приблизительно со скоростью звука в среде. Благодаря ангармонизму, волны в тепловом потоке обмениваются энергией и интерферируют друг с другом. В процессе такой интерференции происходит потеря суммарного импульса теплового потока. В результате возникает теплосопrotивление, а тепловая энергия переносится с диффузионной скоростью, гораздо меньшей скорости распространения упругой энергии, например звуковой волны. Ангармонизм является также одной из причин затухания ультразвуковых волн в кристаллах.

Экспериментальные методы изучения колебаний кристаллической решетки довольно разнообразны [33]. Одним из методов является их возбуждение при помощи инфракрасного излучения, которое сопровождается резонансным уменьшением прозрачности кристалла и позволяет не только обнаружить эти колебания, но и определить их частоты. Закон дисперсии и поляризация нормальных колебаний могут быть определены с помощью исследования неупругого рассеяния нейтронов в кристаллах и диффузного рассеяния рентгеновских лучей. Благодаря эффекту Мессбауэра возможно обнаружить среднеквадратичные смещения и импульсы атомов в процессе колебаний кристаллической решетки.

1.2. Делокализованные нелинейные колебательные моды в кристаллах

Условно нелинейные колебательные моды можно разделить на два вида: делокализованные, когда все частицы участвуют в соответствующем динамическом режиме, и локализованные, где существенные изменения амплитуды колебаний претерпевают лишь некоторые атомы системы. Локализованные и периодические во времени колебания решетки в пространстве получили название «дискретный бризер». Делокализованные нелинейные колебательные моды (ДНКМ) – это симметрично обусловленные точные решения уравнений движения узлов нелинейной решетки вне зависимости от типа взаимодействий между узлами и при любых амплитудах (моды могут проявлять неустойчивость при превышении амплитудой некоторого критического значения) в определенном интервале, ширина которого зависит от типа моды и от используемых потенциалов [34]. Динамика таких мод может быть описана системой n обыкновенных дифференциальных уравнений, при этом число n определяет размерность моды, которое обычно во много раз меньше размерности исходной системы.

Теория бушей нелинейных нормальных мод или ДНКМ была разработана в работах [35, 36]. Термин «буш нормальных мод» происходит от английского слова «bush», то есть «куст», а сам термин был предложен авторами этой теории. Бушами мод называются инвариантные многообразия, которые соответствуют подгруппам группы симметрии Гамильтониана данной физической системы. Их можно рассматривать как обобщение понятия нормальных мод для случая нелинейных систем с дискретной симметрией, в частности, нелинейных решеток. В настоящей работе будут рассмотрены как однокомпонентные, так и двухкомпонентные ДНКМ, то есть те, амплитуда которых определяется соответственно одним и двумя параметрами.

Необходимо отметить, что термин буш нелинейных нормальных мод может использоваться наравне с термином делокализованная нелинейная колебательная

мода, которому отдано предпочтение в данной работе, поскольку он подчеркивает отличие ДНКМ от пространственно локализованных мод – дискретных бризеров.

В работе [34] рассмотрены некоторые характеристики одномерных ДНКМ с использованием парного потенциала Морзе. Интерес к данному исследованию обусловлен несколькими причинами. Во-первых, ДНКМ, с жестким типом нелинейности (частота с ростом амплитуды выходит из фонованого спектра кристалла), могут использоваться для возбуждения ДБ в молекулярно-динамических расчетах путем наложения локализуемых функций [15, 37]. Во-вторых, ДНКМ с частотами вне фонованого спектра могут породить ДБ в результате модуляционной неустойчивости. В третьих, ДНКМ, являясь коротковолновыми колебательными модами, могут быть относительно просто изучены из первых принципов, что дает возможность подгонки межатомных потенциалов по полученным данным. Более того, как показано в работе [38], возбуждение ДНКМ оказывает влияние на физические и механические свойства кристаллов.

Существование четырех типов одномерных ДНКМ в графене с перемещениями атомов в плоскости листа было доказано в работе [17], а авторами [39] изучены их динамические свойства в рамках *ab initio* моделирования на основе теории функционала плотности на относительно малых временных интервалах. Устойчивость ДНКМ в графене с использованием стандартного набора межатомных потенциалов исследовалась в работах [19, 40]. Показано, что такие ДНКМ могут существовать достаточно продолжительное время в течение нескольких тысяч периодов колебаний. Более предпочтительным оказалось начальное возбуждение, когда атомы двигаются навстречу друг другу, что приводит к возбуждению долгоживущих щелевых ДБ в графене. В работе [19] были определены критические значения начальных атомных амплитуд, выше которых ДНКМ теряют свою стабильность.

Попытка изучения неустойчивости колебательных мод в двумерной гексагональной решетке с использованием парного потенциала была предпринята

Е.А. Корзниковой и соавторами [41]. В частности, было показано, что распад двух из четырех мод приводит к появлению долгоживущих ДБ с частотами, лежащими выше верхней границы фононного спектра, в то время как распад двух других мод происходит почти сразу после нескольких колебаний, в результате чего энергия рассеивается в виде тепловых колебаний решетки. Авторами [42-44] была изучена стабильность одномерных и двумерных ДНКМ в нелинейной моноатомной цепочке и выяснено, что учёт тепловых колебаний может привести к потере устойчивости ДНКМ даже при малых отклонениях от их первоначальной структуры смещений.

Таким образом, можно заключить, что изучение ДНКМ в различных кристаллических решетках представляет собой важную задачу. Описанные выше исследования ДНКМ проводились исключительно для простых парных потенциалов в одномерной и двумерной решетках, в то время как попытки проведения молекулярно-динамических расчетов стабильности ДНКМ с использованием многочастичных потенциалов взаимодействия до сих пор не предпринимались. Кроме того, поведение ДНКМ в трехмерной решетке должно отличаться от их поведения в решетках меньшей размерности, что связано, в первую очередь, с наличием соседних атомных слоев, которые оказывают влияние на колебания атомов и способствуют рассеянию энергии моды по объему кристалла в виде тепловых колебаний решетки.

1.3. История открытия дискретных бризеров

Первые новаторские работы по локализации колебательной энергии в гармонических кристаллах с примесями и пространственными дефектами были разработаны М.И. Лифшицем в 1956-66 гг. прошлого столетия [45].

Начало становления теории пространственных локализованных и периодических по времени высокоамплитудных мод в нелинейных дискретных структурах с трансляционной симметрией или дискретных бризеров связано с

работой Сиверса и Такено [46], где рассматривались цепочки одномерных частиц взаимодействующих с ближайшими соседями посредством простых нелинейных потенциалов. Ими было установлено, что в чистой ангармонической решетке возникает новый тип локализованной моды. Эти моды могут появиться при низких температурах в сильно ангармонических твердых телах, таких как квантовые кристаллы, а также обычные твердые вещества.

Последующие после работы Сиверса и Такено исследования были направлены на строгое доказательство существования ДБ и выяснение условий их устойчивости [47-49]. Авторами работы [50] было установлено, что дискретность и нелинейность среды являются двумя необходимыми условиями существования ДБ, в то время как конкретный вид нелинейного потенциала взаимодействия между частицами влияет лишь на его свойства, но не оказывает никакого влияния на саму возможность их возбуждения в данном кристалле.

Теоретическое предсказание ДБ породило вопрос о существовании подобных объектов в реальном мире, и спустя примерно одно десятилетие их стали обнаруживать экспериментальным путем в нелинейных дискретных системах различной физической природы. Так, в 1998 году были найдены дискретные пространственные оптические солитоны в массиве из 41 волновода [51]. Солитон - это уединенная волна, способная двигаться в среде практически не рассеивая свою энергию и, более того, сохраняя свою индивидуальность при столкновении с другими солитонами. Примером динамического солитона могут служить ДБ. Далее в работе [52] было показано, что пространственно-временные дискретные солитоны возможны в нелинейных фотонно-кристаллических структурах. Проведенный анализ продемонстрировал, что эти состояния могут распространяться неискаженными вдоль ряда связанных резонаторов и следовать любому заданному пути в трехмерной среде. Фляйшер с соавторами [53] для обнаружения солитонов использовал оптическую индукцию и интерференцию двух или более плоских волн в светочувствительном материале (для создания

двумерной фотонной решетки). В итоге был получен и реализован способ для явлений нелинейных локализаций в фотонных решетках и кристаллах.

В работе [54] проводилось экспериментальное наблюдение ДБ в атомных волновых пакетах рубидия, представляющих собой совокупность волн, обладающих разными частотами. Рассматривалась ситуация отталкивающего взаимодействия атомов с атомами внутри слабого периодического потенциала, где аномальная дисперсия может быть реализована на границе зоны Бриллюэна. Если когерентный атомный волновой пакет подготовлен на соответствующем краю полосы фононного спектра, внутри щели образуется солитон. Показано, что после времени распространения 25 мс образуется не рассеивающийся волновой пакет. Наблюдаемое поведение демонстрирует качественные особенности формирования щелевых солитонов, такие как: а) во время образования солитонов избыточные атомы излучаются и рассеиваются во времени, б) солитоны не меняют свою форму и число атомов во время распространения, в) щелевые солитоны не движутся. Сильной стороной работы является точный контроль подготовки и манипуляций в реальном времени, который позволяет систематически исследовать щелевые солитоны.

Известно, что эффект Джозефсона – это явление протекания сверхпроводящего тока через тонкий слой диэлектрика, разделяющий два сверхпроводника. Это явление широко используется для измерения напряжения и магнитных полей с очень высокой точностью. А возможность использования джозефсоновского контакта как генератора электромагнитных волн или как приёмника в области частот, недостижимых другими методами, открыла широкие перспективы на будущее. Впервые ДБ или динамические солитоны в массивах сверхпроводящих джозефсоновских контактов были обнаружены экспериментально в работах [55-57]. Оказалось, что вдоль длинного джозефсоновского перехода может двигаться солитон, перенося квант магнитного потока [58]. Это свойство – использование солитонов для записи и передачи информации в системе большого числа связанных между собой джозефсоновских

переходов, послужило одной из главных идей для создания квантового компьютера.

Экспериментально и численно изучены условия существования и устойчивости ДБ в периодических нелинейных электрических цепях [59, 60]. Причем сравнение теории и эксперимента в данных работах показывает очень хорошее качественное и даже количественное согласие.

С помощью сканирующей атомно-силовой микроскопии были измерены нелинейные колебательные свойства периодической матрицы микромеханических генераторов и ДБ найдены в массивах механических зондов [61, 62]. Динамика притяжения и отталкивания примесей собственной локализованной моды в управляемом одномерном зонде рассмотрена в работе [63].

Исследования динамики нано-электромеханических челноков с приводом от переменного тока проводились в работе [64]. Показано, что нестабильность, обусловленная параметрическим усилением синусоидальных механических волн, приводит к возникновению пространственно локализованных механических колебаний или ДБ, а затем к резкому изменению свойств электропроводности. В частности, было определено выпрямление (изменение направления) переменного тока с помощью ДБ, что представляет возможность использования наномеханических датчиков.

Как видно из приведенных выше работ, экспериментальные исследования по обнаружению ДБ являются довольно сложной и трудоемкой задачей. Тем не менее, работы в данной области активно проводятся и наукоемкая база с каждым годом расширяется.

1.4. Примеры дискретных бризеров в кристаллах

Известно, что свойства кристаллов определяются особенностями атомов кристаллической решетки, силами связей и взаимным расположением в пространстве. В зависимости от природы частиц и от характера сил

взаимодействия различают четыре вида химической связи в кристаллах: молекулярную (Ван-дер-ваальсовские силы), ковалентную, ионную и металлическую. На основе этого в таблице 1 приведена систематизация полученных ранее другими авторами результатов по ДБ, возможность существования которых была показана методами компьютерного моделирования в кристаллах с различными типами связей. Пройдемся кратко по основным опубликованным в научной литературе результатам и остановимся более подробно на ДБ в металлах.

Таблица 1. Дискретные бризеры в различных кристаллах, существование которых обнаружено методами молекулярной динамики.

Тип связи	молекулярная	ионная	ковалентная	металлическая
Материалы	твердый Ar	NaI, NaCl, KI	алмаз, графен, графан, Si, Ge	ОЦК (Nb, Fe, V, W) ГЦК (Ni, Cu) ГПУ (Be, Mg, Zr, Co) орторомбическая (U) сплавы (Pt ₃ Al, CuAu)

1.4.1. Дискретные бризеры в кристаллах с молекулярной связью

Твердое кристаллическое состояние газов хорошо описывается при помощи парных потенциалов взаимодействия типа Леннарда-Джонса и Морзе. В работах [16, 65-67] показано, что ДБ различного типа могут быть возбуждены как в одномерных цепочках, так и двумерных кристаллах данного типа. Это позволяет сделать вывод о возможности существования ДБ в кристаллической решетке твердых газов.

1.4.2. Дискретные бризеры в кристаллах с ионной связью

Первая работа по обнаружению ДБ в кристаллах щелочно-галогидного NaI была выполнена с использованием метода молекулярной динамики [6]. Колебания с большой амплитудой совершает один атом Na в кристаллографических направлениях [111] или [011] с частотой, превышающей спектр малоамплитудных колебаний кристалла. Показано, что в ионной структуре такая локализованная мода может быть стабильной в течение 200 периодов колебаний. Такие ДБ бризеры получили название *щелевых*. Наличие щели (запрещенной зоны) в фоннном спектре характеризуется мягким типом нелинейности (частота ДБ уменьшается с амплитудой) и обуславливается значительной разницей масс компонентов кристалла (атом натрия в 5,5 раз легче атома йода). Для этого же кристалла в условиях теплового равновесия при повышенных температурах был проведен ряд экспериментов, доказывающих наличие в них ДБ [7]. В работе [64, 68] методом неупругого рассеяния нейтронов оценена температурная зависимость фоннных частот в кристалле NaI. Установлено, что размер фоннной запрещенной зоны монотонно уменьшается при увеличении температуры с 10 до 700 К. Температура около 800 К ведет к полному закрытию запрещенной зоны. В работе [69] были получены подобные результаты для других щелочно-галогидных соединений типа NaCl.

Влияние массового соотношения анионов и катионов на фоннный спектр кристалла со структурой NaCl, а также на условия существования и свойства щелевых ДБ, исследовано в работах [70-72]. Показано, что ДБ легко возбуждаются, когда соотношение масс легких и тяжелых компонентов меньше 0,2, а щель в фоннном спектре достаточно велика. Отсутствие ДБ для больших массовых отношений объясняется возбуждением гармоник с частотой, равной половине основной частоты ДБ, которая взаимодействует с фонами ниже зазора. Для массового соотношения, равного 0,1, существуют как минимум три типа стабильных ДБ, которые отличаются числом атомов с наибольшей

амплитудой и поляризацией колебаний. В работе [73] продемонстрирована возможность обмена энергии между близкорасположенными комплексами щелевых ДБ в кристалле NaCl.

Влияние упругой деформации на фонный спектр щелочно-галогидных кристаллов изучалось в работе [74], где были рассмотрены два типа деформации кристалла: всестороннего растяжения-сжатия и чистого сдвига для величин упругой деформации вплоть до 2%. Авторами было установлено, что упругая деформация всестороннего растяжения-сжатия приводит к изменению ширины щели спектра, а чистого сдвига к появлению нескольких щелей за счет расщепления частот различных мод оптических колебаний.

Энергия, необходимая для возбуждения ДБ в щели фонного спектра щелочно-галогидных кристаллов, оценена в работе [75]. Была рассмотрена одномерная модель в KI с использованием потенциала Борна-Майера-Кулона и трехмерная модель в NaI при нулевой температуре. Обнаружено, что необходимая энергия для возбуждения щелевого ДБ в KI равна 300 мэВ, а для NaCl в интервале от 400 до 600 мэВ.

1.4.3. Дискретные бризеры в кристаллах с ковалентной связью

Графен и графан являются революционным открытием 21 столетия и принадлежат к самым прочным, легким и электропроводящим вариантам углеродного соединения. В работе [76] было показано, что время жизни ДБ в графене увеличивается до сотен пикосекунд даже при относительно высоких температурах. А в статье [77] продемонстрирована возможность появления щели в его фонном спектре при наложении однородной упругой деформации. Обнаружено, что графен поддерживает существование пространственно локализованных мод в виде дискретных бризеров с мягким типом нелинейности. Главной особенностью является тот факт, что частота ДБ лежит в фонном спектре графена. Это объясняется тем, что колебания ДБ поляризованы в

плоскости листа графена, в то время как полоса фононного спектра, в которой расположена частота ДБ, содержит фононы, колеблющиеся из плоскости.

Подобная ситуация наблюдается и в графеновых нанолентах, на краю которой при ориентации «кресло» может быть возбужден щелевой ДБ, как было продемонстрировано в публикациях [78, 79].

Изучение и анализ кластеров в графене, состоящих из нескольких близко расположенных ДБ в виде двумерного массива рассмотрены в статье [80], где определены простые начальные условия, приводящие к двумерным кластерам ДБ со временем жизни не менее 1000 периодов колебаний.

Исследование влияния температуры на время затухания ДБ в графене, где атом углерода имеет одну связь с атомом водорода и тремя атомами углерода, показано в работе [81]. ДБ представляют собой один атом водорода, совершающий колебания с большой амплитудой перпендикулярно плоскости листа графена. При нулевой температуре существует возможность обмена энергией между близко расположенными ДБ. Это вскрывает механизм накачки ДБ энергией, в результате которого атомы водорода могут получать энергию достаточную для отсоединения от графена.

Исследования ДБ в трехмерных ковалентных кристаллах кремния и германия проводились в работе [82] с использованием межатомного потенциала Терсоффа. Оказалось, что частота такого ДБ расположена чуть выше частоты бесщелевого фононного спектра и имеет время жизни не менее 60 пс. Частота ДБ сначала возрастает, а после достижения своего максимума начинает убывать с возрастанием амплитуды.

Теперь приведем несколько основных работ с исследованием свойств ДБ в кристаллах при помощи квантово-механических (первопринципных или *ab initio*) расчетов основанных на применении теории функционала плотности. Одной из таких работ является [83], где впервые проводилось моделирование щелевых двумерных ДБ в монослойном листе графена. Оказалось, что исследованные ДБ локализованы всего на двух атомах углерода, имеют мягкий тип нелинейности и

время жизни превышающее 100 периодов колебаний. Эти результаты качественно согласуются с полученными ранее в работе [84] методами классической молекулярной динамики, что является свидетельством безошибочности используемого потенциала взаимодействия для графена.

Анализ свойств ДБ в двумерном графене проводился в [85] с помощью *ab initio* моделирования. Обнаружено, что ДБ представляет собой устойчивую, сильно локализованную колебательную моду с одним атомом водорода, колеблющимся с большой амплитудой вдоль направления, перпендикулярного плоскости графана, причем все соседние атомы имеют значительно меньшие амплитуды колебаний. Частота ДБ уменьшается с увеличением ее амплитуды, и может принимать любое значение в пределах фононного спектра и входить в диапазон низкий частот.

1.4.4. Дискретные бризеры в кристаллах с металлической связью

Впервые успешное возбуждение нульмерных ДБ в трехмерных решетках чистых металлов было проведено в работе [12], где обнаружено, что в никеле и ниобии могут существовать собственные локализованные моды с частотами выше границы фононного спектра. В работах [86, 87] были найдены ДБ в железе, меди и некоторых полупроводниках (Ge, алмаз). Показано, что эти возбуждения в металлах могут распространяться вдоль плотноупакованных кристаллографических направлений, передавая колебательную энергию, превышающую 1 эВ на большие расстояния. Для различных металлов (Nb, Ni, Fe, V, W) максимальная скорость ДБ была оценена в работах [12, 21, 86, 88] и составила порядка 0.1-0.5 от скорости звука.

Взаимодействие движущихся нульмерных дискретных бризеров в ГПУ металле магния рассмотрено в работе [89]. Показано, что после столкновения двух ДБ в центре кристалла происходит слияние в один ДБ, который через некоторое время делокализуется, излучая энергию в виде малоамплитудных

колебаний. Максимальное значение скорости ДБ, которое удалось получить в магнии, оказалось близким к 1 км/с, что составляет примерно 0.2 от скорости звука. Такое же значение скорости нульмерного ДБ было получено для циркония в работе [88]. Движущиеся нульмерные ДБ были обнаружены в ГПУ решетке кобальта, скорость движения которых составила 0.840 км/с (0.18 от скорости звука) [90].

Демонстрация обмена энергией между нульмерными двойными и тройными кластерами ДБ проведена в работе [91] в решетке алмаза. Выявлено два механизма обмена энергией. В первом случае обмен энергией происходит из-за рассинхронизации движения двух ДБ в кластере, а во втором – механизм обмена наблюдается в тройных кластерах ДБ. Последний может перестроиться в двойной ДБ, после затухания одного ДБ, который, в свою очередь, отдает значительную часть своей энергии двум другим ДБ. Этот обмен энергией, который достигает значений порядка 1.5 эВ, можно рассматривать как механизм усиления ДБ.

В публикациях [22, 92] проводились исследования подвижных и неподвижных ДБ в альфа-уране. Для определения движущегося ДБ предложен анзац-подход, содержащий небольшое число параметров, отвечающих за скорость ДБ, разность фаз и амплитуд. Оказалось, что в орторомбической кристаллической решетке альфа-урана ДБ локализован на 8 атомах в плотноупакованном кристаллографическом направлении [001]. Попытка возбуждения движущихся ДБ показала, что данный вид бризеров в альфа-уране характеризуется низкой стабильностью и небольшой длиной пробега.

Щелевые ДБ в моделях упорядоченных сплавов были обнаружены в работах [93-97]. Так, авторами [96] рассматривались два ДБ с мягким (ДБ 1) и жестким (ДБ 2) типами нелинейности в кристалле Pt_3Al . В отличие от локализованного на одном атоме, неподвижного и устойчивого ДБ 1, дискретный бризер ДБ 2 локализован, в основном, на четырех атомах Al и вытянут вдоль одного из плотноупакованных рядов кристалла. Однако, ДБ 2 имеет частоту выше фононного спектра и возможность перемещения на сотни нанометров.

Столкновение ДБ 2 и ДБ 1 вызывает излучение части их локализованной энергии в подрешетку Al, причем большую часть энергии теряет ДБ 2, который разрушается быстрее, чем ДБ 1. ДБ 2 может эффективно переносить энергию по кристаллу, а столкновение ДБ 1 и ДБ 2 приводит к значительной ее локализации. Таким образом, возможность переноса энергии на значительные расстояния может вызывать структурные трансформации в материале на удалении от очага возбуждения подобных локализованных объектов.

В работе [97] обнаружены ДБ в кристалле CuAu с жестким типом нелинейности. Показано, что он может быть получен в плотноупакованном ряду атомов меди вдоль направления [110]. Рассмотрены условия формирования ДБ с мягким типом нелинейности и установлено, что ДБ такого типа может существовать в щели фононного спектра кристалла CuAu, образованной за счет деформации кристалла или искусственного «занижения» массы атомов меди. Установлено, что ДБ мягкого типа локализован в основном на одном атоме меди и может существовать несколько десятков периодов колебаний. Несмотря на это, ДБ способен концентрировать энергию порядка 0.9 эВ, в то время как ДБ с жестким типом нелинейности в основном локализован на 6 атомах и их совокупная энергия составляет 2.1 эВ.

Понятие квазибризера было введено Чечиным Г.М. и соавторами в работе [98]. Под квазибризером понимается долгоживущее пространственно-локализованное нелинейное колебание, для которого не наблюдается строгая периодичность во времени. При этом ими был сформулирован определенный критерий близости квазибризера к соответствующему ему точному ДБ, основанный на вычислении среднеквадратичного отклонения частот колебаний отдельных частиц бризера $\eta(t_k)$, найденных на некотором временном интервале в окрестности момента t_k , и вычислении среднеквадратичного отклонения частот колебаний выделенной частицы ДБ на различных временных интервалах. Такой подход позволил охарактеризовать эволюцию колебательной моды с течением времени. Характеристики квазибризеров в моноатомных ГЦК-металлах изучены в

статье [23], где рассчитаны среднеквадратичные отклонения частот атомов, входящих в состав бризера, в зависимости от основной частоты колебаний. Показано, что в рассматриваемых металлах время жизни квазибризера зависит как от начальных условий возбуждения, так и от типа металла. В работах [99-101] рассмотрены вопросы возбуждения квазибризеров в кристаллах типа A_3B при наличии точечных дефектов.

Сравнительный анализ устойчивых долгоживущих ДБ в металлгидридных системах (то есть состоящих из атомов водорода и металла) никеля и палладия проведен в работе [102]. Авторами были обнаружены два типа устойчивых ДБ: одного водорода и пары атомов водорода, колеблющихся в противофазе. Анализ характеристик ДБ показал, что его частота находится в фононной щели или лежит в оптической полосе фононного спектра вблизи его верхней границы.

Влияние ДБ на пластичность и прочность кристаллов изучено в работе [103]. Рассмотрены модели взаимодействия дислокаций с ДБ в железе и алюминии. Атомные колебания большой амплитуды способствуют отрыву дислокаций от «точек зацепа», что может значительно ускорять пластическую деформацию материала в условиях достаточно высокой концентрации в нем бризеров.

1.5. Молекулярная динамика: основные понятия

Молекулярно-динамический подход является надежным инструментом для атомистического описания процессов в материалах. Он может использоваться для определения макропараметров системы (температуры, давления, внутренней энергии, плотности), а также равновесных и неравновесных уравнений состояния и др. С учетом возможностей современной высокопроизводительной вычислительной техники молекулярно-динамическое моделирование, позволяет рассматривать объёмы вещества размером до кубического микрометра, что соответствует примерно миллиарду частиц. При этом вычислительная

погрешность может составлять $\approx 1\div 3\%$. Общая погрешность расчета параметров системы зависит от используемого потенциала взаимодействия между частицами. Качество потенциалов определяется на основе сравнительного анализа рассчитанных механических (изотермический коэффициент объёмного сжатия) и теплофизических (теплоемкость, коэффициент линейного расширения) свойств того или иного вещества с экспериментальными или справочными данными.

Методом классической молекулярной динамики (МД) называется метод, в котором временная эволюция системы взаимодействующих атомов или частиц отслеживается интегрированием их уравнений движения [104, 105]. Для описания движения атомов или частиц решается система уравнений второго закона Ньютона [106]:

$$m_i \vec{a}_i = \vec{F}_i, \quad (1.6)$$

где m_i – масса i -й частицы, $\vec{a}_i = \frac{d^2 \vec{r}_i}{dt^2}$ её ускорение, и $\vec{F}_i = -\nabla_i U(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)$ – сила, действующая на неё.

Для интегрирования дифференциальных уравнений второго порядка необходимо сформулировать начальные условия, задав начальные положения и начальные скорости всех атомов:

$$r_i(0) = r_i^0, \quad v_i(0) = v_i^0 \quad (1.7)$$

Следующим шагом моделирования является выбор граничных условий, которые определяют, будет ли моделирование проводиться при постоянном давлении или при постоянном объёме.

Наиболее используемыми в методе молекулярной динамики являются периодические граничные условия, которые подразумевают, что вокруг расчетной ячейки имеются ее виртуальные образы с точно таким же положением частиц.

Это позволяет устранить поверхностные эффекты и моделировать поведение атомов лишь в небольшой области, называемой также элементарной ячейкой, которая является частью большого (по сути бесконечного) кристалла. В этом случае, когда частица выходит за пределы одной стороны элементарной ячейки, то она появляется на противоположной стороне, полностью сохраняя при этом свою скорость. Таким образом, использование периодических граничных условий позволяет значительно ускорить и существенно упростить процесс моделирования. Однако, при этом нужно иметь ввиду, что выбор слишком малой расчетной ячейки может оказывать влияние на результаты молекулярно-динамического моделирования.

Для получения достоверных результатов важен правильный выбор шага по времени и длительности моделирования. Первый параметр влияет на точность решения уравнений движения, второй важен для установления термодинамического равновесия в системе [107]. Причем время моделирования необходимо подобрать так, чтобы в течение этого времени достигалась требуемая точность определения минимума энергии и устанавливалось термодинамическое равновесие.

Следует отметить, что метод молекулярной динамики применим только к системам, в которых длина волны Де Бройля атома (или частицы) много меньше, чем межатомное расстояние. Также классическая молекулярная динамика не подходит для моделирования поведения систем, состоящих из легких атомов, таких как гелий или водород. Кроме того, при низких температурах квантовые эффекты начинают играть более важную роль и для рассмотрения таких систем необходимо использовать квантовохимические методы, в которых сначала рассчитывается электронная плотность и исходя из нее силы действующие на атомы системы. Важным является также то, чтобы времена моделирования системы были больше, чем время релаксации исследуемых физических величин.

К достоинствам метода молекулярной динамики относятся его разработанность и наличие готовых программных продуктов. Приведем

некоторые из них, например, свободно распространяемый пакет LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator) [108]. Разработан сотрудником Национальной лаборатории Сандая (США) Стивеном Плимптоном (S. Plimpton). Программный продукт позволяет отслеживать траектории всех атомов рассматриваемой системы и может быть использован как на однопроцессорных компьютерах, так и на параллельных кластерах и суперкомпьютерах. Способен моделировать ансамбль частиц жидкого, газообразного и твердого состояний. Программа имеет широкий функционал для построения структур, задания условий моделирования. Кроме того, программа поддерживает практически все известные типы потенциалов межатомного взаимодействия.

