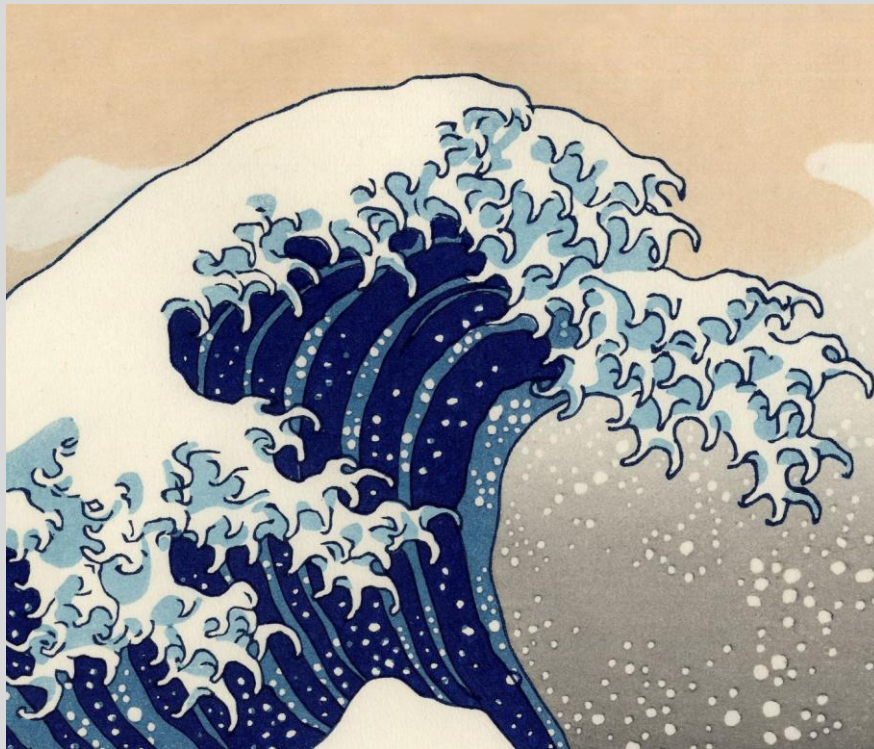


Institute for Metals Superplasticity Problems
of Russian Academy of Sciences
National Research Tomsk State University

The workshop was supported by the Russian Foundation for Basic Research,
Grant N 15-02-20657



International workshop

Discrete Breathers in Crystals

Ufa 2015

International Workshop "Discrete Breathers in Crystals": Book of abstracts. September 21-25, Ufa 2015. Institute for Metals Superplasticity Problems of Russian Academy of Sciences, 2015 – 76 p.

The book includes abstracts of reports presented on the international workshop "Discrete breathers in crystals" held in Ufa, Russia from 21 to 25 of September. The topics are related to the main advances and open problems in the study of discrete breathers (DB) in crystals including

- Theory
- Molecular dynamics simulations
- The first-principles modeling
- Experimental studies
- The role of DB in the formation of the physical and mechanical properties of crystals
- DB in various physical systems
- Nonlinear excitations in crystals different from DB

Abstracts are presented in author's edition.

The workshop was supported by the Russian Foundation for Basic Research, Grant N 15-02-20657

Школа-семинар с международным участием “Дискретные бризеры в кристаллах”. Сборник тезисов. Уфа, 21-25 сентября 2015. Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, 2015. – 76 с.

В сборник включены тезисы докладов школы-семинара с международным участием «Дискретные бризеры в кристаллах». Представленные материалы описывают основные достижения и открытые проблемы в области изучения дискретных бризеров (ДБ) в кристаллах включая

- Теорию ДБ
- Молекулярно-динамическое моделирование ДБ
- Первопринципное моделирование ДБ
- Прямые и непрямые методы экспериментального исследования ДБ
- Роль ДБ в формировании физических и механических свойств кристаллов
- ДБ в различных физических системах
- Нелинейные возбуждения в кристаллах, отличные от ДБ

Тезисы представлены в авторской редакции

Школа конференция поддержана грантом РФФИ № 15-02-20657

International Workshop Discrete Breathers in Crystals

**Ufa 2015
September 21-25**

Organizers

1. Institute for Metals Superplasticity Problems of Russian Academy of Sciences
2. National Research Tomsk State University

Chairman of the Organizing Committee:

Prof. Sergey V. Dmitriev, Institute for Metals Superplasticity Problems, Ufa, Russia

The Organizing Committee:

Archilla J., University of Sevilla, Sevilla, Spain

Cechin G.M., Ph.D., Associate Professor, Southern Federal University, Rostov-on-Don, Russia

Chetverikov A.P., National Research Saratov State University, Saratov, Russia

Doi Y., Osaka University, Osaka, Japan

Dubinko V.I., Kharkov Institute of Physics and Technology, Kharkov, Ukraine

Ebeling W., Institut für Physik, Humboldt-Universität, Berlin, Germany

Hizhnyakov V., University of Tartu, Estonia

Medvedev N.N., Biysk Technological Institute, Biysk, Russia

Mulyukov P.P., Institute for Metals Superplasticity Problems, Ufa, Russia

Nazarov A.A., Institute for Metals Superplasticity Problems, Ufa, Russia

Savin A.V., Semenov Institute of Chemical Physics, Moscow, Russia

Starostenkov M.D., Altai State Technical University, Barnaul, Russia

Terentyev D., SCK • CEN, Nuclear Materials Science Institute, Belgium

Velarde M.G., Universidad Complutense de Madrid, Madrid, Spain

Xiong D., Fuzhou University, Fujian, China

Zhou K., Nanyang Technological University, Singapore

Local Organizing Committee:

Baimova J.A.

Korzniikova E.A.

Karpinskaya E.S.

Rakhmatullina Zh.G.

CONTENTS

Thermal breather-like excitations in 2D triangular and hexagonal Morse-lattices

Chetverikov A.P., Ebeling W., Velarde M.G. 7

Localized nonlinear mobile and immobile waves excited in hexagonal Morse lattice by short external pulses

Chetverikov A.P., Ebeling W., Shepelev I.A., Velarde M.G. 8

Discrete breathers in one dimensional anharmonic crystals at finite temperatures and their roles in anomalous thermal transport

Xiong D., Zhang Y., Wang J., Zhao H. 10

Stability analysis of discrete breathers in carbon nanotube

Doi Y., Nakatani A. 11

Chemical and nuclear catalysis driven by discrete breathers

Dubinko V.I. 12

Atomistic simulations of discrete breathers in crystals and their interaction with crystal defects

Dubinko V.I., Terentyev D., Dubinko A.V., Dmitriev S.V. 13

Existence and stability of intrinsic localized modes in fpu- β chain with fixed boundary condition embedded in two dimensional plane

Kimura M., Mitani A., Doi Y. 15

Velocity step for a driven intrinsic localized mode

Sato M., Shige S., Ishikawa T., Nakaguchi N., Soga Y., Sievers A.J. 17

Elastic moduli of nanocrystalline binary al alloys with grain boundary segregations

Babicheva R.I., Zhang Y., Kok S.W., Zhou K. 19

Системы щелевых дискретных бризеров в графене

Баимова Ю.А., Дмитриев С.В. 20

Динамика дискретных бризеров в теоретических моделях низкоразмерных ангармонических кристаллов

Лантев Д.В., Богдан М.М. 21

Simulation of vortex cores switching in nanocolumnar conducting triplex structure	
<i>Ekomasov A.E., Stepanov S.V., Ekomasov E.G.</i>	23
Resonant dynamics of the domain walls in multilayer ferromagnetic structure	
<i>Ekomasov E.G., Gumerov A.M., Kudryavtsev R.V., Murtazin R.R., Abakumova N.N.</i>	24
Влияние точечных дефектов на поведение дискретного бризера в кристалле Pt₃Al	
<i>Ерёмин А.М., Захаров П.В., Старостенков М.Д.</i>	25
Моделирование генерации дискретных бризеров в кристалле Pt₃Al при импульсе тока	
<i>Захаров П.В., Дмитриев С.В., Старостенков М.Д.</i>	28
The MD simulation of tungsten hardening caused by neutron irradiation	
<i>Zinovyev A., Terentyev D.</i>	29
A molecular dynamics study of [111]-polarized gap discrete breathers in a crystal with nacl-type structure	
<i>Kistanov A.A., Baimova Yu.A., Zhou K.</i>	31
Synchronization of atoms oscillations for discrete quasibreathers in graphene from <i>ab initio</i> simulations	
<i>Chechin G.M., Dmitriev S.V., Lobzenko I.P.</i>	32
О возможности возбуждения дискретных бризеров в алюминиевой и платиновой подрешетках Pt₃Al	
<i>Медведев Н.Н., Старостенков М.Д., Захаров П.В.</i>	32
Еще раз о перераспределении энергии между подрешетками в упорядоченных кристаллах состава A₃B	
<i>Медведев Н.Н., Старостенков М.Д., Захаров П.В.</i>	35
Авторезонансное параметрическое возбуждение магнитного бризера в слабом ферромагнетике с дефектом анизотропии	
<i>Екомасов Е.Г., Назаров В.Н., Муртазин Р.Р., Шафеев Р.Р.</i>	37

Теоретическое исследование кинк-примесных взаимодействий в модели синус-Гордона

Екомасов Е.Г., Гумеров А.М., Муртазин Р.Р., Кудрявцев Р.В., Абакумова Н.Н. 39

Пульсоны нелинейного уравнения Клейна-Гордона с потенциалом дробной степени

Salimov R.K., Ekomasov E.G. 40

Discrete breathers in 2D and 3D crystals

Dmitriev S.V. 41

Interaction of discrete breathers with primary lattice defects in BCC Fe

Terentyev D., Dubinko A., Dubinko V., Dmitriev S.V., Zhurkin E. 42

Thermal solitons in 1D and 2D anharmonic lattices: solectrons and the organization of non-linear fluctuations in long-living dynamical structures

Velarde M.G., Ebeling W., Chetverikov A.P. 42

Tensile behavior of bi-crystalline Si nanofilms with $\Sigma 25$ grain boundaries

Lin P., Babicheva R.I., Xue M., Zhang H.S., Xu H., Liu B., Zhou K. 43

From polaron to solectron

Velarde M.G. 44

The effect of crystallographic orientation on tensile deformation behavior of NiAl nanofilms at room temperature

Krylova K.A., Babicheva R.I., Dmitriev S.V., Mulyukov R.R., Zhou K. 44

Instabilities in crystals at finite temperature

Umeno Y., Nöhring W., Iskandarov A., Bitzek E. 45

Crowdion mobility and stability in FCC metals

Iskandarov A.M. 46

Properties of immobile discrete breathers in monoatomic 2D Morse crystals

Korzniikova E.A. 46

Discrete breathers in alpha uranium

Murzaev R.T., Korzniikova E.A., Bokiyy D.I., Dmitriev S.V. 47

Динамика антисимметричного дискретного бризера в кристалле Pt₃Al

Захаров П.В., Старостенков М.Д., Ерёмин А.М., Медведев Н.Н. 47

Свойства дискретных бризеров в двумерных биатомных кристаллах с потенциалом Морзе

Фомин С.Ю., Корзникова Е.А...... 50

Impurity-induced discrete breathers and phonon Bloch oscillations in perturbed fluorographene and graphane lattices

Kosevich Yu.A...... 51

On the charge of quodons

Archilla J.F.R., Russell F.M...... 52

Scroll configurations of carbon nanoribbons

Savin A.V., Korznikova E.A., Dmitriev S.V...... 53

THERMAL BREATHER-LIKE EXCITATIONS IN 2D TRIANGULAR AND HEXAGONAL MORSE-LATTICES

Chetverikov A.P.^{1*}, Ebeling W.², Velarde M.G.³

¹*Saratov National Research University, Russia*

²*Humboldt University, Berlin, Germany*

³*University Complutense, Madrid, Spain*

*ChetverikovAP@info.sgu.ru

The possibility of exciting localized immobile as well as mobile long-living modes in heated 2D both triangular and hexagonal (honeycomb) lattices of point particles interacting via potential Morse bonds is studied in computer simulations. A molecular-dynamical ensemble model is used in investigations of triangular lattices. For the study of hexagonal (graphene-like) lattices a lattice model with three fixed bonds for each particle is employed. Complex variables $Z_n = x_n + iy_n$ are introduced to present a position of n -th particle in the (x, y) -plane. The Langevin motion equations are solved in computer simulations to describe dynamics of heated lattices [1-4]:

$$\ddot{Z}_n = \sum_k F_{nk}(|Z_{nk}|)z_{nk} + \left[-\gamma \dot{Z}_n + \sqrt{2D_v} (\xi_{nx} + i\xi_{ny}) \right]$$

Here $Z_{nk} = Z_n - Z_k$, $z_{nk} = (Z_n - Z_k) / |Z_n - Z_k|$, $F_{nk}(|Z_{nk}|)$ is an interaction force between n -th and k -th particles, γ is a friction coefficient, D_v is intensity of a chaotic force, $\xi_{nx, ny}$ are independent sources of Gaussian white noise.

Both zero deviations of particles from equilibrium positions and zero velocities of particles are used as initial conditions, simulations are performed in a cell with lengths $L_{x, y}$ corresponding to geometry of a lattice and a number of particles N . Analysis of dynamics are performed for a stationary state of a lattice when temperature of a system reaches a stationary value $T = D_v / \gamma$.

Identification of localized excitations is performed with a special procedure. The density $d_n(Z)$ of each point particle is supposed to be spread in accordance with the axially symmetric Gaussian function of a distance $r_n = |Z - Z_n|$ from a point particle with normalization rule $d(r_n = 0) = 1$ for an isolated particle. The width of a Gaussian bell is chosen by a such way that total density $d(Z)$ of particles at each point $Z = x + iy$ of an equilibrium lattice does not exceed $1 + \delta$, $\delta \ll 1$. When particles approach each other, the density increases and is visualized. Cutting a distribution $d(Z)$ (that is introducing a new characteristic $d_{cut}(Z)$ which equals $a = d(Z) - 1 - \delta$ if $a > 0$ and equals zero in other case) and observing evolution $d_{cut}(Z, t)$ it is possible to identify long living mobile and immobile localized excitations. The target of this study is in first line breather-like excitations. We show that mobile localized excitations moving generally along crystallographic axes for a distance of order of a few equilibrium atomic

distances are excited from time to time. Also immobile compressions of density with a lifetime of order of a few Morse oscillation periods have been observed in simulations. The analysis of trajectories of particles forming the localized compression provides evidence of almost coherent motions of those particles which may be classified as thermal immobile breathers whereas the observed long living mobile excitations may be considered as thermal solitons or possibly thermal mobile breathers [5]. Our analysis shows that in the case of thermal excitations a sharp distinction between breathers and solitons is impossible, these excitations have to be considered as limit cases.

This study is supported in part by the Russian Foundation for Basic Research (Grant No. 14-52-12002)

References

1. Chetverikov A.P., Ebeling W., Velarde M.G. *Physica D* **240**, 1954(2011).
2. Chetverikov A.P., Ebeling W., Velarde M.G. *Wave Motion* **48**, 753(2011).
3. Ebeling W., Chetverikov A.P., Velarde M.G. *Eur. Phys. J. B* **85**, 291(2012).
4. Chetverikov A.P., Ebeling W., Velarde M.G. *Eur. Phys. J. ST* **222**, 2531(2013)
5. Dmitriev S.V., Chetverikov A.P., Velarde M.G. *Phys. Status Solidi B*, 1(2015)

LOCALIZED NONLINEAR MOBILE AND IMMOBILE WAVES EXCITED IN HEXAGONAL MORSE LATTICE BY SHORT EXTERNAL PULSES

Chetverikov A.P.^{1*}, Ebeling W.², Shepelev I.A.¹, Velarde M.G.³

¹*Saratov National Research University, Russia*

²*Humboldt University, Berlin, Germany*

³*University Complutense, Madrid, Spain*

*ChetverikovAP@info.sgu.ru

Localized supersonic and immobile long-living nonlinear modes excited by high energetic external pulses in hexagonal (honeycomb) lattices of point particles interacting via potential Morse bonds are studied in computer simulations. A lattice model with fixed three bonds for each particle is used in investigations. Such model may be considered as a first approach for studies of the dynamics of a graphene-like lattice. Complex variables $Z_n = x_n + iy_n$ are used to present a position of n-th particle in the $(Z = x + iy)$ -plane, $n = 1, \dots, N$, N is a number of particles in simulation. The interaction force F_{nk} between two particles depends on $|Z_{nk}|$ only, $Z_{nk} = Z_n - Z_k$, and its direction is defined by an unity vector $z_{nk} = (Z_n - Z_k) / |Z_n - Z_k|$ [1-4].

