

Политехнический институт (филиал) федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Северо-Восточный федеральный университет им. М.К. Аммосова» в г. Мирном

На правах рукописи



Семёнова Мария Николаевна

**СВОЙСТВА ДЕЛОКАЛИЗОВАННЫХ НЕЛИНЕЙНЫХ
КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ МОД ТРЕУГОЛЬНОЙ РЕШЕТКИ МОРЗЕ
И ГРАФЕНА**

Специальность: 01.04.07 — физика конденсированного состояния

диссертация на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:
доктор физико-математических наук
Корзникова Елена Александровна

Уфа – 2021

Содержание

Введение	4
Глава 1. Обзор литературы: линейная и нелинейная динамика кристаллических решеток.....	13
1.1. Линейная динамика решеток	13
1.2. Типы нелинейных возбуждений кристаллических решеток	16
1.2.1. Волны солитонного типа	16
1.2.2. Пространственно локализованные колебания: колебания, локализованные на дефектах, и дискретные бризеры (ДБ)	19
1.2.3. Делокализованные нелинейные колебательные моды (ДНКМ)	26
1.3. Связь между делокализованными и пространственно локализованными колебательными модами.....	27
1.4. Роль нелинейных колебаний в формировании физических и механических свойств решеток	33
1.5. Заключение по главе	38
Глава 2. Свойства однокомпонентных ДНКМ в треугольной решетке с потенциалом Морзе.....	40
2.1. Описание деталей компьютерного эксперимента	40
2.2. Частота в зависимости от амплитуды колебаний для однокомпонентных ДНКМ.....	43
2.3. Энергии ДНКМ.....	48
2.4. Напряжения индуцируемые ДНКМ	49
2.5. Выводы по главе	51

Глава 3. Свойства одно- двух- и трехкомпонентных ДНКМ в решетке графена	54
3.1. Методика моделирования многокомпонентных ДНКМ	54
3.2. Однокомпонентные ДНКМ	57
3.3. Двухкомпонентные ДНКМ	62
3.4. Трехкомпонентные ДНКМ	70
3.5. Выводы по главе	77
Глава 4. Анализ устойчивости ДНКМ в треугольной решетке Морзе и в графене	80
4.1. Подход к анализу устойчивости ДНКМ	80
4.2. Устойчивость однокомпонентных ДНКМ в треугольной решетке Морзе	81
4.3. Устойчивость однокомпонентных ДНКМ в графене	83
4.4. Выводы по главе	89
Основные результаты и выводы:	91
Список литературы	94

Введение

Одним из важных разделов физики кристаллов является изучение колебаний кристаллической решетки, поскольку они определяют такие важные свойства как теплопроводность, теплоемкость, тепловое расширение и многие другие. Силы межатомных взаимодействий нелинейны, и их линеаризация возможна только для малых отклонений атомов от положений равновесия: менее 1 % от межатомного расстояния. С ростом температуры или интенсивности внешних воздействий на кристаллы растут амплитуды колебаний атомов, что приводит к необходимости учета ангармоничности межатомных взаимодействий. Теория гармонических колебаний кристаллической решетки хорошо развита [1, с. 63], но, с другой стороны, общих аналитических методов для нахождения точных решений нелинейных уравнений движения атомов не существует. Однако, некоторые точные решения могут быть построены на основе анализа точечной симметрии решетки. Такой подход был разработан Чечиным с соавторами в [2, с. 44] и применен для нахождения нелинейных колебательных мод отдельной молекулы SF₆ [3, с. 29], нелинейной LC-цепочки [4, с. 246], треугольной решетки [5, с. 48] и решетки графена [6, с. 72]. Метод заключается в анализе симметрии исследуемой динамической системы и в нахождении колебательных мод, продиктованных симметрией, которые существуют для любых амплитуд колебаний и независимо от типа взаимодействия между элементами системы. Для кристаллов, имеющих трансляционную симметрию, такие моды оказываются делокализованными и периодическими

по пространственным координатам. Описание динамики таких мод может быть сведено к системе N связанных обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка, где N - число компонентов рассматриваемой делокализованной нелинейной колебательной моды (ДНКМ). В работе [5, с. 50], используя аппарат теории групп, строго доказано, что треугольная решетка поддерживает восемь однокомпонентных ($N=1$) и 14 двухкомпонентных ($N=2$) ДНКМ с колебаниями в плоскости решетки. В работе [6, с. 74] установлено, что двумерная гексагональная решетка (это решетка графена) поддерживает четыре однокомпонентных ($N=1$), двенадцать двухкомпонентных ($N=2$) и только одну трехкомпонентную ($N=3$) ДНКМ с атомными колебаниями в плоскости листа графена.

Недавно было продемонстрировано, что ДНКМ имеют тесную связь с пространственно локализованными нелинейными колебательными модами, известными как дискретные бризеры (ДБ) [7, с. 11]. В частности, было показано, что дискретные бризеры могут быть получены путем наложения локализующей функции на ДНКМ, при условии, что её частота лежит вне фононного спектра решетки. Дискретные бризеры могут также возникать спонтанно из ДНКМ, имеющих частоту вне фононного спектра, в результате развития модуляционной неустойчивости ДНКМ.

Наряду с экспериментальными методами изучения нелинейной динамики кристаллической решетки, широко используются эффективные методы компьютерного моделирования, такие как первопринципное моделирование и метод молекулярной динамики. Первый из этих методов

моделирования более точен, поскольку он учитывает электронную структуру вещества, но для его реализации нужны значительные компьютерные ресурсы. В данной работе предпочтение отдано более экономичному методу молекулярной динамики, который позволил решить все поставленные задачи.

Из вышесказанного следует, что молекулярно-динамическое изучение свойств ДНКМ в двумерных кристаллах является очень *важной и актуальной* проблемой физики твердого тела.

В данном исследовании рассматриваются две двумерные кристаллические решетки, а именно, треугольная решетка с одним атомом в примитивной трансляционной ячейке, с векторами трансляции $(a, 0)$ и $(a/2, a\sqrt{3}/2)$, где a – межатомное расстояние, а также гексагональная решетка с теми же векторами трансляции, но с примитивной ячейкой, содержащей два атома с межатомным расстоянием равным $a\sqrt{3}$ (см. рис. 1). Для треугольной решетки используется парный межатомный потенциал Морзе, а для гексагональной решетки – межатомный потенциал sp^2 углерода, разработанный Савиным [19, с. 32]. Это многочастичный потенциал, широко используемый для описания ковалентных химических соединений.

Треугольная решетка интересна потому, что уже на протяжении десятилетий она используется в качестве модельного кристалла для изучения различных локализованных возбуждений. Отметим, что атомная плоскость (111) ГЦК кристалла, как и базисная плоскость ГПУ кристалла, также

представляют собой треугольную решетку и эти атомные плоскости могут поддерживать существование некоторых ДНКМ [23, с. 66].

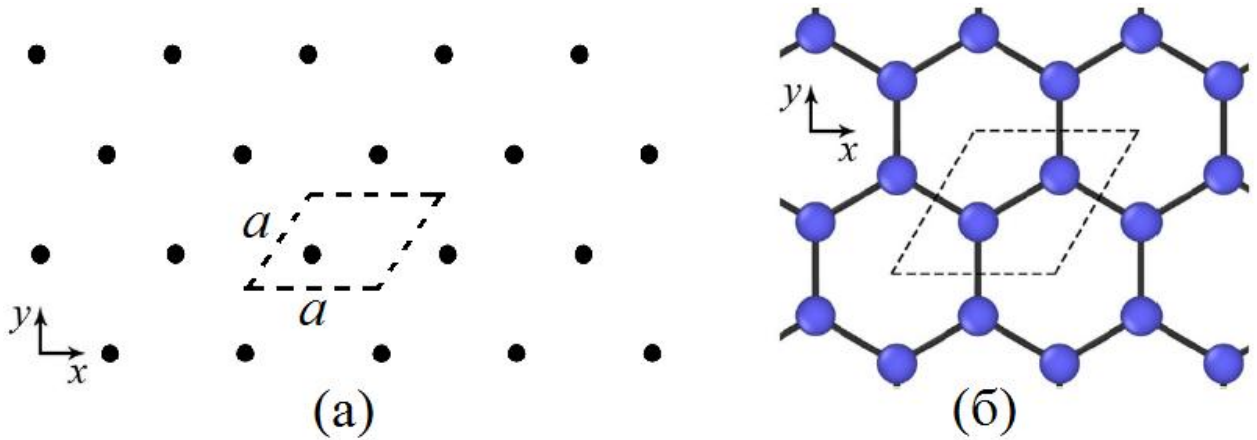


Рис. 1. (а) Структура двумерного плотноупакованного кристалла с треугольной решеткой и осью x направленной вдоль плотноупакованного направления. (б) Гексагональная решетка графена с направлением зигзаг (кресло) вдоль оси x (y). Примитивные трансляционные ячейки в форме ромба со стороной a показаны пунктирными линиями. Вектора трансляции обеих решеток: $(a, 0)$ и $(a/2, a\sqrt{3}/2)$.

Потенциал Морзе был взят как классический парный потенциал, использовавшийся до нас в огромном числе работ по изучению нелинейной динамики кристаллической решетки. Графен выбран потому, что в силу уникального сочетания его физических и механических свойств (рекордно высокие прочность и жесткость, высокая тепло- и электропроводность, химическая стабильность и др.) [24, с. 92], он имеет высокий потенциал применения в нанотехнологиях [25, с. 51; 26, с. 76].

Таким образом, *целью* данной диссертационной работы является анализ устойчивости нелинейных делокализованных колебательных мод в

двумерных кристаллических решетках, а также изучение влияния этих мод на физические свойства решеток на основе молекулярно-динамических расчетов.

Для достижения указанной цели решались следующие задачи:

1. Формулировка молекулярно-динамических моделей двумерных кристаллов, включая треугольную решетку с потенциалом Морзе и решетку графена, описываемые хорошо апробированными межатомными потенциалами, для изучения свойств ДНКМ, поддерживаемых данными решетками.
2. Расчет плотностей фононных состояний исследуемых двумерных кристаллов.
3. Исследование динамики, устойчивости и свойств восьми однокомпонентных ДНКМ в двумерном кристалле с потенциалом взаимодействия Морзе.
4. Исследование динамики, устойчивости и свойств четырех однокомпонентных, двенадцати двухкомпонентных и единственной трехкомпонентной ДНКМ в кристаллической решетке графена, описываемого межатомными потенциалами Савина.
5. Изучение механизма генерации второй гармоники при возбуждении двухкомпонентных и трехкомпонентной ДНКМ в графене.

Научная новизна данной работы состоит в следующем.

1. Впервые методом молекулярной динамики показано, что для точных решений уравнений движения атомов в нелинейных двумерных решетках в виде ДНКМ существует интервал амплитуд, в пределах которого они устойчивы.

2. Впервые раскрыт механизм генерации второй гармоники при возбуждении в решетках двухкомпонентных и трехкомпонентных ДНКМ.
3. Впервые показано, что некоторые двухкомпонентные ДНКМ в графене могут приводить к возникновению аномального отрицательного давления при использовании периодических граничных условий с неизменной формой расчетной ячейки.

Практическая ценность работы заключается в расширении наших представлений о нелинейной динамике двумерных решеток. Исследованы свойства семейства точных решений в виде ДНКМ, установлены границы их устойчивости, показана возможность генерации второй гармоники и отрицательного давления.

Методы исследования - это метод молекулярной динамики и расчет фононных спектров решеток на основе решения соответствующей спектральной задачи для линеаризованных уравнений движения атомов.

На защиту выносятся следующие положения:

1. В треугольной решетке Морзе и в решетке графена имеются симметричные и несимметричные однокомпонентные ДНКМ, в первом случае середина прямолинейных траекторий атомов совпадает с решеточными положениями, а в последнем не совпадает.

2. В треугольной решетке Морзе только лишь одна однокомпонентная и одна двухкомпонентная ДНКМ имеют частоту выше фононного спектра решетки для всех амплитуд колебаний. Такие моды порождают дискретные бризеры в результате их модуляционной неустойчивости, либо дискретные

бризеры можно получить путем наложения на ДНКМ локализирующей функции с должным образом выбранными параметрами.

3. Ни одна из исследованных ДНКМ в решетке графена с потенциалом Савина не имеет частоту выше фононного спектра решетки для всех амплитуд колебаний. Следовательно, графен с потенциалом Савина, вероятнее всего, не поддерживает долгоживущих дискретных бризеров.

4. Как в треугольной решетке Морзе, так и в гексагональной решетке графена имеются ДНКМ как сохраняющие упругую изотропию решетки, так и разрушающие её. В первом случае ДНКМ создают в решетке напряжения с равными нормальными компонентами, $\sigma_{xx} = \sigma_{yy}$, а во втором $\sigma_{xx} \neq \sigma_{yy}$.

5. Как правило, ДНКМ создают в решетке отрицательные (сжимающие) напряжения, при использовании периодических граничных условий с постоянной формой расчетной ячейки. Однако в графене имеются две изотропные двухкомпонентные ДНКМ, создающие аномальное отрицательное давление за счет наличия в структуре ДНКМ вращающихся углеродных гексагонов.

6. Показано, что для двухкомпонентных и трехкомпонентной ДНКМ в обеих исследованных решетках можно подобрать амплитуды рассматриваемой моды так, что колебания становятся периодическими.

7. Все двухкомпонентные ДНКМ в треугольной решетке, а также все двухкомпонентные и единственная трехкомпонентная ДНКМ в решетке графена приводят к генерации второй гармоники. Удвоенная частота

некоторых мод может существенно (почти вдвое) превышать максимальную частоту фононного спектра решетки.

8. Для всех ДНКМ, как в треугольной решетке Морзе, так и в гексагональной решетке графена, существует критическое значение амплитуды, ниже которого моды устойчивы.