NAMD (NAnoscale Molecular Dynamics) [109] - бесплатная программа для МД, написанная с использованием модели параллельного программирования. Используется для симуляции больших систем (миллионы атомов). Программа поддерживает мультипроцессорность и возможность использования графических процессоров. Разработана совместно группой теоретической и вычислительной биофизики и лабораторией параллельного программирования в Иллинойском университете (США).

Следующий программный продукт - это XMD, который представляет собой классическую программу для моделирования методом молекулярной динамики. Предназначен пакет, в основном, для моделирования процессов, происходящих в металлах и керамике. Программа разработана в Коннектикутском университете США под руководством Джона Рифкина (Jon Rifkin) [110], доступна в исходных кодах и распространяется бесплатно. Имеет ограничения в числе атомов, с которыми может работать программа, а именно 5000 до 100 000 атомов.

Программный пакет The ITAP (Institut für Theoretische und Angewandte Physik) Molecular Dynamics Program (IMD) был изначально разработан Йоргом Штадлером (Jörg Stadler) в университете города Штутгарт (Германия) и предназначен для классического моделирования методом молекулярной динамики [111]. Поддерживаются несколько типов взаимодействий, такие как

потенциалы центральной пары, потенциалы основанные на методе погруженного атома для металлов, потенциалы Стиллингера-Вебера и Терсоффа для ковалентных систем и потенциалы Гей-Берна для жидких кристаллов. Нет ограничений как на количество частиц, так и на количество типов частиц. Пакету IMD принадлежат мировые рекорды 1997 и 1999 годов, связанные с моделированием поведения больших систем, содержащих более миллиарда атомов, на тот момент самого большого количества атомов, которое было использовано в молекулярно-динамических расчетах. IMD эффективно работает как на однопроцессорных компьютерах, так и на суперкомпьютерах, но не очень подходит для векторных процессоров. Несмотря на удобство и относительную простоту, пакет IMD не получил столь широкого распространения в отличие LAMMPS.

Для построения динамических симуляций, необходимо описать силы или потенциал межатомного взаимодействия. Физический смысл их применения в молекулярной динамике достаточно прост и не выходит за рамки классической физики. Потенциальная энергия взаимодействия двух атомов записывается как функция расстояния между ними. Атомы в решётке при определенных условиях могут сталкиваться, и их столкновения очень похожи на столкновения упругих шаров. Таким образом, общая энергия системы атомов складывается из потенциальной энергии взаимодействия всех частиц между собой и суммы их кинетических энергий.

Наиболее простым видом межатомных потенциалов являются парные потенциалы. Понятие парного потенциала подразумевает, что взаимодействие двух частиц зависит только от их взаимного расположения и не зависит от положения окружающих их каких-либо других частиц. Парные потенциалы относятся к эмпирическим потенциалам, то есть основанным на простых выражениях, содержащих параметры, которые могут быть выбраны так, чтобы потенциал правильно описывал некоторые заданные свойства вещества. Наиболее распространенными являются потенциалы Леннарда-Джонса [112] и Морзе.

Потенциал Леннарда-Джонса имеет функциональный вид:

$$U(r_{ij}) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right] \quad (1.8)$$

где r_{ij} - расстояние между центрами частиц, σ и ε постоянные коэффициенты, имеющие размерности длины и энергии, соответственно. Они определяются путем подгонки глубины минимума потенциала к энергии связи металла и положения минимума к равновесному расстоянию между атомами.

Потенциал Леннарда-Джонса дает хорошее описание ван-дер-ваальсовых взаимодействий в инертных газах и молекулярных системах. В случае металлов он непригоден для получения количественных данных. Однако, ввиду своей простоты, потенциал Леннарда-Джонса широко используется в тех случаях, когда целью моделирования является не получение данных, а изучение качественных закономерностей и общих явлений.

Потенциал Морзе [113] имеет форму:

$$U(r_{ij}) = \varepsilon [e^{-2\alpha(r_{ij}-r_0)} - 2e^{-\alpha(r_{ij}-r_0)}], \quad (1.9)$$

где r_0 - равновесное межатомное расстояние, ε - глубина потенциальной ямы, расположенной на расстоянии r_0 . В связи с наличием трех параметров ε , α и r_0 потенциал Морзе является трехпараметрическим, в отличие от потенциала Леннарда-Джонса, что позволяет делать его более гибким при подгонке к экспериментальным величинам. Потенциал Морзе часто используется для моделирования металлов с ГЦК и ГПУ решетками. Характерный вид межатомного потенциала представлен на рисунке 1.5.

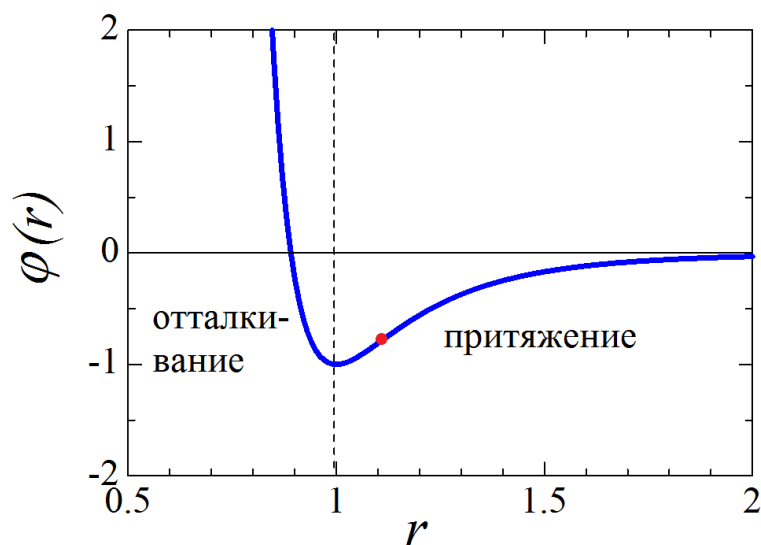


Рисунок 1.5 – Характерный вид межатомного потенциала. Минимум функции при $r = 1$ соответствует равновесному межатомному расстоянию.

Вместе с тем, хорошо известно, что парные потенциалы имеют принципиальные недостатки. Одним из главных недостатков является то, что парные потенциалы, как правило, могут обеспечить устойчивость только достаточно плотно упакованных кристаллических решеток. Решетки с более низкой плотностью упаковки, такие как простая кубическая решетка, оказываются неустойчивыми для большинства парных потенциалов (обсуждается случай, когда взаимодействия всех атомов решетки описываются с помощью одного и того же потенциала). Также неустойчивыми оказываются структуры, характерные для ковалентных кристаллов - структура графита на плоскости и структура алмаза в пространстве. Кроме того, парное взаимодействие не может обеспечить устойчивость пространственной структуры и адекватно описать частоты колебаний большинства многоатомных молекул.

Традиционное решение перечисленных проблем состоит в применении многочастичных потенциалов взаимодействия. Подобные потенциалы зависят от углов между связями, что позволяет сделать устойчивыми структуры с низкой плотностью заполнения и адекватно описать частоты колебаний ряда

молекулярных соединений. Рассмотрим основные модели многочастичных потенциалов молекулярного взаимодействия.

Метод погруженного (или внедренного) атома (Embedded atom method, EAM) основан на квантовомеханической теории функционала электронной плотности и разработан в 1983 году [114, 115]. В нем энергия произвольно расположенных ядер от взаимодействия с электронами записывается как однозначный функционал полной электронной плотности (функционал погружения). В этом случае полную электронную плотность в металле можно рассматривать как линейную суперпозицию вкладов отдельных атомов, причем электронная плотность, создаваемая одним атомом, считается сферически симметричной. Таким образом, в методе погруженного атома полная энергия системы определяется суммой энергии парного взаимодействия атомов и энергии взаимодействия каждого атома с электронной плотностью, создаваемой другими атомами [114]:

$$E_{tot} = \sum_i F_i(\rho_{h,i}) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}}^N \phi_{ij}(R_{ij}) \quad (1.10)$$

где ϕ_{ij} - короткодействующий парный потенциал, R_{ij} – расстояние между исходным атомом i и окружающим атомом j . $F_i(\rho_{h,i})$ - функция «погружения», задает влияние соседних атомов на энергию взаимодействия любой пары атомов, ρ_i - электронная плотность для i -го атома, являющаяся суперпозицией электронных плотностей атомов в каждом узле:

$$\rho_{h,i} = \sum_{j \neq i} \rho_j^{(a)}(R_{ij}) \quad (1.11)$$

Данный метод был успешно применен для моделирования ГЦК металлов [116, 117], ОЦК ванадия [118] и бинарных сплавов [119]. Результаты в настоящей диссертационной работе также были получены с помощью данного метода.

Модифицированный потенциал «погруженного атома» (Modified embedded atom method, MEAM) является модификацией метода «погруженного атома», включающей в себя направленные связи, изменение угла между которыми вносит вклад в энергию взаимодействия. Потенциал разработан в 1989 году и уже через несколько лет широко применялся для моделирования многих металлов, полупроводников и двухатомных газов [120, 121], был апробирован при моделировании кремния, германия и их сплавов [122].

Согласие с экспериментом, применимость к практическим задачам и простота методики делают методы модифицированного, погруженного атома эффективным инструментом для атомистических исследований в металлах.

1.6. Выводы по главе 1

В данной главе описаны различные типы нелинейных колебаний кристаллической решетки, среди которых выделены делокализованные нелинейные колебательные моды и дискретные бризеры, как объекты данного диссертационного исследования. Освещены основные достижения, сделанные в последнее время в теории нелинейной динамики кристаллической решетки, а также в изучении пространственно-локализованных и делокализованных колебательных мод в кристаллах. Как видно из представленного выше обзора литературы, моделирование в подавляющем большинстве работ было выполнено в дискретных нелинейных системах низкой размерности (одномерных или двумерных) с сильно упрощенными потенциалами межатомного взаимодействия.

Дискретные бризеры удобно классифицировать по их пространственной размерности, а именно как нульмерный, одномерный и двумерный. Как было сказано выше, эти объекты отличаются локализацией колебаний вдоль одного или нескольких кристаллографических направлений и делокализацией колебаний вдоль остальных. Спецификация дискретных бризеров по их пространственной

размерности предлагается впервые в настоящей диссертационной работе и позволяет расширить понятийный аппарат в теории нелинейных систем.

В настоящее время остается открытым вопрос о существовании дискретных бризеров различной пространственной размерности в трехмерных металлах с ГПУ и ГЦК решеткой. Ответ на поставленный выше вопрос внесет вклад в понимание нелинейной динамики кристаллической решетки металлов и поможет приблизиться к пониманию влияния дискретных бризеров на физические свойства кристаллов.

ГЛАВА 2. НУЛЬМЕРНЫЕ ДИСКРЕТНЫЕ БРИЗЕРЫ В ГПУ БЕРИЛЛИИ

Данная глава посвящена изучению свойств неподвижных и движущихся нульмерных ДБ в трёхмерной решетке ГПУ бериллия. Глава написана на основе опубликованной работы [26].

2.1. Описание модели и методика компьютерного моделирования

Для описания межатомного взаимодействия был взят многочастичный потенциал, построенный на основе метода погруженного атома [123, 124]. Равновесные постоянные кристаллической решетки воспроизводимые вышеуказанным потенциалом взаимодействия для ГПУ бериллия оказались равными $a = 2.36 \text{ \AA}$ и $c = 3.70 \text{ \AA}$, что несколько выше их экспериментальных значений $a = 2.29 \text{ \AA}$ и $c = 3.58 \text{ \AA}$ [125] и практически совпадают со значениями полученными при помощи расчетов выполненных на основе теории функционала плотности ($a = 2.36 \text{ \AA}$ и $c = 3.70 \text{ \AA}$ [126]).

Для моделирования была выбрана расчетная ячейка, содержащая $30 \times 10 \times 10$ элементарных ячеек (12000 атомов), что соответствует размеру $68.58 \times 39.59 \times 38.86 \text{ \AA}$. Тестовые расчеты показали, что использование расчетных ячеек большего размера приводит к тем же самым результатам, что связано с достаточно высокой степенью пространственной локализации исследуемых нелинейных колебательных мод. Периодические граничные условия были наложены вдоль всех трех координатных направлений. Все расчеты проводились при температуре $T=0 \text{ К}$ с применением термодинамического ансамбля NVE (постоянное число атомов, объем и энергия).

Возбуждение ДБ осуществлялось в центре расчетной ячейки вдоль плотноупакованного атомного ряда [127], который в ГПУ решетке лежит в базисной плоскости и имеет кристаллографическое направление $[2\bar{1}\bar{1}0]$. Атомы

ряда, в котором возбуждался ДБ, нумеровались для удобства индексом n (рисунок 2.1). Отметим, что при этом все другие атомы, лежащие вне выделенного плотноупакованного ряда, в начальный момент времени имели нулевые смещения и скорости.

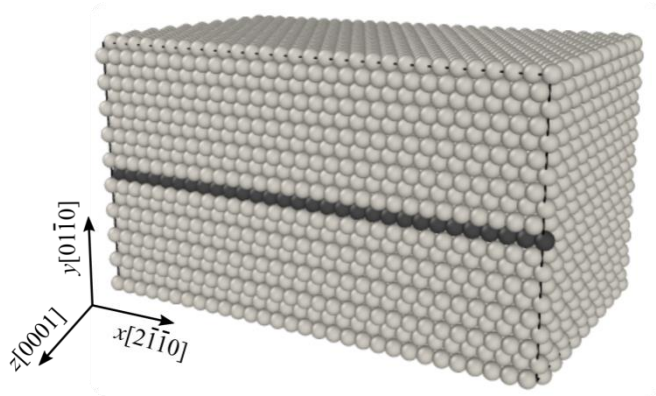


Рисунок 2.1 – Расчетная ячейка используемая для моделирования. ДБ возбуждались вдоль плотноупакованного ряда атомов (выделен темным цветом).

Начальные условия для возбуждения ДБ в плотноупакованном атомном ряду были следующими [128]:

$$\begin{aligned} x_n(t) &= (-1)^n \cdot P_n \cdot \cos[\omega t + \varphi_0 + \delta(n - x_0)] + S_n, \\ y_n &= 0, \quad \dot{y}_n = 0, \quad z_n = 0, \quad \dot{z}_n = 0. \end{aligned} \quad (2.1)$$

Здесь ω – частота ДБ, лежащая выше верхней границы фононного спектра кристалла, которая для бериллия приблизительно равна 30.8 ТГц (см. рисунок 2.2); φ_0 – начальная фаза колебаний; δ – параметр, задающий разность фаз колебаний соседних атомов; функции P_n и S_n определяются выражениями:

$$P_n = \frac{A}{\cosh[\beta(n - x_0)]}, \quad S_n = \frac{-B(n - x_0)}{\cosh[\gamma(n - x_0)]}, \quad (2.2)$$

где A – амплитуда колебаний ДБ, B – амплитуда смещений центров колебаний атомов, параметры β и γ задают степень пространственной локализации ДБ, а x_0 – начальное положение ДБ, которое может изменяться в пределах от 0 до 1. При $x_0=0$ имеем ДБ центрированный на атоме, а при $x_0=1/2$ ДБ находится в середине между двумя соседними атомами. Скорость ДБ зависит от величины δ и при $\delta=0$ имеем неподвижный ДБ. Отметим, что такая же схема была ранее использована для возбуждения ДБ в металлах с ОЦК, ГЦК и орторомбической (альфа-уран) кристаллическими решетками [22, 88-90, 129, 130].

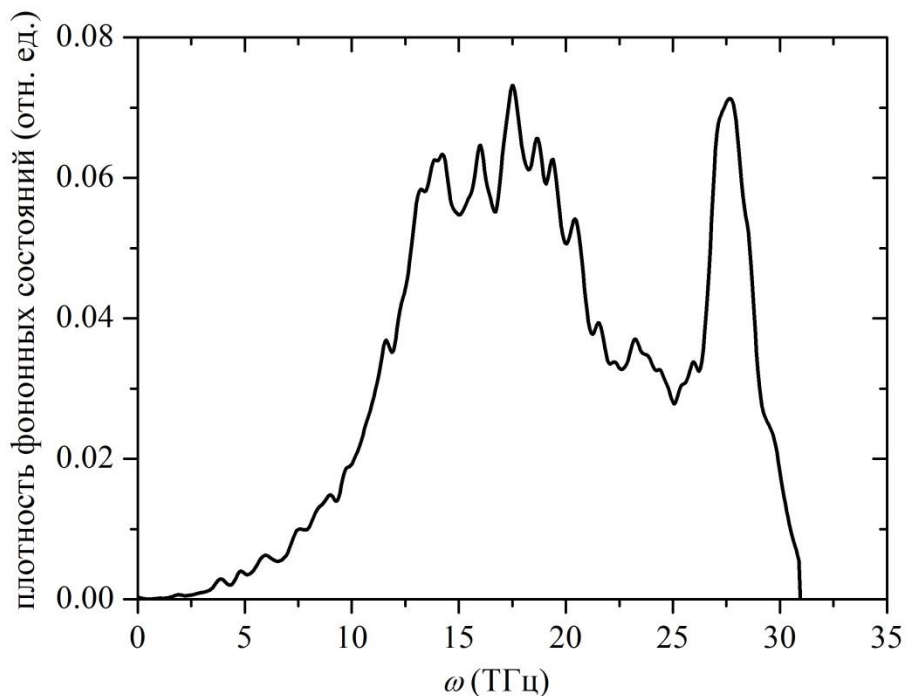


Рисунок 2.2 – Плотность фоновых состояний, рассчитанная для бериллия.

Функции P_n и S_n в выражениях (2.2), описывающие соответственно амплитуды колебаний и смещения центров колебаний атомов, рассчитывались в ходе численного эксперимента следующим образом:

$$P_n = \frac{(x_n^{\max} - x_n^{\min})}{2}, \quad S_n = \frac{(x_n^{\max} + x_n^{\min})}{2}, \quad (2.3)$$

где x_n^{\max} и x_n^{\min} – максимальное и минимальное значение (квази)периодической функции $x_n(t)$, описывающей движение n -го атома прямолинейного ряда, в котором был возбужден ДБ.

2.2. Неподвижный дискретный брызг

Возбуждение ДБ производилось при следующих значениях параметров в выражениях (2.1) и (2.2): $A = 0 - 0.65 \text{ \AA}$; $B = 0.1 \text{ \AA}$; $\beta = 0.8$; $\gamma = 0.8$; $x_0 = 1/2$, $\delta = 0 - 0.6$. Значение полученных амплитуд неподвижного ДБ (в случае, когда $\delta = 0$) лежит в пределах от 0.00016 \AA до 0.223 \AA и в интервале частот от 30.4 до 36.1 ТГц. Следует отметить, что при начальных амплитудах $A \leq 0.2 \text{ \AA}$ и независимо от значений параметра δ , возбуждения ДБ не происходит и после нескольких колебаний его энергия рассеивается по объему расчетной ячейки. При $A = 0.25 \text{ \AA}$ ДБ может существовать только в области $0 < \delta \leq 0.25$, а при увеличении δ от 0.3 до 0.5 наблюдается его затухание.

Графики зависимости амплитуды колебания атомов P_n и смещения центров колебания атомов S_n представлены на рисунке 2.3. Видно, что у ДБ в бериллии большую амплитуду колебаний P_n имеют два или три атома, при центрировании ДБ на середине связи или на атоме, соответственно. Статические смещения центров колебаний атомов, S_n , распространяются на 8 – 10 атомов. Из рисунка 2.3 также видно, что максимальные смещения центров колебания атомов S_n одного порядка со значениями максимальной амплитуды колебания P_n .

На рисунке 2.4 показана зависимость частоты неподвижного ДБ ω от его начальной амплитуды A . Горизонтальной пунктирной прямой показана верхняя граница фононного спектра, которая для бериллия равна 30.8 ТГц. Хорошо видно, что частота колебаний ДБ всегда лежит выше фононного спектра, и сначала возрастает с увеличением амплитуды ДБ, но после достижения максимального значения 36.1 ТГц при $A = 0.40 \text{ \AA}$, начинает убывать при более высоких амплитудах. Такое немонотонное поведение наблюдалось ранее для ДБ в

металлах [129] и в кристаллах с ковалентной связью [82, 91]. Это связано, прежде всего, с особенностями межатомного потенциала, а именно с тем, что при больших отклонениях от положения равновесия происходит уменьшение жесткости связи.

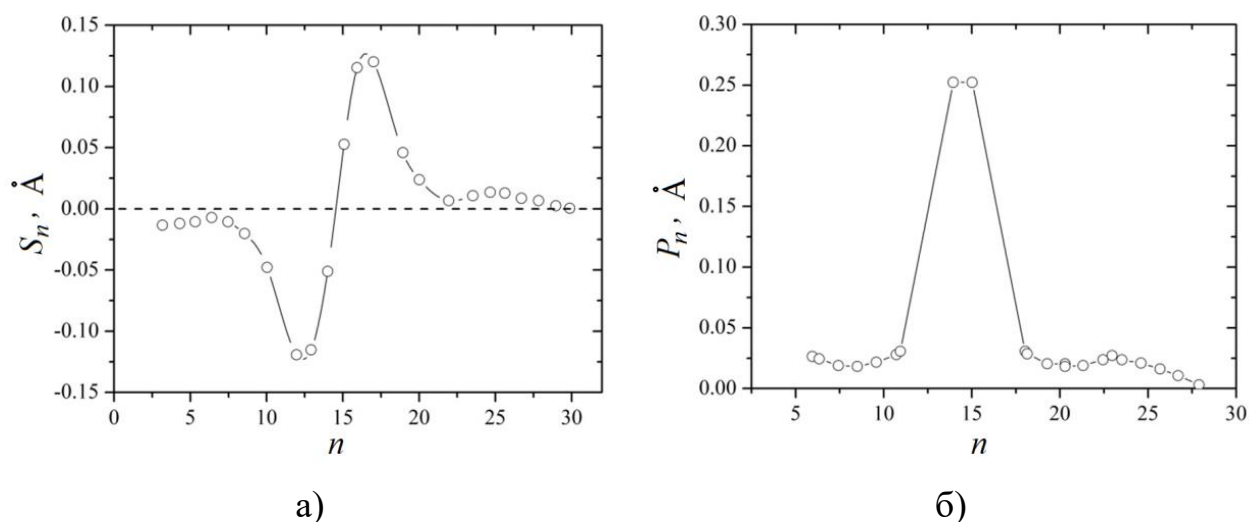


Рисунок 2.3 – (а) Смещения центров колебания атомов и (б) амплитуды колебания атомов ДБ в бериллии, возбужденного при следующих значениях параметров: $A=0.35$ Å, $B = 0.1$ Å, $\beta = 0.6$, $\gamma = 0.7$, $x_0=1/2$, $\delta=0$.

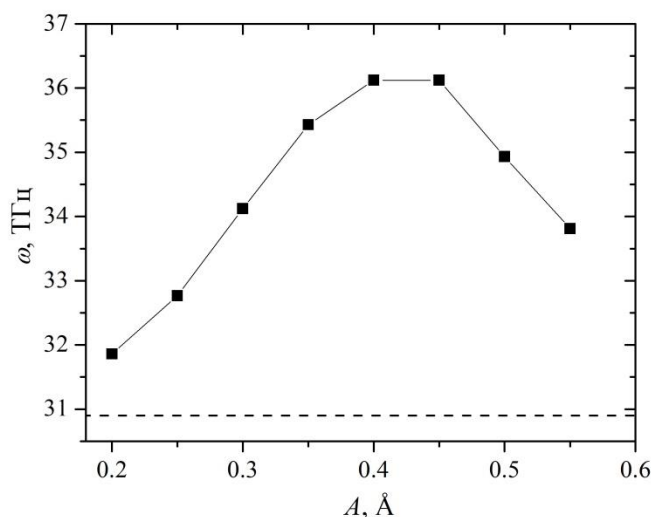


Рисунок 2.4 – Зависимость частоты ДБ в бериллии от начальной амплитуды колебаний A , рассчитанная при $\delta=0$ (неподвижный ДБ). Пунктиром показана верхняя граница фононного спектра, которая для бериллия равна 30.8 ТГц.

2.3. Движущейся дискретный бризер

При значениях параметра δ отличных от нуля, начальные условия (2.1) и (2.2) порождают движущийся ДБ. На рисунке 2.5 представлены смещения атомов n и $(n+5)$, $(n+15)$ вдоль координаты x как функции времени, чтобы показать прохождение через них ДБ. Для возбуждения данного ДБ брались следующие значения параметров в выражениях (2.1) и (2.2): $A = 0.30 \text{ \AA}$; $B = 0.1 \text{ \AA}$; $\beta = 0.8$; $\gamma = 0.8$; $x_0 = 1/2$, $\delta = 0.1$. Можно отметить факты смещения среднего положения атомов при прохождении через него ДБ и постепенного уменьшения амплитуды ДБ за счет излучаемых им малоамплитудных бегущих волн (фононов) (рисунок 2.4). После прохождения ДБ все атомы возвращаются в свои равновесные решеточные положения. Движущийся бризер достаточно быстро теряет свой начальный импульс и останавливается, пройдя несколько десятков межатомных расстояний.

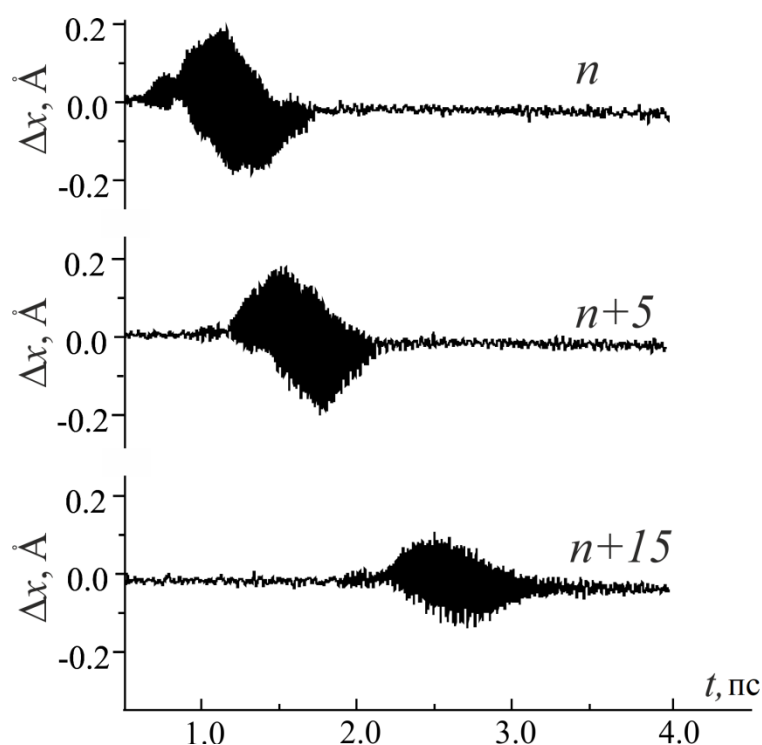


Рисунок 2.5 – Колебания атомов n и $(n+5)$, $(n+15)$ в направлении оси x $[2\bar{1}\bar{1}0]$ при прохождении через них ДБ, возбужденного при следующих значениях параметров в выражениях (1) и (2): $A = 0.30 \text{ \AA}$; $B = 0.1 \text{ \AA}$; $\beta = 0.8$; $\gamma = 0.8$; $x_0 = 1/2$, $\delta = 0.1$.

На рисунке 2.5 также видно, что скорость ДБ уменьшается с падением его амплитуды. Причем для значений параметра δ от 0 до 0.15 имеет место более значительное падение скорости, в то время как для δ в интервале от 0.20 до 0.50 уменьшение скорости выражено слабее.

Зависимость скорости движения ДБ от параметра δ , определяющего разность фаз колебаний соседних атомов, представлена на рисунке 2.6. Из рисунка видно, что скорость приблизительно линейно растет с увеличением параметра δ , а затем выходит на насыщение. Максимальная скорость движения ДБ в бериллии достигается при значениях $A = 0.5 \text{ \AA}$, $\delta = 0.30$ и равна 43.5 \AA/ps (4.35 км/с), что составляет 33.7% от скорости продольного звука в бериллии, которая равна 12.9 км/с . Отметим, что авторами в работе [88, 131, 132] было получено несколько меньшее значение максимальной скорости для бериллия (35 \AA/ps) ввиду того, что ими использовался другой набор параметров для возбуждения ДБ.