Both zero deviations of particles from equilibrium positions and zero velocities of the most number of particles are used as initial conditions, simulations are performed in a cell with lengths $L_{x,y}$ corresponding to geometry of a lattice and a number of particles. Particles with chosen numbers n_{in1}, n_{in2}, \dots have initial velocities v_{in1}, v_{in2}, \dots (a ratio of components $\text{Re}(v_{in})$ and $\text{Im}(v_{in})$ defines direction of an initial velocity of a corresponding particle). Periodic boundary conditions are used.

Identification of localized excitations is performed by means of specially developed procedure to visualize the fields of compression of particles. Also analysis of distributions of velocities $V_n = dZ_n/dt$ and dependencies of kinetic and potential energies of an ensemble are used to derive additional information about dynamics of the lattice.

It has been shown by simulations that energy of a single pulse directed along one of crystallographic axes spreads in a lattice along all axes if the energy is low enough. However with increasing pulse certain part of energy spread in lateral rows decreases and supersonic quasi-1d solitons are formed which are able to travel along a crystallographic axis for a long distance.

In a similar way, if a collision of two oppositely moving localized excitations in the same row is realized, the result depends on energy of initial pulses [5]. If energy is high enough (energies of both pulses is supposed to be equal for simplicity) two quasi-1d excitations pass through each other with minimal deformation. It allows to classify them as quasi-1d solitons. If energy is not very strong (if it belongs to a limited range of values) an immobile excitation is realized with oppositely oscillating adjacent particles. Such excitations may be classified as immobile discrete breathers.

Also pairs of oppositely moving excitations are observed, one of them is in a row with initially perturbed particles (like solitons), the other travelling in a direction transverse to the direction of initial pulses.

Details of all these cases are discussed on the base of an analysis of evolution of distributions of both density and velocities of particles, kinetic and potential energy.

This study is supported in part by the Russian Foundation for Basic Research (Grant No. 14-52-12002)

References

1. *Chetverikov A.P., Ebeling W., Velarde M.G. Physica D* **240**, 1954(2011).
2. *Chetverikov A.P., Ebeling W., Velarde M.G. Wave Motion* **48**, 753(2011).
3. *Ebeling W., Chetverikov A.P., Velarde M.G. Eur. Phys. J. B* **85**, 291(2012).
4. *Chetverikov A.P., Ebeling W., Velarde M.G. Eur. Phys. J. ST* **222**, 2531(2013)
5. *Kistanov A.A., Dmitriev S.V., Chetverikov A.P., Velarde M.G. Eur. Phys. J. B* **87**, 211 (2014).

DISCRETE BREATHERS IN ONE DIMENSIONAL ANHARMONIC CRYSTALS AT FINITE TEMPERATURES AND THEIR ROLES IN ANOMALOUS THERMAL TRANSPORT

Xiong D.^{1*}, Zhang Y.², Wang J.², Zhao H.²

¹*Department of Physics, Fuzhou University, Fuzhou 350108, Fujian, China*

²*Department of Physics and Institute of Theoretical Physics and Astrophysics, Xiamen University, Xiamen 361005, Fujian, China*

*phyxiongdx@fzu.edu.cn

We will talk about some discrete breathers (DBs) properties in two focused one dimensional (1D) anharmonic crystal models with Fermi-Pasta-Ulam- β potential, i.e., a lattice including the next-nearest neighbor (NNN) couplings [1, 2] and a chain with alternating interactions [3]. The main features of these two systems are that, the former has a high order linear phonon dispersion compared with the corresponding models without NN couplings, while the latter's linear phonon dispersion contains both acoustic and optical branches, which is similar to the 1D diatomic lattices. Based on their different dispersions, we will show that, the intraband DBs with frequencies in the phonon bands can be excited in the former systems, however, in the latter systems the gap DBs can emerge. We will further provide some details of the formations, frequencies, and energies of these two kinds of DBs. From these details, we then will report that how these dynamical details are related to the anomalous heat transport, especially the power-law divergence manners of the thermal conductivity with the space size. One underlying picture in our minds is that, phonons, as main heat carries, may perform various kinds of random walks (some times could be Lévy walks [4], but not always be) to support the abnormality of transport. Then if DBs have been verified to exist in these systems at finite temperatures, they should play a central role. Our numerical evidences of both focused systems seem to support such a picture very well.

References

1. Xiong D., Wang J., Zhang Y., Zhao H. Phys. Rev. E **85**, 020102(R) (2012).
2. Xiong D., Zhang Y., Zhao H. Phys. Rev. E **90**, 022117 (2014).
3. Xiong D., Zhang Y., Zhao H. Phys. Rev. E **88**, 052128 (2013).
4. Zaburdaev V., Denisov S., Llafter J. arXiv:1410.5100v2.

STABILITY ANALYSIS OF DISCRETE BREATHERS IN CARBON NANOTUBE

Doi Y. *, Nakatani A.

Department of Adaptive Machine Systems, Graduate School of Engineering, Osaka University, 2-1 Yamadaoka, Suita, Osaka 565-0871, Japan

*doi@ams.eng.osaka-u.ac.jp

Nonlinear energy localization called discrete breathers (DBs) or intrinsic localized modes (ILMs) has been attracted increasing attention since Sievers and Takeno reported the possibility of existence [1]. DB is space localized and time periodic vibration mode that is excited in anharmonic lattice systems such as Fermi-Pasta-Ulam (FPU) \square system. There has been growing recognition that it is important to investigate possibility of DB in practical systems. Recently various theoretical and experimental studies on this field have been performed such as micro-mechanical systems [2], optical systems [3] and electrical systems [4].

DB in atomic systems is also has been the subject of many researches. In fact, atomic structures of crystals are periodic structures. Interaction between atoms is intrinsically anharmonic. Therefore atomic structure can be modeled by anharmonic lattice systems and existence of DB in crystals is expected. Various studies has been performed such as ideal Lenard-Jones hexagonal crystal [5] and recently more realistic 2D and 3D crystals with Tarsoff potential [6].

We focus on the DB in carbon nanotube (CNT). As to the carbon crystals, DB in 2D graphene [7] and 3D CNT [8] have been reported. Moreover linear stability of DB in graphene has been reported[9]. In this study, we investigate detailed properties of DB in CNT. For this purpose, we construct precise numerical solution of DB in CNT with various frequencies by Newton-Raphson method. Then linear stability of DB in CNT is investigated numerically. Molecular dynamics simulations are also performed in order to investigate structural changes by DB after unstable perturbation mode is excited.

References

1. *Sievers A. J., Takeno S.*, Phys. Rev. Lett. **61**, 970 (1988).
2. *Sato M., Hubbard, B. E., Sievers A. J., Ilic B., Czaplowski D. A., Craighead H. G.*, Phys. Rev. Lett., **91**, 044102 (2003).
3. *Eisenberg H. S., Silverberg Y., Morandotti R., Boyd A. R., Sievers A. J.*, Phys. Rev. Lett. **81**, 3383 (1998).
4. *English L. Q., Palmero F., Stormes J. F., Cuevas J., Carretero-González R., Kevrekidis P. G.*, Phys. Rev. E **88**, 022912 (2013).
5. *Marin J. L., Eilbeck J. C., Russel F. M.*, Phys. Lett. A **248**, 225 (1998).

6. Dmitriev S. V., Chetverikov A. P., Velarde M. G., Phys. Status Solid B, **1** (2015).
7. Yamayose Y, Kinoshita Y., Doi Y., Nakatani A., Kitamura T., EPL. **80**, 4008 (2007).
8. Shimada T., Shirasaki D., Kinoshita Y., Doi Y., Nakatani A., Kitamura T., Physica D **239**, 407 (2010).
9. Doi Y., Nakatani A., Journal of Solid Mechanics and Materials Engineering **6**, 71 (2012).

CHEMICAL AND NUCLEAR CATALYSIS DRIVEN BY DISCRETE BREATHERS

Dubinko V.I.

*NSC Kharkov Institute of Physics and Technology, Kharkov 61108,
Ukraine*

*vdubinko@hotmail.com

Excitation of discrete breathers (DBs) [1] in solids may result in the amplification of the reaction rates in their vicinity. Two cases will be considered, which include *chemical* and *low energy nuclear reactions* (LENR). In the former case, the amplification mechanism is based on modification of the classical Kramers escape rate from a potential well due to a periodic modulation of the well depth (or the reaction barrier height), which is an archetype model for chemical reactions since 1940 [2]. In the second case, it is argued that coherency and persistence of large atomic oscillations in breathers may have drastic effect on quantum tunneling due to correlation effects discovered by Schrödinger [5] and Robertson [6] in 1930. These effects have been applied to the tunneling problem by Dodonov et al in 1980 and by Vysotskii et al in 2010 [7], who demonstrated a giant increase of sub-barrier transparency during the increase of correlation coefficient at special high-frequency periodic action on quantum system. Dubinko [8] has shown that DBs is the most efficient way to produce such an action due to *time-periodic modulation of the potential well width* (or the Coulomb barrier width) and hence to act as *breather nano-colliders* (BNC) triggering LENR.

Diatomic crystals, such as metal-hydrides, form at high gas/metal atom ratios in the H/D loading process under typical LENR conditions (E-cat, electrolysis, etc.). Due to the large mass difference between H/D and the metal atoms, there is a gap in phonon spectrum of metal-hydride crystals, in which so called ‘gap DBs’ arise in the H/D sub-lattice resulting in time-periodic modulation of spacing between adjacent H/D and metal atoms. What is more,

there is a striking site selectiveness of energy localization in the presence of spatial disorder arising at high H/D loading. As a sheer consequence of disorder, a non-zero energy gap for exciting a DB at a given site may disappear [9]. Such sites are expected to become the nuclear active sites, which opens new ways of engineering the nuclear active environment by preparing relevant cluster structures, in which creation of DBs is facilitated.

References

1. Flach S, Gorbach A.V. Phys. Rep. **467**, 1 (2008).
2. Dubinko, V. I., Selyshchev P. A., Archilla J. F. R., Phys. Rev. E 83, no. 4, 2011, doi: 10.1103/PhysRevE.83.041124.
3. Dubinko V. I., Dubinko A. V., Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Research, B **303**, 133 (2013).
4. Dubinko V. I., J. Cond. Mat. Nucl. Sci. **14**, (2014).
5. Schrödinger, E. Ber. Kgl. Akad. Wiss., Berlin, S. 296 (1930).
6. Robertson, H.P., Phys. Rev. **34**, 163 (1930).
7. Vysotskii V. I., Vysotsky M.V, Eur. Phys. J. A (2013) DOI 10.1140/epja/i2013-13099-2.
8. Dubinko V. I., Letters on Materials **5** (1), 97 (2015).
9. Dubinko V. I., Piazza F., Letters on Materials **4** (4), 273 (2014).

ATOMISTIC SIMULATIONS OF DISCRETE BREATHERS IN CRYSTALS AND THEIR INTERACTION WITH CRYSTAL DEFECTS

Dubinko V.I.^{1*}, Terentyev D.², Dubinko A.V.², Dmitriev S.V.³

¹ NSC Kharkov Institute of Physics and Technology, Kharkov 61108, Ukraine

² SCK•CEN, Nuclear Materials Science Institute, Belgium

³ Institute for Metals Superplasticity Problems RAS, Russia

*vdubinko@hotmail.com

Discrete breathers (DBs), a.k.a. intrinsic localized modes, are spatially localized large-amplitude vibrational modes in lattices that exhibit strong anharmonicity. They have been identified as the exact solutions to a number of model nonlinear systems possessing translational symmetry [1-5] and successfully observed experimentally in various physical systems [6]. In diatomic crystals with a large mass difference between atoms, there is a gap in phonon spectrum, in which so called ‘gap DBs’ arise in the light atom sublattice [7]. In metals, high frequency DBs can be excited [8]. The threshold DB energy in metals is relatively small (of order of 1 eV) as compared to the

formation energy of a stable Frenkel pair (several eV). Since DB in metals are highly mobile, they can efficiently transfer a concentrated vibrational energy over large distances along close-packed crystallographic directions [9], according to the MD simulations based on the realistic interatomic potentials derived from the embedded atom method. Interactions of DBs with structural defects have been argued to accelerate reaction rates involving the defect sites [10-12].

The interaction of discrete breathers with the primary lattice defects in transition metals such as vacancy, dislocation, and surface is analyzed on the example of bcc Fe and hcp Zr employing atomistic simulations. Scattering of discrete breathers on the lattice defects induces localized atomic excitations, with intensity and relaxation time depending on the defect structure and breather kinetic energy. The dissipation of the intrinsic breather energy due to the scattering is computed and analyzed. It is concluded that the breather-to-defect energy transfer may stipulate the activation of the lattice defects causing unexpected athermal effects such as enhanced mass transfer, irradiation creep or irradiation growth, already experimentally reported but so far not fully understood at the atomic-scale level.

References

1. *Kosevich A.M., Kovalev A.J.*, Sov. Phys. JETP **40**, 891 (1974).
2. *Dolgov A.S.*, Sov. Phys. Solid State **28**, 907 (1986).
3. *Sievers A.J., Takeno S.*, Phys. Rev. Lett. **61**, 970 (1988).
4. *MacKay R.S., Aubry S.*, Nonlinearity **7**, 1623 (1994).
5. *Flach S, Gorbach A.V.* Phys. Rep. **467**, 1 (2008).
6. *Manley M.E.*, Acta Mater. **58**, 2926 (2010).
7. *Khadeeva L.Z., Dmitriev S.V.*, Phys. Rev. B, **81**, 214306 (2010).
8. *Hizhnyakov A.V., Haas M., Pishchev A., Shelkan A., Klopov M.*, Nucl. Instrum. Meth. B, **303**, 91 (2013).
9. *D. Terentyev, A. Dubinko, V. Dubinko, S. Dmitriev, E. Zhurkin, M. Sorokin*, Interaction of discrete breathers with primary lattice defects in bcc Fe, to be published in Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.
10. *Dubinko, V. I., Selyshchev P. A., Archilla J. F. R.*, Phys. Rev. E 83, no. 4, 2011, doi: 10.1103/PhysRevE.83.041124.
11. *Dubinko V. I., Dubinko A. V.*, Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Research, B **303**, 133 (2013).
12. *Dubinko V. I., Piazza F.*, Letters on Materials **4** (4), 273 (2014).

EXISTENCE AND STABILITY OF INTRINSIC LOCALIZED MODES IN FPU- β CHAIN WITH FIXED BOUNDARY CONDITION EMBEDDED IN TWO DIMENSIONAL PLANE

Kimura M.^{1*}, Mitani A.¹, Doi Y.¹

¹*Department of Electric Engineering, Kyoto University, Japan*

*kimura.masayuki.8c@kyoto-u.ac.jp

Intrinsic localized mode (ILM), which is also called discrete breather (DB), is spatially localized and temporally periodic solution in nonlinear lattices. Many researches, which have been reported since the latter half of the 20th century, show evidences of the existence of ILM in real physical systems [1]. Recently, a possibility of application utilizing ILM/DB has been suggested in micro-mechanical cantilever array [2]. On the other hand, a method to create an extremely thin carbon wire, namely, a carbon atomic chain is proposed [3]. It enables us to expect nano-device using ILM/DB as a carrier of kinetic energy, which may be able to control the heat flow. However, many unclear problems remain when the result is extended to molecular/atomic dynamics. One of the problem is the dimension of space in which the atomic chain is located. Several researches related to this problem have been reported for a zig-sag ladder or a curved chain [4-6]. We investigate simpler model which is a straight Fermi-Pasta-Ulam (FPU) chain embedded in two-dimensional plane.

Existence and stability of ILM are investigated for FPU- β chain with fixed boundaries. When the chain is located in two dimensional plane (see Fig. 1), we have the equation of motion of each oscillator as follows:

$$m\ddot{\mathbf{r}}_n = \frac{\mathbf{d}_{n-1}}{\|\mathbf{d}_{n-1}\|} \{-\alpha(\|\mathbf{d}_{n-1}\| - \ell_0) - \beta(\|\mathbf{d}_{n-1}\| - \ell_0)^3\} \\ - \frac{\mathbf{d}_n}{\|\mathbf{d}_n\|} \{-\alpha(\|\mathbf{d}_n\| - \ell_0) - \beta(\|\mathbf{d}_n\| - \ell_0)^3\},$$

where \mathbf{d}_n is the distance vector between n^{th} and $(n+1)^{\text{th}}$ masses and defined as $\mathbf{d}_n = \boldsymbol{\ell}_n + \mathbf{r}_{n+1} - \mathbf{r}_n$. $\boldsymbol{\ell}_n = (\ell_0, 0) + (\ell_1, 0)$ denotes the initial position of n^{th} mass, where ℓ_0 and ℓ_1 represent the natural length and the initial stretch.