Апробация работы. При выполнении диссертационной работы были получены результаты, представленные и обсужденные на: V Открытой школе-конференции стран СНГ «Ультрамелкозернистые и наноструктурные материалы» (г. Уфа, 1-5 октября 2018 г.); VI Российско-Казахстанской молодежной научно-технической конференции «Новые материалы и технологии» (г. Барнаул, 5-12 ноября 2018 г.); Международной научной конференции «Комплексный анализ, математическая физика и нелинейные уравнения» (оз. Банное, 18-22 марта 2019 г.); XXI Зимней школе по механике сплошных сред (г. Пермь, 2019 г.); V Межрегиональной школе-конференции студентов, аспирантов и молодых ученых-физиков (г. Уфа, 15-17 апреля 2019 г.); 12th Chaotic Modeling and Simulation International Conference (г. Ханья, Греция, 18-22 июня 2019 г.), The fourth International Symposium on Atomistic and Multiscale Modeling of Mechanics and Multiphysics (г. Эрланген, Германия, 5-8 августа 2019 г.).

Публикации. Результаты исследований опубликованы в 12 печатных работах, из них 6 статей в журналах из списка ВАК, 4 работы в журналах, индексируемых в Web of Science и Scopus, одна из них в журнале квартиля Q2.

Личный вклад автора. Большинство численных результатов, вошедших в диссертацию, были получены лично автором. Автор принимал непосредственное участие в разработке компьютерных моделей, постановке задач моделирования, обсуждении полученных результатов, подготовке публикаций и докладов на научных конференциях.

Структура и объем работы. Диссертация включает введение, четыре главы, основные результаты и выводы, список литературы из 122 наименований. Работа занимает 108 страниц машинописного текста, содержит 3 таблицы, 37 рисунков.

Благодарности.

Автор признателен проф. Дмитриеву С. В. за плодотворные обсуждения полученных результатов. Работа велась при частичной финансовой поддержке гранта Российского фонда фундаментальных исследований (РФФИ) № 18-32-20158 «Новые двумерные наноматериалы: моделирование физических и механических свойств».

Глава 1. Обзор литературы: линейная и нелинейная динамика кристаллических решеток

1.1. Линейная динамика решеток

Динамическая теория кристаллических решеток была развита в монографии [1, с. 32]. Разработанный в ней математический аппарат лежит в основе современной физики твердого тела, применяется для математического описания колебаний кристаллических решёток и объясняет многие наблюдаемые физические свойства кристаллов: упругие, тепловые, электрические и оптические. Теория строится основываясь на предположении об идеальной периодичности решетки и не учитывает эффектов, связанных с наличием дефектов кристаллического строения.

Несмотря на развитость математического аппарата для решения систем линейных обыкновенных дифференциальных уравнений, описывающих малоамплитудные колебания атомов в решетке, в теории линейных колебаний решетки остается ещё немало задач, требующих решения.

В последние годы значительный вклад в аналитическое изучение линейных колебаний решеток вносят работы научной школы Кривцова. В них разработана кинетическая теория, описывающая аномальное распространение тепла в нестационарных режимах [27, с. 349; 28, с. 178; 29, с. 202; 30, с. 409]. В работе [31, с. 73] исследовано влияние вязкой среды на процесс перехода гармонической цепочки к тепловому равновесию при возбуждении атомов заданием начальных скоростей при нулевых начальных смещениях. Показано, что наличие демпфирования качественно меняет особенности этого процесса. Нестационарный процесс обычно имеет две

стадии. На первом этапе, реализующимся при достаточно слабом затухании, наблюдаются колебания кинетической и потенциальной энергий с уменьшающейся амплитудой. На втором этапе колебания исчезают, и кинетическая и потенциальная энергии монотонно затухают. На больших временах потенциальная энергия затухает пропорционально $t^{-3/2}$, а кинетическая энергия пропорционально $t^{-5/2}$.

Формула для расчета энтропии для уравнения баллистического распространения тепла была получена в [32, с. 58]. Энтропия была рассчитана для синусоидального начального возмущения температуры. Показано, что процессы, описываемые уравнением баллистического распространения тепла, необратимы из-за увеличения энтропии.

При изучении эволюции мгновенного теплового возмущения в гармонической цепочке конечной длины было описано явление теплового эха [33, с. 76], которое состоит в периодическом резком увеличении амплитуды колебаний с периодом, пропорциональным длине цепочки. Амплитуда для каждого последующего эха ниже, чем для предыдущего. Показано, что тепловое эхо в термодинамическом пределе описывается функцией Эйри.

В работах Кузькина [34, с. 1574; 35, с. 1404] аналитически описаны тепловые процессы, протекающие в бесконечных гармонических кристаллах, имеющих элементарную ячейку с произвольным числом частиц. Первоначально частицы имеют нулевые смещения и случайные скорости, соответствующие некоторому начальному профилю температуры. Получено

пространственное распределение кинетических температур, соответствующих степеням свободы элементарной ячейки, в любой момент времени. Показано, что температуры представлены в виде суммы двух слагаемых. Первый член описывает высокочастотные колебания температур, вызванные локальным переходом в тепловое равновесие на коротких временах. Второе слагаемое описывает медленные изменения профиля температуры, вызванные баллистическим переносом тепла. Показано, что при переносе тепла локальные значения температур, соответствующие степеням свободы элементарной ячейки, как правило, различны. Показана сильная анизотропия баллистического переноса тепла в графене. Исследован процесс перехода к тепловому равновесию в случае, когда в нулевой момент времени частицы имеют нулевые смещения и случайные скорости. Исследована временная эволюция кинетических температур, соответствующих различным степеням свободы элементарной ячейки. Показано, что температуры колеблются во времени и стремятся к различным равновесным значениям (аномальный эффект, связанный с линейностью решетки). На больших временах кристалл приближается к тепловому равновесию, то есть состоянию, в котором температуры постоянны во времени.

1.2. Типы нелинейных возбуждений кристаллических решеток

В данном разделе будут представлены различные нелинейные возбуждения, поддерживаемые кристаллами, в их числе: ударные волны сжатия, краудионы, а также колебательные возбуждения, такие как дефектные моды, дискретные бризеры и делокализованные колебания.

1.2.1. Волны солитонного типа

Практически все твердые тела поддерживают распространение ударных волн сжатия [36, с. 495; 37, с. 781; 38, с. 2088]. Ударные волны используются в различных технологиях, позволяя изменять структуру и свойства металлов и сплавов, кроме того, интерес к ним проявляет и фундаментальная наука, поскольку ударное нагружение позволяет изучить поведение твердых тел при высоких скоростях деформации. Теоретически и экспериментально изучаются полиморфные превращения твердых тел в различных структурных состояниях, обсуждается проблема достижения теоретического предела прочности конденсированного материала, аномальное повышение динамического предела текучести с ростом температуры, а также эффекты перегрева в кристаллическом состоянии [36, с. 497; 37, с. 785; 38, с. 2089]. Волны солитонного типа сжатия-растяжения могут возбуждаться в кристалле Pt_3Al гармоническим внешним воздействием на частоте в щели фононного спектра [39, с. 2162]. Такие волны генерируются из-за возбуждения дискретных бризеров с мягкой нелинейностью. Обнаруженные волны способны распространяться на тысячи нанометров вдоль кристалла Pt_3Al без потери своей формы и скорости [39, с. 2165].

Другим примером неколебательного возбуждения в кристалле является краудион – межузельный атом, помещенный в плотноупакованный атомный ряд. Краудионы вносят вклад в диффузию в металлах [40, с. 209; 41, с. 61], осуществляют массоперенос при радиационном воздействии на металлы [42; с. 89; 43, с. 82; 44, с. 62], в ходе пластической деформации [45, с. 103] или при бомбардировке поверхности кристалла отдельными атомами или атомными кластерами [46, с. 251; 47, с. 72]. На рис. 2 схематически представлено возникновение краудиона в плотноупакованном ряду кристалла, подвергнутого бомбардировке ускоренными атомами (ионами).

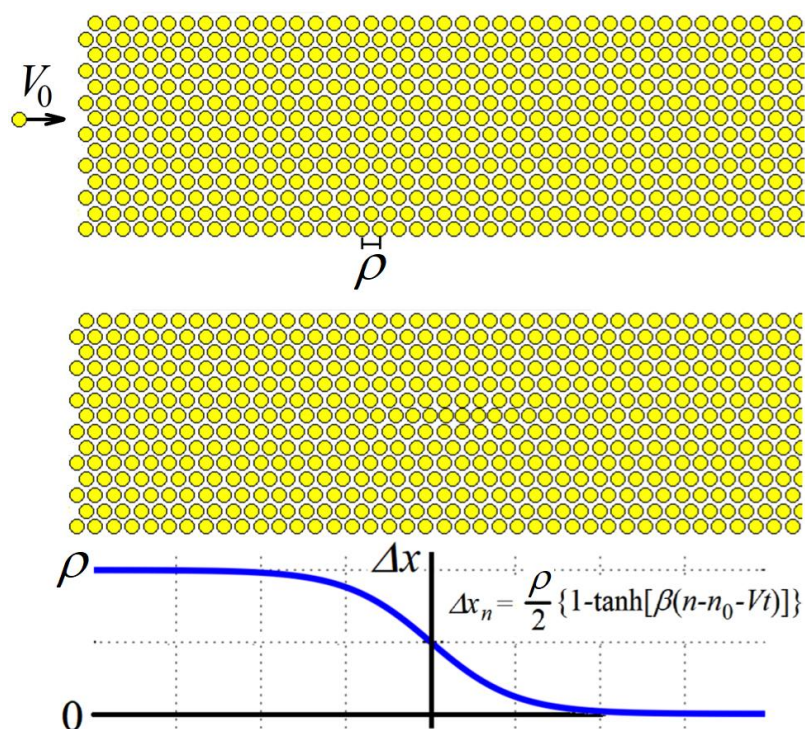


Рис. 2. Иллюстрация к возникновению дозвукового краудиона (т.е. движущегося медленнее скорости звука) в кристалле в результате бомбардировки поверхности атомами. Сверху: идеальный кристалл и атом, летящий со скоростью V_0 . Посередине: межузельный атом в плотноупакованном ряду кристалла. Внизу: схематично показаны атомные

перемещения в плотноупакованном ряду, содержащем межузельный атом. Перемещения хорошо аппроксимируются кинком в виде гиперболического тангенса.

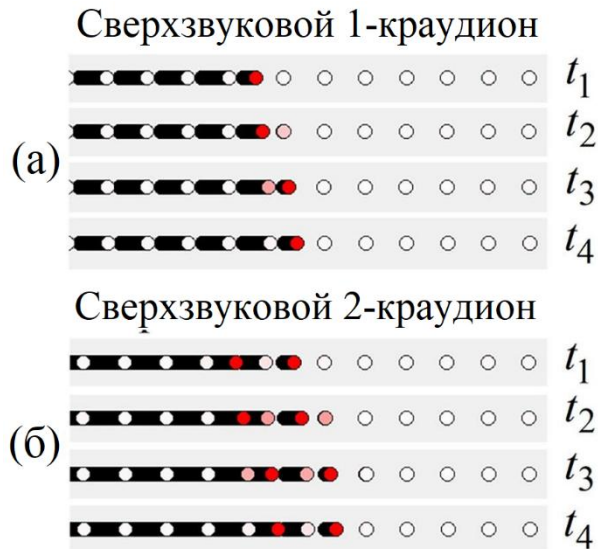


Рис. 3. Динамика (а) 1- и (б) 2-краудионов, движущихся со скоростью выше скорости продольного звука в кристалле. Более насыщенный красный цвет указывает на более высокую скорость атомов (кинетическую энергию). Для разных моментов времени $t_1 < t_2 < t_3 < t_4$ показаны только атомы плотноупакованных рядов, в которых распространяются краудионы. Краудионы распространяются слева направо и в течение времени $t_4 - t_1$ проходят одно межатомное расстояние. Как 1- краудион, так и 2-краудион несет один межузельный атом [46, с. 254].

Краудионы могут двигаться в кристалле и со сверхзвуковой скоростью [46-49], в этом случае сверхзвуковые краудионные кластеры (N -краудионы) намного более эффективно осуществляют перенос вещества, поскольку они

имеют большую длину пробега и для их возбуждения необходима меньшая энергия [46; с. 255; 47, с. 52; 48, с. 349; 49, с. 65]. Дозвуковые краудионы локализованы примерно на десятке атомов (см. рис. 2), а сверхзвуковые N -краудионы сильно локализованы, так, что с большой скоростью движутся одновременно N атомов. На рис. 3 сопоставлено движение 1- и 2-краудионов. Насыщенность красного цвета атомов показывает их кинетическую энергию. Атомы движутся слева направо вдоль плотноупакованных рядов. Как 1-краудион, так и 2-краудион несет один межузельный атом [46, с. 256].

1.2.2. Пространственно локализованные колебания: колебания, локализованные на дефектах, и дискретные бризеры (ДБ)

На дефектах кристаллической структуры могут возбуждаться колебательные моды, имеющие частоту вне фононного спектра. Самым простым примером является примесный атом замещения, масса которого меньше атомов кристаллической матрицы. Поскольку частота осциллятора растет с уменьшением его массы, то частота собственных колебаний легкого атома может оказаться выше фононного спектра, в результате чего он не будет резонировать с фононами и не будет терять свою колебательную энергию на их возбуждение. Важно, что даже при малых амплитудах, частота колебаний лёгкого атома лежит выше спектра и такие колебательные моды могут существовать и в пределе малых амплитуд, то есть могут быть описаны с позиций линейной теории. Теория свидетельствует об экспоненциальной локализации колебаний на дефекте, то есть с удалением от

дефекта амплитуда колебаний убывает экспоненциально быстро. Разумеется, что колебания, локализованные на дефекте, будут существовать и при значительных амплитудах колебаний, и для описания такого режима необходимо учитывать нелинейность системы.

Долгое время подразумевалось, что идеальные (бездефектные) решетки не способны поддерживать пространственно локализованные колебания, и для линейных кристаллов это действительно так. Однако оказалось, что локализованные колебания возможны в бездефектных решетках, если они нелинейны. В этом случае выход частоты осциллятора из спектра малоамплитудных колебаний возможен за счет зависимости частоты нелинейного осциллятора от амплитуды. Такие колебательные моды получили название дискретных бризеров (ДБ) или внутренних колебательных мод (в англоязычной литературе *discrete breathers* или *intrinsic localized modes*).