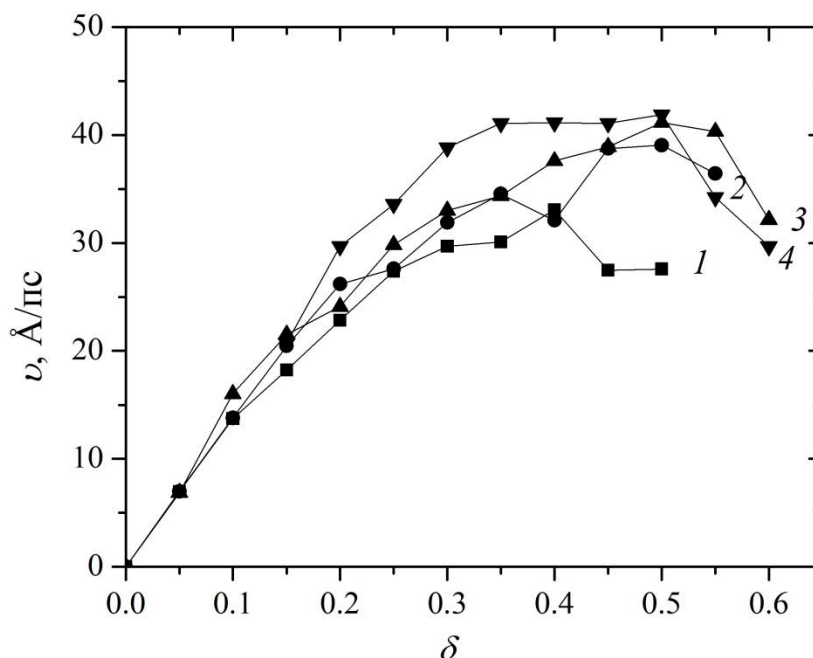


Рисунок 2.6 – Зависимость скорости ДБ в бериллии от параметра δ , рассчитанная при различных значениях начальной амплитуды: $A = 0.30$ (кривая 1), $A = 0.35$ (2), $A = 0.40$ (3), $A = 0.45$ (4).

Зависимость установившейся амплитуды колебаний a от начальной A , рассчитанная для различных значений параметра δ , представлена на рисунке 2.7. Видно, что установившаяся амплитуда ДБ достигает своего максимума в пределах 0.37-0.40 Å и затем начинает убывать вследствие рассеяния энергии на соседних атомах.

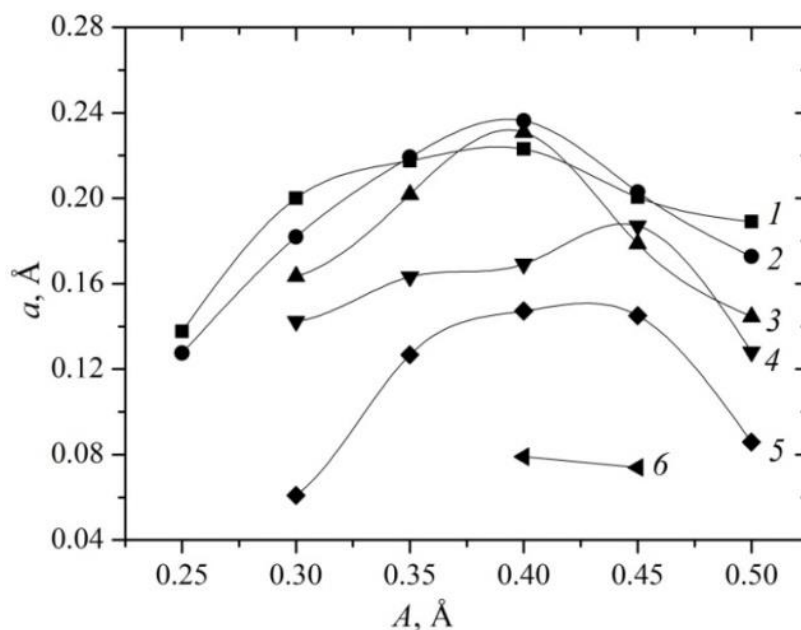


Рисунок 2.7 – Зависимость установившейся амплитуды колебаний ДБ a от начальной амплитуды A , рассчитанная при различных значениях параметра δ : $\delta=0.05$ (кривая 1), $\delta=0.15$ (2), $\delta=0.25$ (3), $\delta=0.35$ (4), $\delta=0.50$ (5), $\delta=0.60$ (6).

При этом частота колебания для легких атомов бериллия в ДБ оказалась значительно выше, чем для тяжелых атомов циркония. Максимальная скорость движения ДБ в Be составила 35 Å/пс (3.5 км/с), а в Zr 10 Å/пс (1.0 км/с). Отметим, что скорость звука в бериллии 12.9 км/с, а в цирконии 4.65 км/с. Таким образом, максимальная скорость ДБ в Be (Zr) составляет 0.27% (0.22%) от скорости звука.

2.4. Выводы по главе 2

Впервые исследованы характеристики неподвижных и движущихся нульмерных ДБ в трехмерном монокристалле ГПУ бериллия в широком

интервале амплитуд и выявлены условия их существования. В качестве начальных условий для возбуждения ДБ в плотноупакованном атомном ряду использовалась квазипериодичная функция. Определен набор параметров, при котором возможно успешное возбуждение долгоживущих ДБ. Частота колебаний ДБ всегда лежит выше верхней границы фононного спектра и сначала возрастает с ростом амплитуды (жесткий тип нелинейности), а затем начинает уменьшаться. Степень пространственной локализации неподвижного ДБ в бериллии достаточно велика и в зависимости от центрирования ДБ, большие амплитуды имеют 2-3 атома. Движущиеся ДБ характеризуется высокой стабильностью в интервале начальных амплитуд $A=0.25-0.50 \text{ \AA}$ и параметра δ в интервале от 0.05 до 0.6. Максимальная скорость движения составила 4.35 км/с, что составляет $\approx 34\%$ от скорости продольного звука в бериллии.

ГЛАВА 3. ОДНОМЕРНЫЕ ДИСКРЕТНЫЕ БРИЗЕРЫ В ГЦК МЕТАЛЛАХ

Данная глава посвящена изучению ДБ, возбужденного на основе одномерной ДНКМ в трехмерных моделях ГЦК металлов (Al, Cu и Ni). Глава написана на основе опубликованных работ [133, 134].

Как было показано в главе 1, существование ДБ было обнаружено в металлах с ОЦК и ГПУ кристаллической решеткой, в то время как в ГЦК металлах они совершенно не исследовались. Кроме того, в настоящей главе впервые вводится понятие одномерного ДБ, то есть делокализованного вдоль одного кристаллографического направления и локализованного вдоль двух других. Поставим задачу изучения возможности существования таких одномерных ДБ, возбужденных во всем плотноупакованном атомном ряду трехмерного кристалла и исследования их свойств при помощи метода молекулярной динамики.

3.1. Описание модели и методика компьютерного моделирования

Все расчеты в данной главе проводились с помощью широко используемой и хорошо зарекомендовавшей себя программы молекулярно-динамического моделирования LAMMPS [108]. Для описания межатомного взаимодействия использовались потенциалы основанные на методе погруженного атома для алюминия, меди и никеля [116, 135].

На рисунке 3.1 изображена локализованная колебательная мода в ГЦК решетке в плотноупакованной (111) плоскости, которая представляет собой одномерную цепочку атомов вдоль направления $[\bar{1}01]$, в которой два соседних атома сдвинуты по направлению друг к другу от их положений в идеальной кристаллической решетке. Для наглядности, черным цветом на рисунке 3.1

показаны атомы колебательной моды в момент максимального отклонения от положения равновесия. Как показали предварительные расчеты, амплитуды смещения атомов от узлов кристаллической решетки достаточно варьировать в интервале от 0.05 до 0.5 Å. Вне этого интервала время жизни колебательной моды ограничивается всего несколькими колебаниями, которые очень быстро затухают. Все остальные атомы расчетной ячейки находились в узлах идеальной кристаллической решетки.

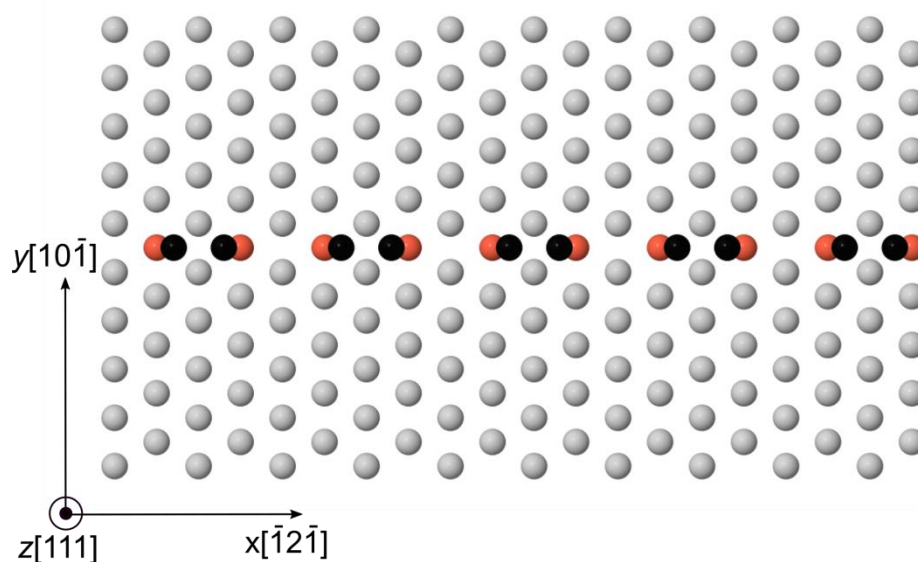


Рисунок 3.1 – Локализованная колебательная мода в ГЦК решетке. Атомы колебательной моды в момент максимального отклонения от положения равновесия показаны черным цветом. Остальные атомы отмечены серым.

Расчетная ячейка содержит четное число возбужденных атомов.

Периодические граничные условия использовались вдоль всех трех взаимно перпендикулярных направлений. Моделирование проводилось при температуре $T=0$ К с применением термодинамического ансамбля NVE (неизменные число атомов, объем и энергия). Данная температура выбрана, поскольку тепловые флуктуации атомов значительно нарушают колебания атомной цепочки. При численном интегрировании уравнений движения частиц шаг по времени был

выбран равным 1 фс. Следует отметить, что такой шаг является стандартным для данного типа молекулярно-динамического моделирования. Продолжительность численных расчетов составила 20000 шагов, что оказалось достаточным для наблюдения изучаемых явлений. Плотность фоннных состояний была рассчитана для всех ГЦК металлов и представлена на рисунке 3.2. Как видно, верхняя граница фоннного спектра 10.0, 7.9 и 10.3 ТГц соответственно для Al, Cu и Ni.

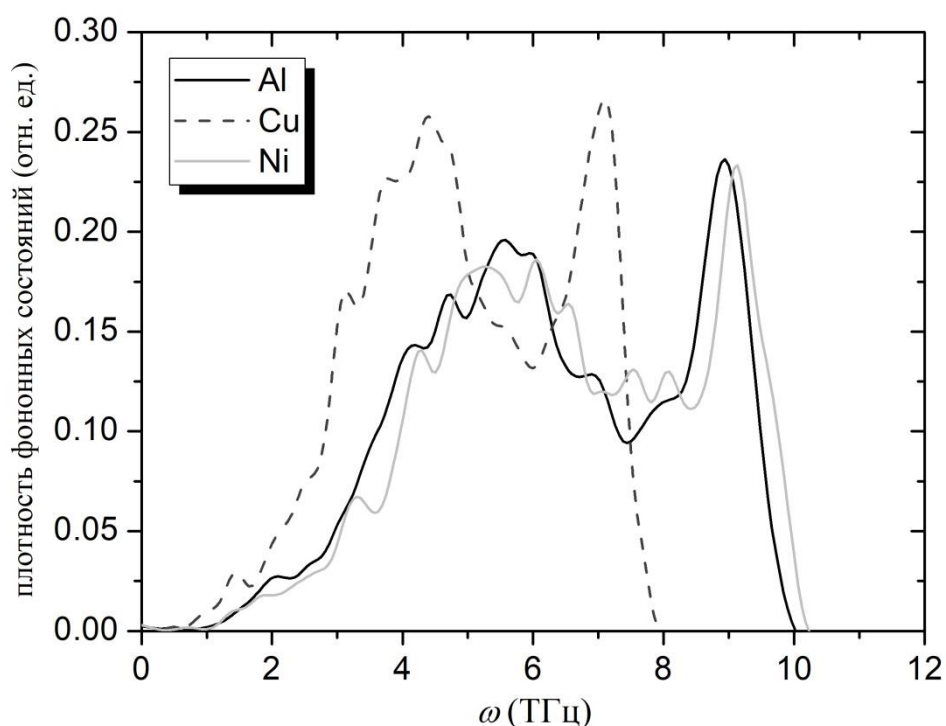


Рисунок 3.2 – Плотность фоннных состояний рассчитанная для ГЦК металлов Al, Cu и Ni.

Для изучения влияния расчетной ячейки на результаты моделирования, свойства локализованной колебательной моды рассматриваются в монокристаллах никеля разных размеров. Для краткости, линейные размеры и число атомов в расчетной ячейке, параметры кристаллической решетки и значения верхней границы фоннного спектра для исследуемых ГЦК металлов Al, Cu и Ni, представлены в таблице 2.

Исследования показали, что начальная амплитуда колебаний атомов A несколько отличается от амплитуды a , которая устанавливается после нескольких колебаний. Эта установившаяся амплитуда колебаний определялась путем усреднения размаха плоской колебательной моды в момент времени, равный 1 пс. Частота определялась как обратная величина периода колебаний. Время жизни - это время, после которого структура плоского бризера начинает разрушаться и сопровождается значительным уменьшением амплитуды колебаний.

Таблица 2. Размеры расчетной ячейки вдоль x -, y - и z -направлений, число атомов (N), постоянная решетки a_0 при $T = 0$ К, верхняя граница фононного спектра (ω) для исследуемых ГЦК металлов Al, Cu и Ni. Монокристалл Ni с меньшей расчетной ячейкой обозначается далее как Ni*.

Металл	Расчетная ячейка (Å)	N	a_0 (Å)	ω (ТГц)
Al	157.6×125.1×76.1	92928	4.05	10.0
Cu	141.7×112.5×68.4	92928	3.62	7.9
Ni	138.0×109.6×67.1	92928	3.54	10.3
Ni*	69.0×54.8×67.1	23232	3.54	10.3

3.2. Свойства одномерного дискретного бризера

На рисунке 3.3 а представлена зависимость времени жизни одномерного ДБ от начальной амплитуды колебаний a в момент времени 1 пс. Следует отметить, что задаваемая в начале моделирования начальная амплитуда в течение нескольких периодов колебаний уменьшается из-за некоторого рассеивания энергии на соседних атомах, в результате чего происходит небольшое уменьшение амплитуды атомных колебаний, которая затем остается постоянной довольно длительный промежуток времени. Эта амплитуда и называется установившейся. При этом период колебаний от момента возбуждения ДБ до его

затухания практически не изменятся. Как видно из рисунка 3.3, исследуемая мода может существовать в ГЦК решетках всех трех исследуемых металлов Al, Cu и Ni. В интервале амплитуд от 0.05 до 0.125 Å время жизни ДБ довольно мало и не превышает 2 пс. При начальных амплитудах для алюминия 0.25 Å, для меди 0.25 Å и для никеля 0.2 Å наблюдается резкое увеличение времени жизни до максимальных значений 16, 17 и 14 пс, что соответствует 163, 140 и 142 колебаниям, соответственно. После чего с увеличением амплитуды от 0.3 до 0.5 Å время существования локализованной моды начинает уменьшаться и уже при амплитуде 0.5 Å не превышает 2.2 пс для всех трех металлов. Время жизни моды, полученное для монокристалла Ni* практически не отличается от значений полученных для Ni при малых и больших амплитудах колебаний, и заметно различается при промежуточных значениях установившихся амплитуд. А именно, времена жизни короче в случае меньшей расчетной ячейки. Отметим, что наибольшая разница около 1.7 пс соответствует максимальному времени жизни, как это показано на рисунке 3.3. Таким образом, диапазон начальных амплитуд, при которых может возбуждаться устойчивая делокализованная колебательная мода, для исследованных металлов относительно узкий, то есть $0.225 < A < 0.45$.

Зависимость частоты одномерного ДБ от начальной амплитуды представлена на рисунке 3.3 б. В интервале начальных амплитуд от 0.05 до 0.225 Å частота колебаний локализованной моды увеличивается несущественно, что можно объяснить малостью смещений и особенностями межатомного потенциала взаимодействия. Далее, при амплитудах более 0.25 Å происходит значительное увеличение частоты ДБ по линейному закону, что соответствует жесткому типу нелинейности, типичному для металлов с различной кристаллической решеткой. Важно отметить, что найденные частоты колебаний для Al, Cu и Ni выше соответствующих значений верхнего края фононного спектра для этих металлов (см. таблицу 2), что обеспечивает невзаимодействие атомов моды с тепловыми колебаниями решетки.

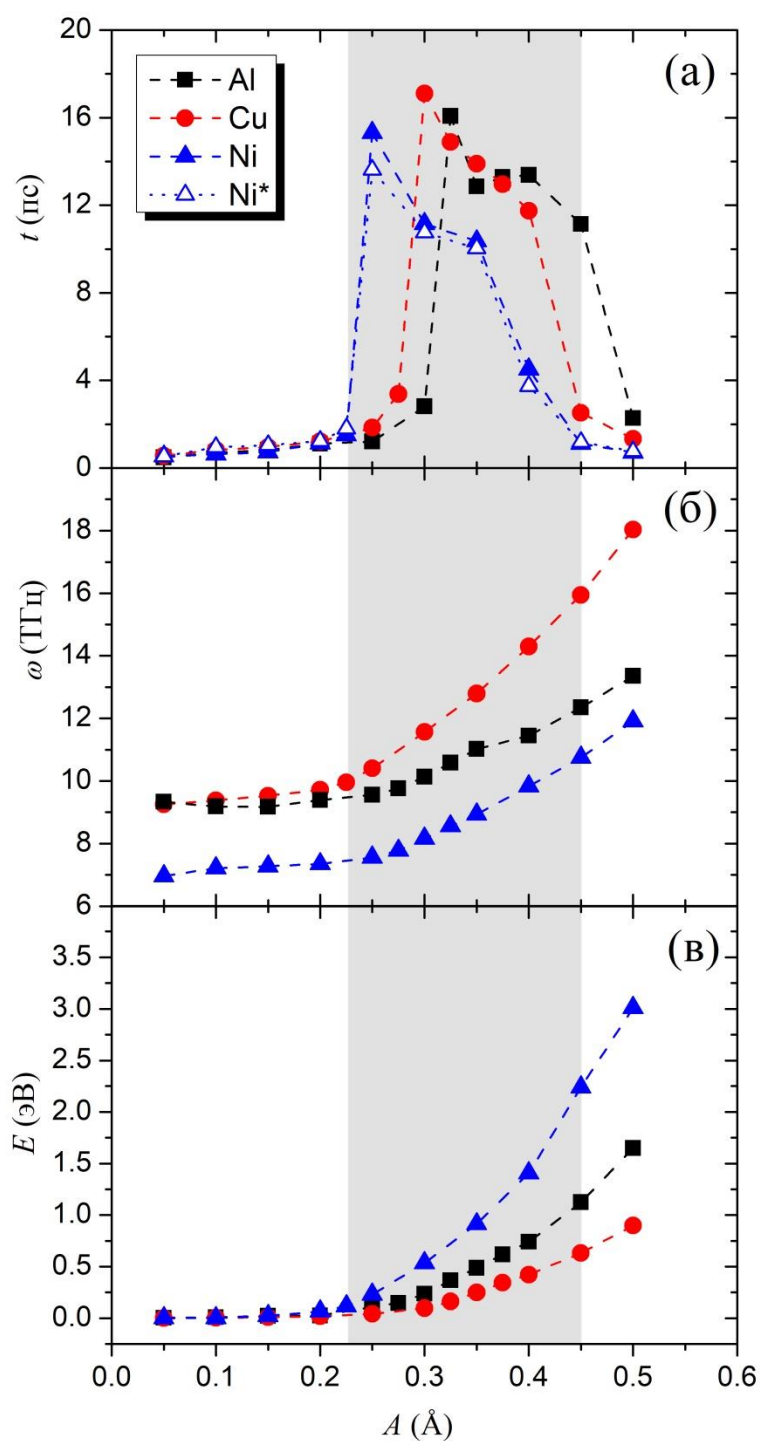


Рисунок 3.3 – а) Зависимость времени жизни б) частоты и в) полной колебательной энергии одномерного ДБ от начальной амплитуды для ГЦК металлов Al, Cu и Ni.

На рисунке 3.3 в показана зависимость полной (кинетическая плюс потенциальная) колебательной энергии, приходящейся на один осциллирующий атом в цепи, от начальной амплитуды A . Как видно, график полной энергии ведет

себя таким же образом, как и частота колебаний, изображенная на рисунке 3.3 б. А именно, незначительное увеличение полной энергии происходит в диапазоне амплитуд от 0.05 до 0.225 Å, а при амплитудах $A > 0.25$ Å энергия растет значительно приблизительно по линейному закону. Такой переход между двумя линейными зависимостями в диапазоне начальных амплитуд 0.225-0.325 Å объясняется максимальным насыщением энергии атомов и соответствует максимальным значениям времени жизни, что хорошо видно при сравнении рисунков 3.3 а и 3.3 в. Таким образом, наиболее долгоживущими одномерными ДБ являются те, у которых амплитуда колебания находится в интервале от 0.2 до 0.4 Å, и которые могут накапливать до 0.5-1.4 эВ колебательной энергии на атом. При этом максимальные значения полной энергии наблюдаются при самых высоких амплитудах и составляют порядка 0.9, 1.6 и 3.0 эВ на атом для Al, Cu и Ni соответственно. Таким образом, делокализованная колебательная мода для Ni может накапливать большую колебательную энергию по сравнению с Al и Cu, что непосредственно связано с жесткостью межатомных связей задаваемых потенциалом взаимодействия для данного конкретного металла. Частота колебаний и полная колебательная энергия для Ni* не показаны на рисунке 3.3 б и 3.3 в, поскольку они почти полностью совпадают с соответствующими результатами для Ni.

На рисунке 3.4 изображена зависимость установившейся амплитуды a от начальной амплитуды A . Хорошо видно, что значения a для данной локализованной колебательной моды всегда ниже соответствующих значений A . Это объясняется тем, что после возбуждения происходит процесс рассеяния энергии на соседние атомы, находящиеся в той же атомной плоскости. Рассеяние колебательной энергии на атомы соседних атомных плоскостей на порядок меньше. В интервале амплитуд от 0.05 до 0.25 Å имеет место линейная зависимость, после чего происходит резкое увеличение установившейся амплитуды, а затем при амплитудах от 0.3 до 0.5 Å зависимость опять становится линейной, но с большим углом наклона по отношению к оси абсцисс. Результаты

для Ni^* почти полностью совпадают с Ni для больших начальных амплитуд и незначительно отличаются при более низких амплитудах колебаний.

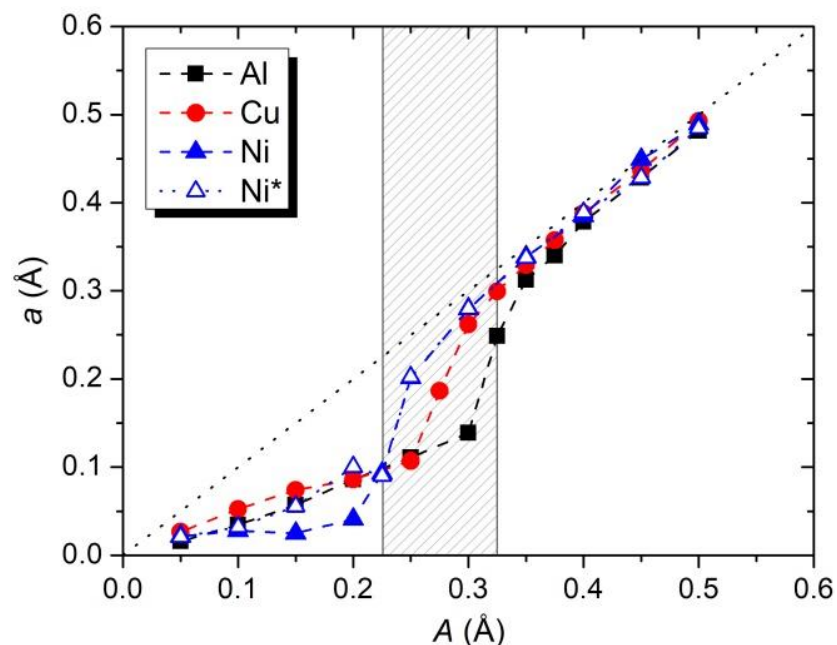


Рисунок 3.4 – Зависимость установившейся амплитуды колебаний одномерного ДБ a от начальной амплитуды A . Пунктирной линией показана зависимость $a = A$.

Для того чтобы более наглядно продемонстрировать динамику колеблющихся атомов, на рисунке 3.5 а представлена зависимость x -компоненты смещения одного из атомов в кристаллических решетках Al, Cu и Ni от времени, рассчитанная при начальной амплитуде $A = 0.30 \text{ \AA}$. Колебания имеют устойчивый характер в течение 10 пс для меди и никеля, в то время как для алюминия уже после 1.2 пс наблюдается затухание.

Смещения от центров равновесия как центрального, так верхнего и нижнего ближайших соседей атомов колебательной моды показаны на рисунке 3.5 б. Следует отметить, что колебания центрального атома n , верхнего $(n+1)$ и нижнего $(n-1)$ атома расположены вдоль двух взаимно перпендикулярных направлений, то есть вдоль осей x и y соответственно. При этом $(n+1)$ и $(n-1)$ атомы колеблются в противоположной фазе, но с одинаковой частотой и амплитудой.

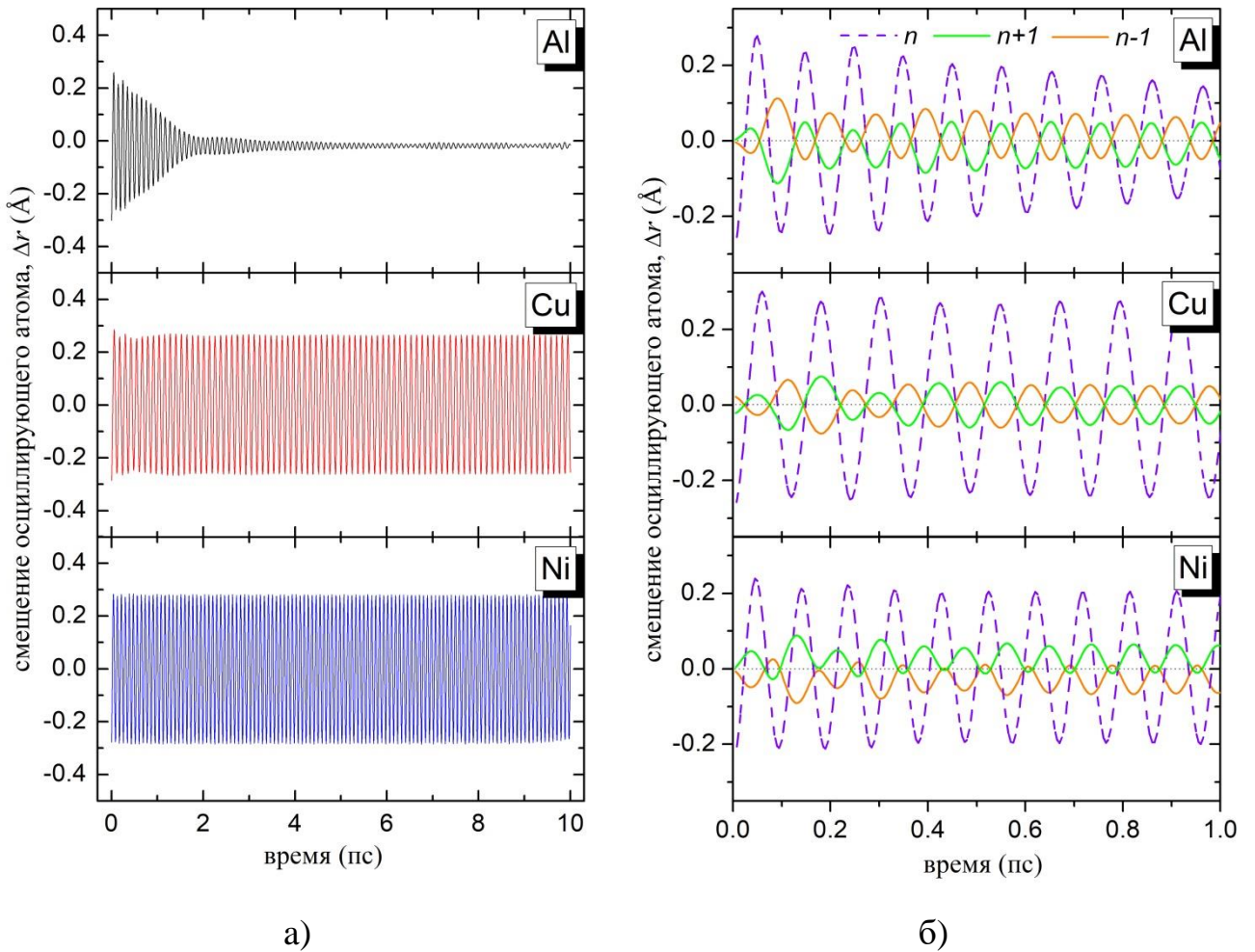


Рисунок 3.5 – а) Зависимость x -компоненты смещения одного из атомов из положения равновесия от времени, рассчитанная для ГЦК металлов Al, Cu и Ni. б) Сравнение x -компоненты смещения центрального осциллирующего атома (обозначенного как n), верхних ($n+1$) и нижних ($n-1$) атомов в зависимости от времени. Для всех металлов расчеты проведены для значения начальной амплитуды $A = 0.30 \text{ \AA}$.