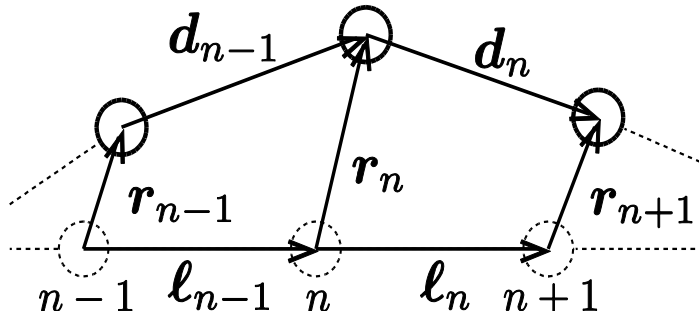
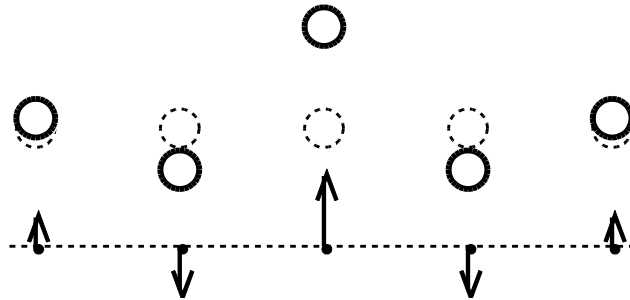


Fig. 1. FPU chain located in two dimensional plane.

By using Newton-Raphson method, two types of ILM are found. One of them is longitudinal ILM that each mass moves along the axis of the chain. Fig. 2 (a) shows the motion of each mass. The other is transversal ILM. As shown in Fig. 2 (b), each mass vibrates transversally to the axis. Stability of these ILMs is also investigated numerically. As a result, it is revealed that a longitudinal ILM centered between sites becomes linearly unstable whereas the corresponding ILM in the traditional FPU- β chain is not linearly unstable if $m = 1, \alpha = 1, \beta > 0$. It implies that the dimension of space in which nonlinear lattices are located affects the stability of ILM.



(a) Longitudinal ILM



(b) Transversal ILM

Fig. 2. Two types of ILM

In presentation, we will also discuss bifurcations of these ILMs and relations between dispersion relations and periods of ILMs.

References

1. *Flach S., Gorbach A.V.*, Phys. Rep. **467**, 1-116 (2008).
2. *Kimura M., Hikihara T.*, Chaos **19**, 013138 (2009).
3. *Jin C., Lan H., Peng L., Suenaga K., Iijima S.*, Phys. Rev. Lett. **102**, 205501(2009).
4. *Zolotaryuk A.V., Christiansen P.L., Savin A.V.*, Phys. Rev. E **54**, 3881 (1996).
5. *Ibañes M., Sancho J. M., Tsironis G. P.*, Phys. Rev. E **65**, 041902 (2002).
6. *Kastner M., Lázaro J.T.*, Proceedings of the third conference: Localization & Energy Transfer in Nonlinear Systems, 333-338 (2003).

VELOCITY STEP FOR A DRIVEN INTRINSIC LOCALIZED MODE

Sato M.^{1*}, Shige S.¹, Ishikawa T.¹, Nakaguchi N.¹, Soga Y.¹, Sievers A.J.²

¹*Graduate School of Natural Science and Technology, Kanazawa University (Kanazawa, Ishikawa 920-1192, Japan)*

²*Laboratory of Atomic and Solid State Physics, Cornell University (Ithaca, NY 14853-2501, USA)*

*msato153@staff.kanazawa-u.ac.jp

Energy localization due to nonlinearity and discreteness has been observed in various periodic systems and is called an intrinsic localized modes (ILM) or a discrete breather (DB). [1, 2] A traveling ILM as well as a stationary ILM can be observed in a micro-cantilever array by steady state driving to compensate for energy loss. [3, 4] Typically an ILM loses energy by radiating acoustic waves when it travels without the driver. Here we focus on simulations that make use of the driven-damped condition. In this way we can produce a running ILM in our simulations for a fixed wavenumber and then identify the normal mode frequency for that value. Next the driver frequency is slowly increased, which automatically increases the ILM amplitude: the larger the frequency difference for fixed wavenumber and the narrower it is in real space. The end result is a steady state traveling ILM centered at a fixed wavenumber. Here we report on velocity steps observed for traveling ILMs in a mono-element lattice with onsite and inter-site harmonic interactions, and only a onsite-nonlinearity, i.e., the Klein-Gordon model.

The parameter sets used are similar to those described in Refs. 4 and 5 for a lattice with hard nonlinearity. Here we focus on a lattice with $N=50$ elements. (Similar results have been obtained for $N=400$ and 800 .) The linear normal mode dispersion curve, represented by 50 crosses, is shown in Fig. 1(a). By strongly exciting a normal mode centered at the up-arrow in Fig. 1(a), the traveling ILM, expressed by the solid line tangent to the dispersion curve, is generated. The down arrow identifies a normal mode that will interact with a strongly localized traveling ILM.

Figure 1(b) shows the resulting ILM velocity as a function of the driver frequency. The velocity distribution is represented with a gray scale. The gray region below 116.2 kHz describes a chaotic traveling mode, which has a wide distribution in velocity. The black thin line structure, generated from 116.2 kHz to 117.2 kHz, identifies the regular, smoothly traveling ILM velocity as the driver frequency and hence the ILM amplitude increases and its linewidth decreases. The velocity is observed to decrease with frequency till 116.8kHz where a significant step occurs. We suspect that this step is caused by the increase in coupling between the ILM and the plane wave mode due to the

narrowing of the ILM. The new velocity track for higher frequencies follows the dashed line in Fig. 1(b) represented by

$$v = \frac{\Omega - \omega_n}{k_c - k_n} \quad (1)$$

where Ω and k_c are the frequency and wavenumber of the driver, and ω_n and k_n are the frequency and wave vector of the normal mode interacting with the traveling ILM. The resulting trace is similar to the tangent line shown in Fig. 1(a).

Figure 1(b) indicates that above the step the ILM velocity is governed by the interaction between the traveling mode and a normal mode near the bottom of the plane wave dispersion curve due to the decrease in width of the ILM with its increasing amplitude for fixed wavenumber. We conclude that the interaction causes not only generation of acoustic radiation, but also changes the group velocity, a fundamental property of the traveling ILM.

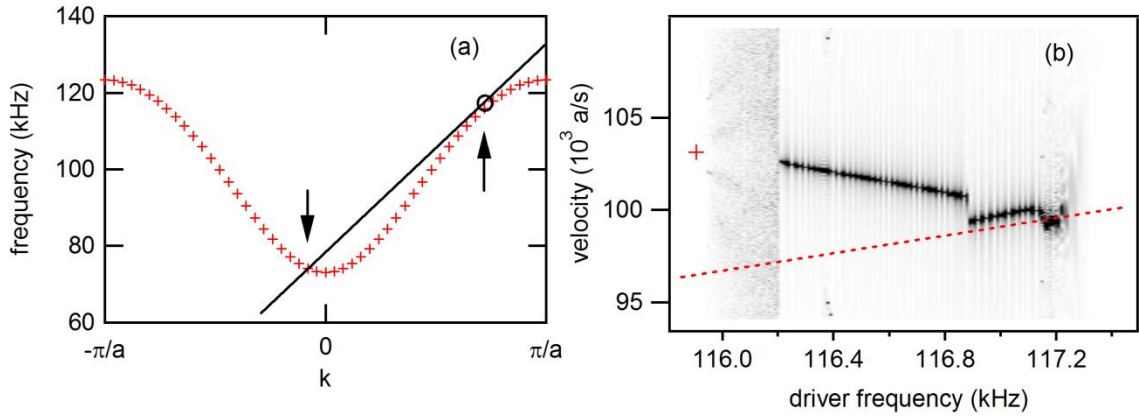


Fig. 1(a). Dispersion curve (crosses) and a traveling ILM (solid line). Up arrow indicates a normal mode that is pumped with a propagating wave driver to generate the traveling ILM, with velocity tangent to the dispersion curve. (b) Velocity of the traveling ILM as a function of the driver frequency. Cross indicates the normal mode frequency. Black thin line structure indicates the regular smooth traveling ILM. The step is due to an increase in coupling between the ILM and the plane wave mode.

References

1. *A. J. Sievers and S. Takeno*, Physical Review Letters **61**, 970 (1988)
2. *D. K. Campbell, S. Flach, and Y. S. Kivshar*, Physics Today **57**, 43 (2004).
3. *S. Flach and A. V. Gorbach*, Physics Reports **467**, 1 (2008).
4. *M. Sato and A. J. Sievers*, Physical Review Letters **98**, 214101 (2007).
5. *M. Sato, N. Fujita, Y. Takao, S. Nishimura, W. Shi, Y. Sada, Y. Soga, and A. J. Sievers*, NOLTA, IEICE **3**, 87 (2012).

ELASTIC MODULI OF NANOCRYSTALLINE BINARY AL ALLOYS WITH GRAIN BOUNDARY SEGREGATIONS

Babicheva R.I.^{1*}, Zhang Y.², Kok S.W.², Zhou K.¹

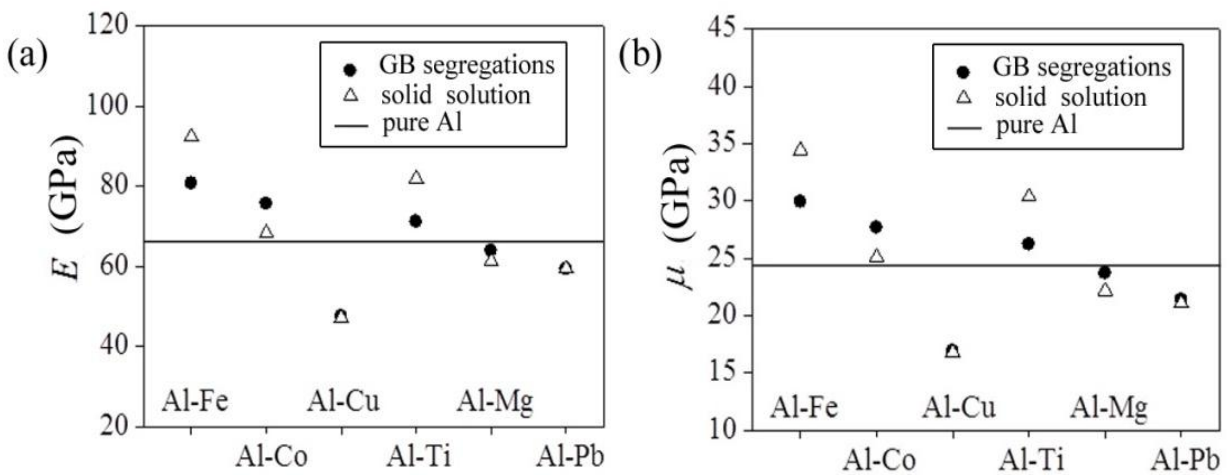
¹*School of Mechanical and Aerospace Engineering, Nanyang Technological University, 50 Nanyang Avenue, Singapore 639798, Singapore*

²*Singapore Institute of Manufacturing Technology, 71 Nanyang Drive, Singapore 638075, Singapore*

*ri.babicheva@gmail.com

The work studies elastic moduli of nanocrystalline (NC) Al and binary Al-X alloys (X is Fe, Co, Cu, Ti, Mg or Pb) by using molecular dynamics simulations. X atoms in the alloys are distributed either via grain boundary (GB) segregations or randomly. At 0 K, the rigidity of the alloys increases with decrease in atomic radii of the alloying elements, except for Cu (see Fig.1). An addition of Fe, Co or Ti to the NC Al leads to increase in the Young's E and shear μ moduli, while an alloying with Pb and Cu decreases them. The elastic moduli of the alloys depend on a distribution of the alloying elements. The alloys with the random distribution of Fe and Ti demonstrate larger E and μ than those for the corresponding alloys with the GB segregations, while the rigidity of the Al-Co alloy is higher for the case of the GB segregations.

Furthermore, a thermal stability of μ for the Al-X alloys is analyzed. It is observed that only the Al-Co alloy with the GB segregations shows the increased thermal stability of μ in comparison with the pure NC Al.



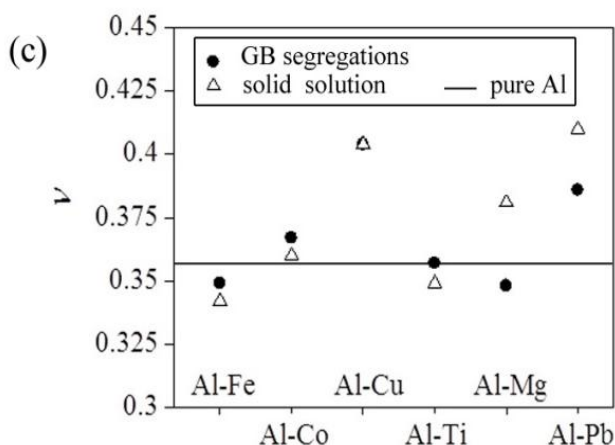


Fig. 1. Nanocrystalline Al alloys with GB segregations of the alloying elements and their random distribution (solid solutions) at 0 K: (a) the Young's modulus E , (b) the shear modulus μ and (c) the Poisson's ratio ν . The alloys are ordered by increasing the atomic radii of their alloying elements.

СИСТЕМЫ ЩЕЛЕВЫХ ДИСКРЕТНЫХ БРИЗЕРОВ В ГРАФАНЕ

Баимова Ю.А.* , Дмитриев С.В.

Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа, Россия

*julia.a.baimova@gmail.com

Графен, представляющий собой один слой атомов углерода, уложенных в гексагональную решетку, обладает экстремально большой площадью поверхности и в комбинации с легким весом, прочностью, химической нейтральностью и привлекательными физико-химическими свойствами входит в число материалов, наиболее подходящих для хранения и транспортировки водорода. Максимальная гравиметрическая плотность может быть получена для графена со степенью химической абсорбции водорода 8,3%, что соответствует формированию полностью насыщенного листа графена со стехиометрией 1:1 для С:Н, который получил название графан. В такой структуре атомы водорода присоединяются к каждому атому углерода сверху и снизу листа графена поочередно. Интересно, что присоединение водорода вызывает выход атомов С из плоскости и, соответственно, коробление листа графена.

Для практического применения водорода в качестве топлива необходимо решить одну ключевую проблему, относящуюся к реализации механизмов присоединения/отделения водорода, работающих при условиях, близких к нормальным, без применения экстремальных температур или давлений. Процесс химической адсорбции достаточно прост, по крайней мере, для атомарного водорода, но процесс удаления водорода требует преодоления энергетического барьера порядка 1 эВ. Ранее было показано, что графен при низких температурах может присоединять водород, а при повышенных температурах водород

освобождается. Однако атомные механизмы наводороживания и разводороживания графена остаются слабо изученными. Исследование нелинейной динамики атомов в наводороженном графене является важной задачей не только для решения вопросов хранения и транспортировки водорода, но и для применения графана в электронике, спинтронике и т.д.

Атом водорода в 12 раз легче атома углерода. Такая большая разница атомных масс элементов, составляющих графан, обеспечивает наличие широкой щели в фоновом спектре графана. Наличие такой щели, в свою очередь, является необходимым условием существования щелевых дискретных бризеров или нелинейных, пространственно локализованных колебательных мод. Дискретные бризеры (ДБ) являются объектом пристального внимания ученых на протяжении последних двух десятилетий и исследуются как теоретически, так и экспериментально в различных материалах, в том числе в графене и графене [1,2]. Еще большую энергию могут локализовать кластеры ДБ, поэтому изучение таких объектов является интересной и актуальной задачей.

В данной работе методом молекулярной динамики исследованы системы ДБ, состоящие из двух, трех и более ДБ, в которых в зависимости от условий происходит или не происходит обмен энергией.

Литература

1. *Vaimova J.A., Dmitriev S.V., Zhou K. EPL* **100**, 36005 (2012).
2. *Liu B., Vaimova J.A., Dmitriev S.V., Wang X., Zhu H., Zhou K. J. Phys. D* **46**, 305302 (2013).