Впервые ДБ были найдены Долговым 30 лет назад [7, с. 908]. Он показал, что цепочка частиц с нелинейными связями допускает существование пространственно локализованных колебательных мод. Тем самым было установлено, что локализованные колебания возможны не только вблизи дефектов. Работа Долгова осталась практически незамеченной научным сообществом и ДБ были открыты во второй раз в работе Сиверса и Такено [8, с. 66], которая породила волну исследований в работах, ставших классическими, существование ДБ было строго доказано, и было показано, что они могут быть устойчивыми [8, с. 68; 55, с. 1633; 56, с. 439]. Более

поздние результаты по изучению ДБ в нелинейных решетках различного типа и различной размерности, а также в реальных физических системах, отражены в обзорах [9, с. 92; 11, с. 52; 13, с. 93].

На рис. 4 показаны примеры ДБ в одномерной цепочке с кубической нелинейностью (взято из работы [57, с. 2825]). Приведены перемещения узлов, u_n , как функции номера узла, n . На (а) ДБ центрирован на узле (мода Сиверса-Такено [8, с. 67]), а на (б) посередине между двух соседних узлов (мода Пейджа [58, с. 49]). Перемещения экспоненциально быстро убывают с удалением от центра бризера. Частота ДБ оказывается выше фононного спектра цепочки потому что рассматриваемая модель имеет жесткий тип нелинейности, когда частота колебательной моды растет с амплитудой.

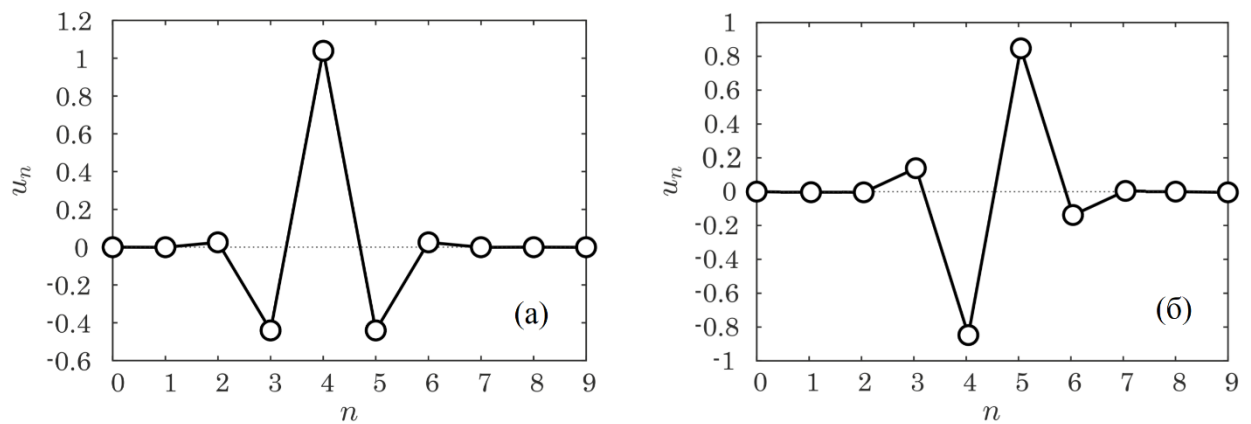


Рис. 4. Примеры ДБ в одномерной цепочке с кубической нелинейностью (взято из работы [57, с. 2826]). Приведены перемещения узлов, u_n , как функции номера узла, n . На (а) ДБ центрирован на узле (мода Сиверса-Такено [8, с. 69]), а на (б) посередине между двух соседних узлов (мода Пейджа [58, с. 55]).

ДБ существуют потому, что их частота лежит вне спектра малоамплитудных фононных волн. Частоты ДБ может выйти за пределы фононного спектра за счет нелинейности системы, ведь частота нелинейных колебаний, в отличие от линейных, зависит от амплитуды. Следовательно, ДБ являются существенно нелинейными колебательными модами и не могут существовать в линейных системах. Кроме того, для существования ДБ необходима дискретность среды для того, чтобы фононный спектр был ограниченным.

Таким образом, нелинейность и дискретность среды - это два необходимых условия существования ДБ.

Первые работы, посвященные изучению ДБ, рассматривали одномерные решетки (цепочки) [7, с. 908; 8, с. 67; 58, с. 73]. Впоследствии были рассмотрены двумерные и трехмерные модельные решетки [59, с. 301; 60, с. 355; 61, с. 113; 62, с. 66; 63, с. 389; 64, с. 91]. Немало работ посвящено изучению ДБ в реальных двумерных и трехмерных кристаллах [11, с. 72].

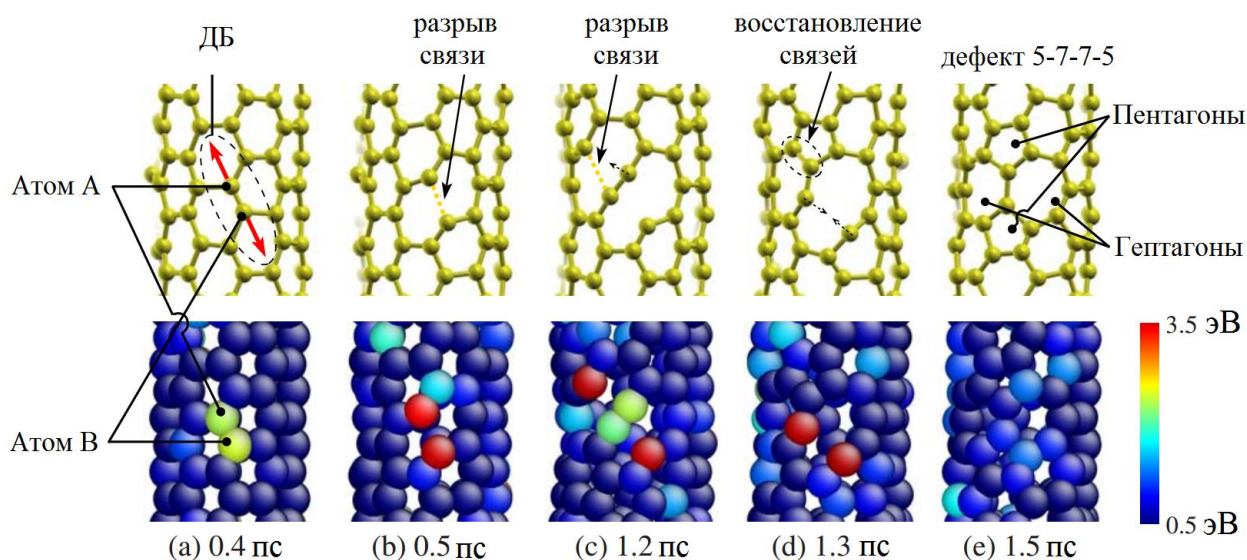


Рис. 5. Появление дефекта 5-7-5-7 в углеродной нанотрубке, растянутой на 10%, за счет возбуждения ДБ. В верхнем ряду - положения атомов углерода, а в нижнем ряду - распределение энергии по атомам [75, с. 73].

ДБ были найдены и изучены в графене (наводороженном графене) [65, с. 81; 66, с. 95] графене [14, с. 85; 67, с. 224; 68, с. 115; 69, с. 83; 70, с. 3394; 71, с. 542; 72, с. 1076; 73, с. 264], углеродных нанотрубках [74, с. 34; 75, с. 61; 76, с. 409] и нитриде бора [77, с. 3554].

Щимада и др. в работе [75, с. 63] показали, что в углеродной нанотрубке, растянутой вдоль оси на 6 % и более, оказывается энергетически выгодным появление дефекта 5-7-5-7, и что такой дефект возникает, если возбудить ДБ (см. рис. 5). Этот результат показывает, что ДБ могут инициировать появление дефектов в структуре наноматериалов.

Щелевой ДБ (то есть ДБ с частотами в щели фононного спектра) можно возбудить в однородно растянутом в направлении зигзаг графене (деформация прикладывается с целью получения щели в фононном спектре, поскольку в недеформированном графене щель отсутствует) [71, с. 543].

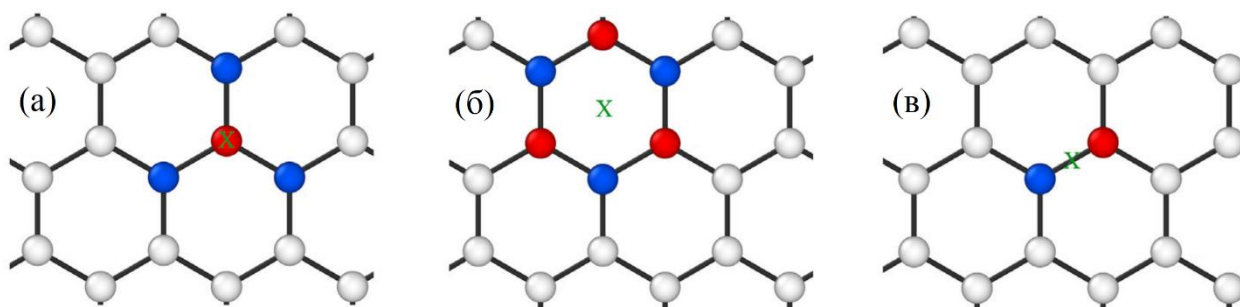


Рис. 6. Три различных варианта центрирования ДБ с поперечными колебаниями в графене: (а) на атоме, (б) в центре шестиугольника и (в) в центре валентной связи. Эти три конфигурации были названы Тип 1, 2 и 3, соответственно. Адаптировано из работы [14, р. 52].

В работе [72, с. 1077] авторы возбудили ДБ в графене с колебаниями атомов перпендикулярно листу. Эти исследования были продолжены в работе [14, с. 61], где было показано, что можно возбудить три различных ДБ, отличающихся центрированием, как показано на рис. 6: ДБ может быть центрирован (а) на атоме, (б) в центре шестиугольника и (в) в центре валентной связи.

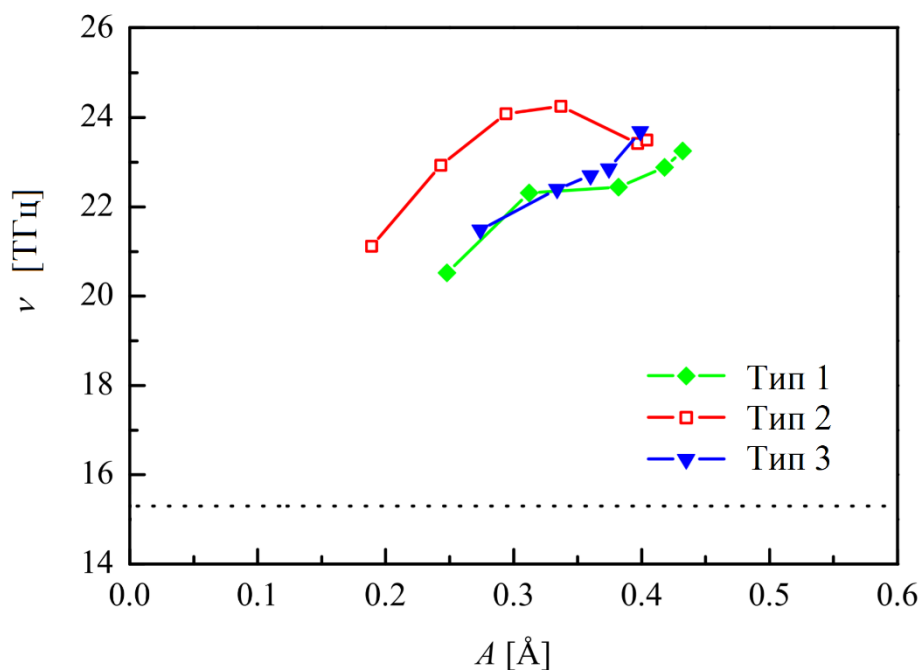


Рис. 7. Горизонтальная пунктирная линия показывает верхний край фононных колебаний графена перпендикулярно плоскости листа. Также показаны частотно-амплитудные зависимости для поперечных ДБ,

центрированных в разных точках относительно решетки: на атоме (тип 1 - ромбы), в центре шестиугольника (тип 2 - открытые квадраты) и в центре валентной связи (тип 3 - треугольники). Адаптировано из работы [14, с. 66].

То, что эти ДБ действительно различны, следует из того, что они имеют разные зависимости частоты от амплитуды, как показано на рис. 7. Частоты ДБ лежат внутри фононного спектра графена, но выше спектра колебаний по нормали к плоскости графена. Колебания в плоскости и из плоскости слабо связаны, что и обеспечивает возможность существования таких ДБ. Частота ДБ возрастает с амплитудой, то есть имеем жесткий тип нелинейности.

В недавней работе сообщалось о существовании ДБ в недеформированном графене с колебаниями в плоскости листа [73, с. 266]. Однако в работе [14, с. 67] утверждается, что речь там идёт о колебательной моде, локализованной на дефекте, а не о ДБ. Оказалось, что потенциал Терсоффа, который использовался в работе [73, с. 266], допускает существования топологического дефекта, с одной валентной связью, имеющей длину больше, чем остальные связи. Два атома, соединенных такой удлинённой связью, могут колебаться с частотой выше фононного спектра.

Имеется несколько работ, где для анализа ДБ использовались первопринципные расчеты, которые были сделаны для двумерных материалов (графан [66, с. 95] и однородно деформированный графен [78, с. 74; 79, с. 620]). В этих расчетах эмпирические межатомные потенциалы не

используются и поэтому они точнее чем молекулярно-динамические расчеты.

1.2.3. Делокализованные нелинейные колебательные моды (ДНКМ)

Делокализованные нелинейные колебательные моды (ДНКМ) – это точные решения уравнений движения атомов, которые могут быть найдены с использованием точечных групп симметрии изучаемой решетки. Алгоритм поиска ДНКМ был разработан Чечиным и Сахненко [2, с. 51; 3, с. 55; 4, с. 258] и затем использовался в других работах. Используя теоретико-групповой подход, были получены буши как для отдельных молекул [3, с. 56], так и для решеток, например, для треугольной [5, с. 62] и гексагональной [6, с. 11] решеток. Движение всех атомов в ДНКМ может быть описано системой N обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка, и такие моды будут называться N -компонентными. Как уже говорилось во введении, треугольная решетка поддерживает четыре однокомпонентных ($N=1$) и 14 двухкомпонентных ($N=2$) ДНКМ с колебаниями в плоскости решетки [5, с. 63]. Двумерная гексагональная решетка (как у графена) поддерживает четыре однокомпонентных ($N=1$), двенадцать двухкомпонентных ($N=2$) и одну трехкомпонентную ($N=3$) ДНКМ с колебаниями атомов в плоскости [6, с. 12].