Как видно на рисунке 3.5, значения амплитуд колебаний соседних атомов в несколько раз меньше, чем соответствующие значения для центрального атома n . Таким образом, возбуждение атомов в цепочке вдоль выбранной оси приводит к незначительному рассеянию колебательной энергии на соседние атомы. Следствием этого является тот факт, что наблюдаемая установившаяся амплитуда колебаний всегда ниже начальной, как это показано на рисунке 3.4. Поскольку

колебания атомов с наибольшей амплитудой происходят вдоль одной линии (ось x), а соседние атомы колеблются со значительно более низкими амплитудами, данную делокализованную колебательную моду можно рассматривать как одномерный ДБ.

Результаты для Ni^* идентичны результатам полученным для Ni (см. рисунок 3.5 а и 3.5 б) и поэтому не приводятся. Таким образом, использование больших расчетных ячеек приводит к тому же смещению осциллирующих атомов относительно их положений равновесия в кристаллической решетке. Этот факт является прямым свидетельством высокой степени пространственной локализации одномерного ДБ вдоль колебательного направления.

Выводы по главе 3

Впервые исследованы свойства колебательной моды, локализованной вдоль двух и делокализованной вдоль третьего направления, в трехмерных монокристаллах ГЦК-металлов (Al, Cu и Ni). Атомы моды осциллируют с амплитудами, намного превышающими амплитуды колебаний соседних атомов, что связано с низкой диссипацией колебательной энергии. Исходя из этого факта, исследованную колебательную моду можно рассматривать как одномерный ДБ. Обнаружено, что время жизни одномерных ДБ существенно зависит от амплитуды колебаний. Максимальное время жизни может достигать 15-17 пс, что соответствует 140-160 атомным колебаниям. Максимальные значения накопленной колебательной энергии составляют порядка 0.9-3.0 эВ на атом. Исследованные одномерные ДБ во всех ГЦК-металлах демонстрируют жесткий тип нелинейности, обнаруженный ранее для нульмерных ДБ в металлах. Оказалось, что размер расчетной ячейки незначительно влияет на время жизни одномерного ДБ, что является прямым свидетельством высокой степени его пространственной локализации.

ГЛАВА 4. ДВУМЕРНЫЕ ДИСКРЕТНЫЕ БРИЗЕРЫ В МЕТАЛЛАХ

Глава посвящена изучению двумерных делокализованных нелинейных колебательных мод (ДНКМ) в трехмерных кристаллах с ГЦК и ГПУ решеткой. Представленные в данной главе результаты были опубликованы в работах [136-138].

4.1. Однокомпонентные делокализованные нелинейные колебательные моды в треугольной решетке

Поставим задачу изучения *однокомпонентных* ДНКМ в ГЦК металлах (Al, Cu и Ni) и выясним, могут ли на их основе быть возбуждены двумерные ДБ.

4.1.1. Описание модели и методика компьютерного моделирования

ДНКМ являются точными решениями нелинейных уравнений движения атомов независимо от вида межатомного потенциала и полностью определяются симметрией кристаллической решетки [34, 35]. Заметим, что базальная плоскость ГПУ кристалла, а также (111) плоскость в ГЦК кристалле представляют собой двумерную треугольную решетку, для которой Чечин и Рябов вывели восемь возможных однокомпонентных ДНКМ изображенных на рисунке 4.1 [34]. Далее в настоящем разделе в ГПУ (Ti) и ГЦК металлах (Al, Cu, Ni) проводится возбуждение этих восьми мод и исследуется время их жизни. В случае, если частота атомных колебаний ДНКМ лежит выше верхней границы фононного спектра кристалла и возрастает с увеличением амплитуды, а время ее жизни превышает 5 пс, то такую ДНКМ будем называть устойчивым двумерным ДБ.

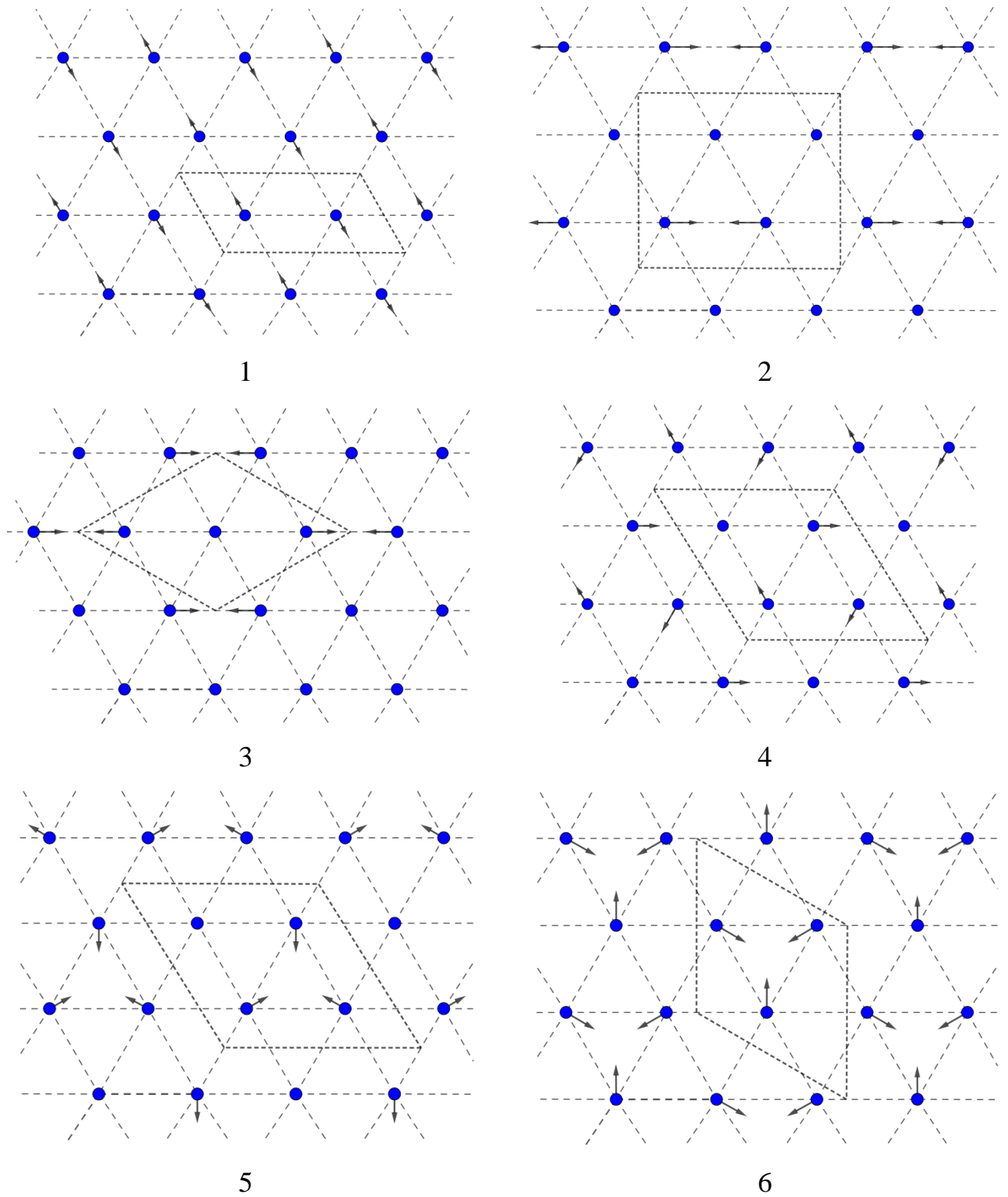


Рисунок 4.1 – Однокомпонентные ДНКМ, обнаруженные в работе [34].

Пунктиром показаны элементарные ячейки колебательного состояния в плоскости, стрелками – атомные смещения из узлов кристаллической решетки. Длина всех векторов смещений в начальный момент времени для каждой из мод одинакова и равна A .

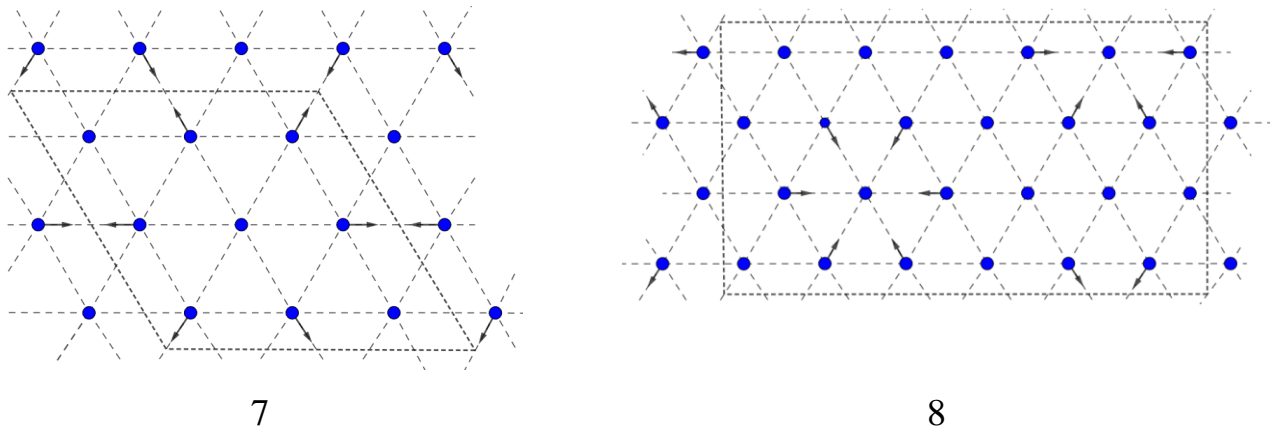


Рисунок 4.1 (продолжение). Однокомпонентные ДНКМ, обнаруженные в работе [34].

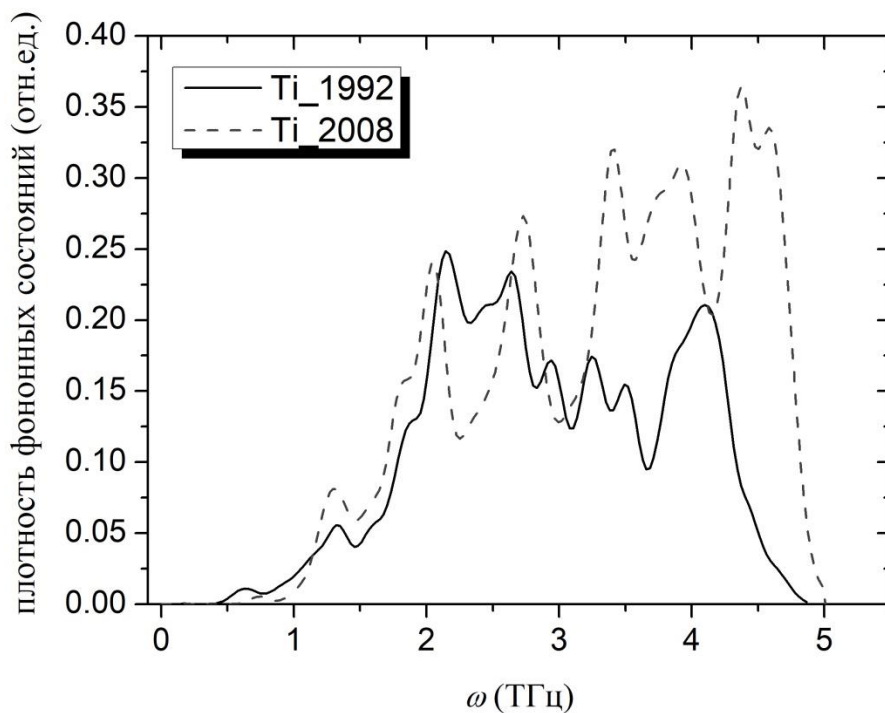


Рисунок 4.2 – Плотность фононных состояний, рассчитанная для двух потенциалов взаимодействия Ti_{1992} и Ti_{2008} .

Межатомные потенциалы взаимодействия в исследуемых ГЦК металлах Al, Cu и Ni использовались те же, что и в предыдущих главах. Для ГПУ титана было выбрано два потенциала межатомного взаимодействия [139, 140], первый из которых представляет собой многочастичный параметризованный

полуэмпирический потенциал типа Финниса-Синклера (обозначен для краткости как Ti_1992) [140], а второй сочетает потенциал Стиллингера-Вебера и потенциал основанный на модифицированном методе погруженного атома (Ti_2008) [139]. Плотность фононных состояний для потенциалов Ti_1992 и Ti_2008 представлена на рисунке 4.2.

Таблица 3. Размеры расчетной ячейки вдоль x -, y - и z -направлений, число атомов (N), постоянная решетки a_0 при $T = 0\text{K}$, верхняя граница фононного спектра (ω) для исследуемых ГПУ и ГЦК металлов. Для краткости монокристалл Ni с меньшей расчетной ячейкой обозначен как Ni*.

Металл	Расчетная ячейка (Å)		N		a_0 (Å)	ω (ТГц)
	ДНКМ 1,2,4,5	ДНКМ 3,6,7,8	ДНКМ 1,2,4,5	ДНКМ 3,6,7,8		
Ti_1992	29.3×50.8×49.8	35.2×50.8×49.8	4000	4800	1.59	4.9
Ti_2008	29.3×50.8×49.8	35.2×50.8×49.8	4000	4800	1.59	5.0
Al	125.1×78.8×76.6	119.4×59.1×76.6	46464	33264	4.05	10.0
Cu	112.5×70.8×68.9	107.4×53.1×68.9	46464	33264	3.62	7.9
Ni	109.5×68.9×67.1	104.5×51.7×67.1	46464	33264	3.54	10.3
Ni*	68.5×54.3×66.6	28.7×33.1×42.8	23232	4224	3.54	10.3
		28.7×49.7×42.8		6336		
		28.7×49.7×42.8		6336		
		28.7×33.1×42.8		4224		

Для изучения влияния расчетной ячейки на результаты моделирования, рассматривались два разных ее размера на примере Ni. Шаг по времени выбран равным 1 фс для титана и 0.5 фс для ГЦК металлов. Амплитуды смещения атомов из узлов кристаллической решетки варьировались в интервале от 0.05 до 0.75 Å. Установившаяся амплитуда определялась путем усреднения размаха колебаний атомов ДНКМ в момент времени равный 1 пс. Периодические граничные условия

использовались вдоль всех трех направлений. Все расчеты выполнялись при нулевой начальной температуре $T = 0$ К с использованием термодинамического ансамбля NVE. Нулевая температура выбрана поскольку тепловые флуктуации атомов существенно нарушают колебания атомов моды и тем самым затрудняют наблюдение изучаемого явления. Для определения «долгоживущих» двумерных ДБ продолжительность моделирования была ограничена 80000 шагами по времени. Данные о размерах расчетной ячейки, числе атомов, постоянных решетки и верхней границы фононного спектра, выбранных для исследования металлов, представлены в таблице 3.

Заметим, что в работе [16] было показано, что возбуждение ДНКМ при постоянном объеме (нулевом давлении) демонстрирует нелинейность жесткого типа (мягкого типа). Это объясняется тем, что в случае постоянного объема (нулевого давления) большой вклад в динамику моды вносит твердое ядро (мягкий хвост) используемого потенциала Морзе. ДНКМ, рассмотренная в работе [16] занимала весь «объем» двумерной решетки. В этом исследовании размер ДНКМ был двумерным, но размер кристалла трехмерным. Поэтому условия нулевого давления и постоянного объема не должны играть какой-либо существенной роли, особенно для расчетных ячеек большого объема. Это основная причина, почему все расчеты в настоящей работе выполняются при постоянном объеме, в то время как случай нулевого давления не исследуется.

4.1.2. Делокализованные нелинейные колебательные моды в ГПУ титане

Расчеты показали, что только некоторые из восьми однокомпонентных ДНКМ, представленных на рисунке 4.1, могут поддерживать устойчивый двумерный ДБ. Для удобства, результаты для всех восьми однокомпонентных ДНКМ в T_i обобщены в таблице 4. Необходимо отметить, что согласно исследованиям проведенным в работе [34], симметричными являются ДНКМ 1, 2, 4 и 5, у которых максимальные положительные и отрицательные отклонения от

положений равновесия равны по абсолютной величине, а ДНКМ 3, 6, 7 и 8 несимметричные, поскольку для них такие отклонения не равны.

Все атомные колебания локализованы в одной атомной плоскости кристалла (z), то есть там, где они были изначально возбуждены. При этом амплитуды атомных колебаний экспоненциально уменьшаются с удалением от этой плоскости.

На рисунках 4.3 а и 4.3 б показаны зависимости времени жизни, частоты колебаний и полной колебательной энергии, приходящейся на атом ДНКМ в зависимости от начального смещения атомов A для двух потенциалов межатомного взаимодействия. «Долгоживущими» со временем жизни от 5 до 18 пс оказались ДБ на основе ДНКМ 2, 5 и 6 для потенциала Ti_{1992} , в то время как максимальное время жизни остальных не превышает 5 пс. Для Ti_{2008} получились похожие результаты, а именно характерное время жизни всех ДБ лежит в интервале от 3 до 13 пс. Наиболее долгоживущей для Ti_{2008} оказалась ДБ на основе ДНКМ 7, время жизни которой составило 26 пс, что соответствует 145 атомным колебаниям. Времена жизни остальных ДБ на основе ДНКМ 7 и 8 малы и не превышают 5 пс для Ti_{1992} и 8 пс для Ti_{2008} . Для ДНКМ 3 и 4 характерное время жизни составило менее 3.3 пс. При значениях начальной амплитуды в интервале $A = 0.45 \div 0.5 \text{ \AA}$ для Ti_{1998} происходит полное разрушение ДБ на основе ДНКМ 3, в то время как для Ti_{2008} устойчивые колебания начинают появляться лишь при $A = 0.25 \text{ \AA}$. Независимо от используемого потенциала, ДБ, возбужденный на основе ДНКМ 1, оказался нестабильным и колебания атомов затухали почти сразу после начала моделирования.

Интересно также отметить, что ДНКМ 4 для Ti_{1992} возбуждалась только при начальных амплитудах $A \geq 0.40 \text{ \AA}$, в то время как для Ti_{2008} возбуждения двумерного ДБ на основе ДНКМ 4 не происходит и потому результаты не представлены на рисунке 4.3 б.

Таблица 4. Результаты моделирования восьми однокомпонентных ДНКМ в ГПУ металле Ti. Знак «+» обозначает, что двумерный ДБ существует, а знак «-» что возбуждение ДБ на основе данной моды невозможно.

металл	ДНКМ							
	1	2	3	4	5	6	7	8
Ti_1992	-	+	+	+	+	+	+	+
				$A \geq 0.40 \text{ \AA}$		$A \leq 0.35 \text{ \AA}$		
Ti_2008	-	+	+	-	+	+	+	+
			$A \geq 0.25 \text{ \AA}$			$A \leq 0.40 \text{ \AA}$		

Возбуждение двумерного ДБ происходит только тогда, когда его частота лежит вне спектра малоамплитудных колебаний кристаллической решетки. Причем выход частоты ДБ из спектра происходит за счет зависимости частоты нелинейных колебаний от амплитуды. На рисунке 4.3 а видно, что ДБ на основе ДНКМ 2, 5 и 7, рассчитанные при помощи потенциала Ti_1992, показывают жесткий тип нелинейности, а у остальных ДНКМ 3, 6 и 8 частота колебаний уменьшается с ростом амплитуды вследствие несимметричности этих мод. Частота ДБ, возбужденного на основе ДНКМ 4, практически не увеличивается с изменением начальной амплитуды и лежит выше, но очень близко к верхней границе фононного спектра Ti_1992, равной 4.9 ТГц (см. таблицу 3).

Результаты для Ti_2008 значительно отличаются от полученных с помощью потенциала Ti_1992 (см. рисунок 4.3 б), демонстрируя, таким образом, что выбор потенциала межатомного взаимодействия играет существенную роль при изучении нелинейных эффектов в кристалле. Двумерный ДБ на основе ДНКМ 4 не возбуждается при использовании потенциала Ti_2008, поскольку его частота колебаний лежит в фононном спектре кристалла, верхняя граница которого равна 5.0 ТГц (см. таблицу 3), что обуславливает их взаимодействие с атомами решетки и быстрое рассеяние энергии на фононах.

На рисунке 4.3 в показана зависимость полной колебательной энергии E всех исследованных мод от начальной амплитуды A . Видно, что энергия возрастает с увеличением амплитуды. Двумерные ДБ на основе ДНКМ 3 и 4 (для Ti_1992) довольно быстро рассеивают свою энергию на соседние атомы. Отметим, что для ДБ на основе ДНКМ 8 имеется характерный «провал» в интервале амплитуд $A=0.35\div 0.40\text{\AA}$ для обоих использованных потенциалов.

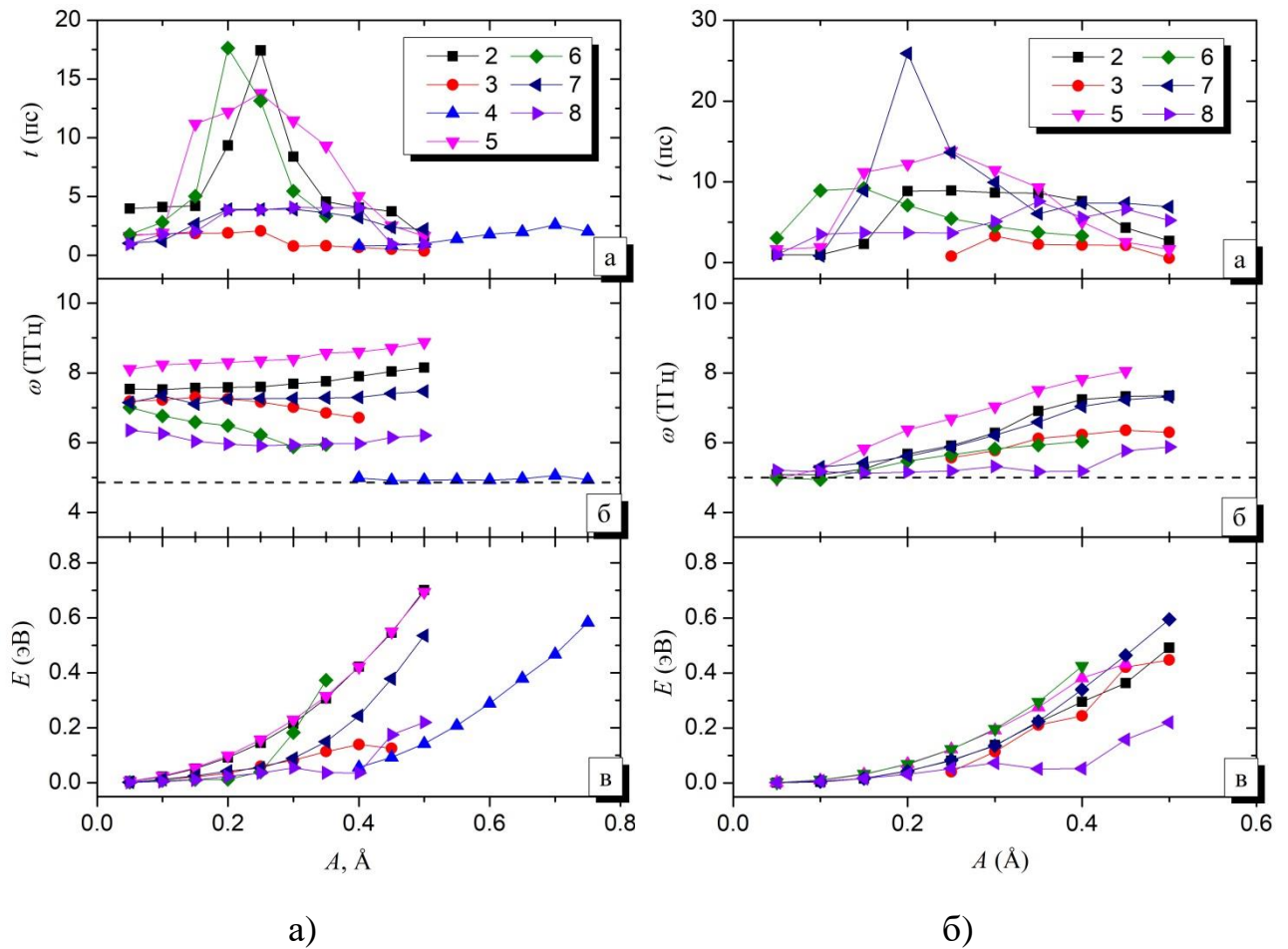


Рисунок 4.3 – Зависимости времени жизни, частоты колебаний и полной энергии колебаний на атом ДНКМ от начального смещения атомов A , рассчитанные при помощи двух различных межатомных потенциалов:

(а) Ti_1992 и (б) Ti_2008. Цифрами в легенде обозначены номера однокомпонентных ДНКМ, представленных на рисунке 4.1. Пунктирной линией показана верхняя граница фононного спектра титана.

Установившаяся амплитуда колебаний a , как функция начальной амплитуды A , представлена на рисунке 4.4. Видно, что A всегда отличается от a , поскольку последняя устанавливается после нескольких колебаний и связана, прежде всего, с рассеянием энергии. Эта установившаяся амплитуда колебаний определялась путем усреднения размаха атомных смещений в ДНКМ в момент времени равный 1 пс. Во всем интервале амплитуд наблюдается увеличение a с ростом A , причем в некоторых случаях эта зависимость оказывается очень близка к линейной, но в то же время, например, для ДНКМ 4, 6 и 7 (Ti_1992), имеется значительное отклонение от линейной зависимости. Заметим, что установившаяся амплитуда для ДБ, возбужденного на основе ДНКМ 6 (Ti_1992) в одной точке и ДНКМ 3 и 6 (Ti_2008), превышает начальную. Это связано, как было ранее указано самими авторами [34], с несимметричностью этих ДНКМ.

На рисунке 4.5 показана зависимость z -компоненты смещения одного из атомов из положения равновесия от времени, рассчитанная для начальной амплитуды $A=0.25 \text{ \AA}$. Выбор данного значения начальной амплитуды продиктован длительным временем жизни почти всех исследованных ДБ, возбужденных на основе однокомпонентных ДНКМ. Повторим, что ДБ на основе ДНКМ 1 не возбуждается в интервале амплитуд $A = 0.05 \div 0.75 \text{ \AA}$ независимо от типа использованного потенциала. На рисунке 4.5 хорошо видно, что в случаях ДНКМ 2, 5, 6 и 7 происходит возбуждение двумерного ДБ для обоих рассмотренных потенциалов межатомного взаимодействия, а ДНКМ 3, 4 и 8, наоборот, довольно быстро разрушаются при $A = 0.25 \text{ \AA}$ и устойчивого ДБ не наблюдается.

Причина немонотонной зависимости $a(A)$ для ДБ на основе ДНКМ 6 связана с наличием перехода от асимметричных колебаний, которые наблюдаются при относительно малых амплитудах, к симметричным, имеющим место при больших амплитудах. Так, ДБ на основе ДНКМ 6 неустойчив при малых амплитудах $A < 0.1$ для Ti_1992 и Ti_2008, а затем устанавливается стационарный режим колебаний атомов. При высоких амплитудах имеет место

соотношение $a > A$ для обоих потенциалов взаимодействия. Разрушение структуры ДНКМ 6 происходит при $A = 0.4 \text{ \AA}$ для Ti_1992 и $A = 0.45 \text{ \AA}$ для Ti_2008.

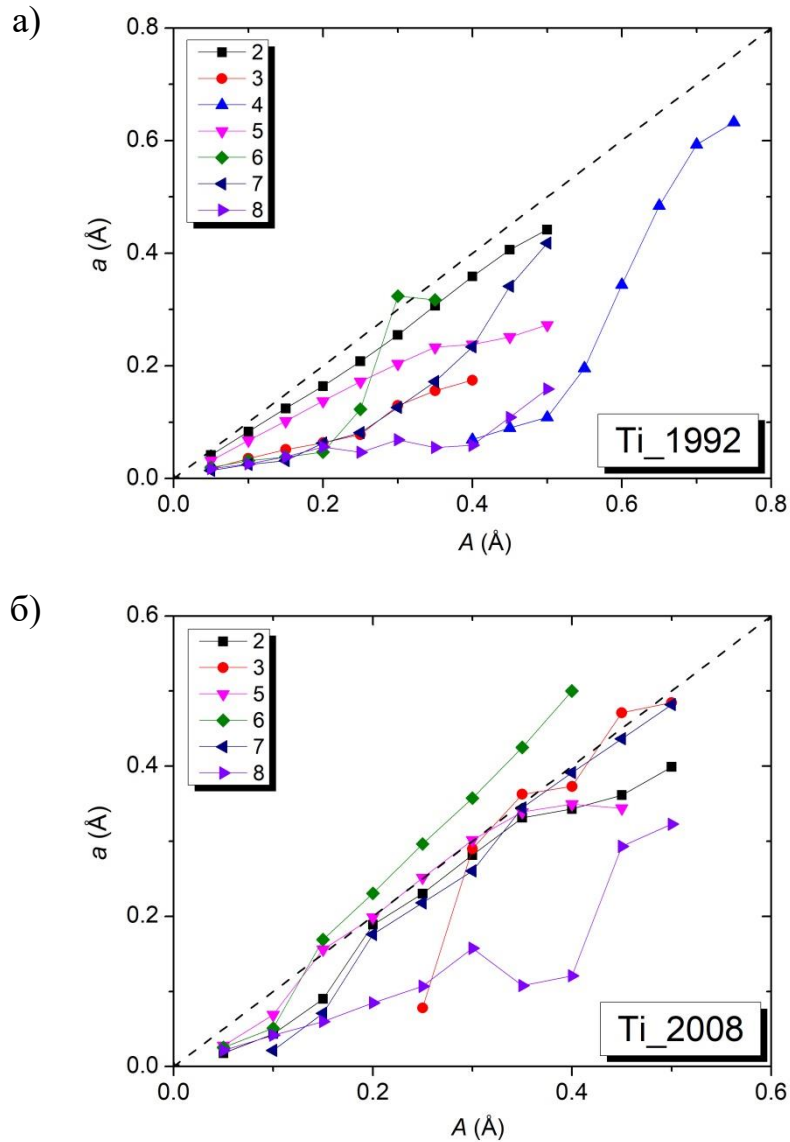


Рисунок 4.4 – Зависимость установившейся амплитуды колебаний ДНКМ a от начальной амплитуды A , рассчитанная для двух межатомных потенциалов:

(а) Ti_1992 и (б) Ti_2008. Цифрами в легенде обозначены номера однокомпонентных ДНКМ, представленных на рисунке 4.1. Пунктирной линией показана прямая пропорциональность.