ДИНАМИКА ДИСКРЕТНЫХ БРИЗЕРОВ В ТЕОРЕТИЧЕСКИХ МОДЕЛЯХ НИЗКОРАЗМЕРНЫХ АНГАРМОНИЧЕСКИХ КРИСТАЛЛОВ

Лаптев Д.В.* , Богдан М.М.

*Физико-технический институт низких температур им. Б.И. Веркина
НАН Украины, Харьков, Украина*

*laptev.denis@mail.ru

Работа посвящена теоретическому исследованию динамики и взаимодействия дискретных бризеров в рамках полностью интегрируемого уравнения нелинейной решётки Хироты [1,2], моделирующей одномерный ангармонический кристалл, и эквивалентной ей нелинейной линии передачи. В работе показано, что эти высокочастотные локализованные в пространстве нелинейные возбуждения решеточных систем упруго

взаимодействуют между собой и с другими возбуждениями – ударными и линейными волнами. Для уравнения решётки Хироты получена формула нелинейной суперпозиции, связывающая четыре различные солитонные решения. С ее помощью найдены в явном виде решения, количественно описывающие парные столкновения дискретных солитонов между собой, а также с линейными волнами. В результате точно описаны парные процессы взаимодействия дискретных бризеров и ударных волн, и найдены сдвиги их центров масс и фаз осцилляций бризеров. Получены предельные выражения, описывающие процессы и данные рассеяния линейных волн на таких дискретных солитонах и найден явный вид связанного состояния бризера и ударной волны – осциллирующего кинка.

Выведены уравнения Гамильтона для дискретных кинков и бризеров, которые рассматриваются как частицеподобные возбуждения нелинейной решётки Хироты. Найдены в явном виде выражения для аналога полевого импульса и адиабатического инварианта дискретного бризера в такой решётке. Получены квазиклассический спектр энергии для движущегося дискретного бризера и энергетический спектр дискретных ударных волн.

Рассмотрены длинноволновый и коротковолновый пределы колебаний в нелинейной решётке Хироты. Показано, что в длинноволновом и малоамплитудном пределе колебания описываются полностью интегрируемым модифицированным уравнением Кортевега де-Фриза, для солитонов и бризеров которого получены уравнения Гамильтона и квазиклассические спектры энергии. В пределе сильной локализации динамика дискретного бризера подобна колебанию одного осциллятора Хироты в поле неподвижных соседей. Найден энергетический спектр такой модели и установлена ее функциональная связь с осциллятором Дюффинга.

Получены точные нелинейные периодические решения, которые описывают бризерные и солитонные сверхрешетки в электрической линии передачи и решётке Хироты и численно установлены пределы их стабильности. В терминах эллиптических функций Якоби найден аналог дискретного бризера для системы конечных размеров и показано, что такое колебание бифуркационным образом отщепляется от ветви нелинейных однородных противофазных колебаний.

Предложены обобщения одномерной цепочки идентичных атомов: модель двухтомной ангармонической цепочки, модель двумерной решётки Хироты. Также было проанализировано влияние на динамику нелинейных возбуждений таких физически важных факторов как внешняя накачка и диссипация.

Литература

1. *Hirota R.*, J. Phys. Soc. Jpn. **33**, 1459 (1972).
2. *Bogdan M.M., Laptev D.V.*, J. Phys. Soc. Jpn. **83**, 064007 (2014).

SIMULATION OF VORTEX CORES SWITCHING IN NANOCOLUMNAR CONDUCTING TRIPLEX STRUCTURE

Ekomasov A.E.^{1*}, Stepanov S.V.¹, Ekomasov E.G.¹

¹ *Bashkir State University, 450076, Ufa, Russia*

*ekomasovae@gmail.com

One of the actual physical issues is the development of a new generation of high-speed and ergonomic electronic devices. The phenomenon of the magnetization oscillations switching and excitation in magnetic nanostructures, using the spin-polarized current of high enough density [1], will increase the speed of the hard disks and magnetic memory devices up to terahertz level. Magnetization oscillations frequency, excited using spin transfer torque, in magnetic nanostructures can be reconfigured by application of external magnetic fields and currents and used for the development of advanced radio applications. Currently great interest represents a spin-transfer nanogenerator (STNG) microwave, which significantly differs in its power output, small width and relatively large frequencies range, even without the application of external magnetic field. Most of these structures have two magnetic layers separated by a nonmagnetic interlayer.

In this paper we study the STNG, consisting of three layers (permalloy (Py) 4 nm/Cu - 10 nm/Py – 15 nm) of circular section and different diameters. The magnetizations of both magnetic layers are in the vortex state. The reference case is when two magnetic layers interact through the demagnetization fields and spin-polarized current and, thus, the system is in an external magnetic field, perpendicular to the layers plane. With the help of a software package SpinPM we conducted a numerical simulation of a bound vortex dynamics. Such dynamics various modes (damped bound oscillations of the vortex cores and their stationary dynamics) were investigated. The processes of magnetic vortexes dynamic transformation (vortex core polarity switching) are studied for currents various in size and polarization. The simulation showed that both the dynamic [3] and static [4] switching scenario are observed under various fields/currents. The switching time for the static scenario may be less than 1 ns and it can be an order of magnitude bigger for a dynamic scenario. Also a comparison of the known experimental [3,5] and numerical results was conducted.

References

1. A.K. Zvezdin, K. A. Zvezdin, A.V. Khvalkovskiy, *Physics-Uspekhi*, **178**, 4 (2008) 436-442.
2. N. Locatelli et al., *Appl. Phys. Lett.* **98** (2011) 062501.

3. A. V. Khvalkovskiy, A. N. Slavin, J. Grollier, et al., *Appl. Phys.Lett.*, **96** (2010) 022504.
4. A. Thiaville, J. M. Garcia, R. Dittrich, et al., *Phys. Rev. B* **67** (2003) 094410.
5. N. Locatelli et al., *Appl. Phys. Lett.* **102** (2013) 062401.

RESONANT DYNAMICS OF THE DOMAIN WALLS IN MULTILAYER FERROMAGNETIC STRUCTURE

**Ekomasov E.G.* , Gumerov A.M., Kudryavtsev R.V., Murtazin R.R.,
Abakumova N.N.**

Bashkir State University, Ufa, Russia

*ekomasoveg@gmail.com

Multilayer magnetic structures have been widely studied recently in connection with the opportunity of their practical application [1]. Frequently, these are periodically alternating layers of two materials with different physical properties. The dynamics of spin waves and magnetic inhomogeneities that are extended in such systems in directions perpendicular to the layer interfaces are studied intensely at present. Note that, frequently, the study of one-dimensional models makes it possible to understand the influence of various magnetic parameters. It has been shown [2-4] that the presence of a thin layer with the magnetic anisotropy parameters, smaller than those in the adjacent layers, can lead to new dynamic effects, e.g., the appearance of a nucleus of a new magnetic phase or the reflection of a moving domain wall (DW) from the attracting potential. In this work, we have studied the effect of spatial modulation of the parameters of magnetic anisotropy and exchange on the nonlinear resonant dynamics of DWs in a three- and five-layered ferromagnetic with allowance for the opportunity of the excitation of localized magnetic inhomogeneities, internal modes of DW oscillations, and the emission of bulk spin waves.

Using as an example two identical thin layers in a five-layered ferromagnetic we showed that the collective effects of the layers influence on the DW dynamics are largely connected with the resonant energy exchange between the localized waves. The presence of a critical distance is discovered between the thin layers separating the two regions with qualitatively different system behavior. The possibility of the existence of a settings range, in which to pass through both layers of a DW requires significantly less energy, is proved. We demonstrated that damping and external force counteract the onset of the DW resonant reflection from the attracting thin layer, but its initiating cause – resonant energy exchange between the localized waves still takes place. For the

experimental observation of the reflections and DW quazitunneling resonance effects in real physical experiments, we suggested a method of measuring the amplitude of the DW center oscillations, and the use of physical systems with sufficiently weak damping.

References

1. A. Hubert and R. Schafer, Magnetic domains (Springer Berlin Heidelberg NewYork, 2009).
2. E.G. Ekomasov, R.R. Murtazin, O.B. Bogomazova, A.M. Gumerov, *J. Magn. Magn. Mater.* **339**, 133-137 (2013).
3. E.G. Ekomasov, R.R. Murtazin and V.N. Nazarov, *Phys. Met. Metallogr.* **115**, 117-133 (2014).
4. Gumerov A.M., Ekomasov E.G., Zakir'yanov F.K., Kudryavtsev R.V., *Computational Mathematics and Mathematical Physics.* **54**, 491-504 (2014).

ВЛИЯНИЕ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ НА ПОВЕДЕНИЕ ДИСКРЕТНОГО БРИЗЕРА В КРИСТАЛЛЕ Pt_3Al

Ерёмин А.М.^{1*}, Захаров П.В.^{1,2}, Старостенков М.Д.²

¹Алтайская государственная академия образования им. В.М. Шукишина, Бийск, Россия

²Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова, Барнаул, Россия

*eam77@yandex.ru

Дискретные бризеры (ДБ) – это пространственно локализованная колебательная мода большой амплитуды в бездефектной нелинейной решетке [1]. Роль ДБ в формировании физических свойств кристаллов все еще остается достаточно слабо изученной, но, тем не менее, концепция ДБ все шире привлекается для объяснения различных экспериментальных наблюдаемых эффектов. В свою очередь, в реальных кристаллах следует говорить о квази-бризерах, имеющих конечное время жизни и нестрогую периодичность колебаний во времени [2].

В данной работе методом молекулярной динамики изучается влияние точечных дефектов на поведение нелинейной локализованной моды – ДБ в кристалле Pt_3Al . В качестве точечных дефектов выступали вакансии, бивакансии, тривакансии Pt в кристалле Pt_3Al , а также рассматривались межузельные атомы Al, помещенные в тетраэдрические и октаэдрические пустоты [3-4].

Рассматриваемая модель представляла собой объемный кристалл стехиометрии A_3B , атомы которого взаимодействовали посредством парного потенциала Морзе:

$$U_{PQ}(r_{ij}) = D_{PQ} \beta_{PQ} \exp(-\alpha_{PQ} r_{ij}) (\beta_{PQ} \exp(-\alpha_{PQ} r_{ij}) - 2), \quad (1)$$

где D – энергетический параметр, соответствующий глубине потенциальной ямы, α – параметр, определяющий жесткость межатомных связей, r_0 – некоторое усредненное равновесное расстояние по координационным сферам, в которых учитывается взаимодействие между атомами. Для сплава Pt_3Al его параметры взяты из [5]: $D_{AlAl} = 0.318$, $\beta_{AlAl} = 27.4979$, $\alpha_{AlAl} = 1.02658$, $D_{PtPt} = 0.710$, $\beta_{PtPt} = 102.89$, $\alpha_{PtPt} = 1.582$, $D_{PtAl} = 0.5048$, $\beta_{PtAl} = 63.124$, $\alpha_{PtAl} = 1.3501$, вычислялись по стандартной методике [6] из условий:

$$\frac{1}{2} \sum_{i=1}^z \eta_i U_{V=V_0} = E_s, \quad \frac{1}{2} \sum_{i=1}^z \eta_i \left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_{V=V_0} = 0, \quad -V_0 \cdot \left(\frac{\partial P_s}{\partial V} \right) = K_0. \quad (2)$$

Здесь E_s – энергия сублимации атомов кристалла при нуле Кельвин K_0 – объемный модуль упругости. Величина межатомного расстояния $a_0 = 2.83$. Массы атомов платины и алюминия: $m_{Pt} = 195.23$, $m_{Al} = 26.97$ а.е.м.; постоянная кристаллической решетки: $a_0 = 3.99 \text{ \AA}$.

Выявлены зависимости времени жизни нелинейной локализованной моды от начальной температуры модельного кристалла, от начального отклонения атома Al от положения равновесия, а также от расстояния до точечного дефекта в плоскости (111) кристалла. Так же получены зависимости времени жизни ДБ по различным направлениям кристалла с тетраэдрической и октоэдрической пустотой с внедрённым атомом Al. Проведено исследование на устойчивость ДБ в данном модельном кристалле, а конкретно получена зависимость времени жизни нелинейной локализованной моды от малых вариаций угла отклонения от направления поляризации колебаний моды. На рис. 1 для примера показана зависимость времени жизни ДБ от малых вариаций угла отклонения от направления поляризации колебаний ДБ в кристалле Pt_3Al с бивакансией Pt.

Точечные дефекты оказывают существенное влияние на нелинейные локализованные моды в случае близкого к ним расположения. Воздействие проявляется в разрушении высокоамплитудных локализованных колебаний с последующим рассеиванием энергии по кристаллу. Однако стоит отметить, что в процессе деградации колебаний большой амплитуды, рассеивание преимущественно происходит в подрешетку Al, где энергия остается локализованной за счет наличия запрещенной зоны в фононном спектре кристалла Pt_3Al в течение продолжительного времени. Установлено наличие области повышенной устойчивости ДБ вблизи вакансии, бивакансии и тривакансии.

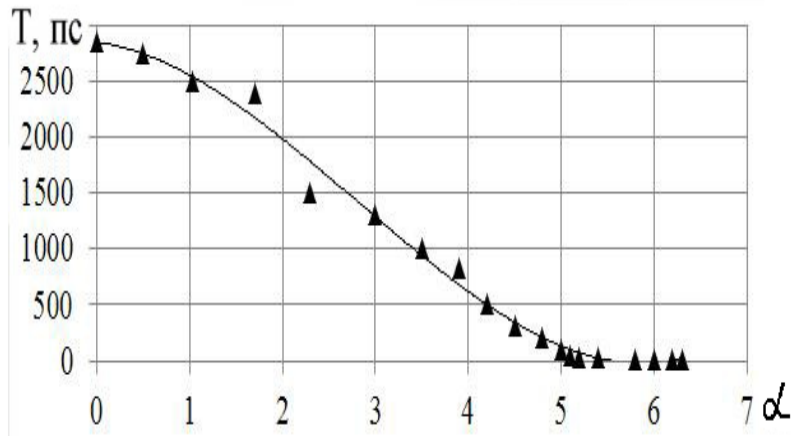


Рис. 1. Зависимость времени жизни T в пикосекундах дискретного бризера от малых вариаций угла отклонения α в градусах от направления поляризации колебаний дискретного бризера.

В рамках исследования устойчивости ДБ получена зависимость времени жизни ДБ от угла отклонения от направления поляризации колебаний. Данная зависимость является важной с точки зрения оценки вероятности возбуждения ДБ в условиях термодинамического равновесия или при облучении кристалла высокоэнергетическими частицами.

Литература

1. *Sievers A.J., Takeno S.* Phys. Rev. Lett. – 1988. 61, 970.
2. *Chechin G.M., Dzhelauhova G.S., Mehonoshina E.A.* Phys. Rev. – 2006 .E. 74, 036608.
3. *Захаров П.В., Старостенков М.Д., Ерёмин А.М., Маркидонов А.В.* Поведение нелинейной локализованной моды вблизи комплексов вакансий в кристалле Pt_3Al // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2014. – Т. 11, № 2. – С. 260-264.
4. *Захаров П.В., Ерёмин А.М., Старостенков М.Д., Маркидонов А.В.* Влияние бивакансии Pt в кристалле Pt_3Al на нелинейную локализованную моду большой амплитуды // Университетский комплекс как региональный центр образования, науки и культуры: Материалы Всероссийской научно-методической конференции (с международным участием), Оренбургский гос. ун-т. – Оренбург: ООО ИПК «Университет», 2015. - С. 1055 – 1061.
5. *Kiselev S.A., Sievers A.J.* Phys. Rev. – 1997. B 55. 5755.
6. *Medvedev N.N., Starostenkov M.D. and Manley M.E.* Energy Localization on the sublattice of Pt_3Al with L_{12} order // Journal of Applied Physics. 2013. V.114. P. 213506(4).

МОДЕЛИРОВАНИЕ ГЕНЕРАЦИИ ДИСКРЕТНЫХ БРИЗЕРОВ В КРИСТАЛЛЕ Pt₃Al ПРИ ИМПУЛЬСЕ ТОКА

Захаров П.В.^{1,2*}, Дмитриев С.В.³, Старостенков М.Д.²

¹ Алтайская государственная академия образования имени В.М. Шукшина, Бийск, Россия

² Алтайский государственный технический университет имени И.И. Ползунова, Барнаул, Россия

³ Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, г. Уфа, Россия

*zakharovpvl@rambler.ru

Интенсивные внешние воздействия на кристаллы приводят к значительным отклонениям атомов от решеточных положений, активизируя различные процессы, изучение которых невозможно в рамках линеаризованных уравнений движения. В последнее время значительное внимание уделяется изучению относительно нового нелинейного объекта, называемого дискретным бризером (ДБ), который в идеале представляет собой локализованное в пространстве незатухающее колебание большой амплитуды в бездефектной нелинейной дискретной системе [1,2]. Однако в реальных кристаллах следует говорить о квази-бризерах, имеющих конечное время жизни и нестрогую периодичность колебаний во времени [3]. Исследуемые в данной работе квази-бризеры будут называться ДБ для краткости.