1.3. Связь между делокализованными и пространственно локализованными колебательными модами

Оказывается, что между ДБ и ДНКМ существует тесная связь. Во-первых, ДНКМ при не слишком малых амплитудах колебаний оказываются модуляционно неустойчивыми (систематический анализ их устойчивости составляет важную часть данной работы). Те из ДНКМ, которые имеют частоту вне фононного спектра решетки, в результате модуляционной неустойчивости распадаются на так называемые хаотические ДБ. Такое явление было впервые обнаружено Бурлаковым с соавторами для одномерной решетки [15, с. 114] и оказалось, что оно является очень общим и проявляется для решеток более высокой размерности [17, с. 75; 18, с. 72].

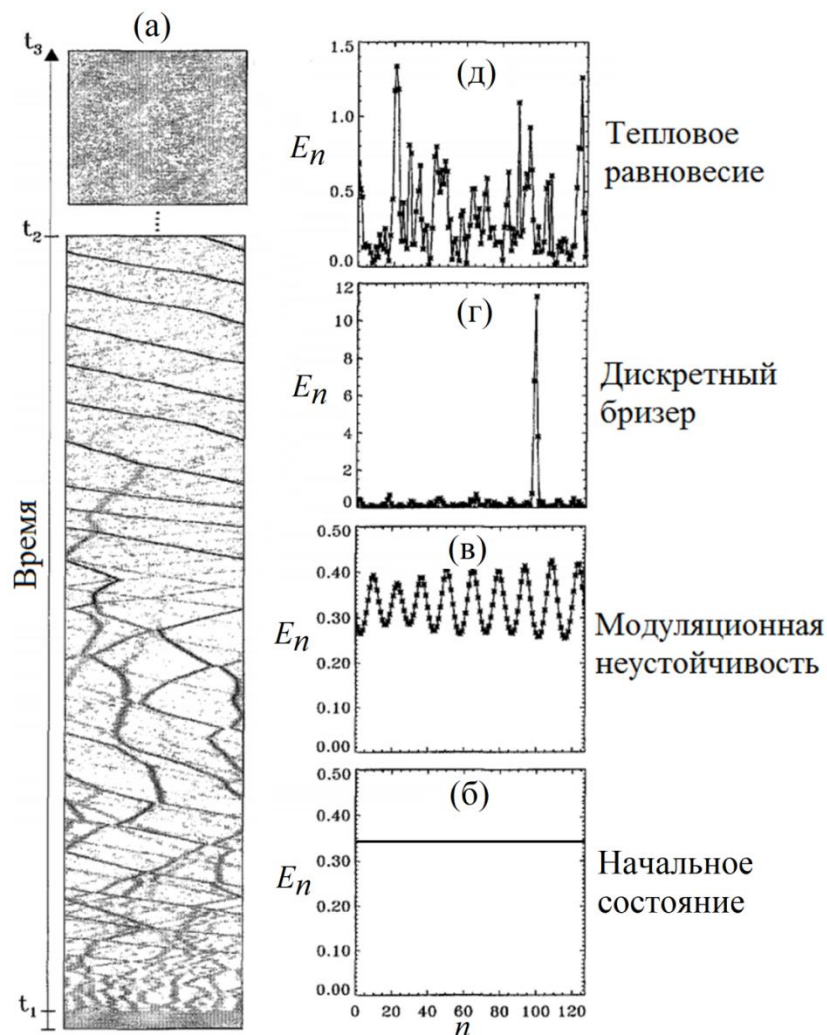


Рис. 8. Развитие модуляционной неустойчивости коротковолновой фононной моды с образованием хаотического ДБ в одномерной нелинейной решетке. Адаптировано из работы [16, с. 51].

На рис. 8, по результатам работы [16, с. 52], показано развитие модуляционной неустойчивости коротковолновой моды в нелинейной цепочке. Первоначально в цепочке четные и нечетные узлы отклонялись на величину A и $-A$ с нулевыми начальными скоростями, с целью возбуждения коротковолновой колебательной моды с амплитудой A . Если A выше определенного критического значения, такая мода неустойчива. На рис. 8(б) показано распределение энергии системы по частицам в нулевой момент времени, откуда видно, что все частицы имеют одинаковую энергию. Однако с развитием неустойчивости моды сначала появляется модуляция в распределении энергии [рис. 8(в)], а затем практически вся энергия системы собирается на одном ДБ, который весьма медленно излучает свою энергию и, в конечном итоге, система приходит к тепловому равновесию [рис. 8(г)]. На рис. 8(а) представлена временная эволюция плотности энергии в цепочке. В приведенном примере образовался один ДБ, поскольку длина цепочки была невелика. В более длинных цепочках образуется серия ДБ.

В работе [18, с. 62] было показано, что модуляционная неустойчивость ДНКМ с частотой выше фононного спектра приводит к возникновению хаотических ДБ и в двумерной гексагональной решетке с кубической нелинейностью. На рис. 9, по результатам работы, представлена эволюция

распределения энергии по частицам для этого случая. В момент времени $t=0$ энергия распределена поровну между всеми частицами (не показано на рисунке). Развитие неустойчивости ДНКМ приводит к появлению неоднородности распределения энергии в момент времени $t=680$, которая проявляется в виде волны в вертикальном направлении, рис. 9(а). К моменту времени $t=1120$ в системе образуются пять ДБ, каждый из которых локализован на паре соседних частиц. ДБ постепенно излучают свою энергию и в итоге, к моменту времени $t=2400$, система приходит в состояние теплового равновесия, как представлено на рис. 9 (г).

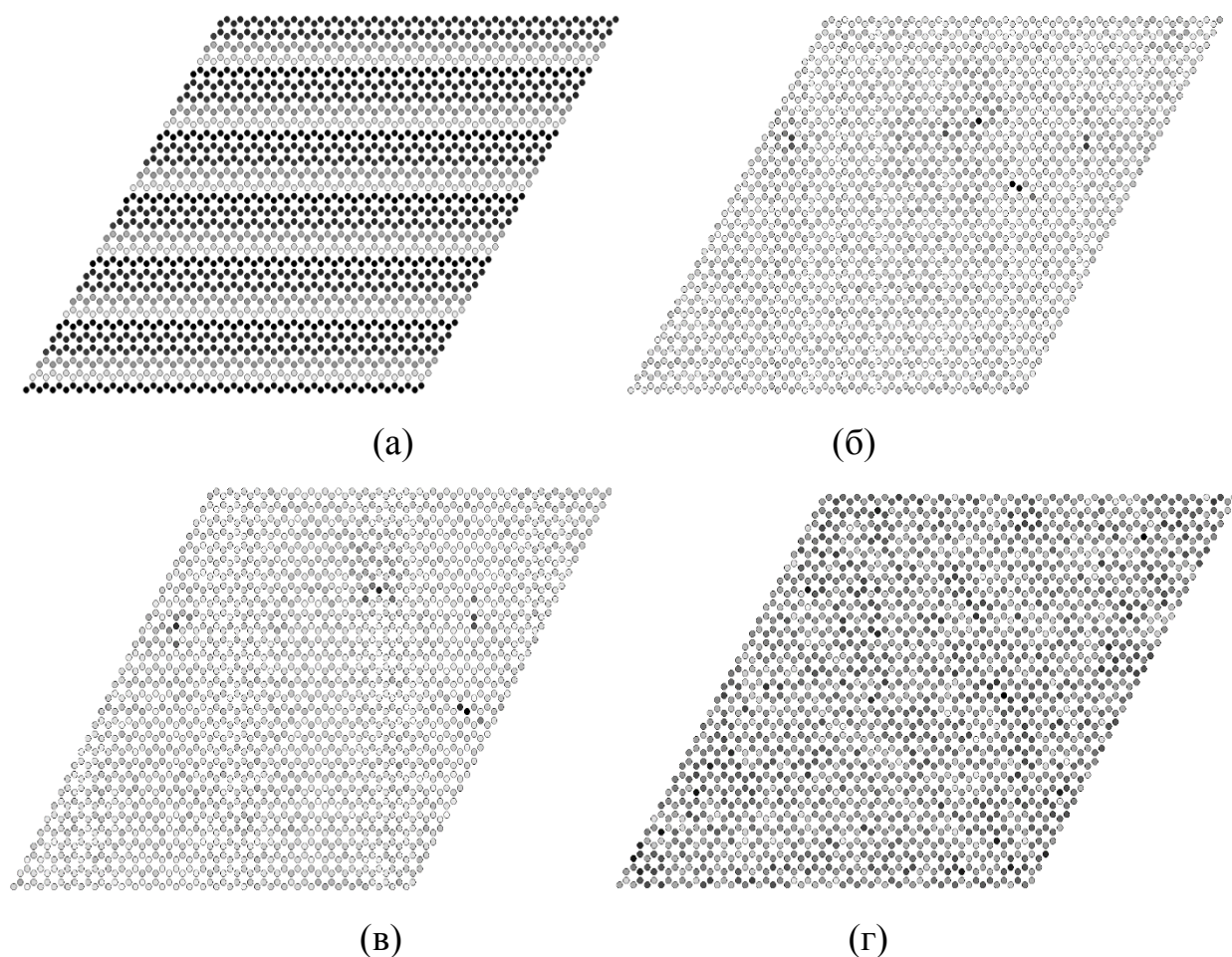


Рис. 9. Эволюция распределения энергии по частицам в результате развития модуляционной неустойчивости ДНКМ в двумерной гексагональной решетке

с кубической нелинейностью. Более темному цвету соответствует более высокая энергия частицы. Картины представлены для моментов времени (а) $t=680$, (б) $t=1120$, (в) $t=1160$, (г) $t=2400$. Адаптировано из работы [18, с. 64].

Существует ещё один аргумент в пользу того, что между ДНКМ и ДБ существует связь. В ряде работ было показано, что дискретные бризеры могут быть получены путем наложения локализирующей функции на ДНКМ, при условии, что её частота лежит вне фононного спектра решетки. ДБ в графене с поперечными колебаниями, представленные на рис. 6 как раз и были получены по такой схеме [14, с. 73]. Дело в том, что графен поддерживает ДНКМ с поперечными колебаниями, когда две его треугольные подрешетки отклоняются в нулевой момент времени в направлении нормали на величину A и $-A$ с нулевыми начальными скоростями. Все три типа ДБ, показанные на рис. 6 были получены наложением гауссовской колоколообразной радиально-симметричной функции на такую ДНКМ. Разница между тремя типами ДБ состоит лишь в том, где выбран центр локализирующей функции. Отметим, что локализирующая функция содержит один параметр – степень локализации. Он обычно подбирается из условия получения ДБ с максимальным временем жизни.

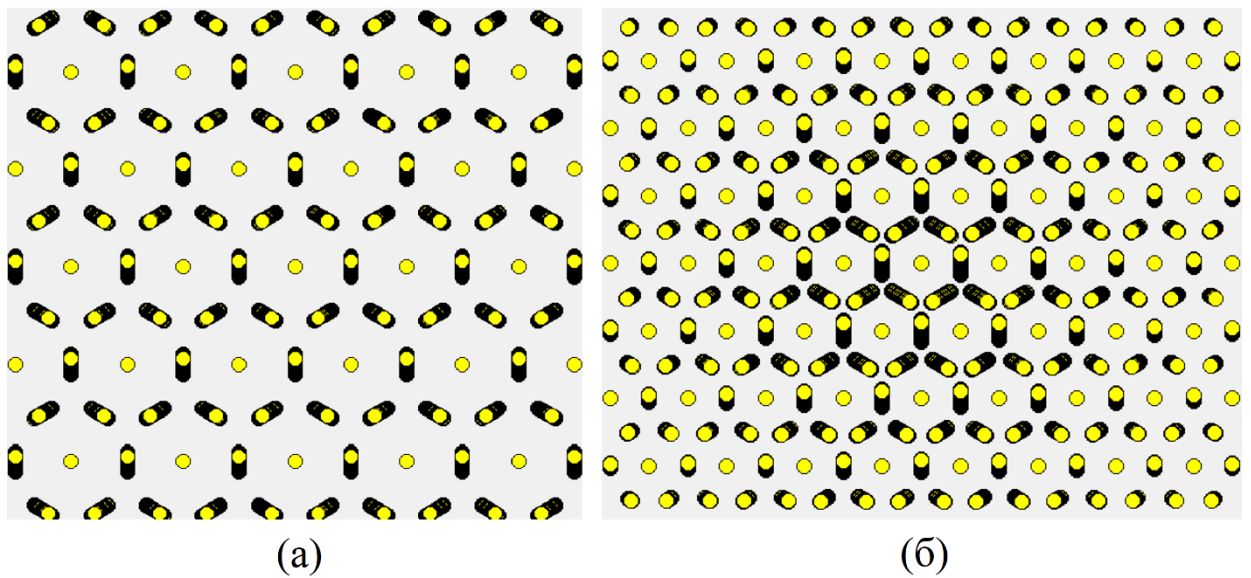


Рис. 10. (а) Однокомпонентная ДНКМ в треугольной решетке Морзе, частота которой лежит выше фононного спектра. (б) Радиально-симметричный ДБ, полученный наложением радиально-симметричной локализирующей функции на эту ДНКМ. Адаптировано из работы [13, с. 201].

Этот же подход был применен к нахождению начальных условий для запуска ДБ с радиальной симметрией в двумерной треугольной решетке с потенциалом Морзе в работе [13, с. 202]. Однокомпонентная ДНКМ, на которую накладывалась локализирующая функция, и получившийся ДБ представлены на рис. 10 (а) и (б), соответственно. Отметим, что частота ДНКМ лежит выше фононного спектра треугольной решетки.