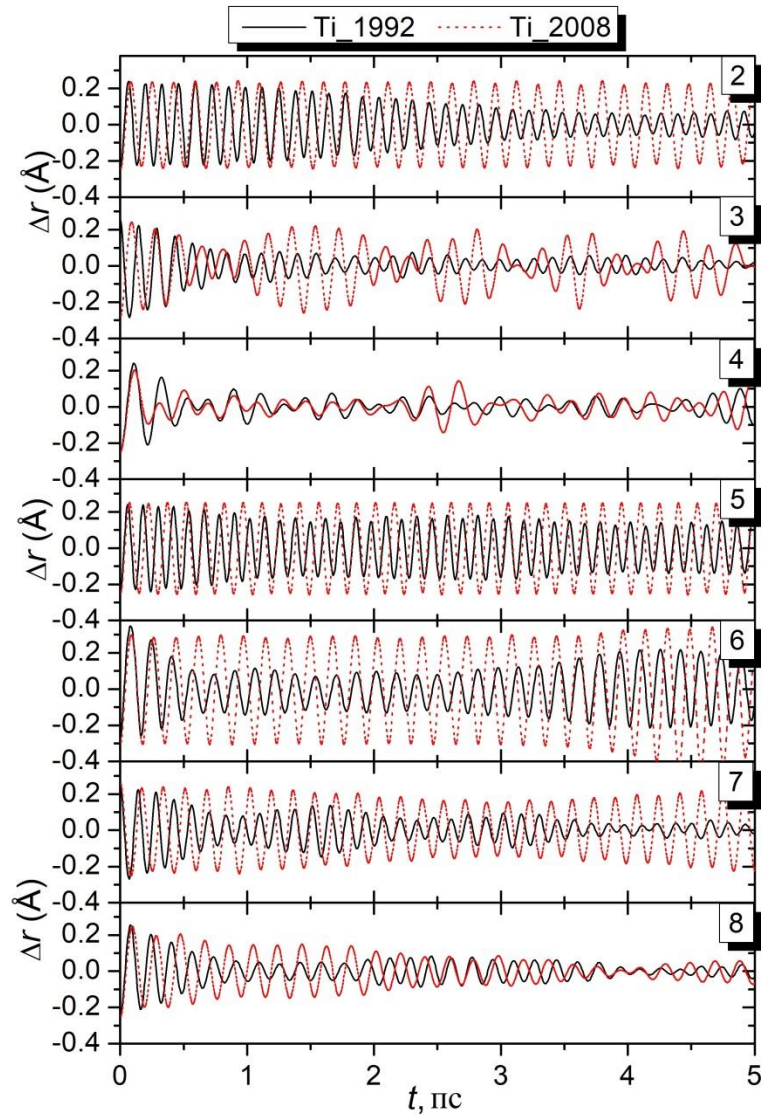


Рисунок 4.5 – Зависимость z -компоненты смещения одного из атомов из положения равновесия от времени, рассчитанная для Ti с использованием двух потенциалов межатомного взаимодействия Ti_1992 и Ti_2008. В данном случае для всех ДНКМ значения начальной амплитуды $A = 0.25 \text{ \AA}$.

Для ДБ на основе ДНКМ 8, вне зависимости от межатомного потенциала, изменение амплитуды атомных колебаний со временем происходит на протяжении всего интервала рассматриваемых начальных амплитуд. Поэтому для анализа бралось среднее значение колебаний по частоте и амплитуде в интервале от 1 до 5 пс. Время жизни таких ДБ на основе ДНКМ 8 оказалось невелико и составило 4–7 пс.

Таким образом, исследования показали, что возбуждение двумерных ДБ на основе восьми однокомпонентных ДНКМ в ГПУ решетке титана возможно при использовании двух видов межатомных потенциалов взаимодействия (Финниса-Синклера и Стиллингера-Вебера), которые влияют на время жизни, частоту и энергию атомных колебаний двумерного ДБ, но не на саму возможность их существования. Исключением является ДБ на основе ДНКМ 4, который возбуждается только при высоких амплитудах при использовании Ti_{1992} , но не устойчив при Ti_{2008} .

4.1.3. Делокализованные нелинейные колебательные моды в ГЦК металлах

Только ДНКМ 2, 3, 5 и 7 из восьми представленных на рисунке 4.1 могут поддерживать устойчивый двумерный ДБ, в то время как ДНКМ 1, 4, 6 и 8 оказались неустойчивы во всех трех ГЦК металлах. Результаты моделирования для однокомпонентных ДНКМ возбужденных в Al, Cu и Ni обобщены в таблице 5.

Таблица 5. Результаты моделирования восьми ДНКМ в ГЦК металлах Al, Cu и Ni. Знак «+» обозначает, что двумерный ДБ существует, а знак «-» что возбуждение ДБ на основе данной моды невозможно.

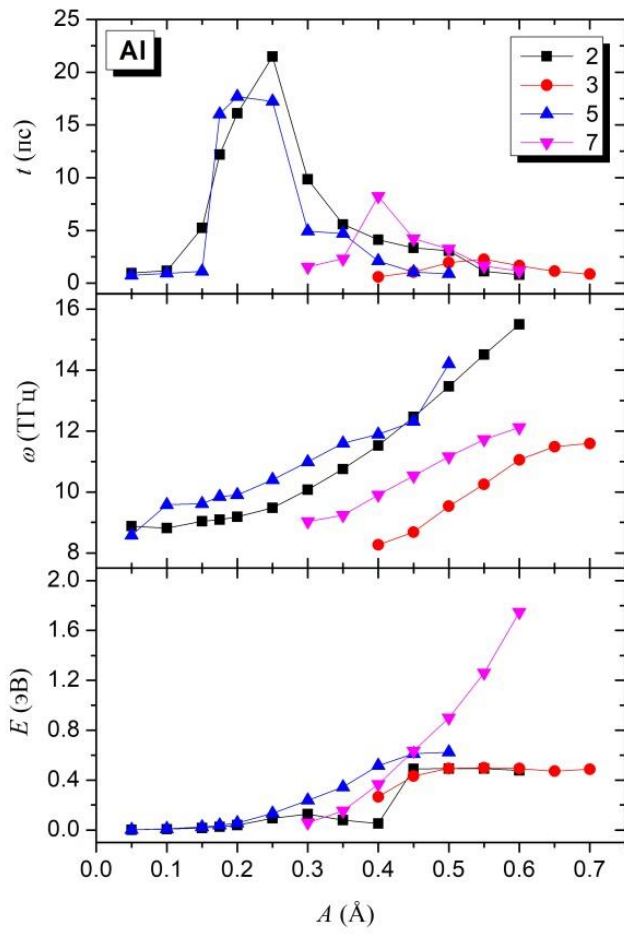
металл	ДНКМ							
	1	2	3	4	5	6	7	8
Al	-	+	+ $A \geq 0.40 \text{ \AA}$	-	+	-	+	-
Cu	-	+	+ $A \geq 0.40 \text{ \AA}$	-	+	-	+	-
Ni	-	+	+ $A \geq 0.40 \text{ \AA}$	-	+	-	+	-

На рисунке 4.6 показаны зависимости времени жизни, частоты колебаний и полной энергии колебаний на атом для всех ДНКМ от начального смещения атомов A в Al, Cu и Ni. В области малых амплитуд $A = 0.05 \div 0.15 \text{ \AA}$ время жизни

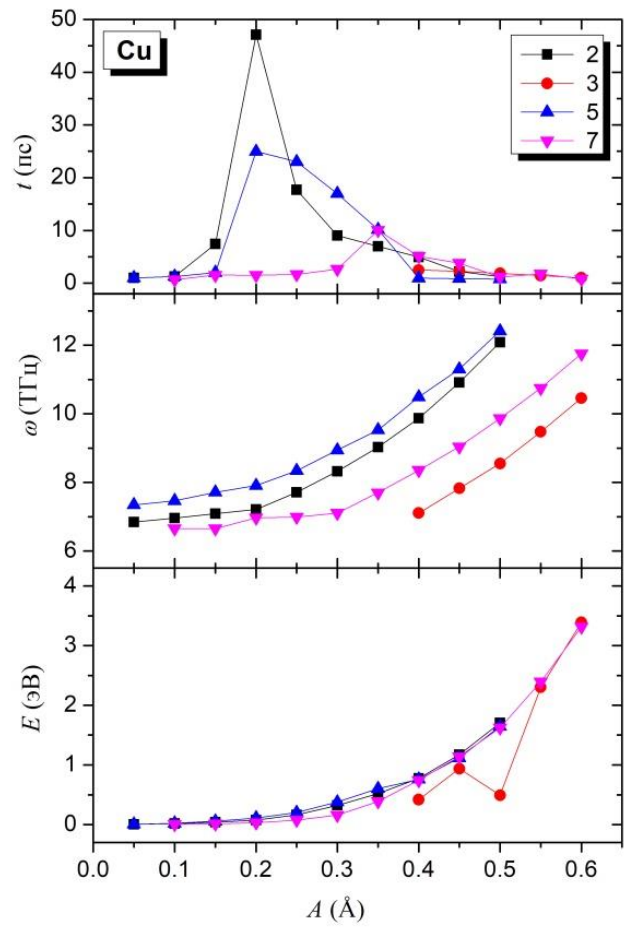
мало и не превышает 5 пс для исследуемых металлов. Максимум достигается для ДБ на основе ДНКМ 2 и равен 23, 47 и 37 пс при начальных амплитудах 0.25, 0.20 и 0.20 Å для Al, Cu и Ni, соответственно. Следует отметить, что максимальное время жизни ДБ на основе ДНКМ 5 также довольно велико (17.7 пс для Al, 25.0 пс для Cu и 17.3 пс для Ni) и приходится на те же начальные амплитуды, что и у ДНКМ 2. Возбуждая двумерный ДБ с помощью ДНКМ 7, получаем устойчивые колебания атомов со значений $A = 0.3 \text{ Å}$ для Al и с $A = 0.1 \text{ Å}$ Cu и Ni, с небольшими временами жизни, лежащими в интервале от 6 до 10 пс. Для сравнения, в Ti это время не превышает 4 пс для потенциала Ti_1992.

Отметим, что все двумерные ДБ возбужденные на основе однокомпонентных ДНКМ в ГЦК-металлах имеют жесткий тип нелинейности. Однако, у ГЦК металлов наблюдается резкое увеличение частоты в зависимости от начальной амплитуды по сравнению с титаном (см. рисунок 4.3).

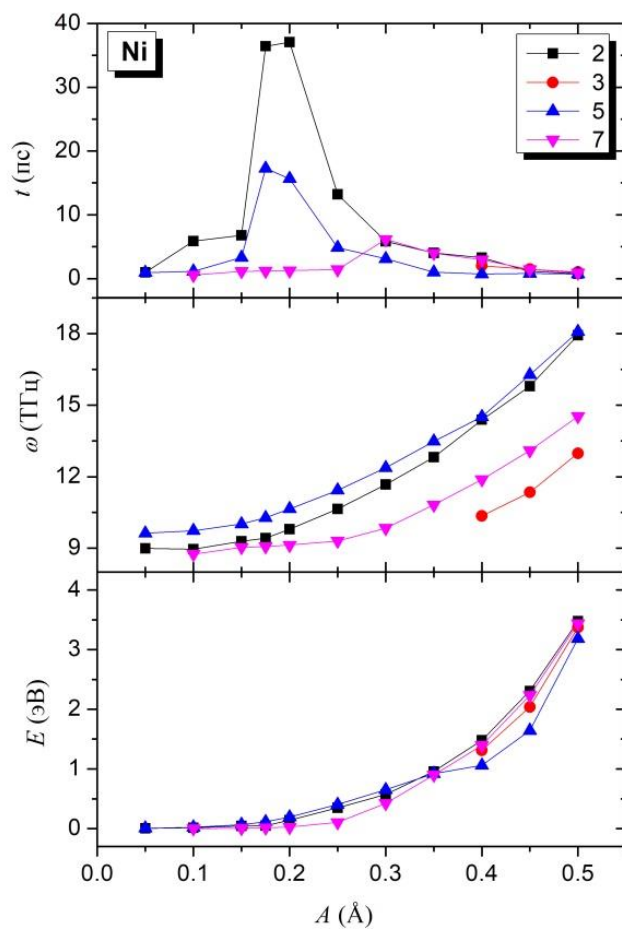
Зависимость установившейся амплитуды атомных колебаний a от начальной амплитуды A для Al, Cu и Ni показана на рисунке 4.7. Для ДБ на основе ДНКМ 2 в Ni линейная зависимость $a(A)$ наблюдается в интервале начальных амплитуд $0.2 \div 0.6 \text{ Å}$, а для Al и Cu с 0.25 Å . Отметим, что ДБ на основе ДНКМ 3 может быть возбужден только при достаточно высоких начальных амплитудах $A \geq 0.40 \text{ Å}$ во всех исследуемых ГЦК-металлах. Следует отметить, что установившаяся амплитуда для ДНКМ 3 для Al и Cu и 3, 7 для Ni превышает начальную. Как было сказано в пункте 4.2.2, это связано с несимметричностью данных мод [34].



a)



б)



в)

Рисунок 4.6 – Зависимости времени жизни, частоты колебаний и полной энергии колебаний на атом ДНКМ от начальной амплитуды A , рассчитанные для ГЦК-металлов: а) Al, б) Cu и в) Ni. Цифрами в легенде обозначены номера соответствующих ДНКМ, представленных на рисунке 4.1, на основе которых возбуждались двумерные ДБ. Результаты представлены только для устойчивых двумерных ДБ, возбужденных на основе ДНКМ 2, 3, 5 и 7.

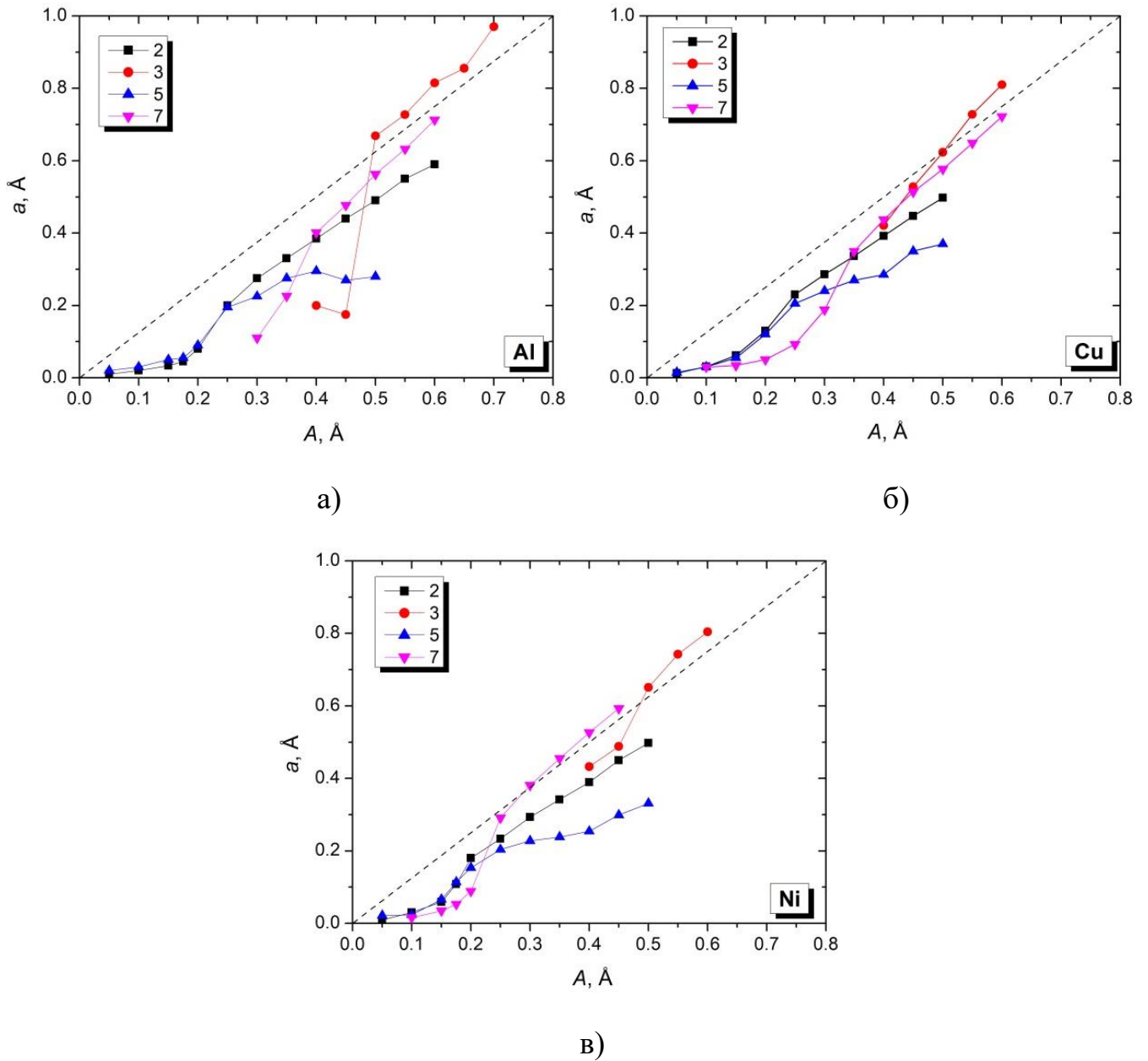


Рисунок 4.7 – Зависимость установившейся амплитуды колебаний ДНКМ a от начальной амплитуды A , рассчитанная для ГЦК-металлов: а) Al, б) Cu и в) Ni. Пунктирной линией показана прямая пропорциональность. Цифрами в легенде обозначены номера соответствующих ДНКМ, представленных на рисунке 4.1, на основе которых возбуждались двумерные ДБ. Результаты представлены только для устойчивых двумерных ДБ, возбужденных на основе ДНКМ 2, 3, 5 и 7.

4.2. Двухкомпонентные делокализованные нелинейные колебательные моды

Поставим задачу изучения двумерных ДБ на основе *двухкомпонентных* ДНКМ в ГЦК металлах (Al, Cu и Ni) и определим их основные характеристики.

4.2.1. Описание модели и методика компьютерного моделирования

Двумерные ДБ на основе двухкомпонентной ДНКМ возбуждались путем задания следующих начальных условий. Атомы одной выбранной плотноупакованной плоскости (111) смещались вдоль осей x и y , как показано на рисунке 4.8. Начальные амплитуды их смещений в направлении осей x и y обозначим A_x и A_y , соответственно. Атомы, не принадлежащие выбранной плотноупакованной плоскости, имели нулевые начальные смещения. В начальный момент времени все атомы в расчетной ячейке имели нулевые начальные скорости. Необходимо отметить, что в отличие от однокомпонентных ДНКМ изображенных на рисунке 4.1, ДНКМ на рисунке 4.8 является двухкомпонентной, поскольку атомные смещения в ней задаются вдоль двух взаимно перпендикулярных координатных направлений.

Расчетная ячейка для всех ГЦК металлов (Al, Cu и Ni) содержала одинаковое количество атомов. Размеры ячейки моделирования и верхние границы фононного спектра для каждого из металлов представлены в таблице 6.

Таблица 6. Размеры расчетной ячейки вдоль x -, y - и z -направлений, число атомов (N), верхняя граница фононного спектра (ω) для ГЦК металлов Al, Cu и Ni.

Металл	Расчетная ячейка (Å)	N	ω (ТГц)
Al	68.2×78.8×76.6	25344	10.0
Cu	61.3×70.8×68.9	25344	7.9
Ni	59.7×69.0×67.1	25344	10.3

Начальные амплитуды вдоль двух перпендикулярных координатных направлений менялись в интервале $A_{x,y}=0.05\div 0.5 \text{ \AA}$. Путем варьирования параметров A_x и A_y , методом проб и ошибок, решалась задача о нахождении долгоживущего двумерного ДБ в ГЦК решетках Al, Cu и Ni. Естественно, что после запуска молекулярно-динамического расчета с описанными выше начальными условиями, часть энергии возбужденной плоскости передавалась соседним плоскостям кристалла. После некоторого переходного периода, при должном выборе начальных амплитуд A_x и A_y , устанавливался режим, в котором колебания с большой амплитудой совершали лишь атомы возбужденной атомной плоскости, с удалением от которой амплитуды колебаний экспоненциально убывали. Условимся, что если длительность установившегося режима составляет более 5 пс, то такой двумерный ДБ будем называть долгоживущим.

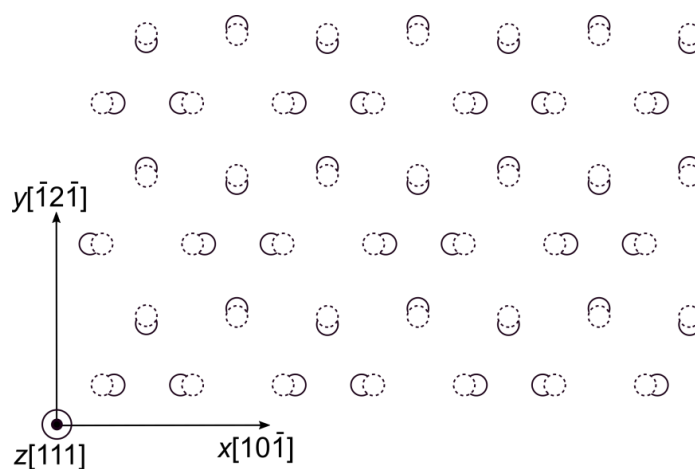


Рисунок 4.8 – Двухкомпонентная ДНКМ в плотноупакованной (111) плоскости ГЦК решетки. Кружками с пунктирной линией показаны положения атомов в узлах идеальной кристаллической решетки, а кружки со сплошной линией демонстрируют смещения атомов вдоль координатных направлений x и y .

4.2.2. Делокализованные нелинейные колебательные моды в ГЦК металлах

В ходе компьютерного моделирования двумерного ДБ в ГЦК металлах (Al, Cu и Ni) было установлено, что устойчивый режим исследуемой двухкомпонентной ДНКМ наблюдается только при условии $A_y < A_x$, то есть когда значения начальной амплитуды атомных смещений вдоль оси y меньше, чем вдоль оси x .

На рисунке 4.9 а представлена амплитуда атомных колебаний в установившемся режиме a_x которая определялась как половина разницы между максимальными и минимальными значениями смещений по сравнению с A_x . Результаты на рисунке 4.9 а приведены только для значений $A_y = 0.05 \div 0.20 \text{ \AA}$, поскольку дальнейшее увеличение A_y приводит либо к уменьшению времени жизни ДНКМ, либо к нарушению его первоначальной структуры. Как и для случая однокомпонентных ДНКМ, рассмотренных в предыдущем разделе 4.1, значения a_x всегда ниже A_x за счет рассеяния энергии по объему кристалла. Отметим, что в интервале $0.1 - 0.30^\circ \text{ \AA}$ имеется отклонение от линейной зависимости $a_x(A_x)$, а при $A_x > 0.3 \text{ \AA}$ эта зависимость для Al и Cu становится очень близка к линейной при различных значениях A_y . В Ni же это имеет место при $A_x = 0.25 \text{ \AA}$ и $A_y = 0.08 \div 0.18 \text{ \AA}$. Линейная зависимость $a_x(A_x)$ устанавливается ввиду выхода двумерного ДБ на стационарный режим колебаний, при котором энергия колебаний максимально сохраняется в узлах кристаллической решетки. Таким образом, можно сделать вывод, что амплитуда A_x является ключевым параметром при рассмотрении исследуемой двухкомпонентной ДНКМ. Кроме того, анализ атомных структур показывает, что двумерный ДБ, возбужденный на основе двухкомпонентной ДНКМ, в конце своего времени существования выстраивается по наиболее плотно упакованным атомным рядам и имеет одномерный характер, путем полного затухания колебаний вдоль оси y . Далее такие одномерные ДБ после непродолжительного времени также распадаются уже

на нульмерные ДБ посредством концентрации колебательной энергии на 6-8 атомах.

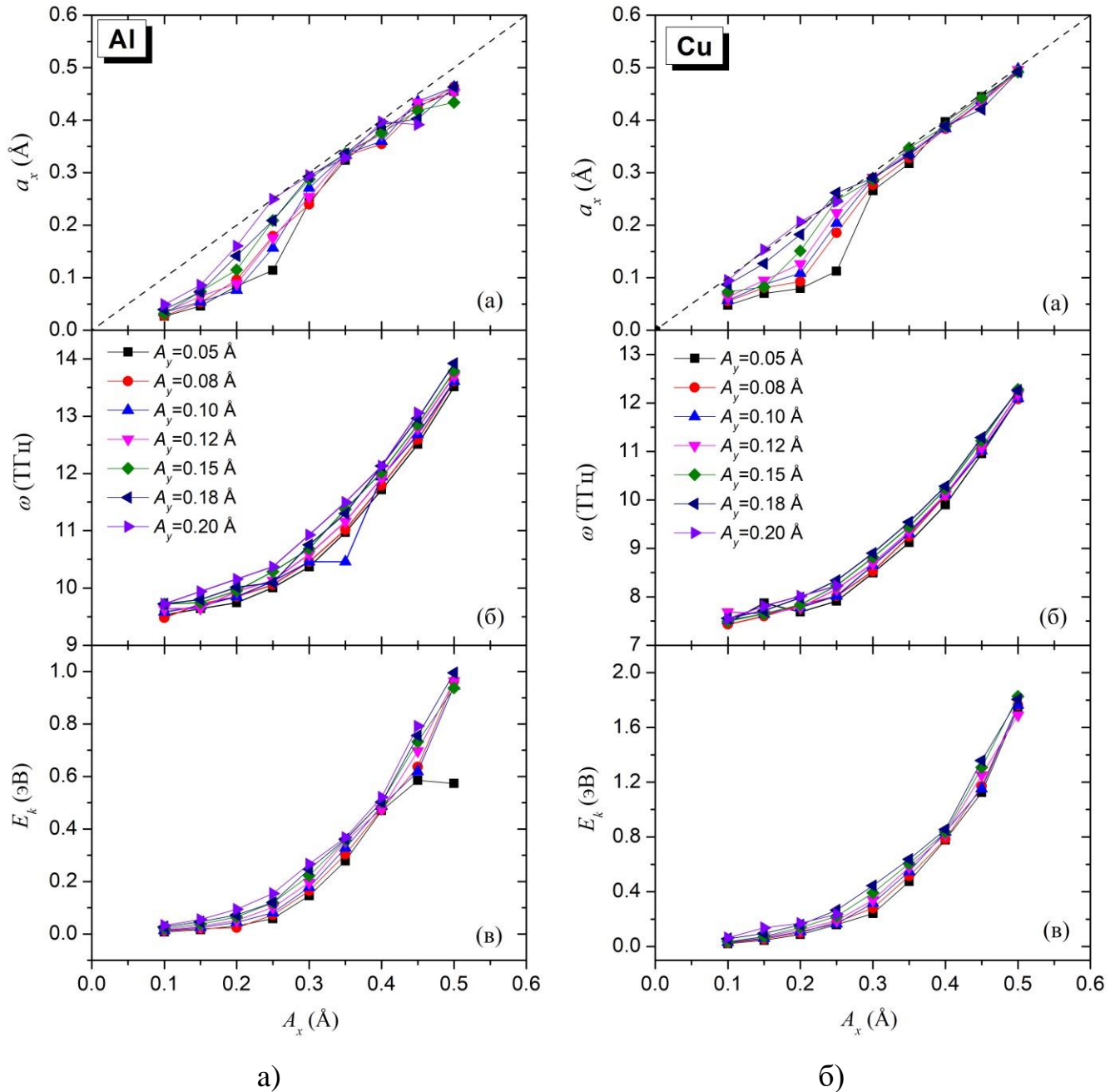


Рисунок 4.9 – Зависимость установившейся амплитуды, частоты колебаний и кинетической энергии колебаний на атом двумерного ДБ, возбужденного на основе двухкомпонентной ДНКМ, от начального смещения атомов A_x для ГЦК-металлов: а) Al и б) Cu для различных значений A_y . Пунктирная линия показывает зависимость $a_x = A_x$.