В последнее время растет число исследований, где предлагаются различные гипотезы об участии ДБ в различных процессах в твердых телах. Согласно данным работам, ДБ могут повышать каталитические свойства наночастиц с неупорядоченной структурой, приводить к радиационно-стимулированному росту пор в металлах, вносить вклад в диффузию, транспортировать электрический заряд, приводить к отжигу дефектов в германии, снижать энергетический барьер химических реакций в кристаллических твердых телах и т.д.

В свою очередь, механизмы возбуждения ДБ остаются не ясными. В данной работе методом молекулярной динамики исследуется возможность возбуждения дискретных бризеров в модельном кристалле состава A₃B при протекании по нему электрического тока, атомы которого взаимодействовали посредством парного потенциала Морзе

$$\phi_{PQ}(r_{ij}) = D_{PQ} \beta_{PQ} \exp(-\alpha_{PQ} r_{ij}) (\beta_{PQ} \exp(-\alpha_{PQ} r_{ij}) - 2), \quad (1)$$

где D – энергия связи, соответствующая глубине потенциальной ямы, α – параметр, определяющий жесткость межатомных связей, r определяет равновесное межатомное расстояние. Для сплава Pt₃Al параметры потенциала следующие [4]: $D_{AlAl} = 0.318$ eV, $\beta_{AlAl} = 27.4979$,

$$\alpha_{AlAl} = 1.02658 \text{ \AA}^{-1}, D_{PtPt} = 0.710 \text{ eV}, \beta_{PtPt} = 102.89, \alpha_{PtPt} = 1.582 \text{ \AA}^{-1}, \\ D_{PtAl} = 0.5048 \text{ eV}, \beta_{PtAl} = 63.124, \alpha_{PtAl} = 1.3501 \text{ \AA}^{-1}.$$

Посредством компьютерного эксперимента установлено, что в зависимости от энергии движения электронов возможно два способа генерации ДБ. В первом случае, когда энергия электрона при столкновении с легким атомом подрешетки велика и составляет несколько электрон-вольт, то ДБ может возникнуть благодаря одному такому столкновению. Во втором случае, когда энергия электрона составляет несколько десятых долей электрон-вольт возможен механизм накачки легкой подрешетки сплава энергией, что так же приводит к возбуждению дискретных бризеров.

Литература

1. *Dolgov A.S.*, Sov. Phys. Solid State **28**, P. 907 (1986).
2. *Sievers A.J., Takeno S.* Phys. Rev. Lett. **61**, 8, 970-973 (1988)
3. *Chechin G.M., Dzhelauhova G.S., Mehonoshina E.A.* Phys. Rev. E74. P.036608 (2006)
4. *Medvedev N.N., Starostenkov M.D., Potekaev A.I., Zakharov P.V., Markidonov A.V., Eremin A.M.* Russian Physics Journal V. **57**. 3. P. 387-395 (2014)
5. *Medvedev N.N., Starostenkov M.D., Zakharov P.V., Pozidaeva O.V.* Technical Physics Letters. **37**. 2. C. 98-101 (2011)

THE MD SIMULATION OF TUNGSTEN HARDENING CAUSED BY NEUTRON IRRADIATION

Zinovyev A. *, Terentyev D.

SCK•CEN, Nuclear Materials Science Institute, Mol, Belgium

*zinovyev.alex.v@gmail.com

Defects in materials, their interaction and influence on physical properties are actively investigated [1, 2]. They hinder the dislocation movement, which results in hardening and embrittlement. The presence of defects, such as dislocations and dislocation loops, in materials is an inevitable result of plastic deformation or irradiation. On the stress-strain curves we can see that as the absorbed dose is increasing, the flow stress rises and the ductility diminishes (Fig.1).

To analyze atomic-scale dislocation-obstacle interactions, a method has been proposed in [3], which allows critical stress and activation energy of unpinning to be extracted from molecular dynamics (MD) data. In the present work we have simulated the interaction between a $\frac{1}{2}[111]$ edge dislocation and a $\frac{1}{2}[\bar{1}\bar{1}1]$ dislocation loop in a monocrystal of tungsten approximately 55x23x11 nm in size. We inserted dislocation loops 3.6, 5.0, 6.4, 7.6 nm in diameter so that they would intersect the glide plane and applied the shear strain (Fig.2). MD simulations were carried out for temperatures chosen from the range 600–1400K and applied strain rate from the range 10^7 – 10^8 s⁻¹. Then we calculated activation energy of unpinning and the critical stress, which could be used in dislocation dynamics simulations for further investigations.

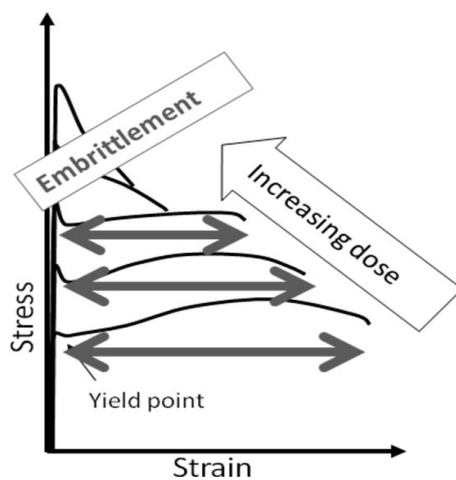


Figure 1. Stress-strain curves of materials, exposed to different doses of irradiation.

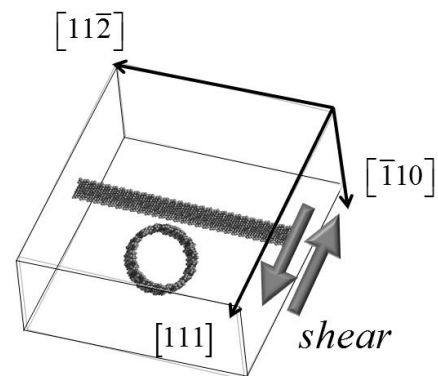


Figure 2. The computational cell used in the present work. Dislocations only are shown.

References

1. Koneva N.A., Trishkina L.I., Kozlov E.V. BPMS 11, No. 1 (2014).
2. Babicheva R.I., Starostenkov M.D., Zhou K. Letters on Materials 4, No. 4 (2014).
3. Monnet G., Osetsky Yu.N., Bacon D.J. Phil. Mag. 90 (2010).

A MOLECULAR DYNAMICS STUDY OF [111]-POLARIZED GAP DISCRETE BREATHERS IN A CRYSTAL WITH NaCl-TYPE STRUCTURE

Kistanov A.A.* , Baimova Yu.A., Zhou K.

Nanyang Technological University, 639798, Singapore

*andrei.kistanov.ufa@gmail.com

Spatially localized vibrational modes of large amplitudes in a defect-free crystal lattice are called discrete breathers (DBs) [1, 2]. The existence of DBs is ensured by the anharmonicity of interatomic forces, which leads to the dependence of the frequency of atomic oscillations on their amplitude. This intrinsic mode frequency decreases or increases with growing amplitude in the case of soft and hard nonlinearities, respectively. Then, for a soft nonlinearity, the mode frequency that decreases with increasing amplitude can enter the gap (if it exists) in the phonon spectrum. For a hard non-linearity, the mode frequency can increase until occurring above the phonon spectrum. In both cases, the oscillatory mode (i.e., DB) at zero temperature ceases to radiate energy in the form of small amplitude oscillations and, theoretically, can exist for an infinitely long period of time [1].

In the present work by using the method of molecular dynamics simulations, we have obtained and studied [111]-polarized local oscillation modes in NaCl-type crystals of DB excitation. It was show, that a gap discrete breather (DB) polarized along the [111] direction can be excited in a crystal with NaCl type structure and significantly different masses of anions and cations (see Fig. 1). The DB exists in both a non-deformed crystal and one subjected to significant uniaxial or biaxial elastic deformation.

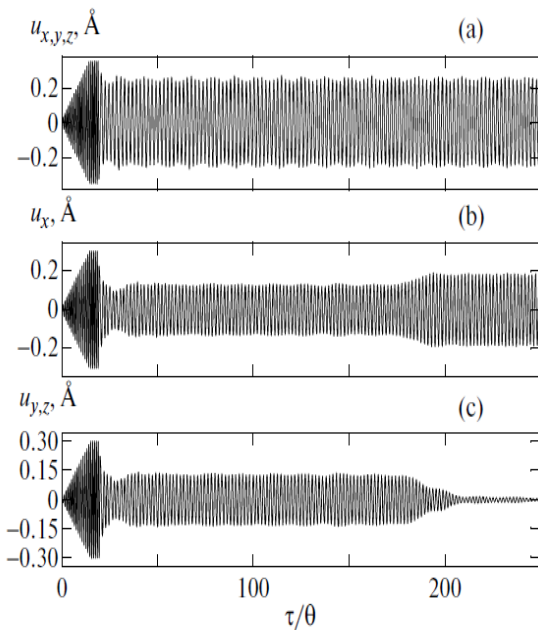


Fig. 1. Components of motion of an atom oscillating with large amplitude as functions of dimensionless time: (a) $u_{x,y,z}$ components for a stable DB with [111] polarization; (b, c) u_x and $u_{y, z}$ components, respectively, for an unstable DB with initial [111] polarization, which converted as a result of instability into a [100]-polarized DB.

Пумепамыпа

1. *Flach S., Gorbach A. V. Phys. Rep. 467, 1 (2008).*
2. *Manley M. E. Acta Mater. 58, 2926 (2010).*

SYNCHRONIZATION OF ATOMS OSCILLATIONS FOR DISCRETE QUASIBREATHERS IN GRAPHANE FROM *AB INITIO* SIMULATIONS

Chechin G.M.¹, Dmitriev S.V.^{2,3}, Lobzenko I.P.^{4*}

¹*Research Institute of Physics, Southern Federal University, 194 Stachki Av, Rostov-on-Don 344090, Russia*

²*Institute for Metals Superplasticity Problems of RAS, 39 Khalturin St, Ufa 450001, Russia*

³*National Research Tomsk State University, 36 Lenin Prospekt, Tomsk 634050, Russia*

⁴*Institute of Molecule and Crystal Physics Ufa Research Center of Russian Academy of Sciences, 151 Oktyabrya Av, Ufa 450075, Russia*

*ivanlobzenko@gmail.com

A density functional theory (DFT) study of the discrete breathers (DBs) in graphane (fully hydrogenated graphene) was performed. In contrast to the molecular dynamic method that is common for breathers investigation, DFT takes into account the deformation of atoms electron shells in the process of breather oscillations. It is found that the DB is a robust, highly localized vibrational mode with one hydrogen atom oscillating with a large amplitude along the direction normal to the graphane plane while all neighboring atoms having much smaller vibration amplitudes. A method for refining the profile of quasibreathers in the space of all initial atoms displacements is developed in the framework of the density functional theory. The method is exemplified by the procedure of constructing the discrete breathers in graphane.

О ВОЗМОЖНОСТИ ВОЗБУЖДЕНИЯ ДИСКРЕТНЫХ БРИЗЕРОВ В АЛЮМИНОВОЙ И ПЛАТИНОВОЙ ПОДРЕШЕТКАХ Pt_3Al

Медведев Н.Н.^{1*}, Старостенков М.Д.¹, Захаров П.В.²

¹*Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова, Барнаул, Россия*

²*Алтайская государственная академия образования им. В.М. Шукишина, Бийск, Россия*

*nnm42@rambler.ru

Дискретные бризеры [1] (ДБ), квазибризеры [2] или пространственно локализованные, строго периодические нелинейные колебательные моды большой амплитуды в периодических структурах, могут быть с жестким и

мягким типами нелинейности. При мягком (жестком) типе нелинейности частота колебаний атомов несущих локализованную моду уменьшается (увеличивается) с ростом амплитуды колебаний. Возбуждение ДБ с мягким типом нелинейности возможно в упорядоченных структурах обладающих фононным спектром с запрещенной зоной или говоря иначе, щелью внутри. Частоты таких бризеров лежат внутри этой щели, из-за чего, ДБ с мягкой нелинейностью называют также «щелевыми». Известно, что в упорядоченных кристаллах стехиометрии A_3B при определенных условиях возможно возбуждение щелевых ДБ [3]. Бризеры с жесткой нелинейностью возбуждаются в модельных кристаллических решетках практически всех металлов независимо от типа их кристаллической решетки (см. обзор в работе [4]).

Методом молекулярной динамики исследовалась возможность возбуждения ДБ с жесткой нелинейностью в алюминиевой и платиновой подрешетках трехмерной модели упорядоченного сплава Pt_3Al со сверхструктурой $L1_2$. Взаимодействие между атомами задавалось потенциалом Морзе.

$$U_{PQ}(r_{ij}) = D_{PQ} \beta_{PQ} \exp(-\alpha_{PQ} r_{ij}) (\beta_{PQ} \exp(-\alpha_{PQ} r_{ij}) - 2) \quad (1)$$

Его параметры $D_{AlAl} = 0.247$, $\beta_{AlAl} = 57.932$, $\alpha_{AlAl} = 1.287$, $D_{PtPt} = 0.685$, $\beta_{PtPt} = 118.83$, $\alpha_{PtPt} = 1.638$, $D_{PtAl} = 0.481$, $\beta_{PtAl} = 39.085$, $\alpha_{PtAl} = 1.138$. Наложением на границы 3D расчетной ячейки периодических граничных условий моделировался бесконечный кристалл.

Как и ожидалось, возбуждение колебательных мод большой амплитуды в платиновой подрешетке с неизбежностью влечет за собой диссипацию энергии в алюминиевую подрешетку [5]. Кроме того, в рассматриваемом сплаве для атомов платины не удастся обеспечить жесткую нелинейность, благодаря соседству легких атомов алюминия, см. рис.1.

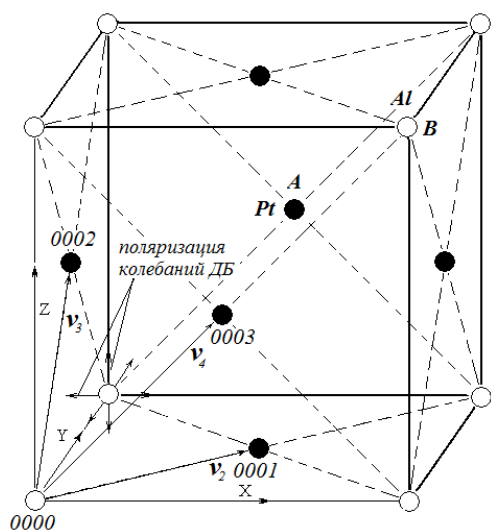


Рис. 1. Кристаллическая решетка Pt_3Al со сверхструктурой $L1_2$

По указанным выше причинам нелинейную локализованную незатухающую моду большой амплитуды в платиновой подрешетке Pt_3Al , скорее всего, получить невозможно.

В то же время, достаточно просто возбуждаются бризеры с жесткой нелинейностью в алюминиевой подрешетке упорядоченного сплава Pt_3Al . Существует целый набор начальных смещений нескольких атомов Al из одного ряда (110) относительно положения равновесия, приводящих к появлению ДБ. На рис. 2. показаны характерные для бризеров с жесткой нелинейностью зависимости частот от амплитуды колебаний (кривые 1 и 2). Там же для сравнения приведена зависимость частоты колебаний нелинейной локализованной моды с мягкой нелинейностью (кривая 3). Кривая 1 на рис.2 относится к «бесконечному» бризеру, который можно получить путем смещения всех атомов Al выбранного атомного ряда в направлении (110) на одно и то же расстояние в одну сторону (или навстречу друг другу, при этом между ними располагается атом Pt).