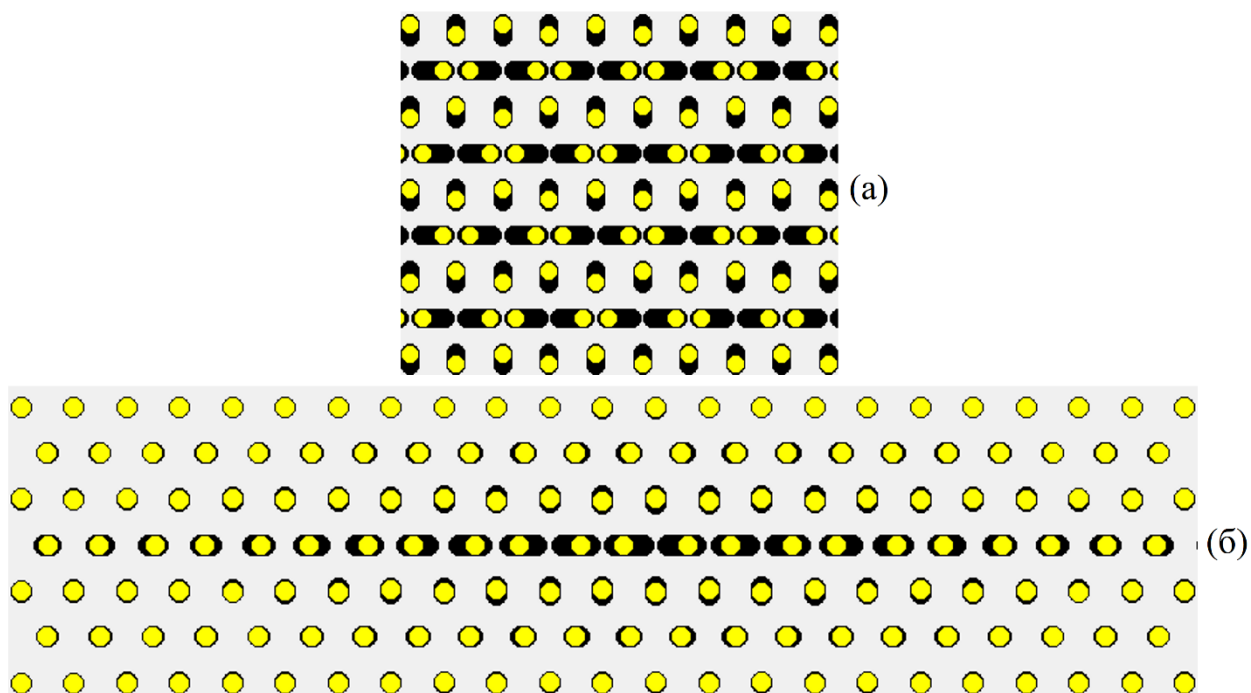


Рис. 10. (а) Двухкомпонентная ДНКМ в треугольной решетке Морзе, частота которой лежит выше фононного спектра. (б) «Стержневой» ДБ, полученный наложением локализирующей функции на эту ДНКМ. Адаптировано из работы [13, с. 202].

Интересно, что один и тот же кристалл может поддерживать различные ДБ. Та же треугольная решетка Морзе поддерживает двухкомпонентную ДНКМ с частотой выше фононного спектра и на нее также можно наложить локализирующую функцию с целью получения ДБ. Такая ДНКМ и построенный на её основе ДБ представлены на рис. 11 (а) и (б), соответственно.

Итак, заключаем, что ДНКМ и ДБ оказываются тесно связанными, поскольку ДБ могут быть получены из ДНКМ либо в результате

модуляционной неустойчивости, либо путем наложения локализирующих функций.

1.4. Роль нелинейных колебаний в формировании физических и механических свойств решеток

Начнем с описания работ, где исследовалось влияние ДНКМ на свойства решеток. В работе [18, с. 62] было изучено влияние однокомпонентных ДНКМ на упругие свойства двумерной гексагональной решетки с кубической нелинейностью. Результаты этой работы частично воспроизведены на рис. 11, где в зависимости от амплитуды моды A показаны: (а) модули Юнга E_x, E_y ; (б) коэффициенты Пуассона ν_{xy}, ν_{yx} ; (в) частота ДНКМ ω , (г) средняя за период энергия в расчете на частицу $\langle e \rangle$; (д) средние за период напряжения $\langle \sigma_{xx} \rangle, \langle \sigma_{yy} \rangle$ (во всех случаях $\sigma_{xy}=0$). Легко видеть, что возбуждение ДНКМ может нарушить упругую изотропию решетки (на рис. 11 слева), но некоторые ДНКМ не нарушают изотропию (на рис. 11 справа). О нарушенной изотропии можно судить по различию модулей Юнга E_x, E_y и коэффициентов Пуассона ν_{xy}, ν_{yx} (в изотропной решетке $E_x = E_y$ и $\nu_{xy} = \nu_{yx}$). В целом, возбуждение ДНКМ приводит к изменению упругих констант решетки.

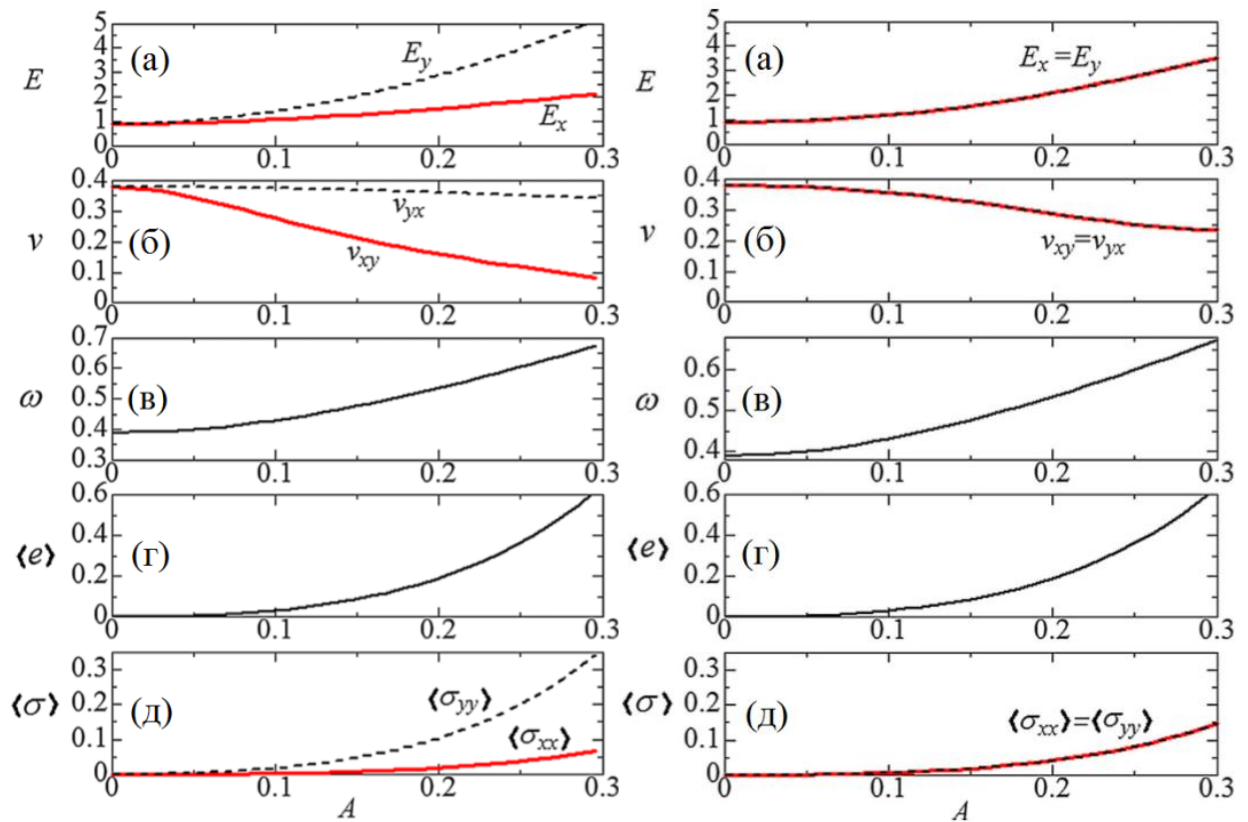


Рис. 11. Влияние ДНКМ на свойства гексагональной решетки с кубической нелинейностью. Слева (справа) даны результаты для ДНКМ нарушающей (не нарушающей) упругую изотропию решетки. В зависимости от амплитуды моды A показаны: (а) модули Юнга E_x, E_y ; (б) коэффициенты Пуассона ν_{xy}, ν_{yx} ; (в) частота ДНКМ ω , (г) средняя за период энергия в расчете на частицу $\langle e \rangle$; (д) средние за период напряжения $\langle \sigma_{xx} \rangle, \langle \sigma_{yy} \rangle$ (во всех случаях $\sigma_{xy}=0$). Адаптировано из работы [18, с. 66].

В литературе имеются данные о влиянии ДБ на механические и физические свойства нелинейных решеток и реальных кристаллов [11, с. 51; 80, с. 2926], полученные, в основном, из молекулярно-динамических расчетов, и имеющих косвенное экспериментальное подтверждение [81, с.

2443; 82, с. 51; 83, с. 37; 84, с. 73]. Чтобы говорить о влиянии ДБ на свойства кристаллов следует описать их основные свойства. ДБ в кристаллах имеют энергию порядка одного эВ, сосредоточенную на группе от одного до десятка атомов [11, с. 52]. В ядре ДБ амплитуда колебаний атомов может достигать величины 15-20 % от межатомного расстояния. Близко расположенные ДБ могут осуществлять обмен энергией друг с другом по аналогии со слабо связанными осцилляторами [85, с. 870; 86, с. 256; 87, с. 70]. Нередко ДБ способны перемещаться по кристаллу на значительные расстояния, осуществляя перенос энергии [60, с. 356; 91, с. 230]. Скорость движения ДБ в металлах и сплавах составляет величину порядка 10 % скорости продольного звука [88, с. 79]. ДБ могут возникать за счет тепловых флуктуаций [92; с. 84], при плазменной обработке поверхности [82, с. 50] или под воздействием потока частиц [81, с. 2444; 93, с. 12].

Импульсный электрический ток высокой плотности способен возбуждать ДБ, которые приводят к релаксации дефектов в металле после его интенсивной пластической деформации [94, с. 5] или к проявлению эффекта электропластичности [95, с. 15; 96, с. 71].

ДБ, являясь существенно нелинейными колебательными модами, способны давать вклад в тепловое расширение кристаллов, приводить к анизотропии теплового расширения и к неоднородности теплового расширения на микроуровне (см. рис. 12, взятый из работы [80, с. 2930]).

Поскольку ДБ способны снижать энергии активации зарождения и миграции вакансий и межузельных атомов, они вносят вклад в диффузию,

способствуют отжигу радиационных повреждений, повышают ионную проводимость [101, с. 381].

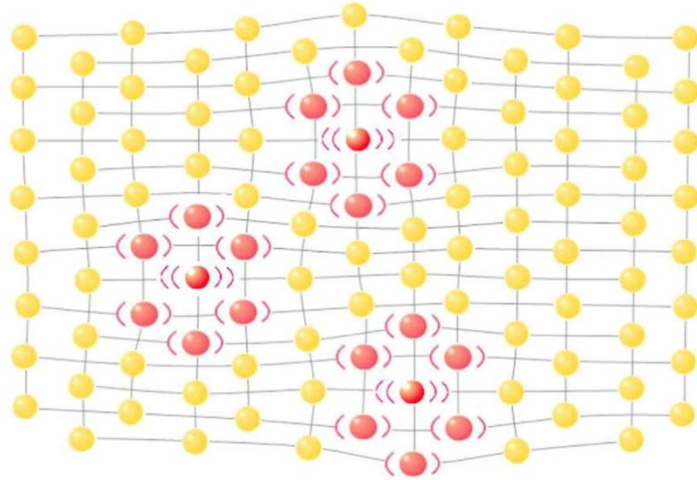


Рис. 12. Схематическая иллюстрация дилатации кристаллической решетки за счет возбуждения ДБ [80, с. 2931].

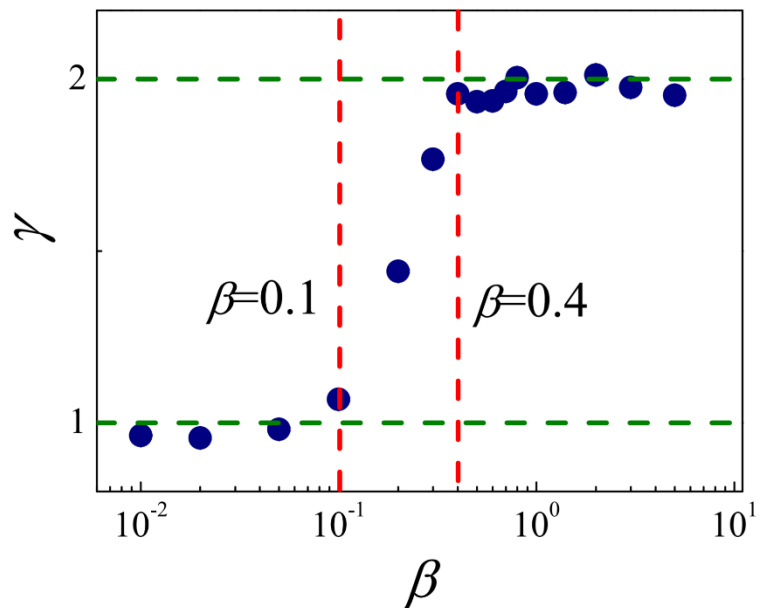


Рис. 13. Показатель γ как функция параметра нелинейности цепочки β . При малых β процесс переноса тепла является баллистическим ($\gamma=1$) но с ростом степени нелинейности системы наблюдается переход от баллистического к нормальному переносу тепла ($\gamma=2$), подчиняющемуся закону Фурье. Адаптировано из работы [102, с. 115].