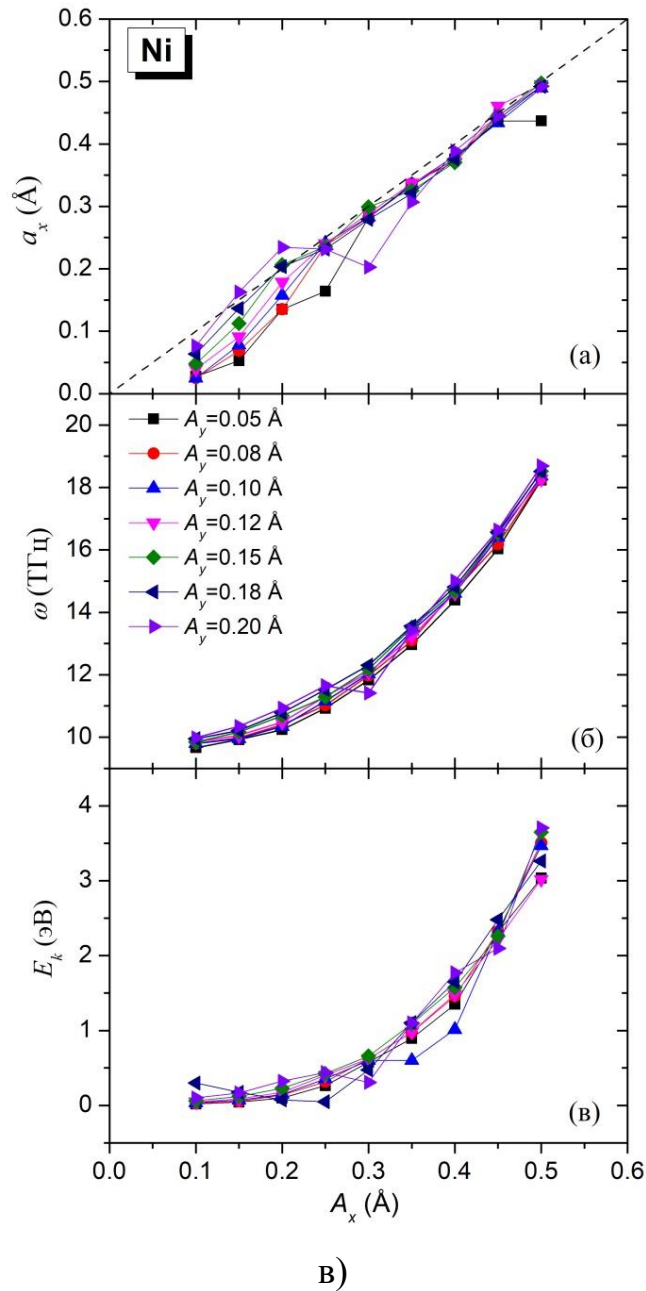


Рисунок 4.9 (продолжение). Зависимость установившейся амплитуды, частоты колебаний и кинетической энергии колебаний на атом двумерного ДБ, возбужденного на основе двухкомпонентной ДНКМ, от начального смещения атомов A_x для в) Ni для различных значений A_y .

На рисунках 4.9 б и 4.9 в показаны зависимости частоты ω и энергии колебаний на атом E для двумерного ДБ на основе двухкомпонентной ДНКМ в установившемся режиме от начальной амплитуды A_x . В общем, поведение кривой $E(A_x)$ аналогично поведению для $\omega(A_x)$. Исследуемый ДБ также демонстрирует

жесткий тип нелинейности. Частоты колебаний атомов при $A_x > 0.2^\circ \text{ \AA}$ выше верхнего края фононного спектра, равного 10.0, 7.9 и 10.3 ТГц для Al, Cu и Ni, соответственно. В случае $A_x < 0.2^\circ \text{ \AA}$, время жизни двумерного ДБ очень мало и составляет около 10-15 колебаний, поскольку его энергия расходуется на возбуждение фононов.

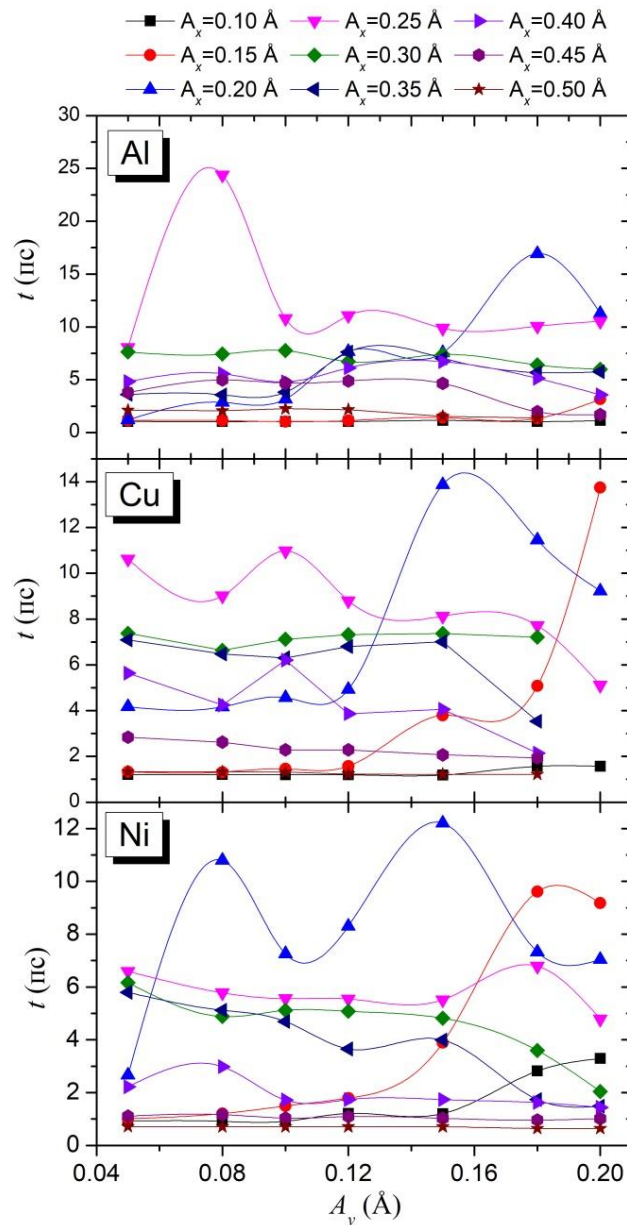


Рисунок 4.10 – Зависимость времени жизни двумерного ДБ, возбужденного на основе двухкомпонентной ДНКМ, от начальной амплитуды A_y для ГЦК металлов, рассчитанной для разных значений A_x .

На рисунке 4.10 представлена зависимость времени жизни двумерного ДБ, возбужденного на основе двухкомпонентной ДНКМ от начальных амплитуд A_x и A_y . В Al время жизни ДБ лежит в интервале от 0 до 7 пс для всех A_x , кроме $A_x=0.20 \text{ \AA}$ при $A_y = 0.15 \div 0.20 \text{ \AA}$ и $A_x=0.25 \text{ \AA}$ при $A_y = 0.05 \div 0.20 \text{ \AA}$. Для Cu при $A_x = 0.10 \text{ \AA}$ и $A_x = 0.45 \div 0.50 \text{ \AA}$ и $A_y = 0.05 \div 0.20 \text{ \AA}$ время жизни ДБ не превышает 7 пс. Для Ni получены аналогичные результаты. В области средних амплитуд $A_x = 0.30 \div 0.40 \text{ \AA}$ резких скачков не происходит, что означает переход двумерного ДБ в стационарный режим колебаний, что хорошо заметно на рисунке 4.9, где зависимость $a_x(A_x)$ именно в этом диапазоне приобретает линейный характер для всех металлов. Таким образом, легко заметить, что лишь при определенных значениях A_x и A_y достигается максимальный период существования двумерного ДБ в Al, Cu и Ni. Таковыми являются: $A_x = 0.25 \text{ \AA}$ и $A_y=0.08 \text{ \AA}$, $A_x = 0.20 \text{ \AA}$ и $A_y=0.18 \text{ \AA}$ для Al; $A_x = 0.25 \text{ \AA}$ и $A_y=0.05 \text{ \AA}$, $A_x = 0.25 \text{ \AA}$ и $A_y=0.10 \text{ \AA}$, $A_x = 0.35 \text{ \AA}$ и $A_y=0.15 \text{ \AA}$, $A_x = 0.15 \text{ \AA}$ и $A_y=0.20 \text{ \AA}$ для Cu; $A_x = 0.20 \text{ \AA}$ и $A_y=0.08 \text{ \AA}$, $A_x = 0.20 \text{ \AA}$ и $A_y=0.15 \text{ \AA}$, $A_x = 0.15 \text{ \AA}$ и $A_y=0.18 \text{ \AA}$, $A_x = 0.15 \text{ \AA}$ и $A_y=0.20 \text{ \AA}$ для Ni.

Зависимость установившихся амплитуд a_x от a_y двумерного ДБ, возбужденного на основе двухкомпонентной ДНКМ показана на рисунке 4.11. Серым цветом выделена область амплитуд a_x и a_y , в которой могут существовать исследуемые двумерные ДБ. Видно, что сначала с увеличением a_x происходит рост a_y : до $a_x = 0.2 \text{ \AA}$ для Al и Cu и до $a_x = 0.2 \text{ \AA}$ для Ni, после чего наблюдается некоторое насыщение для Al, Cu и Ni. Продолжительное время жизни ДБ в этой области связано с минимальным рассеянием колебательной энергии на соседние атомы. Задание амплитуд, лежащих вне указанной области, приводит к рассеянию энергии и быстрому затуханию ДБ (время жизни мало и не превышает 5 пс) или опять же к частичной диссипации энергии и попаданию амплитуд колебаний в указанную область оптимальных параметров a_x и a_y . Таким образом, рисунок 4.11 демонстрирует область оптимальных параметров a_x и a_y необходимых для возбуждения исследуемого двумерного ДБ на основе двухкомпонентной ДНКМ.

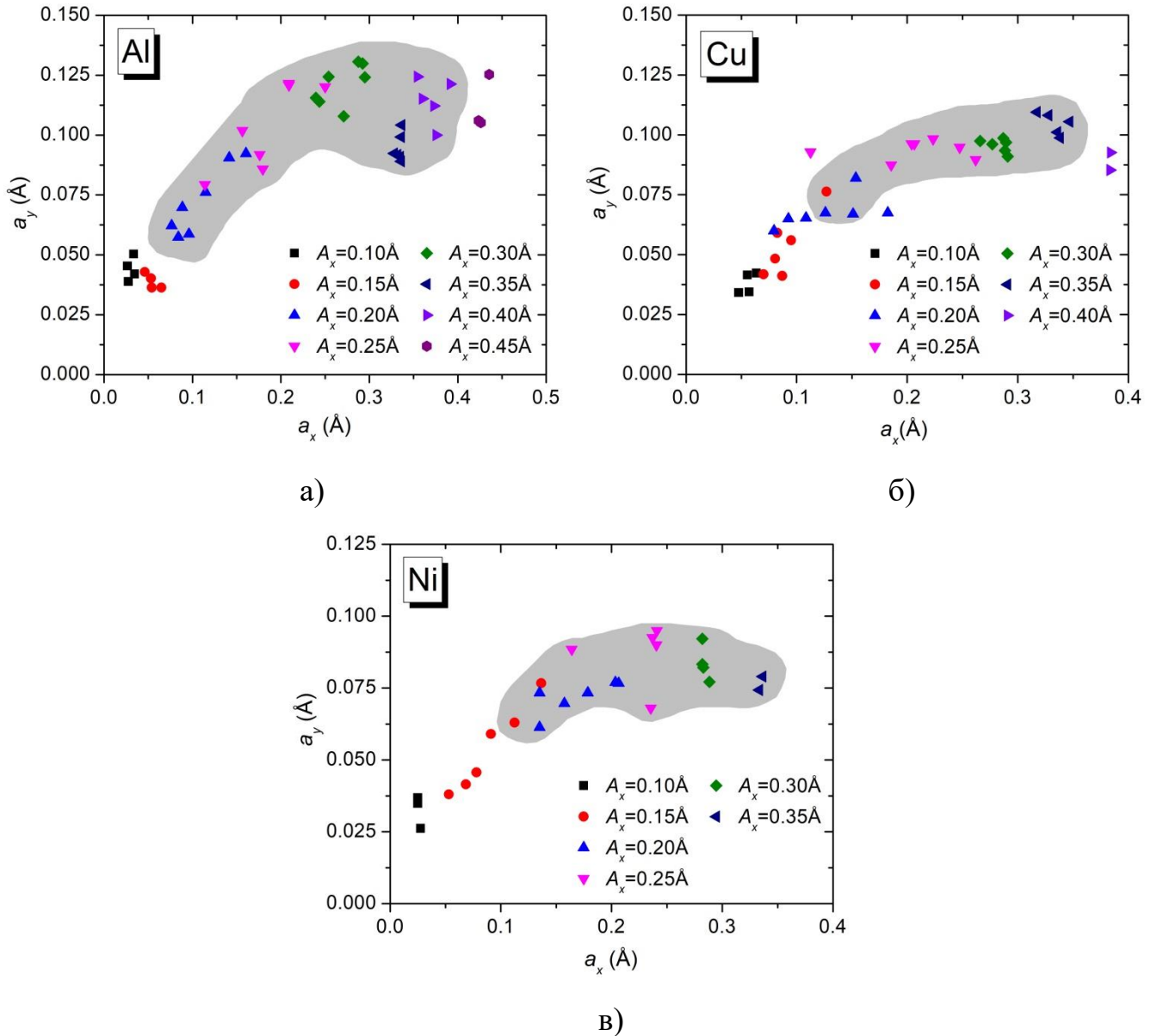


Рисунок 4.11 – Зависимость установившихся амплитуд a_x от a_y для а) Al, б) Cu и в) Ni, рассчитанная для разных значений A_x . Серым цветом показана область стабильности двумерного ДБ, время жизни которого превышает 5 пс.

Отдельно проведенное исследование показало, что уменьшение размера расчетной ячейки оказывает незначительное влияние на время жизни двумерного ДБ, частоту атомных колебаний и энергию.

Сравнение смещений атомов, колеблющихся вдоль осей x и y для Ni, показано на рисунке 4.12. Как видно, затухание ДБ, возбужденного на основе двухкомпонентной ДНКМ, сопровождается одновременным уменьшением

амплитуд колебаний в обоих направлениях примерно в момент времени 8 пс и рассеянием колебательной энергии на соседние атомы. Отметим, что колебательные движения атомов вдоль направления z очень малы (не показаны на рисунке 4.12), что еще раз подтверждает тот факт, что исследуемая двухкомпонентная ДНКМ может рассматриваться как двумерный ДБ, где атомные колебания локализованы в одном направлении (ось z) и делокализованы вдоль двух других (оси x и y).

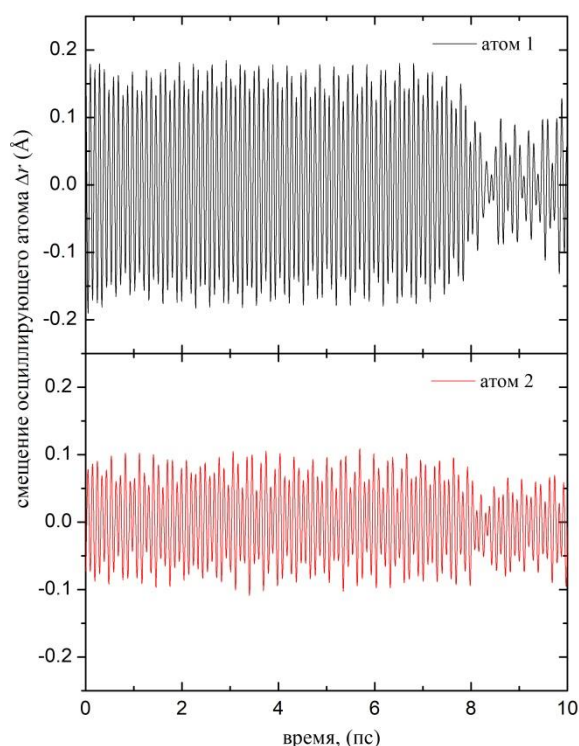


Рисунок 4.12 – Смещения атомов, колеблющихся вдоль осей x (атом 1) и y (атом 2), от узлов идеальной кристаллической решетки, в зависимости от времени, рассчитанные при $A_x = 0.20\text{Å}$ и $A_y = 0.08\text{Å}$ для Ni.

4.3. Выводы по главе 4

Впервые показана возможность существования двумерных ДБ, локализованных вдоль одного и делокализованного вдоль двух других направлений, в трехмерных монокристаллах ГПУ (Ti) и ГЦК металлов (Al, Cu и Ni). Возбуждение ДБ проводилось на основе восьми однокомпонентных ДНКМ и

одной двухкомпонентной ДНКМ. Для выяснения влияния межатомного потенциала взаимодействия на свойства двумерного ДБ, моделирование для Ti осуществлялось при помощи двух потенциалов межатомного взаимодействия.

В трехмерной кристаллической решетке Ti возможно возбуждение 6 или 7 типов двумерных ДБ в зависимости от межатомного потенциала взаимодействия (однокомпонентные ДНКМ 2-7), в то время как для ГЦК-металлов Al, Cu, Ni только 4 (однокомпонентные ДНКМ 2, 3, 5, 7). Все изученные в данной главе ДБ имеют жесткий тип нелинейности. Для ДНКМ 3 и 7 наблюдается превышение установившейся амплитуды над начальной, ввиду их несимметричности. Максимальное время жизни для Ti достигает 17-26 пс, а для ГЦК-металлов 23-47 пс. Максимальные значения накопленной колебательной энергии составляют порядка 0.7 эВ и 1.8-3.5 эВ на атом для Ti и ГЦК-металлов соответственно.

Выяснено главное условие существования устойчивых двумерных ДБ, возбужденных на основе двухкомпонентной ДНКМ в ГЦК металлах (Al, Cu и Ni), а именно начальная амплитуда атомных смещений вдоль оси y должна быть меньше соответствующих смещений вдоль оси x . Исследованный двумерный ДБ также имеет жесткий тип нелинейности. Максимальное время жизни составляет 24 пс для Al, 14 пс для Cu и 12 пс для Ni. Максимальные значения колебательной энергии находятся в интервале 1.0-4.0 эВ на атом. При затухании ДБ выстраивается в цепочки вдоль плотно упакованных атомных рядов (ось x), при этом имеет место полное исчезновение колебаний вдоль оси y и рассеивание энергии на соседние атомы. Далее, в каждой из цепочек происходит концентрация колебательной энергии на 6-8 атомах, что соответствует образованию нульмерных ДБ. Таким образом, распад двумерного ДБ происходит путем постепенного уменьшения его пространственной размерности.

ГЛАВА 5. НУЛЬМЕРНЫЕ ДИСКООБРАЗНЫЕ ДИСКРЕТНЫЕ БРИЗЕРЫ

В данной главе исследуется одномерная ДНКМ в трехмерной ГЦК решетке Al, Cu и Ni и показывается, что на ее основе возможно возбуждение устойчивого нульмерного дискообразного ДБ в Cu и Ni. Представленные в данной главе результаты были опубликованы в работах [131, 132, 141].

5.1. Описание модели и методика компьютерного моделирования

Выбор этой ДНКМ обусловлен, прежде всего, тем, что плоские и дискообразные ДБ, возбуждаемые с использованием этой схемы смещений, имеют продолжительное время жизни по сравнению с ДБ, основанными на других ДНКМ (см. рисунок 4.1). Кроме того, исследование дискообразных ДБ подразумевает использование большой расчетной ячейки, в связи с чем ее размеры были увеличены вдоль осей x и y , в отличие от того, что было использовано в главе 4. В данной главе проводится анализ характеристик двумерного ДБ, возбужденного на основе ДНКМ 5, и сравнивается с результатами, полученными для расчетной ячейки меньшего размера в разделе 4.1.3. настоящей диссертационной работы.

Исходная структура для моделирования содержит $22 \times 24 \times 11$ элементарных ячеек по 16 атомов в каждой (92928 атомов в расчетной ячейке). Вдоль всех трех взаимно перпендикулярных направлений были использованы периодические граничные условия. Все исследования проводились при нулевой абсолютной температуре $T = 0$ К с применением термодинамического ансамбля NVE. Шаг по времени при численном интегрировании уравнений движения частиц был равен 1 фс, а продолжительность моделирования составляла 2×10^4 шагов по времени.

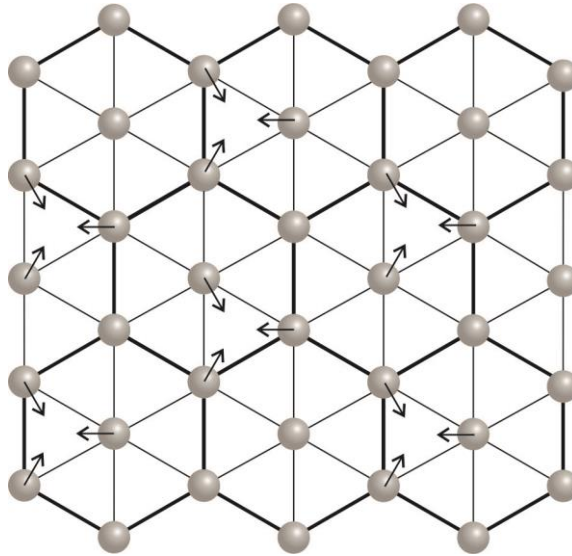


Рисунок 5.1 – Смещения атомов вдоль плоскости (111) для исследуемой однокомпонентной ДНКМ 5 в ГЦК решетке (показаны стрелками).

Порядок смещения атомов, соответствующий однокомпонентной ДНКМ 5, показан стрелками на рисунке 5.1 в увеличенном виде. Каждый четвертый атом в плоскости (111) остается неподвижным, в то время как остальные атомы в начальный момент времени получают одну и ту же по модулю амплитуду смещений от положения равновесия. Начальные скорости всех атомов в расчетной ячейке равны нулю.

5.2. Плоский двумерный дискретный бризер

Отметим, что схема смещения, показанная на рисунке 5.1, дает точное решение, зависящее от симметрии в двумерной треугольной решетке. Однако, в ГЦК-кристаллах атомы возбужденной (111) атомной плоскости взаимодействуют со смежными атомными плоскостями, и часть энергии первоначально передаваемой возбужденной плоскости рассеивается на весь кристалл, вызывая тепловые флуктуации. Если начальное смещение A берется из определенного интервала, то после короткого переходного периода в возбужденной атомной

плоскости наблюдаются долгоживущие колебания, а амплитуда колебаний атомов в соседних плоскостях экспоненциально уменьшается с расстоянием от возбужденной плоскости. Таким образом, колебания атомов ДБ экспоненциально локализованы в одной (111) плоскости, в той, где они первоначально были возбуждены. Исходя из этого, начальная амплитуда смещения A всегда больше амплитуды установившихся колебаний a для атомов в возбужденной плоскости, как показано на рисунке 5.2 а. В исследованном диапазоне начальных амплитуд для Cu и Ni наблюдается близкая к линейной зависимость, позволяющая предположить, что рассеяние энергии на соседних атомах для этих металлов незначительна. Зависимость $a(A)$ для Cu очень похожа на зависимость для Ni (точки почти перекрываются и близки к линии $a = A$). Однако кривая для Al совершенно иная, и она заметно ниже линии $a = A$, что означает, что рассеяние энергии в виде тепловых флуктуаций в Al гораздо более выражена, чем в Cu и Ni. Этот факт напрямую связан с жесткостью межатомных связей.

Зависимость времени жизни двумерных ДБ от начальной амплитуды смещений показана на рисунке 5.2 б. Для всех металлов в диапазоне амплитуд 0.05-0.15 Å времена жизни довольно малы и не превышают 2 пс. Дальнейшее увеличение A приводит к резкому росту времени жизни, максимальные значения которого составляют 17, 22 и 17.1 пс для Al, Cu и Ni, соответственно. Заметное уменьшение времен жизни происходит в диапазоне начальных амплитуд 0.35 - 0.5 Å. Для сравнения, для расчетной ячейки меньшего размера (см. раздел 4.1.3) времена жизни составили 17.7, 25 и 17.3 пс, соответственно. Как видно, размер расчётной ячейки незначительно влияет на времена жизни двумерного ДБ, возбужденного на основе ДНКМ 5.

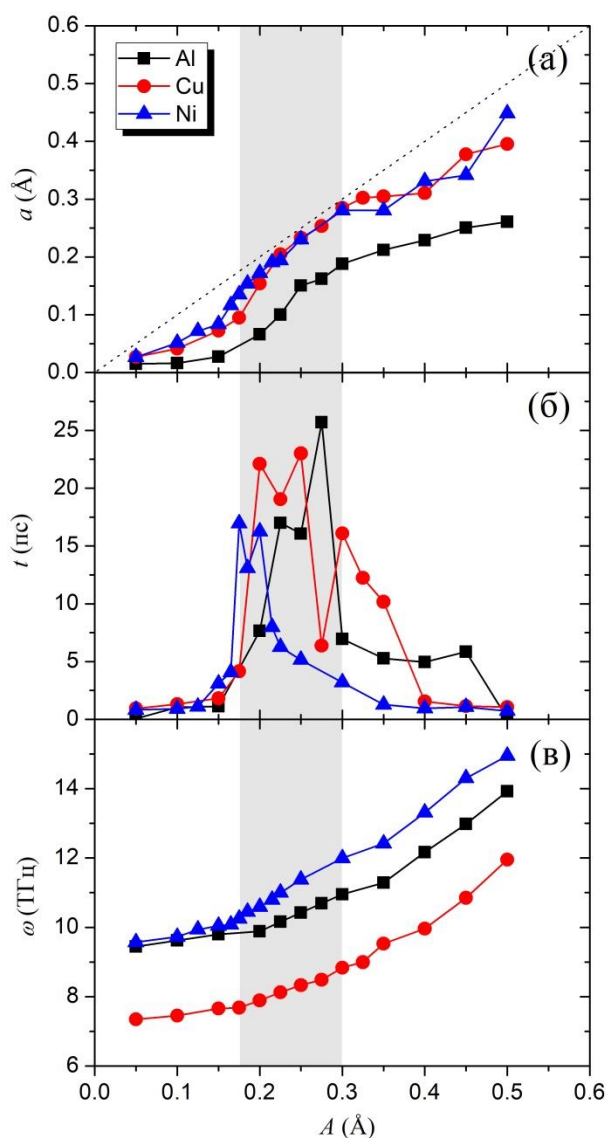


Рисунок 5.2 – а) установившаяся амплитуда б) время жизни в) частота плоского дискретного бризера как функции начальной амплитуды смещения, рассчитанные для Al, Cu и Ni. Пунктирная линия на (а) показывает зависимость $a = A$. Серым цветом заштрихована область начальных амплитуд, в которой исследуемый двумерный ДБ, возбужденный на основе однокомпонентной ДНКМ 5, имеет наибольшие времена жизни.

На рисунке 5.2 (в) показана зависимость частоты плоских ДБ от начальной амплитуды смещения. Как видно, начиная со значения $A = 0.175 \text{\AA}$, частота увеличивается с амплитудой, что соответствует жесткому типу нелинейности.

Отметим, что последнее типично для чистых металлов с разными кристаллическими решетками [12, 20-22, 24-27], в то время как мягкий тип нелинейности, то есть уменьшение частоты колебаний с ростом амплитуды, наблюдается, в частности, в упорядоченных сплавах, которые обладают щелью в фононном спектре [8-11, 142-144]. В исследованном интервале амплитуд от 0.05 до 0.5 Å, частота колебаний долгоживущих плоских ДБ находится в интервале 10.2÷10.7 ТГц для Al, 7.9÷8.3 ТГц для Cu и 10.3÷10.6 ТГц для Ni. Эти частоты немного выше, чем верхние края фононного спектра металлов, которые соответственно равны 10.0, 7.9 и 10.3 ТГц. Заметим, что ДБ должен иметь частоту колебаний, лежащую вне фононного спектра, иначе он будет терять энергию из-за возбуждения бегущих волн малой амплитуды (фононов). Существенных отличий в частоте колебаний для всех трех исследованных металлов по сравнению с ДНКМ 5, возбужденной в меньшей расчетной ячейке в разделе 4.1.3 не наблюдается.

Зависимость x -компоненты смещения одного колеблющегося атома в Ni от времени при разных начальных амплитудах показана на рисунке 5.3. Для этого графика выбран атом, который изначально был смещен вдоль оси x . При $A = 0.15$ Å, время жизни, то есть время, в течение которого атомы колеблются с большими амплитудами очень мало, и колебательная энергия очень быстро рассеивается на соседние атомы. При начальной амплитуде 0.175 Å время жизни достигает максимума, а затем постепенно уменьшается в интервале 0.25–0.5 Å с дальнейшим увеличением начальной амплитуды в полном соответствии с рисунком 5.2 б.