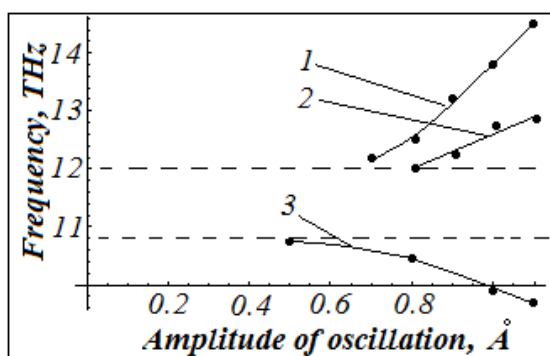


Рис. 2. Зависимость частоты колебаний атомов от их амплитуды колебаний. Кривая 1 – зависимость частоты от начального отклонения атомов несущих «бесконечный» бризер. Кривая 2 – зависимость частоты колебаний от

начального отклонения атомов (имеющих максимальное значение) несущих моду локализованного бризера. Поляризация колебаний обоих бризеров (110). Нижняя кривая построена для атома алюминия несущего моду щелевого ДБ, поляризация (100). Штрихованными линиями обозначены границы оптической части фононного спектра модельного кристалла Pt_3Al .

Кривая 2 на том же рисунке получена для локализованного ДБ, который возбуждается после смещения атомов Al по методике, предложенной в работе [6].

Все полученные ДБ с жесткой нелинейностью не отличались устойчивостью. Совершив несколько десятков незатухающих колебаний, они либо неожиданно исчезали, либо, поменяв поляризацию колебаний на направление (100), или близкое к нему, превращались в щелевые ДБ. Наиболее четкое, ярко выраженное перерождение ДБ с жесткой нелинейностью в группу щелевых происходило в случае с «бесконечным бризером».

Литература

1. Sievers A.J., Takeno S. Phys. Rev. Lett. **61**, 970 (1988).
2. Chechin G.M., Dzhelauhova G.S., Mehonoshina E.A. Phys. Rev. E. **74**, 036608 (2006).
3. Дмитриев С.В., Медведев Н.Н., Мулюков Р.Р., Пожидаева О.В., Поткаев А.И., Старостенков М.Д. Изв. Вузов. Физика. **51**(8), 73 (2008).
4. Кистанов А.А., Семенов А.С., Мурзаев Р.Т., Дмитриев С.В. ФПСМ. **11**(3), 322 (2014).
5. Medvedev N.N., Starostenkov M.D., and Manley M.E. J. of Applied Physics. **114**, 213506(4) (2013).
6. Кистанов А.А., Семенов А.С., Мурзаев Р.Т., Дмитриев С.В. ФПСМ. **11**(4/2), 572 (2014).

ЕЩЕ РАЗ О ПЕРЕРАСПРЕДЕЛЕНИИ ЭНЕРГИИ МЕЖДУ ПОДРЕШЕТКАМИ В УПОРЯДОЧЕННЫХ КРИСТАЛЛАХ СОСТАВА A_3B

Медведев Н.Н.^{1*}, Старостенков М.Д.¹, Захаров П.В.²

¹Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова, Барнаул, Россия

²Алтайская государственная академия образования им. В.М. Шукишина, Бийск, Россия

*nmm42@rambler.ru

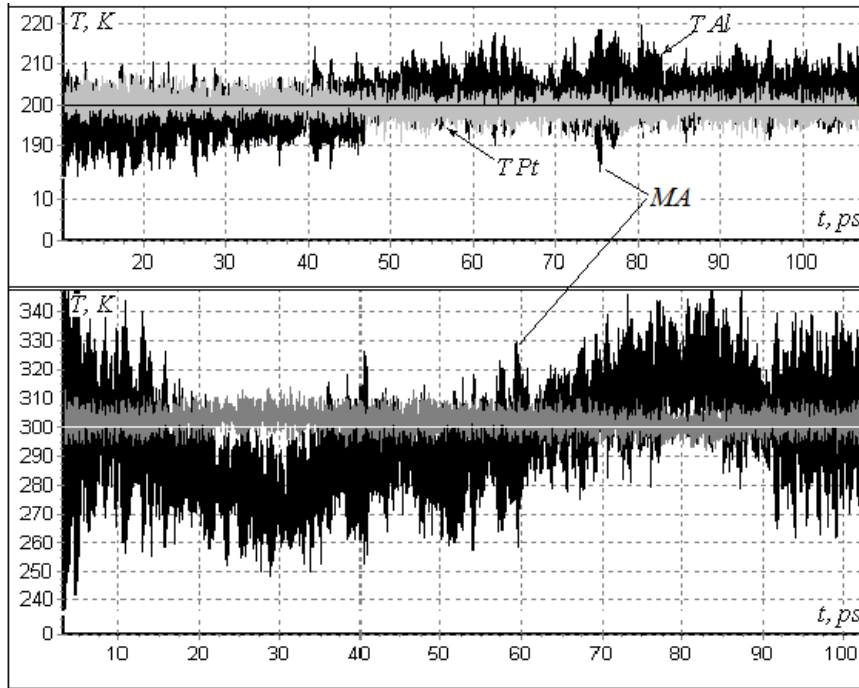
В работах [1, 2] показано, что в кристаллических решетках стехиометрии A_3B при определенных условиях возможна локализация энергии фононных оптических колебаний на подрешетке атомов сорта B . Там же было продемонстрировано явление спонтанного перераспределения на короткое время энергии между подрешетками платины и алюминия, никеля и алюминия см. рис.1.

Причина указанного эффекта кроется, на наш взгляд, в ангармонизме колебаний атомов. Дадим некоторые пояснения.

Известно, что формулировка теоремы о равнораспределении энергий в статистической физике, в наиболее общей форме, может быть представлена в виде [40]:

$$\left\langle x_m \frac{\partial H}{\partial x_n} \right\rangle = \delta_{mn} k_B T . \quad (1)$$

Рис. 1. Спонтанное перераспределение энергии между подрешетками Pt и Al.



На верхнем рисунке показан переход от преобладания энергии колебаний подрешетки Pt к преобладанию энергии подрешетки Al.

Нижний рисунок увеличение эффекта перераспределения энергий между подрешетками с уменьшением размеров модельной ячейки. МА – межузельные атомы.

Здесь H - Гамильтониан системы, δ_{mn} - символ Кронекера, k_B - постоянная Больцмана, угловые скобки $\langle \dots \rangle$ обозначают усреднение, которое может относиться как к среднему по времени, так и более общее усреднение по ансамблю в фазовом пространстве. Требование эргодичности, используемое в теореме, подразумевает, что оба эти усреднения эквивалентны. Общая формулировка теоремы верна в случае микроканонических ансамблей [3], которыми являются модели, рассматриваемые в данной работе.

Для ангармонического осциллятора, потенциальная энергия не является квадратичной функцией смещения q (обобщенная координата, которая показывает отклонение от положения равновесия). Такие осцилляторы позволяют более широко взглянуть на закон равнораспределения энергий [4]. Рассмотрим функцию потенциальной энергии вида

$$U = Cq^S, \quad (2)$$

где C и S произвольные действительные постоянные. В этом случае закон равнораспределения приводит к выражению

$$k_B T = \left\langle q \frac{\partial U}{\partial q} \right\rangle = \left\langle q \cdot SCq^{S-1} \right\rangle = \left\langle SCq^S \right\rangle = S \langle U \rangle. \quad (3)$$

Таким образом, средняя потенциальная энергия равна $k_B T/S$, а не $k_B T/2$ как для потенциала гармонического осциллятора (для которого $S=2$).

Очевидно, что в этом случае средняя кинетическая энергия атомов будет отличаться от $k_B T/2$.

Как трактовать сделанный вывод? Возможно ли создать условия при которых средние кинетические энергии атомов подрешеток A и B будут далеки от нуля Кельвин и при этом заметно отличаться друг от друга?

Легко показать, что такое возможно лишь короткое время, на время релаксации при выведении системы из состояния равновесия.

Литература

1. *Medvedev N.N., Starostenkov M.D., and Manley M.E.* J. of Applied Physics. **114**, 213506(4) (2013).
2. *Медведев Н.Н., Старостенков М.Д., Потеев А.И., Захаров П.В., Маркидонов А.В., Еремин А.М.* Изв. Вузов Физика. **57**(3), 92 (2014).
3. *Huang K.* Statistical Mechanics. - 2nd ed – John Wiley and Sons. 136 (1987).
4. *Terletsii Y.P.* Statistical Physics – translated: N. Fröman. – Amsterdam: North-Holland. 83 (1971).

АВТОРЕЗОНАНСНОЕ ПАРАМЕТРИЧЕСКОЕ ВОЗБУЖДЕНИЕ МАГНИТНОГО БРИЗЕРА В СЛАБОМ ФЕРРОМАГНЕТИКЕ С ДЕФЕКТОМ АНИЗОТРОПИИ

Екомасов Е.Г.^{1*}, Назаров В.Н.², Муртазин Р.Р.¹, Шафеев Р.Р.¹

¹*Башкирский государственный университет, Уфа, Россия*

²*Институт физики молекул и кристаллов УНЦ РАН, Уфа, Россия*

*EkomasovEG@gmail.com

В последнее время в математической физике при исследованиях нелинейных волновых процессов появляется прогресс в изучении динамики бризеров [1]. Интерес представляет динамика магнитных неоднородностей типа бризера распространяющихся в многослойных магнитных структурах перпендикулярно границам раздела слоев. Часто они представляют собой периодически чередующиеся слои двух материалов с различными физическими свойствами. При изучении таких новых магнитных материалов и процессов, протекающих в них, актуальными являются исследования динамического перемагничивания, генерации однородных и неоднородных по структуре динамических состояний под действием высокочастотного поля [2, 3]. Особый интерес представляет изучение управляемых динамических режимов, при которых

возможно достижение больших углов прецессии намагниченности полями достаточно малой амплитуды [4].

В данной работе рассматривается авторезонансное параметрическое возбуждение магнитного бризера в трехслойном ферромагнетике с пониженным значением анизотропии в тонком слое полями переменной частоты и малой амплитуды специального вида $h = h_1 \cos(\omega' \tau - \mu \tau^2 / 2)$. Считается также, что диссипация слабая и частота является медленной функцией времени. Как было показано [5], в зависимости от ширины тонкого слоя, зародыш новой магнитной фазы с амплитудой большей критической исчезает, закрепляется на тонком слое, либо выходит за пределы тонкого слоя, приводя к образованию домена новой фазы. В случае переменного внешнего поля, возможно появление резонансных эффектов, которые приводят к более значительному изменению амплитуды бризера A . При переменной частоте накачки поля $\omega' - \mu \tau$, эволюция во времени квадрата амплитуды определяется из резонансного условия $2\sqrt{1 - A^2} = \omega' - \mu \tau$. Это соотношение интерпретируется как захват системы в параметрический резонанс и дает приближенное решение для амплитуды на далеких временах. Вблизи начального момента имеется погранслой, в котором приближенное решение определяется из дифференциальных уравнений, полученных методом усреднения. Основные результаты данной работы связаны с исследованием усредненных уравнений, которые принято называть уравнениями главного резонанса. Анализ таких уравнений показывает существование решений с растущими и ограниченными амплитудами. Так же из уравнения движения с помощью численных методов показана возможность генерации в области тонкого слоя растущего по амплитуде магнитного бризера.

Литература

1. *Скалдин О.А., Делев В.А., Шиховцева Е.С., Лебедев Ю.А., Батыршин Э.С.* Письма В ЖЭТФ **100**, 181 (2014).
2. *Гуревич А.Г., Мелков Г.А.* Магнитные колебания и волны, Физматлит (1994).
3. *Семенцов Д.И., Шутый А.М.* УФН **177**, 831 (2007).
4. *Шамсутдинов М.А., Ломакина И.Ю., Назаров В.Н., Харисов А.Т., Шамсутдинов Д.М.* Ферро- и антиферромагнитодинамика. Нелинейные колебания, волны и солитоны, Наука (2009).
5. *Назаров В.Н., Шафеев Р.Р., Шамсутдинов М.А., Ломакина И.Ю.* Физика твердого тела **54**, 282 (2012).

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ КИНК-ПРИМЕСНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ В МОДЕЛИ СИНУС-ГОРДОНА

Екомасов Е.Г., Гумеров А.М., Муртазин Р.Р., Кудрявцев Р.В. *,
Абакумова Н.Н.

Башкирский государственный университет, Уфа, Россия

*xc.89@mail.ru

Солитон — уединённая волна, сохраняющая свою форму и скорость при движении и столкновениях с другими уединёнными волнами [1]. Одним из уравнений, имеющих солитонные решения, является уравнение синус-Гордона (УСГ):

$$u_{tt} - u_{xx} + \sin u = 0$$

где $u = u(x, t)$.

Понятие солитона сохраняется и для модифицированного УСГ (МУСГ). Они моделируют различные локализованные динамические возбуждения физических систем [1,2], например: движение дислокаций в кристаллах, динамику доменных границ в магнетиках, процессы в джозефсоновских сверхпроводящих контактах, поведение волн зарядовой плотности, движение локальных конформационных возмущений вдоль молекулы ДНК и др.

Кинки представляют собой пример топологических солитонов, соединяя между собой два различных стационарных состояния системы [1]. Взаимодействие кинков МУСГ, движущихся по инерции, с примесями может приводить к возбуждению «примесной» моды и к таким резонансным эффектам, как отражение кинка от притягивающего потенциала. Для изучения резонансной динамики кинков была разработана программа [3], реализующая высокую точность численного решения МУСГ. Для случая одной и двух примесей были численно найдены все возможные сценарии кинк-примесных взаимодействий при различных параметрах системы.

С помощью метода коллективных переменных [4] с учётом внешней силы и диссипации нами были получены уравнения движения для координаты центра кинка и амплитуды примесной моды в случае одной и двух точечных примесей. Полученные с их помощью результаты качественно совпадают с результатами, полученными численно.

Литература

1. Браун О.М., Ю.С. Кившарь. Модель Френкеля-Конторовой. Концепции, методы, приложения. Физматлит (2008).

2. Шамсутдинов М.А., Назаров В.Н., Ломакина И.Ю. и др. Ферро- и антиферромагнитодинамика. Неинейные колебания, волны и солитоны. Наука (2009).
3. Гумеров А.М., Муртазин Р.Р., Екомасов Е.Г. Программный пакет для моделирования нелинейных волн модифицированного уравнения синус-Гордон. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2013616082 от 26.06.2013.
4. Шаповалов А.В., Краснобаева Л.А. Солитоны уравнения синус-Гордона: Учебное пособие. Томский государственный университет (2009).

ПУЛЬСОНЫ НЕЛИНЕЙНОГО УРАВНЕНИЯ КЛЕЙНА-ГОРДОНА С ПОТЕНЦИАЛОМ ДРОБНОЙ СТЕПЕНИ

Salimov R.K.*, Ekomasov E.G.

Bashkir State University, Ufa, Russia

*salemsrkk@yandex.ru

Нелинейные волновые уравнения, например нелинейные уравнения Клейна–Гордона, лежат в основе многих областей физики, включая гидродинамику, физику конденсированного состояния, теории поля и т.д. [1–3]. Хотя наиболее изученными являются $(1 + 1)$ и $(2 + 1)$ - размерные модели, эти уравнения легко обобщить на пространства более высокой размерности, например для сферической симметрии:

$$u_{rr} + 2\frac{u_r}{r} - u_{tt} = F(u) \quad (1)$$

Устойчивые решения таких уравнений можно было бы интерпретировать как классические модели частиц конечного размера. Наиболее интересным с этой точки зрения представляются как раз пространственно-трехмерные уравнения. Как известно, не существует стационарных локализованных решений Лоренц-инвариантных полевых уравнений для пространственной размерности более одной. Однако это не исключает локализованных, зависящих от времени осциллирующих решений. В настоящей работе мы рассмотрим потенциалы вида

$$V(u) = \frac{n}{m+n} u^{\frac{m+n}{n}}, \quad (2)$$

приводящие к функции $F(u)$ вида $u^{\frac{m}{n}}$, и уравнению

$$u_{rr} + 2\frac{u_r}{r} - u_{tt} = u^{\frac{m}{n}}. \quad (3)$$

где m, n целые положительные нечетные числа $m = 2k + 1, n = 2l + 1, m > n$.

При исследовании уравнений вида (4) были получены долгоживущие бризероподобные решения нового типа [4] со временем жизни, превышающим времена жизни пульсонов уравнения синус-Гордона (УСГ) [5]. Наблюдаемые времена существования осциллирующего бризероподобного решения составляют $t \sim 800$. Самым интересным свойством полученного решения (3) является неизменность во времени средней амплитуды и частоты быстрой моды колебаний. Это позволяет надеяться на существование вообще не расплывающегося периодического решения. Данное свойство сохраняется для разных значений потенциалов (разных значений m и n , которые также исследовались численно), а также при добавлении таких слагаемых в УСГ. Следует также отметить, что уравнения вида (3) имеют симметрии растяжения по r , t . Поэтому ограничений по амплитуде решений данное уравнение не имеет.