ДБ рассеивают фононы, поэтому можно предположить, что они снижают теплопроводность кристаллов. Действительно в работе [102, с. 116] было убедительно показано, что именно ДБ ответственны за переход от баллистического к нормальному переносу тепла, подчиняющемуся закону Фурье (см. рис. 13).

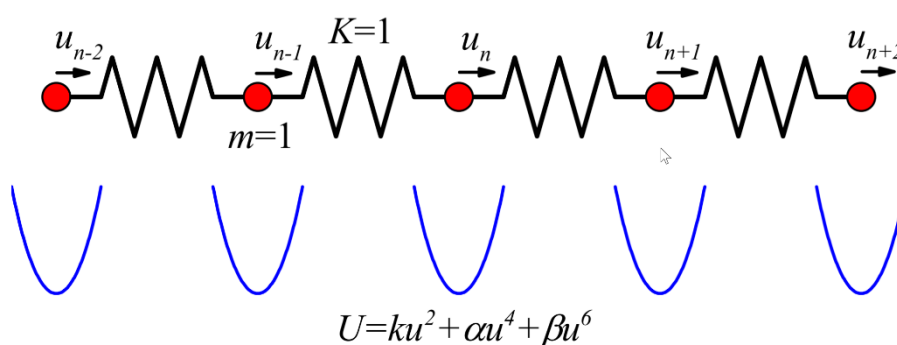


Рис. 14. Цепочка гармонически связанных точечных частиц единичной массы, взаимодействующих с полиномиальным локальным потенциалом шестой степени. Взято из работы [103, с. 93].

В работе [103, с. 93] для одномерной цепочки с гармоническими связями и нелинейным локальным потенциалом исследовалось влияние ДБ на теплоёмкость цепочки (см. рис. 14). Локальный потенциал содержал параметр, позволяющий рассматривать как жесткий, так и мягкий тип нелинейности. Рассматривалась модуляционная неустойчивость коротковолновой моды, когда в системе сначала появлялись хаотические ДБ, а затем она приходила в состояние теплового равновесия. Теплоёмкость

определялась как отношение потенциальной энергии системы к кинетической. Результат, представленный на рис. 15 говорит о том, что в системе с жестким (мягким) типом нелинейности ДБ понижают (повышают) теплоемкость.

В целом, следует констатировать, что вклад ДНКМ и ДБ в свойства реальных кристаллов выяснен еще не до конца.

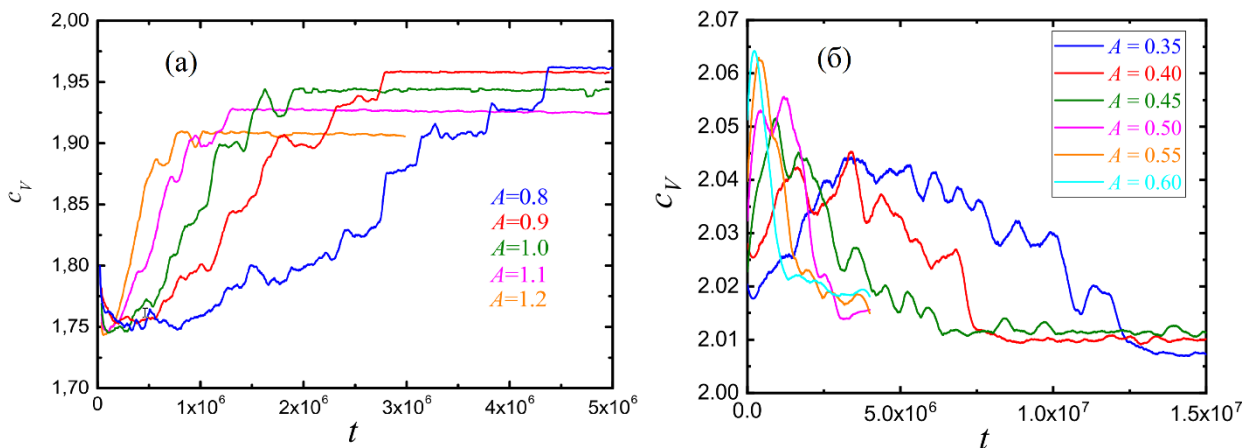


Рис. 15. Удельная теплоемкость как функция времени для различных амплитуд возбуждаемой коротковолновой моды для (а) $\alpha = 1/24$ (жесткий тип нелинейности) и (б) $\alpha = -1/24$ (мягкий тип нелинейности). На (а) теплоемкость минимальна, когда в системе имеются ДБ, и она увеличивается, когда система приближается к тепловому равновесию. На (б) имеем противоположный результат. Взято из работы [103, с. 94].

1.5. Заключение по главе

Анализ литературы, представленный выше, свидетельствует о недостаточной изученности ДНКМ в двумерных решетках. В частности, не изучена устойчивость ДНКМ в треугольной решетке Морзе и гексагональной

решетке графена. Имеются лишь отрывочные сведения о свойствах одно- двух- и трехкомпонентных ДНКМ в решетке графена.

Поэтому в данной диссертационной работе в качестве объекта исследования взяты треугольная решетка Морзе и гексагональная решетка графена. Для обеих решеток ДНКМ известны, вплоть до двухкомпонентных для треугольной решетки и вплоть до трехкомпонентных для гексагональной решетки [5, с. 61; 6, с. 12]. Для треугольной решетки взят модельный потенциал Морзе [104, с. 99], а для графена хорошо апробированный межатомный потенциал Савина [19, с. 69].

Поставленные задачи будут решаться с использованием классического метода молекулярной динамики.

Ожидается, что решение поставленных задач внесет вклад в понимание связи между делокализованными и пространственно локализованными нелинейными колебаниями двумерных решеток.

Глава 2. Свойства однокомпонентных ДНКМ в треугольной решетке с потенциалом Морзе

В данной главе рассматриваются однокомпонентные ДНКМ в двумерной треугольной решетке Морзе, для которых вычисляются зависимости частоты колебаний от амплитуды, энергия в расчете на атом и напряжения, возникающие в решетке при их возбуждении.

2.1. Описание деталей компьютерного эксперимента

Молекулярно-динамическое моделирование основано на использовании оригинальных программ, написанных на алгоритмическом языке C++. Исследуемая треугольная решетка с межатомным расстоянием a определена векторами трансляции $(a, 0)$ и $(a/2, a\sqrt{3}/2)$, см. рис. 1(а). Используемая в расчетах ячейка содержала 144 атома, то есть 12×12 трансляционных ячеек. Вдоль обоих координатных направлений x и y накладывались периодические граничные условия.

Для описания межатомных взаимодействий использовался потенциал Морзе [104]

$$\phi(r) = D(e^{-2\alpha(r-r_m)} - 2e^{-\alpha(r-r_m)}).$$

1)

Здесь $\phi(r)$ – это энергия взаимодействия двух атомов, расположенных на расстоянии r друг от друга, кроме того потенциал включает три параметра: D , α , r_m , определяющих энергию разрыва связи, жесткость связи и равновесное межатомное расстояние, соответственно. Здесь будут использоваться безразмерные величины, опираясь на тот факт, что без

потери общности можно положить $D=r_m=1$, за счет должного выбора единиц измерения энергии и расстояния. Кроме того, полагаем массу атома равной 1, что достигается за счет выбора единицы измерения времени. Потенциал Морзе содержит свободный параметр α , которому было присвоено значение $\alpha=5$, типичное для моделирования металлической связи. Радиус обрезки потенциала был равен 5 безразмерным единицам длины, для которого было найдено равновесное межатомное расстояние $a=0.9881329$ единиц длины.

В расчетах использовался NVE ансамбль, то есть число частиц, объем и полная энергия системы не меняются с течением времени.

На рис. 16 показаны картины колебаний атомов для всех восьми однокомпонентных ДНКМ треугольной решетки, где стрелки показывают смещения атомов из положений равновесия, которые использовались для задания начальных условий, генерирующих ту или иную колебательную моду. Все вектора смещений имеют одинаковую длину равную A_0 . Начальные скорости всех атомов равны нулю. Пунктирными прямыми показаны трансляционные ячейки всех ДНКМ. Обратим внимание на то, что величина A_0 определяет амплитуду колебания симметричных ДНКМ, но для несимметричных мод амплитуда не равна A_0 , как это будет показано ниже, где также будет дано определение симметричной и несимметричной ДНКМ.

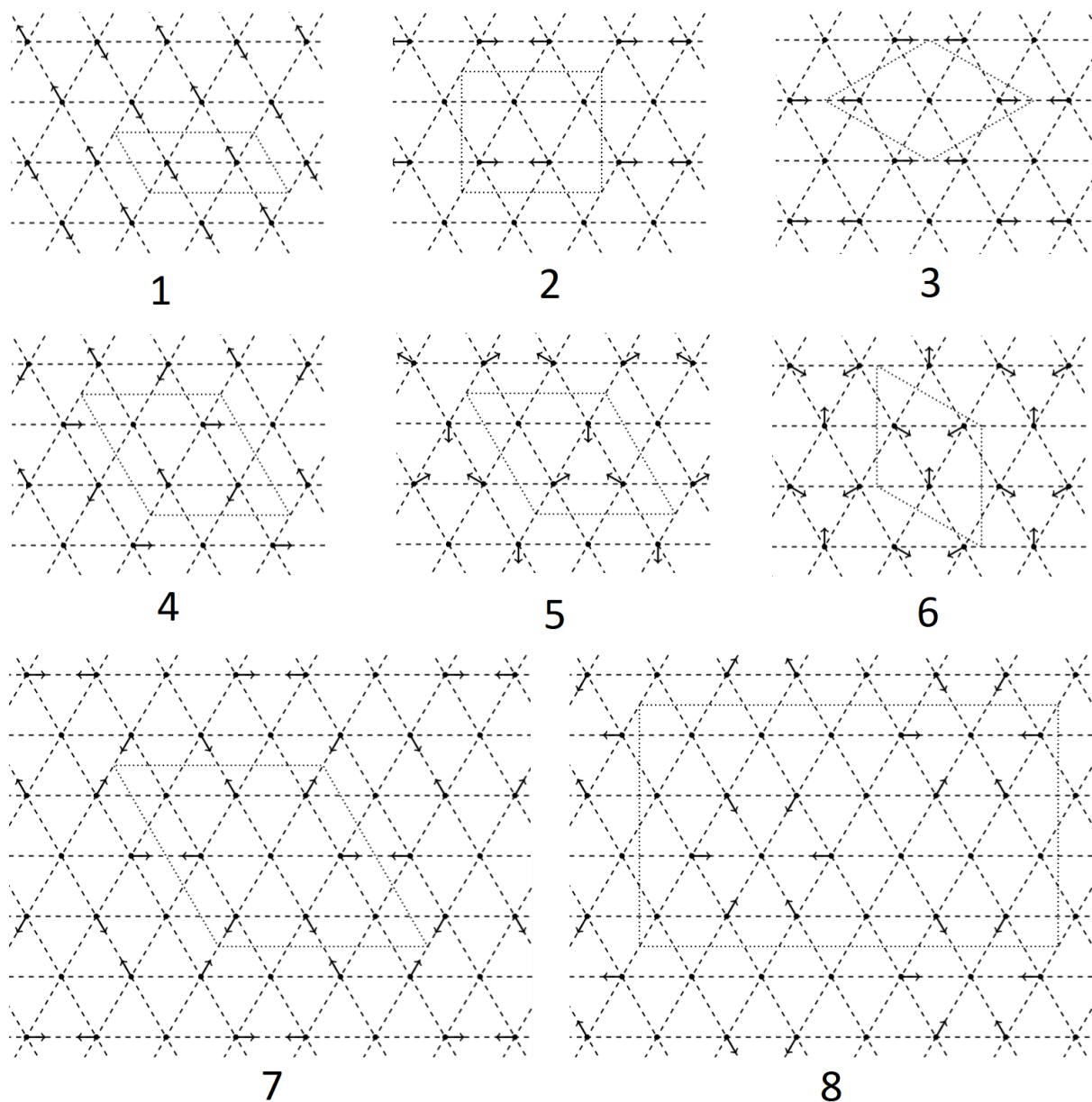


Рис. 16. Все восемь однокомпонентных делокализованных колебательных мод, существующих в треугольной решетке. Пунктиром показаны трансляционные ячейки для каждой из мод. Стрелками показаны смещения атомов, которые использовались для задания начальных условий. Длина всех векторов начальных смещений одинакова и равна A_0 . Нумерация мод условна и не несет физического смысла.

Для начальных условий, описанных выше, для каждой из восьми ДНКМ численно интегрировались уравнения движения атомов методом Штормера шестого порядка с шагом по времени $\Delta t=0.0005$.

В ДНКМ 1 и 6 все атомы вовлечены в движение. В ДНКМ 4 и 5 покоится четверть атомов, а в ДНКМ 3 и 7 один из трех атомов находится в покое. В ДНКМ 2 и 8 половина атомов покоится.

В однокомпонентных ДНКМ все движущиеся атомы осуществляют периодические колебания с периодом T . Для всех ДНКМ были рассчитаны средне-интегральные за период T напряжения, возникающие в решетке при их иницировании, согласно выражению

$$\langle \sigma_{ij} \rangle = \frac{1}{T} \int_0^T \sigma_{ij}(t) dt. \quad (2)$$

Помимо напряжений, в зависимости от выбранных значений A_0 , вычислялись зависимости частоты моды от амплитуды, а также полная энергия в расчете на атом.

2.2. Частота в зависимости от амплитуды колебаний для однокомпонентных ДНКМ

На рис. 17 (a-h) представлены расстояния движущихся атомов от решеточных положений как функции времени для ДНКМ с 1 по 8, сверху вниз. Во всех случаях начальное смещение равнялось $A_0=0.1$. Заметим, что масштаб по оси времени для разных мод может отличаться, поскольку отличаются их периоды колебаний.