Поскольку наличие двумерного ДБ в кристалле связано с избыточной энергией по сравнению с идеальной невозмущенной решеткой, интересно сравнить плотность энергии для такого ДБ с энергией плоского дефекта (дефект упаковки). Так, например, расчеты для $A = 0.20$ Å показывают, что плотности энергии на единицу площади двумерного ДБ в начальный момент времени составляют 0.35, 0.65 и 1,13 Дж / м² для Al, Cu и Ni соответственно. Последние

очень близки к значениям дефекта упаковки в Cu и Ni и примерно в 3 раза меньше, чем для Al. Таким образом, сравнимые значения избыточной энергии наводят на мысль о том, что двумерные ДБ могут играть ту же роль, что и плоские дефекты, при рассмотрении, в частности, взаимодействия с дислокациями решетки. Однако, это требует отдельного исследования и выходит за рамки настоящей работы.

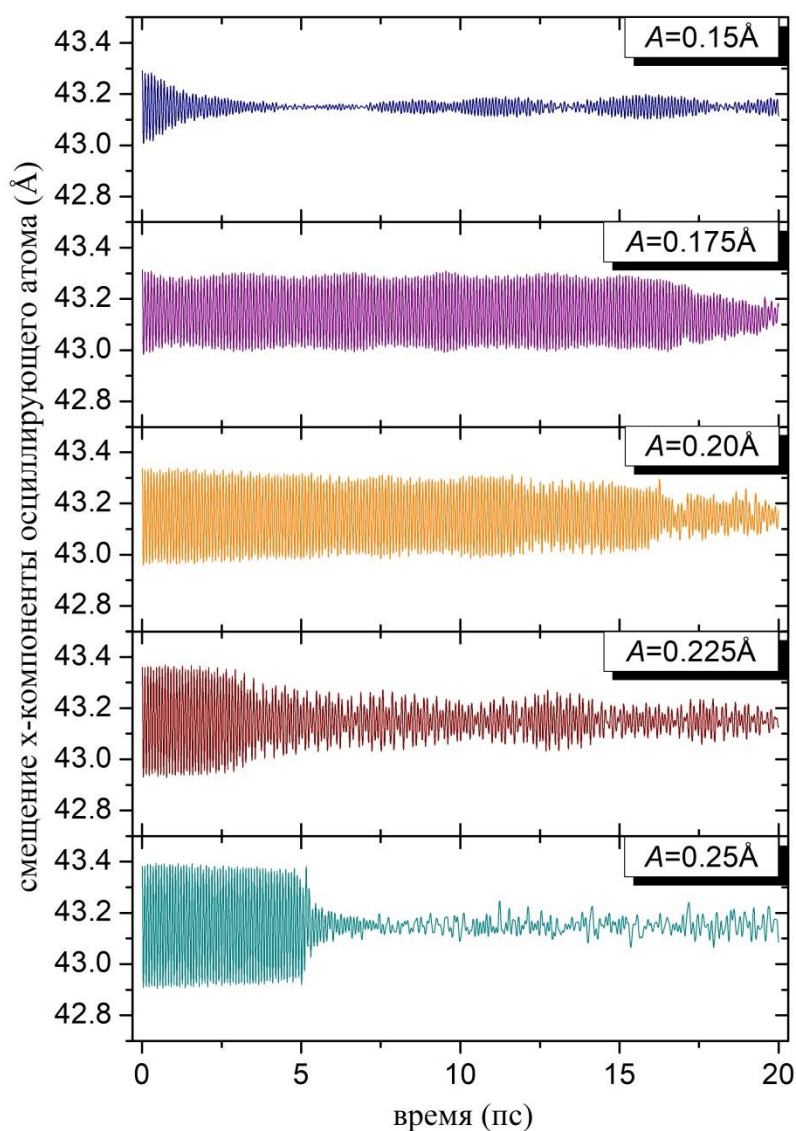


Рисунок 5.3 – Временная зависимость x -компоненты для выбранного атома в Ni для различных значений начальной амплитуды смещения A .

Следует отметить, что в работе [16], где рассматривался высокосимметричный ДБ в двумерном кристалле Морзе, интервал рассмотренных амплитуд ДБ был меньше, чем в данном разделе. По-видимому, это связано с различием в размерности кристаллических решеток и межатомных потенциалов, используемых при моделировании.

Таким образом, проведенные исследования позволяют сделать вывод о том, что исследуемая мода может существовать только в довольно узком интервале установившихся амплитуд от 0.1 до 0.3 Å для Cu и Ni, от 0.05 до 0.18 Å для Al. На основании вышесказанного, можно сделать предположение о существовании двумерного ДБ в металлах с ГЦК решеткой (Al, Cu и Ni) в указанном интервале амплитуд.

5.3. Дiskoобразный нульмерный дискретный бризер

Поскольку, как показано в разделе 5.2, ГЦК-решетки Al, Cu и Ni поддерживают существование двумерных ДБ, возникает вопрос о возможности возбуждения дискообразного ДБ в этих металлах. Для этой цели атомы в плоскости (111) возбуждаются в соответствии со схемой, показанной на рисунке 5.1, но при этом, для ограничения колебания в определенной области дополнительно применяется экспоненциально локализованная радиальная функция. Эта процедура позволяет искусственно локализовать атомные смещения во всех направлениях и, как следствие, получить из двумерного ДБ нульмерный дискообразный ДБ. Таким образом, можно сказать, что исходная структура дискообразного ДБ получается путем вырезания определенной области из двумерного ДБ (показана на рисунке 5.1). Величина смещения атомов от их равновесных положений в решетке определяется следующим выражением

$$r = r_0 + dr \cdot \exp\left(-\frac{r_0}{R}\right), \quad (5.1)$$

где r_0 – расстояние от центра ДБ, dr – максимальное отклонение атома от его положения равновесия, а R – параметр локализации, который определяет степень смещения атома в зависимости от расстояния от центра ДБ. Центр функции (1) может быть расположен как на одном из неподвижных атомов, так и в некоторой точке, которая равноудалена от трех соседних колеблющихся атомов. Как было ранее показано в работе [16], свойства полученного ДБ довольно слабо зависят от центра расположения функции (5.1). Исходя из этого, дискообразный ДБ был построен с центром в неподвижном атоме.

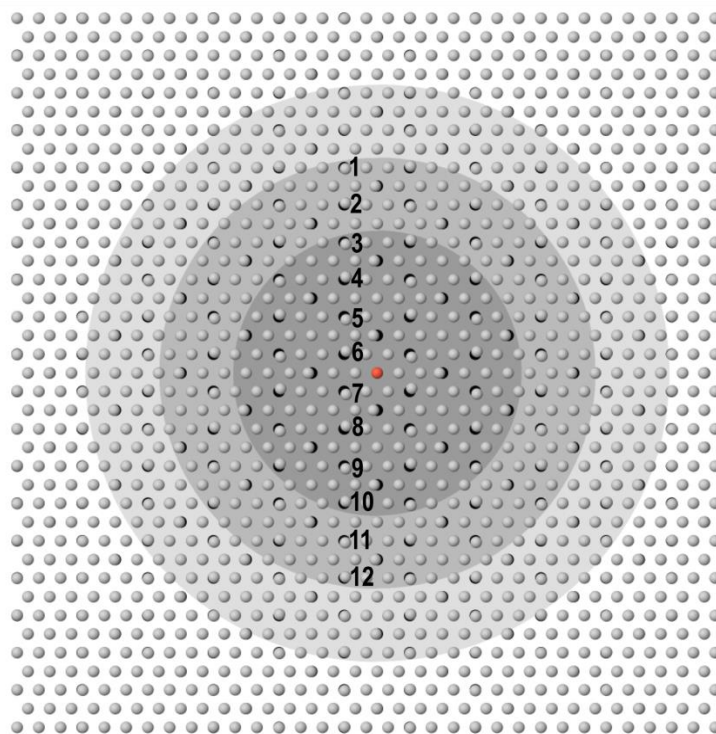


Рисунок 5.4 – Иллюстрация начальных атомных смещений, используемых для возбуждения дискообразного ДБ, расположенного в плоскости (111) ГЦК решетки. Показана только часть расчетной ячейки, содержащей ДБ. Смещенные атомы ДБ показаны черным. Атом в центре ДБ окрашен в красный цвет. Другие атомы в ячейке отображаются серым цветом. Показаны реальные (не увеличенные для наглядности) смещения атомов. Концентрические круги, окрашенные в разные оттенки серого, схематично демонстрируют дискообразные ДБ, характеризующиеся различными значениями параметра локализации R .

На рисунке 5.4 показаны дискообразные ДБ и соответствующие атомные смещения в плоскости (111). Последние рассчитываются как

$$A = \sqrt{A_x^2 + A_y^2 + A_z^2} \quad (5.1)$$

где A_x , A_y и A_z - амплитуды смещения вдоль осей x , y и z соответственно. Из выражения (5.1) следует, что отклонения атомов от узлов кристаллической решетки максимальны в центре ДБ и экспоненциально убывают с удалением от него. Как видно, этот тип дискообразных ДБ имеет ось симметрии третьего порядка. Диаметр ДБ, который характеризуется параметром локализации R , выбирается таким, чтобы он включал 200-400 атомов. То есть ДБ такого типа относительно слабо локализован в отличие от других нульмерных ДБ в металлах, где «колебательный центр» бризера состоит из 5-10 атомов [21, 22, 24, 26].

Как было установлено из многочисленных расчетов, оптимальным набором параметров, при которых может возбуждаться дискообразный ДБ, являются $A = 0.25 \text{ \AA}$, $R = 250$ для Cu и $A = 0.20 \text{ \AA}$, $R = 300$ для Ni. Следует отметить, что при параметрах немного отличных от указанных выше, дискообразные ДБ также существуют в обоих металлах, но с более короткими временами жизни. Более значительное изменение параметра локализации R , то есть числа возбужденных атомов, приводит к более быстрому рассеянию колебательной энергии на соседних атомах и, как следствие, сокращению их времени жизни. Другими словами, наиболее долгоживущие ДБ этого типа имеют некоторую определенную степень локализации, отклонение от которой существенно влияет на характеристики ДБ. Поэтому ниже приведены результаты для наиболее долгоживущих дискообразных ДБ в Cu и Ni, полученные с указанным выше набором параметров.

Выбранный для исследования дискообразный ДБ представляет собой довольно сложную колебательную моду, включающую большое количество колеблющихся атомов. Чтобы проследить, как ДБ эволюционирует с течением времени, вдоль одной из осей симметрии были выбраны 12 наиболее близко

расположенных атомов, участвующих в колебательном движении (см. рисунок 5.4). В момент времени 1 пс амплитуды смещения выбранных атомов имеют четко определенную экспоненциальную форму для обоих металлов, что хорошо видно на рисунке 5.5. Это связано с тем, что до этого момента времени существенно рассеяния энергии колебательного движения атомов не происходит. Далее амплитуды колебаний начинают постепенно уменьшаться, причем для Ni такое уменьшение более выражено, чем для Cu. В частности, в момент времени 5 пс в Ni происходит перераспределение колебательной энергии и ее концентрация на атоме 6, в результате чего он испытывает самые большие смещения, а амплитуды колебаний других атомов становятся значительно меньше. Такая сильная локализация энергии не наблюдается в Cu и в момент времени 5 пс атомы с номерами от 5 до 10 колеблются с амплитудами превышающими 0.1 \AA . Стоит отметить, что абсолютные значения смещений для Cu выше, чем для Ni, что указывает на наличие менее жестких связей между атомами в Cu в отличие от Ni.

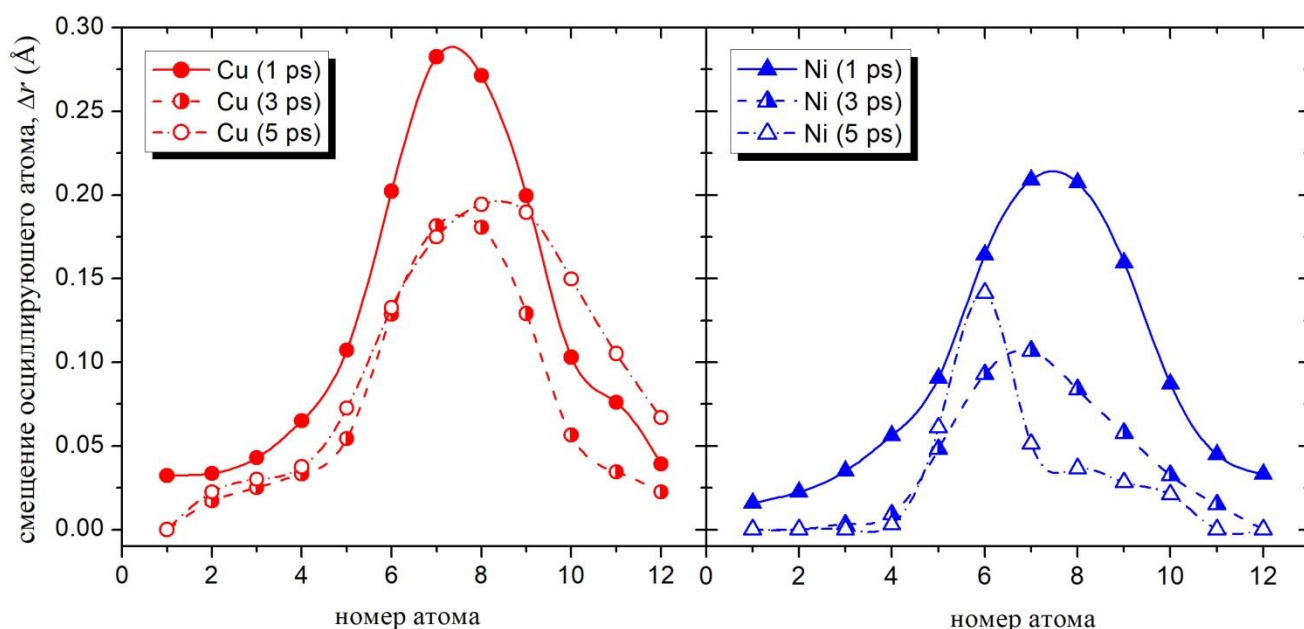
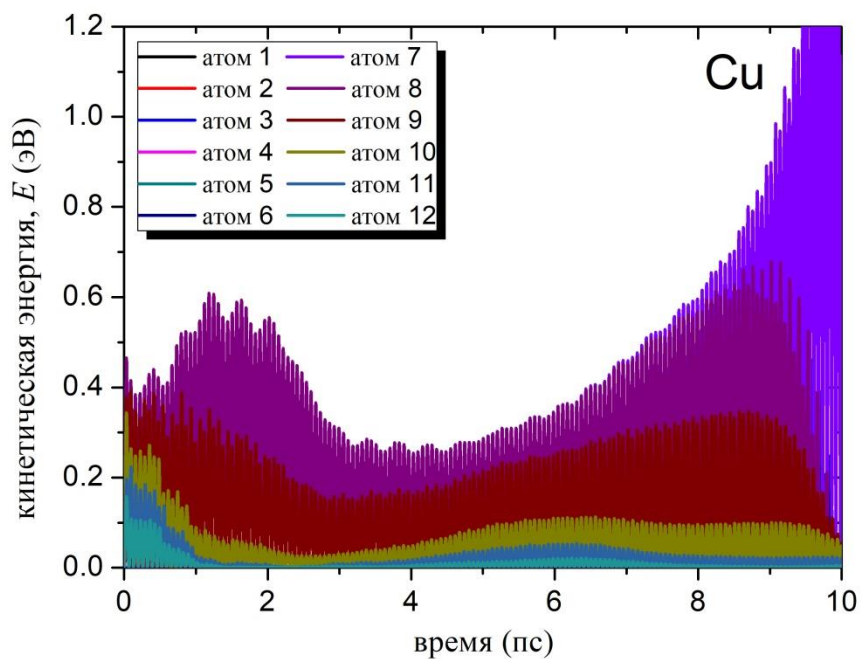


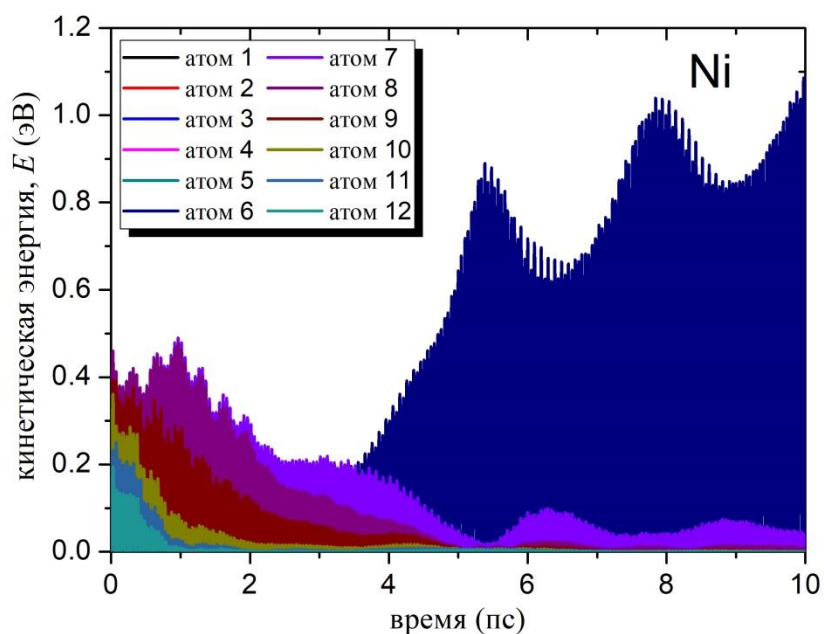
Рисунок 5.5 – Амплитуда смещения в зависимости от положения атома в дискообразном ДБ, рассчитанная для разных моментов времени для Cu и Ni. Данные для Al отсутствуют, поскольку не найден набор параметров, при которых может возбуждаться долгоживущий дискообразный ДБ.

На рисунке 5.6 показана зависимость кинетической энергии колебаний для каждого из выбранных 12 атомов в дискообразном ДБ от времени. Как видно, атомы, наиболее удаленные от центра ДБ, довольно быстро (за 1 пс) рассеивают свою энергию на соседних атомах плоскости, а другая часть атомов колеблется в течение 10 пс в Cu и 4-5 пс в Ni. Колебания атомов 8 и 9 (которые ближе к центру ДБ) в Cu продолжаются до 9 пс, а затем их колебательная энергия начинает уменьшаться и переносится на атом 7. Через 4 пс колебания всех атомов Ni практически полностью исчезают, а единственный атом 6 значительно увеличивает свою кинетическую энергию, что отчетливо видно на рисунке 5.6. Таким образом, можно сделать вывод о том, что приблизительные времена жизни дискообразного ДБ в Cu и Ni составляют 9 и 4 пс соответственно. В то же время кинетическая энергия внешних атомов 1-3 и 10-12 быстро рассеивается и концентрируется на атомах, расположенных ближе к центру ДБ.

Долгоживущий дискообразный ДБ, локализованный на нескольких сотнях атомов, в Al не обнаружен. Этот факт можно объяснить недостаточно жесткими связями между атомами в решетке. Кроме того, пока не ясно, может ли быть возбужден дискообразный ДБ на основе других ДНКМ изображенных на рисунке 4.1. Таким образом, из полученного выше результата можно сделать предварительный вывод. А именно, наличие плоской ДНКМ в кристаллической решетке ГЦК металла не гарантирует возможности возбуждения дискообразного ДБ в этом материале. Несомненно, это утверждение нуждается в более точной проверке с использованием более точных методов моделирования, например, основанных на теории функционала плотности.



а)



б)

Рисунок 5.6 – Эволюция кинетической энергии во времени, рассчитанная отдельно для каждого из выбранных 12 атомов дискообразного ДБ для Cu и Ni.

Ввиду наличия симметрии в расположении атомов относительно центра ДБ, временная зависимость кинетической энергии симметричных атомов практически идентичная. Это вызывает наложение кривых, в результате чего некоторые из них на рисунке не отображаются.

5.4. Выводы по главе 5

Впервые показано, что в трехмерных моделях ГЦК металлов (Cu, Ni) возможно возбуждение устойчивых нульмерных ДБ нового типа, путем наложения локализирующих функций с радиальной симметрией на двумерные ДБ. Такие ДБ были названы дискообразными. Определена степень пространственной локализации, при которых существуют устойчивые дискообразные ДБ. Их времена жизни оказались меньше времен жизни соответствующих двумерных ДБ, рассмотренных в главе 4. Перераспределение колебательной энергии между атомами ДБ приводит к нарушению симметрии и его постепенному затуханию. Начальные условия для возбуждения долгоживущего дискообразного ДБ в Al найти не удалось.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Методом молекулярной динамики показана возможность существования дискретных бризеров различной пространственной размерности в ряде ГЦК и ГПУ металлов. В результате предложена новая спецификация бризеров по их пространственной размерности.
2. Установлено, что в модели ГПУ кристалла бериллия возможно существование неподвижных и движущихся нульмерных стержневых дискретных бризеров, которые ранее изучались только в ГЦК и ОЦК металлах.
3. Во всех исследованных моделях ГЦК металлов (алюминий, медь, никель) были успешно возбуждены долгоживущие одномерные дискретные бризеры, локализованные в одном плотноупакованном атомном ряду. Для запуска одномерных дискретных бризеров использовались начальные смещения атомов, соответствующие известной делокализованной нелинейной колебательной моде одномерной решетки. Рассчитаны параметры данных бризеров, такие как диапазон возможных частот колебаний и энергий на атом. Одномерные дискретные бризеры обладают высокой степенью пространственной локализации и жестким типом нелинейности.
4. С использованием делокализованных нелинейных колебательных мод двумерной треугольной решетки, в ряде моделей ГЦК металлов в плотноупакованной плоскости были успешно возбуждены различные двумерные дискретные бризеры. Две из восьми существующих делокализованных нелинейных колебательных мод приводят к долгоживущим бризерам, две другие к бризерам с меньшим временем жизни и остальные четыре не порождают дискретных бризеров. Наибольшее время жизни имеют дискретные бризеры основанные на симметричных делокализованных колебательных модах у которых максимальные положительные и отрицательные отклонения от положений равновесия равны по абсолютной величине. В ГПУ модели титана возможно возбуждение трех или четырех

типов долгоживущих двумерных ДБ в зависимости от межатомного потенциала взаимодействия, остальные имеют меньшее время жизни, и только одна колебательная мода не порождает дискретного бризера. Для всех двумерных бризеров рассчитаны диапазоны возможных частот колебаний и энергий.

- Путем наложения радиально-симметричной локализирующей функции на один из долгоживущих двумерных дискретных бризеров в моделях ГЦК металлов (алюминий, медь, никель) удалось возбудить нульмерный дискообразный дискретный бризер. Для таких бризеров найдена степень пространственной локализации, при которой время его жизни максимально. Рассчитаны их энергии и частоты в зависимости от амплитуды колебаний атомов в центре дискретного бризера.

В таблице 7 представлены типы ДБ в ГЦК и ГПУ металлах, существование которых было доказано в настоящей диссертационной работе при помощи молекулярно-динамического моделирования.

Таблица 7. Результаты моделирования ДБ различных типов в ГЦК И ГПУ металлах.

Тип ДБ/Металл	Al	Cu	Ni	Ti	Be
Нульмерный (стержневой)					✓
Одномерный	✓	✓	✓		
Двумерный (плоский)	✓	✓	✓	✓	
Нульмерный (дискообразный)	✓	✓	✓		

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Дмитриев, С. В. Дискретные бризеры в кристаллах / С. В. Дмитриев, Е. А. Корзникова, Ю. А. Баимова, М. Г. Веларде // Успехи физических наук. – 2016. – Т. 186, № 5. – С. 471–488.
2. Flach, S. Discrete breathers — advances in theory and applications / S. Flach, A. Gorbach // Physics Reports. – 2008. – V. 467, № 1–3. – P. 1–116.
3. Корзникова, Е. А. Молекулярно-динамическое изучение дискретных бризеров с жестким типом нелинейности в моноатомной двумерной решетке с морзевским взаимодействием / Е. А. Корзникова, Д. И. Бокий, С. Ю. Фомин, С. В. Дмитриев // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2015. – Т. 12, № 3. – С. 311–315.
4. Семенов, А. С. Дискретные бризеры с жестким и мягким типом нелинейности в одномерной цепочке с дальнедействующим морзевским взаимодействием / А. С. Семенов, Е. А. Корзникова, С. В. Дмитриев // Письма о материалах. – 2015. – Т. 5, № 1.
5. Kiselev, S. A. Anharmonic gap modes in a perfect one-dimensional diatomic lattice for standard two-body nearest-neighbor potentials / S. A. Kiselev, S. R. Bickham, A. J. Sievers // Physical Review B. – 1993. – V. 48, № 18. – P. 13508.
6. Kiselev, S. A. Generation of intrinsic vibrational gap modes in three-dimensional ionic crystals / S. A. Kiselev, A. J. Sievers // Physical Review B. – 1997. – V. 55, № 9. – P. 5755.
7. Manley, M. E. Intrinsic localized modes observed in the high-temperature vibrational spectrum of NaI / M. E. Manley, A. J. Sievers, J. W. Lynn, S. A. Kiselev, N. I. Agladze, Y. Chen, A. Llobet, A. Alatas // Physical Review B. – 2009. – V. 79, № 13. – P. 134304.
8. Zakharov, P. V. Simulation of the interaction between discrete breathers of various types in a Pt₃Al crystal nanofiber / P. V. Zakharov, M. D. Starostenkov, S. V. Dmitriev,

- N. N. Medvedev, A. M. Eremin // *Journal of Experimental and Theoretical Physics*. – 2015. – V. 121, № 2. – P. 217–221.
9. Starostenkov, M. D. Dynamics of Discrete Breathers in a Pt₃Al Crystal / M. D. Starostenkov, A. I. Potekaev, S. V. Dmitriev, P. V. Zakharov, A. M. Eremin, V. V. Kulagina // *Russian physics journal*. – 2016. – V. 58, № 9. – P. 1353–1357.
10. Medvedev, N. N. Exciting discrete breathers of two types in a computer 3D model of Pt₃Al crystal / N. N. Medvedev, M. D. Starostenkov, P. V. Zakharov, S. V. Dmitriev // *Technical Physics Letters*. – 2015. – V. 41, № 10. – P. 994–997.
11. Zakharov, P. V. Surface discrete breathers in Pt₃Al intermetallic alloy / P. V. Zakharov, S. V. Dmitriev, E. G. Ekomasov, K. Zhou // *Surface Science*. – 2019. – V. 679. – P. 1–5.
12. Haas, M. Prediction of high-frequency intrinsic localized modes in Ni and Nb / M. Haas, V. Hizhnyakov, A. Shelkan, M. Klopov, A. J. Sievers // *Physical Review B*. – 2011. – V. 84, № 14. – P. 144303.
13. 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. – V. 119, № 4. – P. 766–771.
14. Kistanov, A. A. Head-on and head-off collisions of discrete breathers in two-dimensional anharmonic crystal lattices / A. A. Kistanov, S. V. Dmitriev, A. P. Chetverikov, M. G. Velarde // *The European Physical Journal B*. – 2014. – V. 87, № 9. – P. 211.
15. Barani, E. Transverse discrete breathers in unstrained graphene / E. Barani, I. P. Lobzenko, E. A. Korznikova, E. G. Soboleva, S. V. Dmitriev, K. Zhou, A. M. Marjaneh // *The European Physical Journal B*. – 2017. – V. 90, № 3. – P. 38.
16. Korznikova, E. A. 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. – V. 103. – P. 277–81.

17. G. M. Chechin, D. S. Ryabov, S. A. Shcherbinin. Nonlinear vibrational modes in graphene: group-theoretical results / G. M. Chechin, D. S. Ryabov, S. A. Shcherbinin // *Letters on Materials* – 2016. – V. 6, № 1. – P. 9.
18. Chechin, G. M. Interactions between normal modes in nonlinear dynamical systems with discrete symmetry. Exact results / G. M. Chechin, V. P. Sakhnenko // *Physica D: Nonlinear Phenomena*. – 1998. – V. 117, № 1–4. – P. 43–76.
19. Baimova, J. A. Large systems of discrete breathers in graphene / J. A. Baimova // *Letters on Materials*. – 2016. – V. 6, № 1. – P. 31–33.
20. Lobzenko, I. P. Numerical modeling of 3D discrete breathers in fcc Ni / I. P. Lobzenko, P. V. Lobzenko, A. M. Bayazitov, A. P. Chetverikov, R. I. Machmutova, A. A. Kistanov // *Letters on materials*. – 2016. – V. 6, № 4. – P. 304–308.
21. Murzaev, R. T. Moving discrete breathers in bcc metals V, Fe and W / R. T. Murzaev, A. A. Kistanov, V. I. Dubinko, D. A. Terentyev, S. V. Dmitriev // *Computational Materials Science*. – 2015. – V. 98. – P. 88–92.
22. Murzaev, R. T. Discrete breathers in alpha-uranium / R. T. Murzaev, R. I. Babicheva, K. Zhou, E. A. Korznikova, S. Y. Fomin, V. I. Dubinko, S. V. Dmitriev // *The European Physical Journal B*. – 2016. – V. 89, № 7. – P. 168.
23. Захаров, П. В. Стационарные квазибризеры в моноатомных металлах с ГЦК-структурой / П. В. Захаров, С. В. Дмитриев, М. Д. Старостенков, А. М. Ерёмин, Е. А. Корзникова // *Журнал экспериментальной и теоретической физики*. – 2017. – Т. 152, № 5. – С. 11.
24. Terentyev, D.A. 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 // *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. – 2015. – V. 23, № 8. – P. 085007.
25. Bachurina, O.V. Study of one-dimensional nonlinear vibrational mode in fcc aluminum / O.V. Bachurina, E.A. Korznikova, R.T. Murzaev, S.V. Dmitriev // *Materials Physics and Mechanics*. – 2017. – V. 33, № 49–56.