Литература

1. Encyclopedia of Nonlinear Science, ed. by A. Scott, Routledge, N.Y. (2004).
2. Л. А. Тахтаджан, Л. Д. Фаддеев, Теоретическая и математическая физика 21, 160 (1974).
3. T. Dauxois and M. Peyrard, Physics of Solitons, Cambridge University Press, N.Y. (2010).
4. Е.Г. Екомасов, Р.К. Салимов, Письма в ЖЭТФ, том 100, вып. 7, с. 532 – 535
5. В. Г. Маханьков, Физика элементарных частиц и атомного ядра 14, 123 (1983).

DISCRETE BREATHERS IN 2D AND 3D CRYSTALS

Dmitriev S.V.

*Institute for Metals Superplasticity Problems, Khalturin St. 39, 450001
Ufa, Russia*

dmitriev.sergey.v@gmail.com

Discrete breathers (DB) are spatially localized, large-amplitude vibrational modes in defect-free nonlinear lattices. Recent numerical and experimental studies have confirmed that DB exist in crystals. In the present work, we briefly describe the well-known existence conditions of DB in crystals and present our recent results on DB in 2D crystals such as graphene and graphane and in 3D crystals such as alkali halide crystals and pure metals. The possible role of DB in solid state physics and materials science is discussed.

INTERACTION OF DISCRETE BREATHERS WITH PRIMARY LATTICE DEFECTS IN BCC FE

Terentyev D.^{1*}, Dubinko A.¹, Dubinko V.², Dmitriev S.V.^{3,4}, Zhurkin E.⁴

¹*SCK•CEN, Nuclear Materials Science Institute, Boeretang 200, Mol, 2400, Belgium*

²*NSC Kharkov Institute of Physics and Technology, Kharkov 61108, Ukraine*

³*Institute for Metals Superplasticity Problems RAS, Khalturin St. 39, Ufa 450001, Russia*

⁴*St. Petersburg State Polytechnical University, Polytechnicheskaya St. 29, St. Petersburg 195251, Russia*

*dterenty@sckcen.be

The interaction of discrete breathers with a vacancy, dislocation and surface - primary lattice defects in transition metals, is analyzed on the example of bcc Iron employing atomistic simulations. Scattering of discrete breathers on the lattice defects induces localized atomic excitations, with intensity and relaxation time depending on the defect structure and breather kinetic energy. The dissipation of the intrinsic breather energy due to the scattering is computed and analyzed. It is concluded that the breather-to-defect energy transfer may stipulate the activation of lattice defects causing unexpected athermal effects such as enhanced mass transfer or super-plasticity, already experimentally reported but so far not fully understood at atomic scale-level.

THERMAL SOLITONS IN 1D AND 2D ANHARMONIC LATTICES: SOLECTRONS AND THE ORGANIZATION OF NON-LINEAR FLUCTUATIONS IN LONG-LIVING DYNAMICAL STRUCTURES

Velarde M.G.^{*}, Ebeling W.[†], Chetverikov A.P.[‡]

Instituto Pluridisciplinar, Universidad Complutense, Paseo Juan XXIII, 1, 28040 Madrid, Spain

*mgvelarde@pluri.ucm.es, †ebeling@physik.hu-berlin.de,
‡chetverikovap@info.sgu.ru

We study the thermal excitation of intrinsic localized modes in the form of solitons in 1d and 2d anharmonic lattices at moderately high temperatures. Such finite-amplitude fluctuations form long-living dynamical structures with lifetime in the pico-second range thus surviving a relatively long time in comparison to other thermal fluctuations. Further we discuss the influence of

such long-living fluctuations on the dynamics of added excess free electrons. The atomic lattice units are treated as quasi-classical objects interacting by Morse forces and stochastically moving according to Langevin equations. In 2d the atoms are initially organized in a triangular lattice. The electron distributions are in a first estimate represented by equilibrium adiabatic distributions in the actual polarization fields. Computer simulations show that in 2d systems such excitations are moving with supersonic velocities along lattice rows oriented with the crystallographic axes. By following the electron distributions we have also been able to study the excitations of soliton type (electron-soliton dynamic bound states) and estimate their lifetime.

TENSILE BEHAVIOR OF BI-CRYSTALLINE SI NANOFILMS WITH $\Sigma 25$ GRAIN BOUNDARIES

Lin P.¹, Babicheva R.I.^{1*}, Xue M.², Zhang H.S.², Xu H.², Liu B.¹, Zhou K.¹

¹School of Mechanical and Aerospace Engineering, Nanyang Technological University of Singapore, 50 Nanyang Avenue, Singapore 639798, Singapore

²Infineon Technologies Pte Ltd, 8 Kallang Sector, Singapore 349282, Singapore

*ri.babicheva@gmail.com

The present work studies the effects of grain boundaries (GBs), notches and temperature on the mechanical properties of silicon (Si) nanofilms via molecular dynamics simulations. Both $\Sigma 25$ (710)<010> tilt and $\Sigma 25$ (001)<001> twist GBs are considered. It is found that the single-crystalline Si nanofilm has relatively low fracture strength of ~11.6 GPa at room temperature, and fracture occurs through the dislocation sliding mechanism regardless of the existence of notches. At the same temperature, the bi-crystalline Si generally has lower fracture strength than that of the single-crystalline due to the presence of GBs, which changes the crystallographic orientation of the Si nanofilms. Moreover, strength of the bi-crystalline Si depends on the type of the GBs, and it fractures through either the dislocation sliding or cleavage mechanism, depending on the presence of notches. The temperature reduces the fracture strength of the nanofilms but does not change the failure mechanism.

FROM POLARON TO SOLECTRON

Velarde M.G.

*Instituto Pluridisciplinar, Universidad Complutense, Paseo Juan XXIII, 1,
28040 Madrid, Spain*

mgvelarde@pluri.ucm.es

A significant generalization of the polaron concept is given here. The building block of the new concept is the anharmonicity of the backbone lattice vibrations not considered by the earlier authors. Due to such (non-Hookean) nonlinear elasticity, solitons may appear in an one-dimensional Toda (and Toda-Morse) lattice (no electric charge is involved in the system). Then a discussion is provided about the interplay of an added, excess electron with these lattice excitations (including polaron-like effects) thus leading, in particular, to electron trapping by solitons and hence to the dynamic bound state called solectron. Also given here are features of the “truth and consequences” of introducing this new concept (and quasiparticle) when dealing with electric transport.

THE EFFECT OF CRYSTALLOGRAPHIC ORIENTATION ON TENSILE DEFORMATION BEHAVIOR OF NiAl NANOFILMS AT ROOM TEMPERATURE

**Krylova K.A.¹, Babicheva R.I.^{2*}, Dmitriev S.V.^{1,3}, Mulyukov R.R.¹,
Zhou K.²**

¹*Institute for Metals Superplasticity Problems, Russian Academy of
Sciences, 39 Khalturin St., Ufa 450001, Russia*

²*School of Mechanical and Aerospace Engineering, Nanyang
Technological University, 50 Nanyang Avenue, Singapore 639798,
Singapore*

³*National Research Tomsk State University, Prosp. Lenina 36, Tomsk
634050, Russia*

*ri.babicheva@gmail.com

Molecular dynamics is applied to study the effect of crystallographic orientation on the plastic deformation mechanisms and mechanical properties of NiAl intermetallic nanofilms subjected to uniaxial tension. It is observed that the deformation mechanisms qualitatively depend on the crystallographic orientation of the nanofilms with respect to a loading direction. Plastic deformation of the nanofilms elongated along the [557] crystallographic direction is associated with the edge dislocation sliding in the [001](110) slip

system. As for the nanofilms stretched along [554] and [111], their deformation occurs first through the dislocation sliding followed by the formation of (112) $[11\bar{1}]$ twins. Uniaxial tension of the nanofilms along [559] and [55 11] leads to the nucleation and growth of the martensite phase. The maximum (minimum) strength of 9.9 (7.0) GPa is observed for the nanofilms stretched along the [559] ([554]) crystallographic direction, while the largest (smallest) strain to failure of 27 (15) % is for [559] ([55 11]). Various deformation mechanisms are explained through computing the Schmid factor for the operational slip system. Results indicate that the crystallographic orientation is among the key parameters controlling the deformation mechanisms and mechanical properties of intermetallic nanofilms.

INSTABILITIES IN CRYSTALS AT FINITE TEMPERATURE

Umeno Y.¹, Nöhring W.², Iskandarov A.^{1*}, Bitzek E.²

¹*Institute of Industrial Science, the University of Tokyo, 4-6-1 Komaba, Meguro-ku, Tokyo 153-0062, Japan*

²*Department of Materials Science and Engineering, Institute I, Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg (FAU), 91058 Erlangen, Germany*

*a.iskandarov@gmail.com

There have been a lot of studies dedicated to structural instability in solids. For local instability, theoretical (ideal) strength of crystals has been extensively studied with ab initio calculations. Global instability taking into account the collective motion of atoms involved in deformation has also been investigated. However, these studies have usually been done at 0 K and little has been understood about the effect of temperature. In this study, we demonstrate computational approaches to the effect of temperature on local and global instabilities. Ideal shear strength (ISS) of silicon at finite temperatures is calculated by molecular dynamics (MD) simulations with an empirical potential. ISS is obtained as a function of temperature. Our results imply that, unlike metals, the reduction in ISS by temperature cannot be estimated simply by taking into account thermal expansion of volume. In addition, global instability for dislocation nucleation in a Cu thin film model under tension is investigated. We first evaluated instability modes at 0 K with increasing strain, and then performed MD simulations at 50 K. After the nucleation of a partial dislocation, the second dislocation can be one to create a twin or one to create another partial dislocation. These different deformations can be understood as the competition of latent instability modes that have relatively small eigenvalues.

CROWDION MOBILITY AND STABILITY IN FCC METALS

Iskandarov A.M.

*Institute of Industrial Science, the University of Tokyo, 4-6-1 Komaba,
Meguro-ku, Tokyo 153-0062, Japan*

a.iskandarov@gmail.com

Crowdion is a special configuration created by an interstitial atom that can propagate in a close packed direction as a quasi-particle. Motion of crowdions can contribute to material transport during cascade-producing irradiation and also during plastic deformation. Crowdions can move only at relatively high velocity sufficient to overcome the Peierls-Nabarro potential (mobility), but their stable (self-focusing) motion is possible for sufficiently small velocities when the effective radius of colliding atoms is sufficiently large. By means of molecular dynamics simulation we find that in 3D and 2D nickel at zero temperature both mobility and stability criteria can be met for a crowdion in a window if its propagation velocity.

PROPERTIES OF IMMOBILE DISCRETE BREATHERS IN MONOATOMIC 2D MORSE CRYSTALS

Korznikova E.A.

*Institute for Metals Superplasticity Problems of RAS, 39 Khalturin St, Ufa
450001, Russia*

elena.a.korznikova@gmail.com

A transition from theoretical research in simplified non-linear systems to observation and analysis in real physical objects like crystal lattice is observed in the field of nonlinear localized oscillation modes known as discrete breathers.

The study of discrete breathers in different physical systems requires consideration of various factors. The work reports a study of the characteristics of the immobile discrete breather localized on a dozen atoms of a close-packed atomic row in a monoatomic two-dimensional Morse crystal. It is shown that the amplitude of frequency dependence of the breather refers to a hard type of nonlinearity. Amplitude variation decreases with increasing amplitude of the breather. Values of frequency variation depend on the amplitude non-monotonically. The total energy of the breather and the speed of its radiation exhibit a monotonic increase with amplitude growth. It is found that the kinetic energy of the discrete breather is greater than its potential energy. Possible reasons and impact of different factors on characteristics of the breather are discussed.

DISCRETE BREATHERS IN ALPHA URANIUM

Murzaev R.T.¹, Korznikova E.A.^{1*}, Bokiya D.I.², Dmitriev S.V.¹

¹*Institute for Metals Superplasticity Problems of RAS, 39 Khalturin St, Ufa 450001, Russia*

²*AO Atomproekt 82, Savushkina St., Saint Petersburg, 197183, Russia*

*elena.a.korznikova@gmail.com

Research in the field of conditions of discrete breathers (DB) existence and their properties in different crystalline solids is reported in numerous works with increasing its number with time.

Experimental investigation of DB is impeded by difficulties in separation the contribution of DB from one of thermal vibrations. For this reason atomistic and ab-initio modelling is the most effective instrument for studying nature and properties of DB and related phenomena. Molecular dynamics simulation studies based on empirical potentials has recently been used for investigation of DB and their properties in different materials.

In present work a DB in the structure of alpha-uranium is investigated by means of molecular dynamics method. The dependence of breather frequency on its amplitude is considered revealing hard nonlinearity type when the oscillation frequency grows with increasing amplitude. Such properties of the discrete breather as lifetime, energy and localization degree are analyzed.

ДИНАМИКА АНТИСИММЕТРИЧНОГО ДИСКРЕТНОГО БРИЗЕРА В КРИСТАЛЛЕ RT_3Al

Захаров П.В.^{1,2*}, Старостенков М.Д.², Ерёмин А.М.¹, Медведев Н.Н.³

¹*Алтайская государственная академия образования имени В.М. Шукишина, Бийск, Россия*

²*Алтайский государственный технический университет имени И.И. Ползунова, Барнаул, Россия*

³*Бийский технологический институт АлтГТУ, Бийск, Россия*

*zakharovpvl@rambler.ru

Методом молекулярной динамики в работе изучается динамика антисимметричного дискретного бризера (АДБ) [1], аналога моды Пейджа [2]. Под дискретным бризером (ДБ) понимают локализованные в пространстве и периодические во времени возбуждения большой амплитуды в кристаллах с трансляционной симметрией [3,4]. В свою

очередь АДБ представляет собой ДБ с двумя атомами в ядре дискретного бризера, совершающими колебания в противофазе (рис. 1) [1].

Рассматриваемая модель представляла собой объемный кристалл стехиометрии A_3B , атомы которого взаимодействовали посредством парного потенциала Морзе

$$\phi_{PQ}(r_{ij}) = D_{PQ}\beta_{PQ} \exp(-\alpha_{PQ}r_{ij}) \left(\beta_{PQ} \exp(-\alpha_{PQ}r_{ij}) - 2 \right), \quad (1)$$

где D – энергия связи, соответствующая глубине потенциальной ямы, α – параметр, определяющий жесткость межатомных связей, r определяет равновесное межатомное расстояние. Для сплава Pt_3Al параметры потенциала следующие: $D_{AlAl} = 0.318$ eV, $\beta_{AlAl} = 27.4979$, $\alpha_{AlAl} = 1.02658 \text{ \AA}^{-1}$, $D_{PtPt} = 0.710$ eV, $\beta_{PtPt} = 102.89$, $\alpha_{PtPt} = 1.582 \text{ \AA}^{-1}$, $D_{PtAl} = 0.5048$ eV, $\beta_{PtAl} = 63.124$, $\alpha_{PtAl} = 1.3501 \text{ \AA}^{-1}$.

Атомы несущие АДБ могут совершать колебание довольно продолжительное время, при этом рассеяние энергии практически не происходит благодаря тому, что частота их колебаний находится за пределами фононного спектра идеального кристалла. Выход частоты ДБ из фононного спектра обусловлен зависимостью частоты нелинейного осциллятора от его амплитуды. В данном случае имеет место нелинейность мягкого типа, т.е. частота осциллятора уменьшается при увеличении амплитуды и попадает в запрещенную зону фононного спектра, для нелинейности жесткого типа характерна обратная зависимость, что обсуждается, например, в работах [5-7].

Время жизни АДБ существенно зависит от симметричности начальных условий [1]. Разрушение антисимметричного дискретного бризера не приводило к полному рассеиванию энергии по кристаллу Pt_3Al . В результате разрушения формируется ДБ с одним атомом в ядре, с частотой колебаний меньше, чем у АДБ. При этом продолжительность жизни установившихся колебаний решетки может превышать 1500 пс.