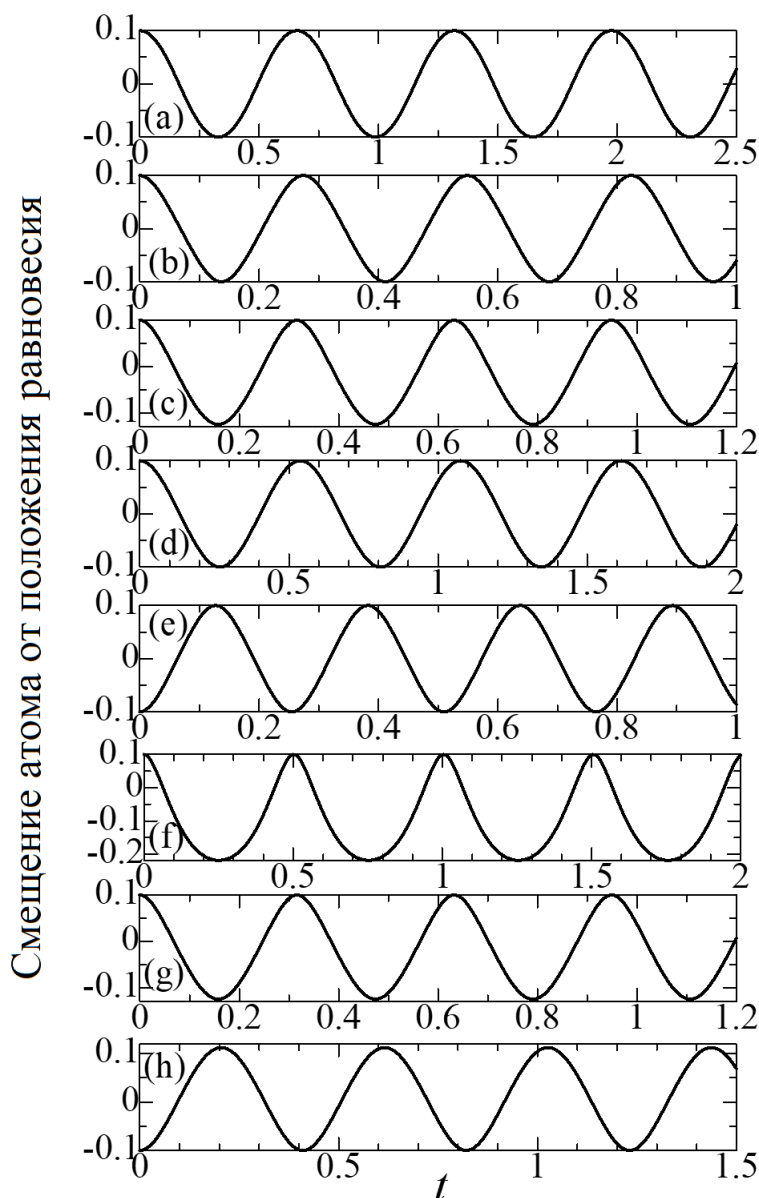


Рис. 17. (a-h) Расстояние от движущегося атома до решеточного положения в зависимости от времени для ДНКМ 1-8, соответственно. Во всех случаях бралось начальное смещение атомов $A_0=0.1$. Заметим, что масштаб по оси времени для разных мод может отличаться, поскольку отличаются их периоды колебаний. Имеются ДНКМ с несимметричными колебаниями (3, 6, 7 и 8), у которых минимальное и максимальное отклонение от решеточного положения отличаются по модулю, и для таких мод выбран различный масштаб по оси ординат.

Из рис. 2 видно, что для ДНКМ 1, 2, 4 и 5, максимальные и минимальные

значения перемещений совпадают по абсолютной величине (они равны A_0), и такие моды будут называться симметричными. С другой стороны, для ДНКМ 3, 6, 7 и 8 абсолютные значения максимальных и минимальных перемещений отличаются, и такие моды естественно назвать несимметричными. Определим амплитуду моды A как половину разницы между максимальным и минимальным значением смещения. Тогда для симметричных мод очевидно получим $A=A_0$, но для несимметричных мод это не так.

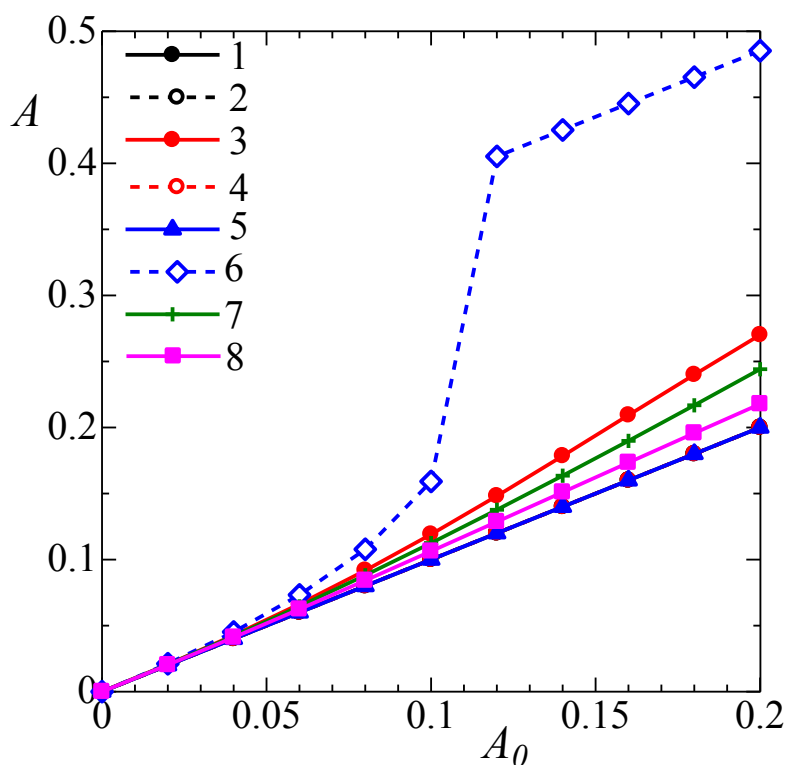


Рис. 18. Амплитуда ДНКМ A в зависимости от начального смещения атомов A_0 для всех восьми однокомпонентных ДНКМ. Обратим внимание, что $A=A_0$ для симметричных ДНКМ с номерами 1, 2, 4 и 5 и $A>A_0$ для несимметричных ДНКМ с номерами 3, 6, 7 и 8.

На рис. 18 приведена зависимость амплитуды моды от начального смещения A_0 для всех восьми ДНКМ. Согласно сказанному выше, $A=A_0$ для симметричных ДНКМ 1, 2, 4 и 5, в то время как $A>A_0$ для несимметричных ДНКМ с номерами 3, 6, 7 и 8. Отметим, что зависимость $A(A_0)$ для моды 6 немонотонна. Это объясняется тем, что для данной моды наблюдается переход от асимметричных колебаний к симметричным при превышении амплитудой колебаний некоторого критического значения.

При изучении нелинейных колебаний решетки представляется важным рассчитать его плотности фононных состояний, иными словами, спектр малоамплитудных колебаний решетки. Такой расчет был сделан и результат представлен на рис. 19. Спектр является бесщелевым, что естественно для кристалла с одним атомом в трансляционной ячейке. Важно отметить, что максимальная частота колебаний фононного спектра равна 3.

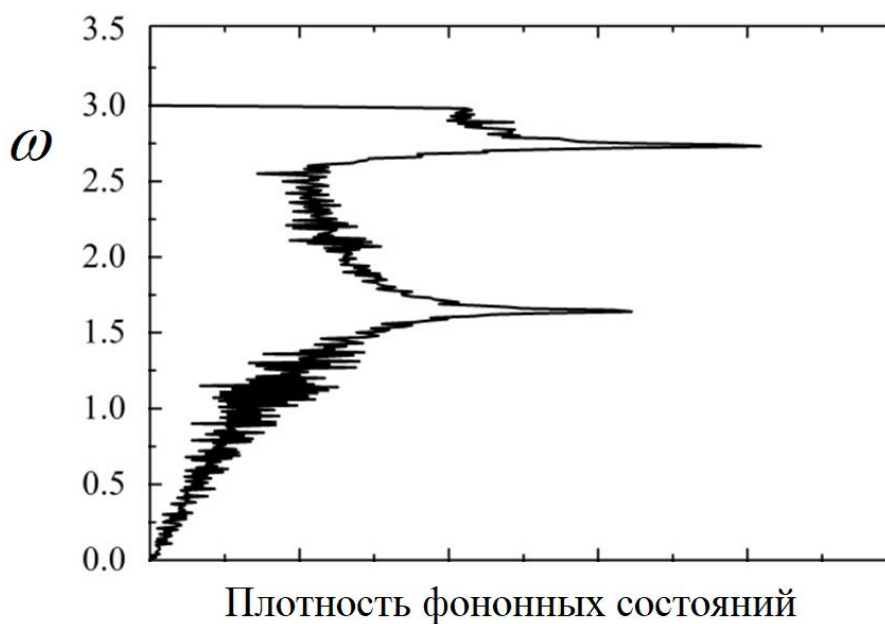


Рис. 19. Плотность фононных состояний для 2D кристалла Морзе с треугольной решеткой.

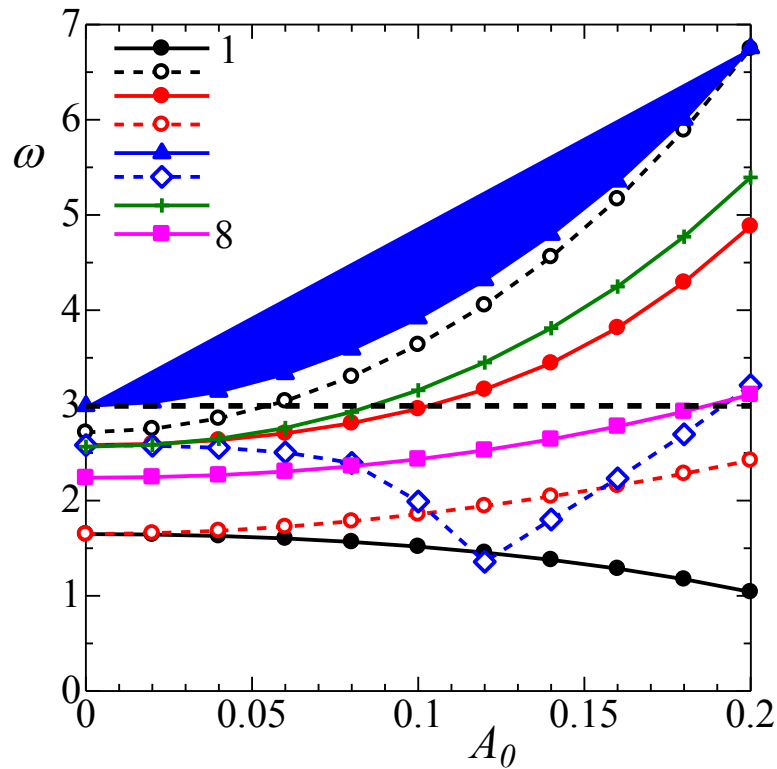


Рис. 20. Зависимость частоты колебаний ДНКМ с 1 по 8 от начального смещения атомов. Верхняя граница фононного спектра треугольной решетки показана пунктирной линией.

Амплитудно-частотные характеристики восьми однокомпонентных ДНКМ показаны на рис. 20. Абсцисса дает не амплитуду колебаний, а начальное смещение атомов A_0 . Горизонтальная пунктирная линия на рис. 20 показывает максимальную частоту фононного спектра кристалла, равную 3 (см. рис. 19). Как видно из рисунка, моды 1 и 6 имеют мягкий тип нелинейности, поскольку их частота снижается с увеличением амплитуды. Остальные шесть мод имеют жесткий тип нелинейности с частотой

увеличивающейся с ростом амплитуды. Частота ДНКМ 5 ответвляется от верхнего края фононного спектра и растет с амплитудой моды, оставаясь выше фононного спектра для всех амплитуд. Частоты остальных мод лежат в фононном спектре при малых амплитудах, при этом частоты ДНКМ 2, 3 и 7 выходят выше фононного спектра при достаточно больших амплитудах, тогда как частоты мод 1, 4, 6 и 8 остаются в спектре вплоть до весьма значительных амплитуд, при этом мода 1, как уже отмечалось, вообще демонстрирует уменьшение частоты с амплитудой.

2.3. Энергии ДНКМ

На рис. 21 построены зависимости полной энергии в расчете на атом для восьми ДНКМ как функции начального смещения атомов A_0 . Для значений $A_0 < 0,1$ энергия с высокой точностью пропорциональна квадрату начальных отклонений атомов (по сути, квадрату амплитуды колебаний). Наибольшую энергию при той же амплитуде колебаний имеет ДНКМ 6, что объясняется тем, что в этой моде нет неподвижных атомов и атомы тройками движутся навстречу друг к другу, тем самым повышая вклад жесткого ядра потенциала в энергию моды. Наименьшую энергию показывает ДНКМ 1, в которой плотноупакованные ряды атомов двигаются параллельно друг другу.

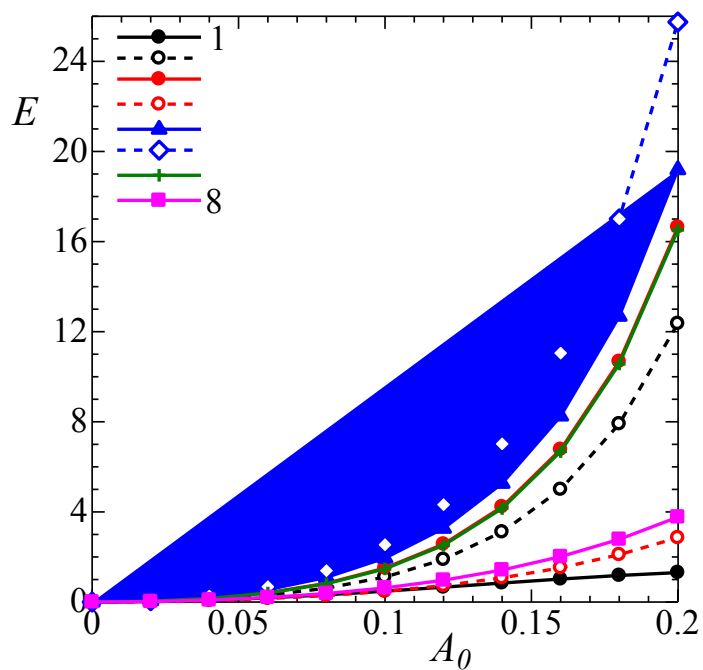


Рис. 21. Зависимость полной энергии на атом от начального смещения атомов для всех восьми ДНКМ.