26. Бачурина, О. В. Свойства движущихся дискретных бризеров в бериллии / О. В. Бачурина, Р. Т. Мурзаев, А. С. Семенов, Е. А. Корзникова, С. В. Дмитриев // Физика твердого тела. – 2018. – Т. 60, № 5. – С. 978.
27. S. V. Dmitriev. Discrete breathers in metals and ordered alloys / S. V. Dmitriev // Nonlinear Theory and Its Applications, IEICE. – 2017. – V. 8, № 2. – P. 85–97.
28. Manley, M. E. Formation of a new dynamical mode in α -uranium observed by inelastic X-ray and neutron scattering / M. E. Manley, M. Yethiraj, H. Sinn, H. M. Volz, A. Alatas, J. C. Lashley, W. L. Hulst, G. H. Lander, J. L. Smith // Physical Review letters. – 2006. – V. 96, № 12. – P. 125501.
29. Manley, M. E. Intrinsic nature of thermally activated dynamical modes in α -U: Nonequilibrium mode creation by x-ray and neutron scattering / M. E. Manley, A. Alatas, F. Trouw, B. M. Leu, J. W. Lynn, Y. Chen, W. L. Hulst // Physical Review B. – 2008. – V. 77, № 21. – P. 214305.
30. Павлов, П. В. Физика твердого тела. / П. В. Павлов, А. Ф. Хохлов. – Москва: Высшая школа, 2000. – 494 с.
31. Займан, Д. Принципы теории твердого тела / Д. Займан. – Москва: Мир, 1974. – 472 с.
32. Ашкрофт, Н. Физика твердого тела. Том 2 / Н. Ашкрофт, Н. Мермин. – Москва: Мир, 1979. – 486 с.
33. Ашкрофт, Н. Физика твердого тела. Том 1. / Н. Ашкрофт, Н. Мермин – Москва: Мир, 1979.– 399 с.
34. Семёнова, М. Н. Некоторые характеристики одномерных делокализованных нелинейных колебательных мод треугольной решетки с морзевским взаимодействием / М. Н. Семёнова, А. С. Семёнов, Ю. В. Бебихов, Д. С. Рябов, Г.М. Чечин, Ж. Г. Рахматулина, Е. А. Корзникова, С. В. Дмитриев // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2018. – Т. 15, №2. – С. 257–265.

35. Chechin, G. M. Interactions between normal modes in nonlinear dynamical systems with discrete symmetry. Exact results / G. M. Chechin, V. P. Sakhnenko // *Physica D: Nonlinear Phenomena*. – 1998. – V. 117, № 1–4. – P. 43–76.
36. Сахненко, В. П. Кусты мод и нормальные колебания для нелинейных динамических систем с дискретной симметрией // *Доклады Академии наук*. – 1994. – Т.338. – С. 42–45.
37. Kistanov, A.A. Properties of discrete breathers in 2D and 3D Morse crystals / A.A. Kistanov, E.A. Korznikova, S. Fomin, K. Zhou, S.V. Dmitriev // *Letters on Materials*. – 2014. – V. 4, № 4. – P. 315–318.
38. Dmitriev, S. Auxeticity from nonlinear vibrational modes / S. Dmitriev, E. Korznikova, D. Bokij, K. Zhou // *Physica status solidi (b)*. – 2016. – V. 253, № 7. – P.1310–1317.
39. 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. – V. 7. – P. 367–372.
40. Baimova, J. A. On the stability of one-dimensional bushes in graphene / J. A. Baimova, S. A. Shcherbinin, G. M. Chechin, S. V. Dmitriev // *Materials Physics and Mechanics*. – 2017. – V. 33, № 1. – P. 41–48.
41. Korznikova, E. A. 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. – V. 90, № 2. – P. 23.
42. Chechin, G. M. Stability of low-dimensional bushes of vibrational modes in the Fermi–Pasta–Ulam chains / G. M. Chechin, D. S. Ryabov, K. G. Zhukov // *Physica D: Nonlinear Phenomena*. – 2005. – V. 203, № 3–4. – P. 121–166.
43. Chechin, G. M. Existence and stability of bushes of vibrational modes for octahedral mechanical systems with Lennard–Jones potential / G. M. Chechin, A. V. Gnezdilov, M. Y. Zekhtser // *International journal of non-linear mechanics*. – 2003. – V. 38, № 10. – P. 1451–1472.

44. Chechin, G. M. Delocalized periodic vibrations in nonlinear LC and LCR electrical chains / G. M. Chechin, S. A. Shcherbinin // *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*. – 2015. – V. 22, № 1–3. – P. 244–262.
45. Лифшиц, И. М. Физика реальных кристаллов и неупорядоченных систем / И.М. Лифшиц . – М.: Наука, 1987. – 552 с.
46. Sievers, A. J. Intrinsic Localized Modes in Anharmonic Crystals / A. J. Sievers, S. Takeno // *Physical review letters*. – 1988. – V. 61 №8. – P. 970–973.
47. Bambusi, D. Exponential stability of breathers in Hamiltonian networks of weakly coupled oscillators / D. Bambusi // *Nonlinearity*. – 1996. – V. 9. – P. 433.
48. Livi, R. Breathers on a diatomic FPU chain / R. Livi, M. Spicci, R. S. MacKay // *Nonlinearity*. – 1997. – V. 10, № 6. – P. 1421.
49. MacKay, R. S. Proof of existence of breathers for time-reversible or Hamiltonian networks of weakly coupled oscillators / R. S. MacKay, S. Aubry // *Nonlinearity*. – 1994. – V. 7, № 6. – P. 1623.
50. Flach, S. Discrete breathers—advances in theory and applications / S. Flach, A. V. Gorbach // *Physics Reports*. – 2008. – V. 467, № 1–3. – P. 1–116.
51. Eisenberg, H. S. Discrete spatial optical solitons in waveguide arrays / H. S. Eisenberg, Y. Silberberg, R. Morandotti, A. R. Boyd, J. S. Aitchison // *Physical Review Letters*. – 1998. – V. 81, № 16. – P. 3383.
52. Christodoulides, D. N. Discrete temporal solitons along a chain of nonlinear coupled microcavities embedded in photonic crystals / D. N. Christodoulides, N. K. Efremidis // *Opt. Lett.* – 2002. – V. 27. – P. 568.
53. Fleischer, J. W. Observation of two-dimensional discrete solitons in optically induced nonlinear photonic lattices / J. W. Fleischer, M. Segev, N. K. Efremidis, D. N. Christodoulides // *Nature*. – 2003. – V. 422. – P. 147.
54. Eiermann, B. Bright Bose-Einstein gap solitons of atoms with repulsive interaction / B. Eiermann, T. Anker, M. Albiez, M. Taglieber, P. Treutlein, K. Marzlin, M. Oberthaler // *Physical Review Letters*. – 2004. – V. 92, № 23. – P. 230401.

55. Binder, P. Observation of breathers in Josephson ladders / P. Binder, D. Abraimov, A. Ustinov, S. Flach, Y. Zolotaryuk // *Physical Review Letters*. – 2000. – V. 84, № 4. – P. 745.
56. Mazo, J. J. Discrete breathers in Josephson arrays / J. J. Mazo, T. P. Orlando // *Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science*. – 2003. – V. 13, № 2. – P. 733–743.
57. Trias, E. Discrete breathers in nonlinear lattices: experimental detection in a Josephson array/ E. Trias, J. J. Mazo, T. P. Orlando // *Physical Review Letters*. – 2000. – V. 84. – P. 741.
58. Ustinov, A. V. Solitons in Josephson junctions / A. V. Ustinov // *Physica D: Nonlinear Phenomena*. – 1998. – V. 123, № 1–4. – P. 315–329.
59. English, L. Q. Generation of localized modes in an electrical lattice using subharmonic driving / L. Q. English, F. Palmero, P. Candiani, J. Cuevas, R. Carretero-González, P. G. Kevrekidis, A. J. Sievers // *Physical Review Letters*. – 2012. – V. 108, № 8. – P. 084101.
60. Palmero, F. Discrete breathers in a nonlinear electric line: Modeling, computation, and experiment / F. Palmero, L. Q. English, J. Cuevas, R. Carretero-González, P. Kevrekidis // *Physical Review E*. – 2011. – V. 84, № 2. – P. 026605.
61. Sato, M. Observation of locked intrinsic localized vibrational modes in a micromechanical oscillator array / M. Sato, B. Hubbard, A. Sievers, B. Ilic, D. Czaplewski, H. Craighead // *Physical review letters*. – 2003. – V. 90, № 4. – P. 044102.
62. Sato, M. Switching dynamics and linear response spectra of a driven one-dimensional nonlinear lattice containing an intrinsic localized mode / M. Sato, S. Imai, N. Fujita, W. Shi, Y. Takao, Y. Sada, B. Hubbard, B. Ilic, A. Sievers // *Physical Review E*. – 2013. – V. 87, № 1. – P. 012920.
63. Sato, M. Dynamics of impurity attraction and repulsion of an intrinsic localized mode in a driven 1-D cantilever array / M. Sato, Y. Sada, W. Shi, S. Shige, T. Ishikawa, Y. Soga, B. Hubbard, B. Ilic, A. Sievers // *Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science*. – 2015. – V. 25, № 1. – P. 013103.

64. Wiersig, J. Discrete breathers in ac-driven nanoelectromechanical shuttle arrays / J. Wiersig, S. Flach, K.-H. Ahn // *Applied Physics Letters*. – 2008. – V. 93, № 22. – P. 222110.
65. Marin, J. L. Intrinsic localized modes: discrete breathers. existence and linear stability / J. L. Marin, S. Aubry, L. M. Floria // *Physica D: Nonlinear Phenomena*. – 1998. – V. 113, № 2–4. – P. 283–292.
66. Kistanov, A. A. Properties of discrete breathers in 2D and 3D Morse crystals / A. A. Kistanov, E. A. Korznikova, S. Y. Fomin, K. Zhou, S. V. Dmitriev // *Письма о материалах*. – 2014. – V. 4, № 4. – P. 315–318.
67. Dmitriev, S. V. Gap discrete breathers in two-component three-dimensional and two-dimensional crystals with Morse interatomic potentials / S. V. Dmitriev, L. Z. Khadeeva, A. I. Pshenichnyuk, N. N. Medvedev // *Physics of the Solid State*. – 2010. – V. 52, № 7. – P. 1499–1505.
68. Kempa, M. The temperature dependence of the phononic band gap of NaI / M. Kempa, P. Ondrejko, P. Bourges, J. Ollivier, S. Rols, J. Kulda, S. Margueron, J. Hlinka // *Journal of Physics: Condensed Matter*. – 2013. – V. 25, № 5. – P. 055403.
69. Кистанов, А. А. Спонтанное возбуждение дискретных бризеров в кристаллах со структурой NaCl при повышенных температурах / А. А. Кистанов, С. В. Дмитриев // *Физика твердого тела*. – 2012. – Т. 54, № 8. – С. 1545.
70. Khadeeva, L. Z. Discrete breathers in crystals with NaCl structure / L. Z. Khadeeva, S. V. Dmitriev // *Physical Review B*. – 2010. – V. 81, № 21. – P. 214306.
71. Дмитриев, С. В. Дискретные бризеры в кристалле со структурой NaCl / С. В. Дмитриев, А. А. Кистанов, А. И. Потекаев, Ю. А. Баимова // *Известия высших учебных заведений. Физика*. – 2013. – Т. 56, № 2. – С. 60.
72. Кистанов, А. А. Молекулярно-динамическое исследование щелевого дискретного бризера поляризации [111] в кристалле со структурой NaCl / А. А. Кистанов, Ю. А. Баимова, С. В. Дмитриев // *Письма в ЖТФ*. – 2012. – Т. 38, № 14.

73. Кистанов, А. А. Обмен энергией между дискретными бризерами в кристалле со структурой NaCl / А. А. Кистанов, С. В. Дмитриев // Письма в Журнал технической физики. – 2013. – Т. 39, № 13. – С. 78–84.
74. Дмитриев, С. В. Влияние упругой деформации на фононный спектр и на характеристики щелевых дискретных бризеров в кристалле со структурой NaCl / С. В. Дмитриев, Ю. А. Баимова // Письма в ЖТФ. – 2011. – Т. 37, № 10.
75. Sievers, A. Thermally populated intrinsic localized modes in pure alkali halide crystals / A. Sievers, M. Sato, J. Page, T. Rössler // Physical Review B. – 2013. – V. 88, № 10. – P. 104305.
76. Fraile, A. Long-lived discrete breathers in free-standing graphene / A. Fraile, E. Koukaras, K. Papagelis, N. Lazarides, G. Tsironis // Chaos, Solitons & Fractals. – 2016. – V. 87. – P. 262–267.
77. Хадеева, Л. З. Дискретные бризеры в деформированном графене / Л. З. Хадеева, С. В. Дмитриев, Ю. С. Кившарь // Письма в журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2011. – Т. 94, № 7. – С. 580–584.
78. Korznikova, E. A. Discrete breather on the edge of the graphene sheet with the armchair orientation / E. A. Korznikova, A. V. Savin, Y. A. Baimova, S. V. Dmitriev, R. R. Mulyukov // JETP letters. – 2012. – V. 96, № 4. – P. 222–226.
79. Korznikova, E. A. Effect of strain on gap discrete breathers at the edge of armchair graphene nanoribbons / E. A. Korznikova, J. A. Baimova, S. V. Dmitriev // EPL (Europhysics Letters). – 2013. – V. 102, № 6. – P. 60004.
80. Баимова, Ю. А. Двумерные кластеры дискретных бризеров в графене / Ю. А. Баимова, А. Б. Ямилова, И. П. Лобзенко, С. В. Дмитриев, Г. М. Чечин // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2014. – Т. 11, № 4–2. – С. 599–604.
81. Баимова, Ю. А. Дискретные бризеры в графене: влияние температуры / Ю. А. Баимова, Р. Т. Мурзаев, И. П. Лобзенко, С. В. Дмитриев, Ж. Кун // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2016. – Т. 149, № 5. – С. 1005–1010.

82. Voulgarakis, N. K. Computational investigation of intrinsic localization in crystalline Si / N. K. Voulgarakis, G. Hadjisavvas, P. C. Kelires, G. Tsironis // *Physical Review B*. – 2004. – V. 69, № 11. – P. 113201.
83. Lobzenko, I. P. Ab initio simulation of gap discrete breathers in strained graphene / I. P. Lobzenko, G. M. Chechin, G. S. Bezuglova, Y. A. Baimova, E. A. Korznikova, S. V. Dmitriev // *Physics of the Solid State*. – 2016. – V. 58, № 3. – P. 633–639.
84. Khadeeva, L. Z. Discrete breathers in deformed graphene / L. Z. Khadeeva, S. V. Dmitriev, Y. S. Kivshar // *JETP letters*. – 2011. – V. 94, № 7. – P. 539–543.
85. Chechin, G. M. Properties of discrete breathers in graphene from ab initio simulations / G. M. Chechin, S. V. Dmitriev, I. P. Lobzenko, D. S. Ryabov // *Physical Review B*. – 2014. – V. 90, № 4. – P. 045432.
86. Hizhnyakov, V. Theory and molecular dynamics simulations of intrinsic localized modes and defect formation in solids / V. Hizhnyakov, M. Haas, A. Shelkan, M. Klopov // *Physica Scripta*. – 2014. – V. 89, № 4. – P. 044003.
87. Hizhnyakov, V. Standing and moving discrete breathers with frequencies above the phonon spectrum // *Quodons in MicaSpringer*, 2015. – С. 229–245.
88. Семенов, А. С. Исследование дискретных бризеров в ГПУ металлах бериллии и цирконии / А. С. Семенов, Р. Т. Мурзаев, А. А. Кистанов, Ю. В. Бебихов // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. – 2015. – Т. 12, № 1. – С. 26–30.
89. Кистанов, А. А. Взаимодействие движущихся дискретных бризеров в ГПУ металле Mg / А. А. Кистанов, А. С. Семенов, Р. Т. Мурзаев, С. В. Дмитриев // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. – 2014. – Т. 11, № 4/2. – С. 572–577.
90. Кистанов, А. А. Неподвижные и движущиеся дискретные бризеры в ГПУ металле Co / А. А. Кистанов, А. С. Семенов, Р. Т. Мурзаев, С. В. Дмитриев // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. – 2014. – Т. 11, № 3. – С. 322–326.

91. Murzaev, R. T. Localized vibrational modes in diamond / R. T. Murzaev, D. V. Bachurin, E. A. Korznikova, S. V. Dmitriev // *Physics Letters A*. – 2017. – V. 381, № 11. – P. 1003–1008.
92. Мурзаев, Р. Т. Свойства неподвижных дискретных бризеров в альфа-уране / Р. Т. Мурзаев, Е. А. Корзникова, Д. И. Бокий, С. Ю. Фомин, С. В. Дмитриев // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. – 2015. – Т. 12, № 3. – С. 324–329.
93. Медведев, Н. Н. Локализованные колебательные моды в двумерной модели упорядоченного сплава Pt_3Al / Н. Н. Медведев, М. Д. Старостенков, П. В. Захаров, О. В. Пожидаева // *Письма в журнал технической физики*. – 2011. – Т. 37, № 3. – С. 7–15.
94. Медведев, Н. Н. Локализация энергии в упорядоченных конденсированных системах: сплавы состава A_3B со сверхструктурой $L12$ / Н. Н. Медведев, А. И. Потекаев, П. В. Захаров, А. В. Маркидонов, А. М. Еремин, М. Д. Старостенков // *Известия вузов. Физика*. – 2014. – Т. 57, № 3. – С. 92-100.
95. Захаров, П. В. Возбуждение щелевых дискретных бризеров в кристалле состава A_3B потоком частиц / П. В. Захаров, М. Д. Старостенков, А. М. Ерёмин, Е. А. Корзникова, С. В. Дмитриев // *Физика твердого тела*. – 2017. – Т. 59, № 2. – С. 217–222.
96. Старостенков, М. Д. Динамика дискретных бризеров в кристалле Pt_3Al / М. Д. Старостенков, С. В. Дмитриев, П. В. Захаров, А. М. Еремин, В. В. Кулагина, А. И. Потекаев // *Известия вузов. Физика*. – 2015. – Т. 58, № 9. – С. 136-140.
97. Захаров, П. В. Дискретные бризеры в кристалле $CuAu$ / П. В. Захаров, М. Д. Старостенков, А. М. Ерёмин, А. И. Чередниченко // *Письма о материалах*. – 2016. – Т. 6, № 4. – С. 294–299.
98. Chechin, G. M. Quasibreathers as a generalization of the concept of discrete breathers / G. M. Chechin, G. S. Dzhelauhova, E. A. Mehonoshina // *Physical Review E*. – 2006. – V. 74, № 3. – P. 036608.

99. Захаров, П. В. Квазибризерные состояния в кристалле A_3B при наличии точечных дефектов / П. В. Захаров, А. М. Ерёмин, М. Д. Старостенков, А. В. Маркидонов, И. С. Луценко // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. – 2015. – Т. 12, № 2. – С. 146–152.
100. Захаров, П. В. Поведение квазибризерной моды в кристалле Pt_3Al при наличии точечных дефектов / П. В. Захаров, А. М. Ерёмин, Н. А. Манаков, М. Д. Старостенков, А. В. Маркидонов // *Вестник Оренбургского государственного университета*. – 2015. – Т. 184, № 9 – С. 38–44.
101. Ерёмин, А. М. Статистические характеристики квази-бризера с мягким типом нелинейности в кристаллах стехиометрии A_3B / А. М. Ерёмин, П. В. Захаров, М. Д. Старостенков // *Химическая физика и мезоскопия*. – 2016. – Т. 18, № 4. – С. 565–571.
102. Dubinko, V. Assessment of discrete breathers in the metallic hydrides / V. Dubinko, D. Laptev, D. Terentyev, S. V. Dmitriev, K. Irwin // *Computational Materials Science*. – 2019. – V. 158. – P. 389–397.
103. Дубинко, В. И. Влияние дискретных бризеров на пластичность и прочность кристаллов / В. И. Дубинко, А. В. Дубинко, С. В. Дмитриев // *Письма о материалах*. – 2013. – Т. 3, № 3. – С. 239–247.
104. Haile, J. M. *Molecular Dynamics Simulation: Elementary Methods*. / J. M. Haile – New York: John Wiley & Sons, 1992.– 489 p.
105. Rapaport, D. C. *The Art of Molecular Dynamics Simulation*. / D. C. Rapaport: 2nd Edition. – Cambridge University Press, UK, 2004. – 564 p.
106. Сивухин, Д. В. *Общий курс физики. Том 1. Механика* / Д. В. Сивухин – М.: Физматлит: Издательство МФТИ, 2005. – 560 с.
107. *Атомистическое моделирование материалов, наноструктур и процессов нанотехнологии*. / А. А. Назаров, Р. Р. Мулюков – Уфа: РИО БашГУ, 2010.
108. LAMMPS. <http://lammps.sandia.gov/>. –
109. <http://www.ks.uiuc.edu/Research/namd/>.
110. <http://xmd.sourceforge.net/>.

111. Stadler, J. IMD: a software package for molecular dynamics studies on parallel computers / J. Stadler, R. Mikulla, H.-R. Trebin // *International Journal of Modern Physics C*. – 1997. – V. 8, № 05. – P. 1131–1140.
112. Lennard-Jones, J. E. On the Determination of Molecular Fields. II. From the equation of State of a Gas/ J. E. Lennard-Jones // *Proceedings of the Royal Society A*. – 1924. – V. A 106. – P. 463.
113. Сюэ-сень, Ц. Физическая механика / Ц. Сюэ-сень: М.: Мир, 1965. – 545 с.
114. Daw, M. S. Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals / M. S. Daw, M. I. Baskes // *Physical Review B*. – 1984. – V. 29, № 12. – P. 6443.
115. Daw, M. S. The embedded-atom method: a review of theory and applications / M. S. Daw, S. M. Foiles, M. I. Baskes // *Materials Science Reports*. – 1993. – V. 9, № 7–8. – P. 251–310.
116. Foiles, S. M. Embedded-atom-method for the fcc metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and their alloys / S. M. Foiles, M. I. Baskes, M. S. Daw // *Physical Review B*. – 1986. – V. 33. – P. 7983.
117. Baskes, M. I. Application of the embedded-atom method to covalent materials: a semiempirical potential for silicon / M. I. Baskes // *Physical Review Letters*. – 1987. – V. 59, № 23. – P. 2666.
118. Adams, J. B. Development of an embedded-atom potential for a bcc metal: Vanadium / J. B. Adams, S. M. Foiles // *Physical Review B*. – 1990. – V. 41, № 6. – P. 3316.
119. Johnson, R. A. Alloy models with the embedded-atom method / R. A. Johnson // *Physical Review B*. – 1989. – V. 39, № 17. – P. 12554.
120. Baskes, M. I. Modified embedded-atom potentials for cubic materials and impurities / M. I. Baskes // *Physical Review B*. – 1992. – V. 46, № 5. – P. 2727.
121. Baskes, M. I. Modified embedded atom potentials for HCP metals / M. I. Baskes, R. A. Johnson // *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. – 1994. – V. 2, № 1. – P. 147.

122. Baskes, M. I. Semiempirical modified embedded-atom potentials for silicon and germanium / M. I. Baskes, J. S. Nelson, A. F. Wright // *Physical Review B*. – 1989. – V. 40, № 9. – P. 6085.
123. Agrawal, A./ A. Agrawal, R. Mishra, L. Ward, K.M. Flores, W. Windl // *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. – 2015. – V. 23, № 3.
124. Agrawal, A. An embedded atom method potential of beryllium / A. Agrawal, R. Mishra, L. Ward, K. M. Flores, W. Windl // *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. – 2013. – V. 21, № 8. – P. 085001.
125. Mackay, K. J. H. Lattice parameter and hardness measurements on high purity beryllium/ K. J. H. Mackay, N. A. Hill // *Journal of Nuclear Materials*. – 1963. – V. 8. – P. 263.
126. Bachurin, D. V. Ab initio study of hydrogen on beryllium surfaces / D. V. Bachurin, P. V. Vladimirov // *Surfaces Science* –2015. – V. 641. – P. 198.
127. Haas, M. Prediction of high-frequency intrinsic localized modes in Ni and Nb / M. Haas, V. Hizhnyakov, A. Shelkan, M. Klopov, A. J. Sievers // *Physical Review B*. – 2011. – V. 84, № 14. – P. 144303.
128. Кистанов, А. А. Движущиеся дискретные бризеры в моноатомном двумерном кристалле / А. А. Кистанов, С. В. Дмитриев, В. И. Дубинко, В. В. Хижняков, Р. Т. Мурзаев // *Письма в ЖЭТФ* –2014. – Т. 99, № 6. – С. 403–408.
129. Murzaev, R. Moving discrete breathers in bcc metals V, Fe and W / R. Murzaev, A. Kistanov, V. I. Dubinko, D. Terentyev, S. Dmitriev // *Computational Materials Science*. – 2015. – V. 98. – P. 88.
130. Мурзаев, Р. Т. Молекулярно-динамическое изучение дискретных бризеров с жестким типом нелинейности в моноатомной двумерной решетке с морзевским взаимодействием / Р. Т. Мурзаев, Е. А. Корзникова, Д. И. Бокий, С. Ю. Фомин, С. В. Дмитриев // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. – 2015. – Т. 12, № 3. – С. 311–315.
131. Бачурина, О. В. Исследование плоской колебательной моды в ГЦК металле никеля в плоскости [111] / О. В. Бачурина, Р. Т. Мурзаев, С. В. Дмитриев //

Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2017. – Т. 14, № 2. – С. 363–367.

132. Бачурина, О. В. Исследование одномерной нелинейной колебательной моды в ГЦК алюминии / О. В. Бачурина, Р. Т. Мурзаев, Е. А. Корзникова, С. В. Дмитриев // *Materials Physics and Mechanics*. – 2017. – Т. 33. – С. 49–56.

133. Бачурина, О. В. Моделирование линейного дискретного бризера в никеле / О. В. Бачурина, Р. Т. Мурзаев, С. В. Дмитриев // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. – 2017. – Т. 14, № 3. – С. 363–367.

134. Бачурина, О. В. Линейные дискретные бризеры в ГЦК металлах / О. В. Бачурина // *Computational Materials Science* –2019. – Т. 160. – С. 217–221.

135. Zhou, X.W. Atomic scale structure of sputtered metal multilayers / X.W. Zhou, H.N.G. Wadley, R.A. Johnson, D.J Larson, N. Tabat, A. Cerezo, A.K. Petford-Long, G.D.W. Smith, P.H. Clifton, R.L Martens, T. F. Kelly // *Acta Materialia*. – 2001. – V. 49, № 19. – P. 4005.

136. Bachurina, O. V. Molecular dynamics study of two-dimensional discrete breather in nickel / O. V. Bachurina, R. T. Murzaev, D. V. Bachurin // *Journal of Micromechanics and Molecular Physics*. – 2019. – V. 3, № 4.

137. Бачурина, О.В. Двумерная нелинейная колебательная мода в никеле / О. В. Бачурина, Р. Т. Мурзаев, С. В. Дмитриев // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. – 2018. – Т. 15, № 2. – С. 203–207.

138. Bachurina, O.V. Two-dimensional discrete breathers in hcp titanium // *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*. – Т. 447 –IOP Publishing, 2018. – p. 012033.

139. Hennig, R. G. Spline-based MEAM+SW potential for Ti / R. G. Hennig // *Physical Review B*. –2008. – V. 78, № 05412.

140. Ackland, G. J. Theoretical study of titanium surfaces and defects with a new many-body potential / G. J. Ackland // *Philosophical Magazine A*. –1992. – V. 66. – P. 917.

141. Bachurina, O. V. Plane and plane-radial discrete breathers in fcc metals / O. V. Bachurina // Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering. – 2019. – V. 27, № 5.
142. Medvedev, N. N. Energy Localization in the Ordered Condensed Systems: A_3B Alloys With L12 Superstructure / N. N. Medvedev, M. D. Starostenkov, A. I. Potekaev, P. V. Zakharov, A. V. Markidonov, A. M. Eremin // Russian Physics Journal. – 2014. – V. 57, № 3. – P. 387.
143. Zakharov, P.V. Analysis of statistical characteristics of quasi-breather with soft-type of nonlinearity in the crystals of A_3B stoichiometry // Key Engineering Materials. – V. 743 –Trans Tech Publ, 2017. – P. 86.
144. Zakharov, P.V. Discrete breathers in the crystal CuAu / P. V. Zakharov, A. M. Eremin, M. D. Starostenkov, A. I. Cherednichenko // Letters on Materials. – 2016. – V. 6, № 4. – P. 294.