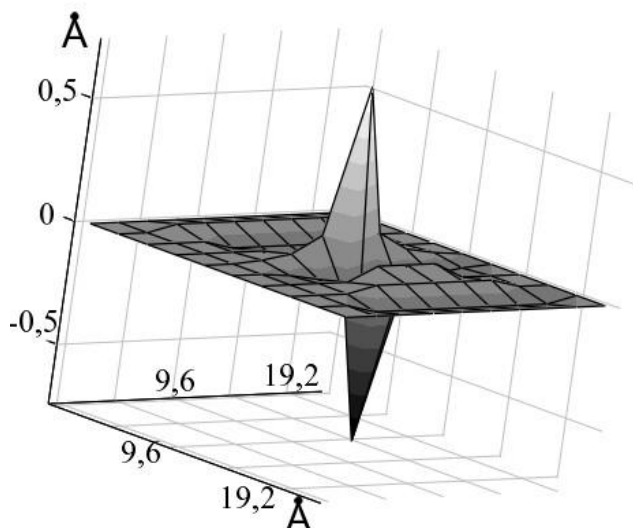


Рис. 1. Схематичный объемный профиль АДБ для атомов плоскости (111). Вдоль вертикальной оси отложены амплитуды колебаний атомов в ангстремах.

Отследить динамики АДБ можно по ряду параметров, представленным на рис. 2.

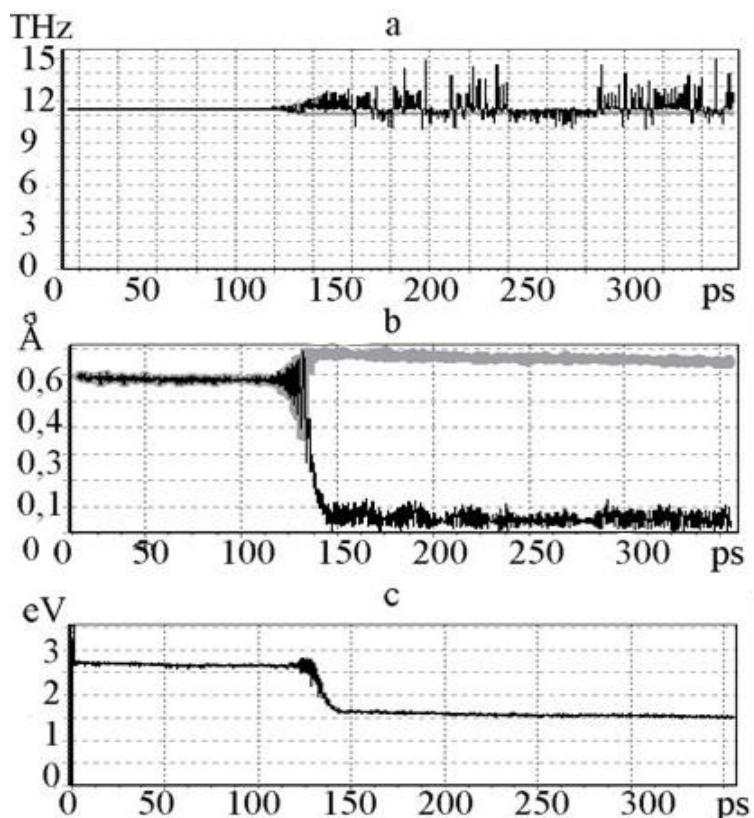


Рис. 2. Характеристики антисимметричного дискретного бризера, а) зависимость частоты двух атомов в ядре АДБ от времени, б) зависимость амплитуд колебаний двух атомов в ядре АДБ от времени, с) зависимость энергии АДБ от времени.

Отметим ряд особенностей сопровождающих преобразование АДБ в ДБ. Процесс перестройки начинается с рассогласования в частотах колебаний основных атомов, входящих в АДБ (рис. 2 а). При этом возрастает амплитуда одного из них с $0,6 \text{ \AA}$ до $0,7 \text{ \AA}$, а второй заухает (рис. 2 б). Сам процесс перестройки колебаний занимает 15-20 ps и сопровождается рассеиванием 45% энергии АДБ в подрешетку Al (рис. 2 с). Не смотря на значительный выброс энергии и как следствие локальный разогрев кристалла, сформированный ДБ остается достаточно устойчивым и может существовать более 1500 ps. Количество рассеянной энергии позволяет предположить, что данные процессы могут оказывать влияние на структурно-энергетические трансформации в ГЦК кристаллах состава A_3B .

Литература

1. Захаров П.В., Старостенков М.Д., Медведев Н.Н. и др. Фундаментальные проблемы современного материаловедения **11**, 3, 388-392 (2014).
2. Page J.B. Physical Review B **41**, 7835 (1990).
3. Sievers A.J., Takeno S. Phys. Rev. Lett. **61**, 8, 970-973 (1988).
4. MacKay R.S., Aubry S. Nonlinearity **7**, 1623 – 1643 (1994).

5. Кистанов А.А., Семенов А.С., Мурзаев Р.Т., Дмитриев С.В. *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*, **11**, 3, 322-326 (2014).
6. Кистанов А.А., Дмитриев С.В., Семенов А.С., и др. *ПЖТФ*, **40**, 15, 58-66 (2014).
7. Семенов А.С., Мурзаев Р.Т., Кистанов А.А., Бебихов Ю.В. *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. **12**, 1, 26-30 (2015).

СВОЙСТВА ДИСКРЕТНЫХ БРИЗЕРОВ В ДВУМЕРНЫХ БИАТОМНЫХ КРИСТАЛЛАХ С ПОТЕНЦИАЛОМ МОРЗЕ

Фомин С.Ю.¹, Корзникова Е.А.^{2*}

¹*Уфимский государственный авиационный технический университет,
Уфа, Россия*

²*Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа, Россия*

*elena.a.korznikova@gmail.com

Четверть века назад в физике нелинейных явлений было показано, что нелинейная дискретная система идентичных частиц, периодически расположенных в пространстве, способна поддерживать пространственно локализованные колебательные моды. Оказалось, что именно дискретность и нелинейность среды являются двумя главными условиями, необходимыми для возбуждения таких мод, получивших название дискретных бризеров (ДБ). При этом размерность системы и конкретный вид потенциала взаимодействия между частицами, как правило, влияют лишь на характеристики ДБ, но не на саму возможность их существования.

Молекулярно-динамические исследования возможностей существования и свойств ДБ в различных кристаллах активно ведутся в последнее десятилетие и полученные результаты свидетельствуют о том, что их роль в формировании структуры может оказаться весьма значительной. Ввиду этого важным представляется исследование влияния типа атомной структуры на свойства ДБ, которое может быть реализовано на примере модельного кристалла, взаимодействие атомов в котором задается потенциалом Морзе.

Нами был исследован случай биатомного кристалла, соотношений масс атомов в котором равно 1:10. Известно, что для такого случая характерно существование ДБ в интервале частот, находящихся в щели фононного спектра колебаний атомов и имеющего мягкий тип

нелинейности, т. е. с ростом амплитуды ДБ имеет место уменьшение его частоты [1].

В работе обсуждается влияние начальных условий на такие характеристики как частота, амплитуда, степень локализации и распределение энергии. Показано, что поляризация ДБ не оказывает значительного влияния на его свойства. Полученные характеристики ДБ сопоставляются с аналогичными характеристиками? Полученными для ДБ в моноатомном кристалле.

Литература

1. А.С. Семенов, Е.А. Корзникова, С.В. Дмитриев Письма о материалах, 5 (2015) 11-14.

IMPURITY-INDUCED DISCRETE BREATHERS AND PHONON BLOCH OSCILLATIONS IN PERTURBED FLUOROGRAPHENE AND GRAPHANE LATTICES

Kosevich Yu.A.

*Semenov Institute of Chemical Physics, Russian Academy of Sciences,
Kosygin str. 4, 119991 Moscow, Russia*

yukosevich@gmail.com

Discrete breathers, or intrinsically localized modes, are spatially localized and time-periodic excitations in nonlinear defect-free crystal lattices. Discrete breathers can be trapped both by light- and by heavy-mass impurities in the lattice [1]. Fluorographene and graphane present fluorinated (by heavy F atoms) or hydrogenated (by light H atoms) graphene derivatives, which can also have translationally invariant 2D lattices. The existence of the hydrogen-induced discrete breathers in fully hydrogenated graphane have been recently demonstrated by the molecular dynamics and first-principle simulations [2,3]. In partially fluorinated C₂F boat graphene [4], oscillations of the pair of “non-fluorinated” neighbor carbon atoms with nonlinear C-C bonds, surrounded by fluorinated carbon atoms, can support a discrete breather. In the harmonic limit, oscillations of the pair form a narrow phonon band separated by a gap from the bulk of C-F oscillations. Such narrow phonon band is similar to that induced by H atoms in fully hydrogenated graphane. The narrow phonon band can be splitted in the Wannier-Stark ladder by the corresponding perturbation. The ladder in turn leads to the time-domain Bloch oscillations of phonon wave packets traversing the perturbed periodic system [5,6,7]. The proper lattice perturbation for the formation of the phonon Wannier-Stark ladder can be the

inhomogeneous strain in the finite-size sheet or ribbon of fluorographene or graphane. In such perturbed periodic system, the slowly-moving discrete breather [8] with not very high oscillation amplitude will perform time-domain phonon Bloch oscillations similar to that of phonon wave packets with small spatial widths.

References

1. Yu.A. Kosevich, Phys. Rev. B **47**, 3138 (1993).
2. B. Liu, J.A. Baimova, S.V. Dmitriev, X. Wang, H. Zhu, and K. Zhou, J. Phys. D: Appl. Phys. **46** 305302 (2013).
3. G.M. Chechin, S.V. Dmitriev, I.P. Lobzenko, and D.S. Ryabov, Phys. Rev. B **90**, 045432 (2014).
4. H. Sahin, M. Topsakal, and S. Ciraci, Phys. Rev. B **83**, 115432 (2011).
5. H. Sanchis-Alepuz, Yu. A. Kosevich, and J. Sanchez-Dehesa, Phys. Rev. Lett. **98**, 134301 (2007).
6. M. M. de Lima, Jr., Yu.A. Kosevich, P.V. Santos, and A. Cantarero, Phys. Rev. Lett. **104**, 165502 (2010).
7. A. A. Karabutov, Jr., Yu. A. Kosevich, and O. A. Sapozhnikov, Acoustical Physics **59**, 137(2013).
8. Yu.A. Kosevich, Phys. Rev. Lett. **71**, 2058 (1993).

ON THE CHARGE OF QUODONS

Archilla J.F.R.^{1*}, Russell F.M.²

¹*Group of Nonlinear Physics, Universidad de Sevilla, Spain*

²*Department of Physics, University of Pretoria, South Africa*

*archilla@us.es

Mica muscovite is a material for which magnetite dark tracks due to the passage of charged swift particles have been described. Also the tracks of quasi-dimensional lattice excitations, called quodons, along close-packed directions are recorded. Many quodon tracks are thought to be produced by atom recoil after the decay of ⁴⁰K.

Overlooked during many years have been two facts:

1. Most of the decays leave behind a charge, about 90% of them positive.
2. Only positive swift particles leave a track.

The natural conclusion of these observations is that quodons have charge and the quodons dark tracks are produced by positive charge. Reinforcing this conclusion is the fact that the thickness of positron tracks when the positron is about to stop and thus travelling at low speed is similar to that of quodons.

The possible energies and mechanisms of charge transmission in the lattice are analyzed. Not only the energy and charge of the recoiling atoms has to be considered but also the outcome of the first collisions and the possible outcomes taking into account charge, energy and momentum conservation and considering the possible ionization states of the K atoms.

References

1. *J.F.R. Archilla, Y.A. Kosevich, N. Jiménez, V.J. Sánchez-Morcillo, L.M. García-Raffi, A supersonic crowdion in mica, in Quodons in Mica, J.F.R. Archilla et al, eds., Springer (2015) pp. 69-96.*
2. *F.M. Russell, Charge coupling to anharmonic lattice excitations in a layered crystal at 800K arXiv: 1505.03185 (2015).*

SCROLL CONFIGURATIONS OF CARBON NANORIBBONS

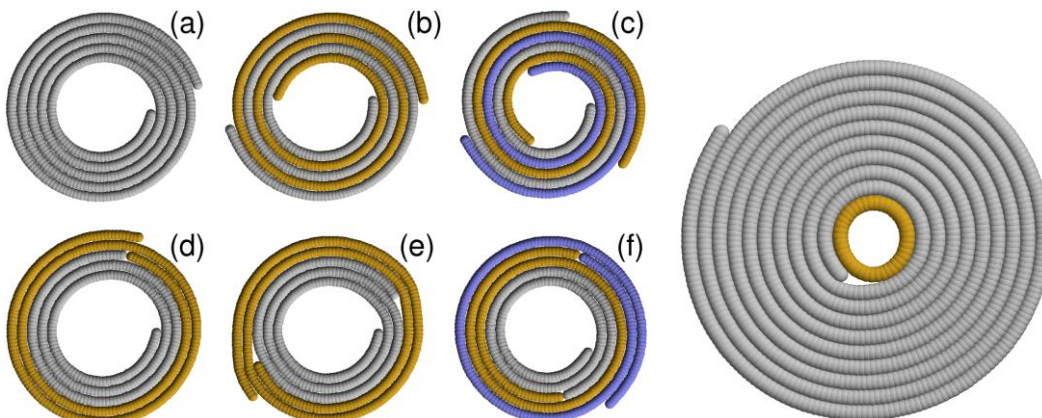
Savin A.V^{1*}, Korznikova E.A.², Dmitriev S.V.²

¹*Semenov Institute of Chemical Physics, Russian Academy of Sciences, Kosygin Street 4, Moscow 117977, Russia*

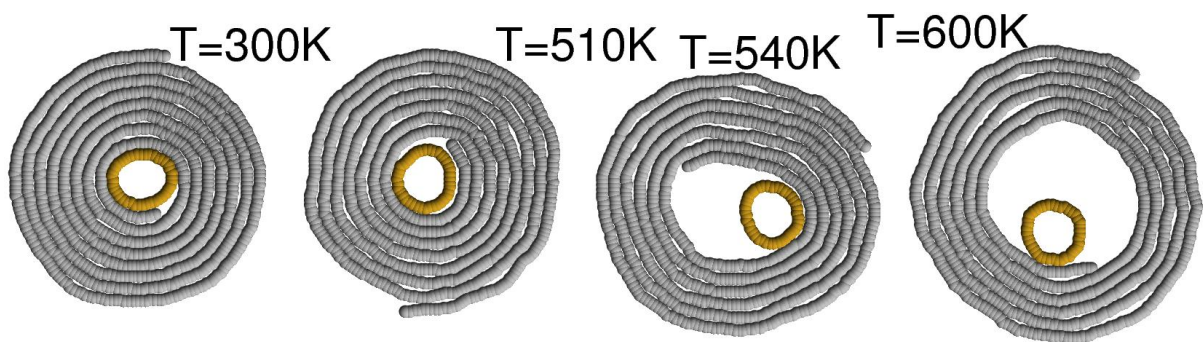
²*Institute for Metals Superplasticity Problems of RAS, 39 Khalturin St, Ufa 450001, Russia*

*asavin00@gmail.com

Carbon nanoscroll is a unique topologically open configuration of graphene nanoribbon possessing outstanding properties and application perspectives due to its morphology. However molecular dynamics study of nanoscrolls with more than a few coils is limited by computational power. Here, we propose a simple model of the molecular chain moving in the plane, allowing to describe the folded and rolled packaging of long graphene nanoribbons. The model is used to describe a set of possible stationary states and the low-frequency oscillation modes of isolated single-layer (a) and multi-layer nanoribbon scrolls (b-f) and scrolls on carbon nanotube:



Possible conformational changes of scrolls due to thermal fluctuations are analyzed and their thermal stability is examined. Using the full-atomic model, frequency spectrum of thermal vibrations is calculated for the scroll and compared to that of the flat nanoribbon. It is shown that the density of phonon states of the scroll differs from the one of the flat nanoribbon only in the low ($\omega < 100 \text{ cm}^{-1}$) and high ($\omega > 1450 \text{ cm}^{-1}$) frequency ranges. The linear thermal expansion coefficient for the scroll outer radius is calculated from the long-term dynamics with the help of the developed planar chain model. The scrolls demonstrate anomalously high coefficient of thermal expansion and this property can find new applications. The nanoribbon scrolls on carbon nanotube can demonstrate bistability: there are two stable conformations. Close state is stable for small, open state – for large temperatures.



FOR NOTES

FOR NOTES

FOR NOTES

FOR NOTES

FOR NOTES

FOR NOTES

FOR NOTES

FOR NOTES

FOR NOTES

FOR NOTES

FOR NOTES

FOR NOTES

FOR NOTES

FOR NOTES

FOR NOTES

FOR NOTES

FOR NOTES

FOR NOTES

FOR NOTES

FOR NOTES

FOR NOTES

FOR NOTES