2.4. Напряжения индуцируемые ДНКМ

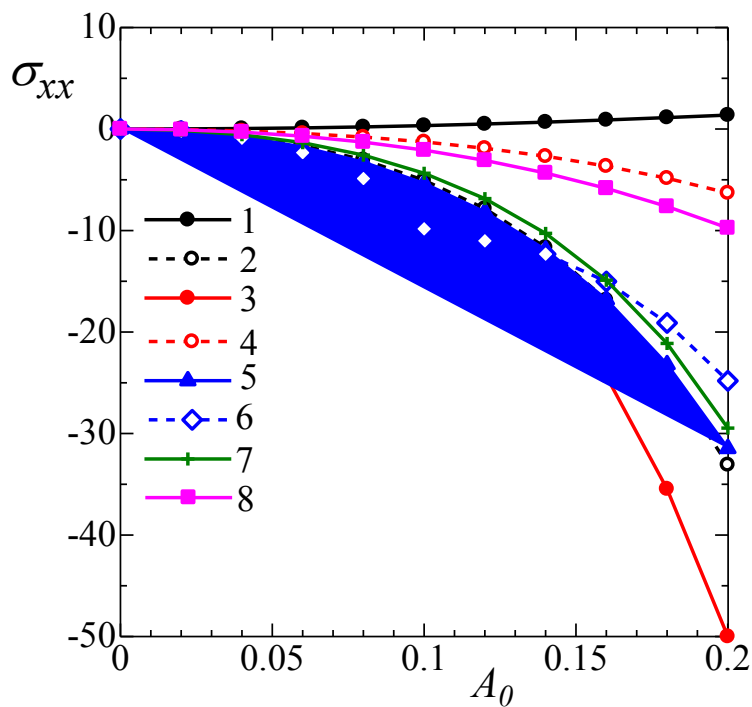


Рис. 22. Напряжение σ_{xx} , возникающее в решетке в результате возбуждения ДНКМ, как функция начального смещения атомов для восьми ДНКМ.

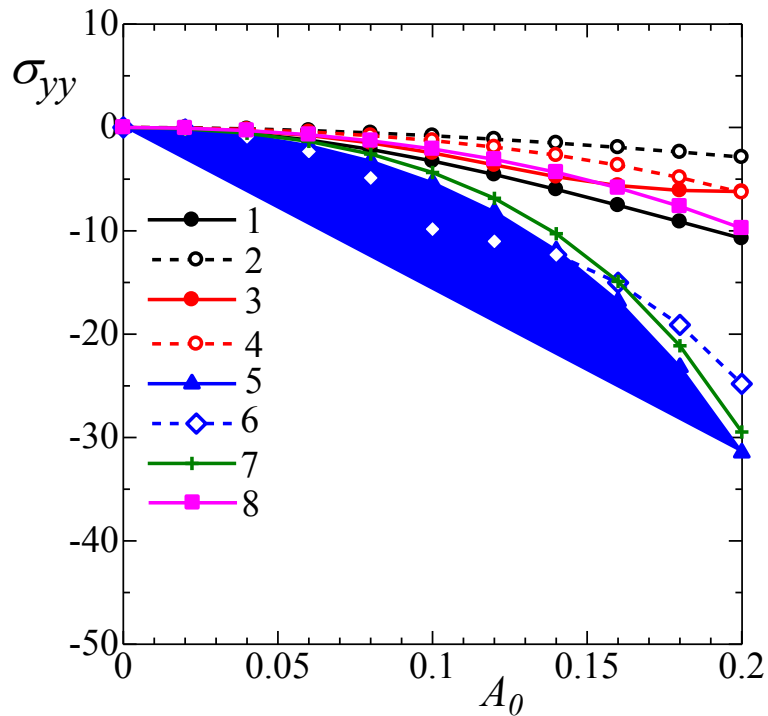


Рис. 23. То же, что и на рис. 22, но для напряжения σ_{yy} .

Напряжения σ_{xx} и σ_{yy} как функции начальных смещений атомов A_0 даны на рис. 22 и 23, соответственно. При этом сдвиговые напряжения σ_{xy} равны нулю для всех ДНКМ. Анализируя данные, приведенные на рис. 22 и 23, можно сделать вывод, что ДНКМ 1, 2 и 3 нарушают упругую изотропию треугольной решетки, так как для них σ_{xx} и σ_{yy} не равны друг другу. Остальные ДНКМ не нарушают изотропию решетки, поскольку для них $\sigma_{xx} = \sigma_{yy}$. Для всех мод наблюдаются отрицательные (сжимающие) напряжения, кроме σ_{xx} для ДНКМ 1. Это означает, что возбуждение ДНКМ 1 приводит к стремлению кристалла сжаться в направлении оси x и, поскольку

сжатие невозможно из-за использования периодических граничных условий, в этом направлении наблюдаются растягивающие напряжения. Однако поскольку компонента напряжения σ_{yy} для ДНКМ 1 отрицательна и имеет большее абсолютное значение чем σ_{xx} , то это означает, что ДНКМ 1, как и все остальные моды, производит положительное давление в решетке, поскольку давление определяется как $p = -(\sigma_{xx} + \sigma_{yy})/2$.

2.5. Выводы по главе

Методом молекулярной динамики для двумерной треугольной решетки с межатомными потенциалами Морзе изучены все восемь однокомпонентных ДНКМ. Для всех восьми мод посчитаны зависимости амплитуды, частоты, энергии и внутренних напряжений как функции начальных смещений атомов.

Колебания ДНКМ с номерами 1, 2, 4 и 5 симметричны, а колебания остальных ДНКМ несимметричны, поскольку для них максимальные и минимальные отклонения атомов от решеточных положений не равны по абсолютной величине.

Установлено, что только лишь ДНКМ 5 имеет частоту выше фононного спектра для всех амплитуд колебаний. Остальные моды имеют частоту колебаний в фононном спектре либо при достаточно малых амплитудах, либо даже и при весьма значительных амплитудах. ДНКМ 1 показывает падение частоты с амплитудой во всем исследованном диапазоне амплитуд. Согласно имеющимся в литературе данным, ДНКМ 5 с частотой выше фононного

спектра, будет проявлять модуляционную неустойчивость с возникновением дискретных бризеров. Кроме того, дискретные бризеры могут быть получены на основе данной моды путем наложения на неё локализирующих функций [13, с. 64].

Как и следовало ожидать, энергии всех ДНКМ монотонно растут с амплитудой колебаний. При не слишком больших амплитудах энергия всех мод пропорциональна квадрату амплитуды, но при больших амплитудах наблюдается незначительное отклонение от этой зависимости из-за влияния геометрической нелинейности.

Возбуждение всех мод кроме ДНКМ 1 приводит к возникновению в кристалле отрицательных (сжимающих) напряжений, что ожидаемо, поскольку обычно кристаллические тела демонстрируют тепловое расширение. При использовании периодических граничных условий, запрещающих такое расширение, как раз и возникают сжимающие напряжения. Однако для ДНКМ 1 наблюдается интересная аномалия: её возбуждение приводит к стремлению кристалла сжаться в направлении оси x и, поскольку сжатие невозможно из-за использования периодических граничных условий, в этом направлении наблюдаются растягивающие напряжения. Однако давление $p = -(\sigma_{xx} + \sigma_{yy})/2$ в решетке остается положительным поскольку компонента напряжения σ_{yy} отрицательна и имеет большее абсолютное значение чем σ_{xx} . Отметим также, что ДНКМ 1, 2 и 3 нарушают упругую изотропию треугольной решетки, так как для них σ_{xx} и σ_{yy}

не равны друг другу, а остальные ДНКМ сохраняют изотропию решетки и для них обе компоненты нормальных напряжений равны.

Глава 3. Свойства одно- двух- и трехкомпонентных ДНКМ в решетке графена

В настоящей главе исследуются свойства многокомпонентных ДНКМ в графене методом молекулярной динамики с использованием межатомных потенциалов, разработанных Савиным.

3.1. Методика моделирования многокомпонентных ДНКМ

Гексагональная решетка графена представлена во Введении на рис. 1 (б).

Метод молекулярной динамики реализуется в оригинальной программе, написанной на языке C++. Применяется NVE ансамбль, так что число атомов, N , объем, V и полная энергия расчетного блока E сохраняются во времени. Атомы имеют три степени свободы – две компоненты движения в плоскости, а также компонента перемещения по нормали к плоскости листа графена. Ньютоновские уравнения движения частиц (система о.д.у. второго порядка) интегрировались численно методом Штримера шестого порядка точности [105, с. 201] с шагом по времени $\tau = 0,5$ фс. Точность численного интегрирования контролировалась по постоянству полной энергии, которая за время счёта изменялась в пределах относительной погрешности не превышающей величины 10^{-9} .

Взаимодействия между атомами углерода описываются потенциалом Савина [19, с. 68], который был апробирован для решения задач о теплопроводности графеновых нанолент [19, с. 69], термофорезиса молекулы фуллерена на графеновой подложке [106, с. 72], о различных локализованных колебаниях углеродных структур [107, с. 1048; 108, с. 74; 109, с. 103; 104, с.

57; 105, с. 199; 106, с. 78; 107, с. 1050; 108, с. 59; 109, с. 91; 110, с. 63; 111, с. 705], динамике волн солитонного типа [112, с. 92], механических свойствах скрученных нанолент графена [113, с. 129], о структуре и свойствах вторичных ван-дер-ваальсовых структур [114, с. 116; 115, с. 2243]. Потенциал Савина учитывает энергии валентных связей, валентных углов, а также диэдральных углов для описания степеней свободы, связанных с движением атомов по нормали к листу графена [19, с. 51]. Также возможен учет сил Ван-дер-Ваальса между листами графена, но в настоящей работе они не рассматривались поскольку исследовались изолированные листы графена.

В зависимости от решаемой задачи использовались разные размеры расчетных ячеек. Для расчета энергетических характеристик ДНКМ и внутренних напряжений, возникающих в листе графена после запуска ДНКМ использовался расчетный блок размером 6×6 элементарных ячеек, включающий 72 атома. Анализ устойчивости ДНКМ проводился на ячейке содержащей 24×24 элементарных ячеек, с общим числом атомов 1152. В тестовых расчетах использовались расчетные ячейки большего размера и было показано, что увеличение размера расчетной ячейки не приводит к изменению результатов. Во всех случаях применялись периодические граничные условия.

Для возбуждения ДНКМ атомам углерода задавались начальные смещения согласно схемам, описанным в [5, с. 77; 6, с. 11], при этом атомы имели нулевые начальные скорости.

В исследуемых однокомпонентных ДНКМ атомы совершают периодические во времени колебания. За один период колебания кинетическая энергия движущихся атомов дважды обращается в ноль. Обозначим эти моменты времени t_1 и t_2 , они соответствуют положениям атомов на максимальном удалении от положений равновесия. Поскольку все движущиеся атомы в однокомпонентных ДНКМ совершают одинаковые колебания, можно следить за любым из них. Координаты определённого движущегося атома в моменты времени t_1 и t_2 обозначим (x_1, y_1) и (x_2, y_2) соответственно. Тогда амплитуда ДНКМ может быть определена как $A = \left(\frac{1}{2}\right) \sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2}$. Период ДНКМ очевидно равен $T = 2(t_2 - t_1)$, а частота $\omega = 1/T$. ДНКМ создают в плоскости листа графена периодически изменяющиеся во времени напряжения σ_{xx} , σ_{yy} и σ_{xy} . Средние за период колебания напряжения вычислялись согласно выражению (2) раздела 2.1. по аналогии с тем, как это делалось для треугольной решетки.

Для многокомпонентных ДНКМ проводился подбор амплитуд компонент с целью получения периодических во времени колебаний. Эта процедура будет детально описана ниже при исследовании двух- и трехкомпонентных ДНКМ для каждого случая.

Возбуждение однокомпонентных ДНКМ приводит к периодическому переходу потенциальной энергии системы в кинетическую и обратно, как у осциллятора с одной степенью свободы. Кинетическую энергию частицы можно усреднить за период колебания, получив величину $\langle K \rangle$, и формально

температуру d -мерного кристалла (в нашем случае $d=2$) можно определить следующим образом

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

где $k_B = 8,617 \times 10^{-5}$ эВ К⁻¹ - это постоянная Больцмана. Однако под температурой обычно понимается мера средней кинетической энергии систем близких к тепловому равновесию, с равным распределением энергии между всеми колебательными модами. В нашем случае возбуждена единственная колебательная мода и более естественно говорить не о температуре, а о средней за период полной энергии частиц $\langle e \rangle$.

3.2. Однокомпонентные ДНКМ

На рис. 24 показаны четыре однокомпонентные ДНКМ гексагональной двумерной решетки точечных масс (решеточные положения показаны желтыми точками). Траектории атомов углерода показаны черным цветом, а зелёные точки обозначают положения атомов на максимальном удалении от решеточных положений. Нумерация мод довольно условна и не несет физического смысла. Представленные колебательные моды являются точными решениями уравнений движения атомов, продиктованными симметрией решетки. Они существуют независимо от используемых межатомных потенциалов и для любого значения A . Для $A > A^*$, где A^* - пороговое значение начальных смещений, эти колебательные моды неустойчивы, как будет показано в Главе 4.

Колебания атомов для ДНКМ I-IV показаны на рис. 25 (а), где дано смещение Δu как функция времени для атома, колеблющегося вдоль оси y (во всех четырех модах имеются такие атомы, см. рис. 24). Начальное смещение атомов во всех случаях составляет $A = 0,1 \text{ \AA}$. Для ДНКМ I и II используются тонкие и толстые сплошные линии соответственно. Для ДНКМ III и IV используются тонкие и толстые пунктирные линии, соответственно. Из представленного графика видно, что только ДНКМ IV демонстрирует симметричные колебания с одинаковыми максимальными и минимальными значениями Δu , тогда как для остальных трех мод максимальное положительное значение Δu больше максимального отрицательного значения по абсолютной величине.

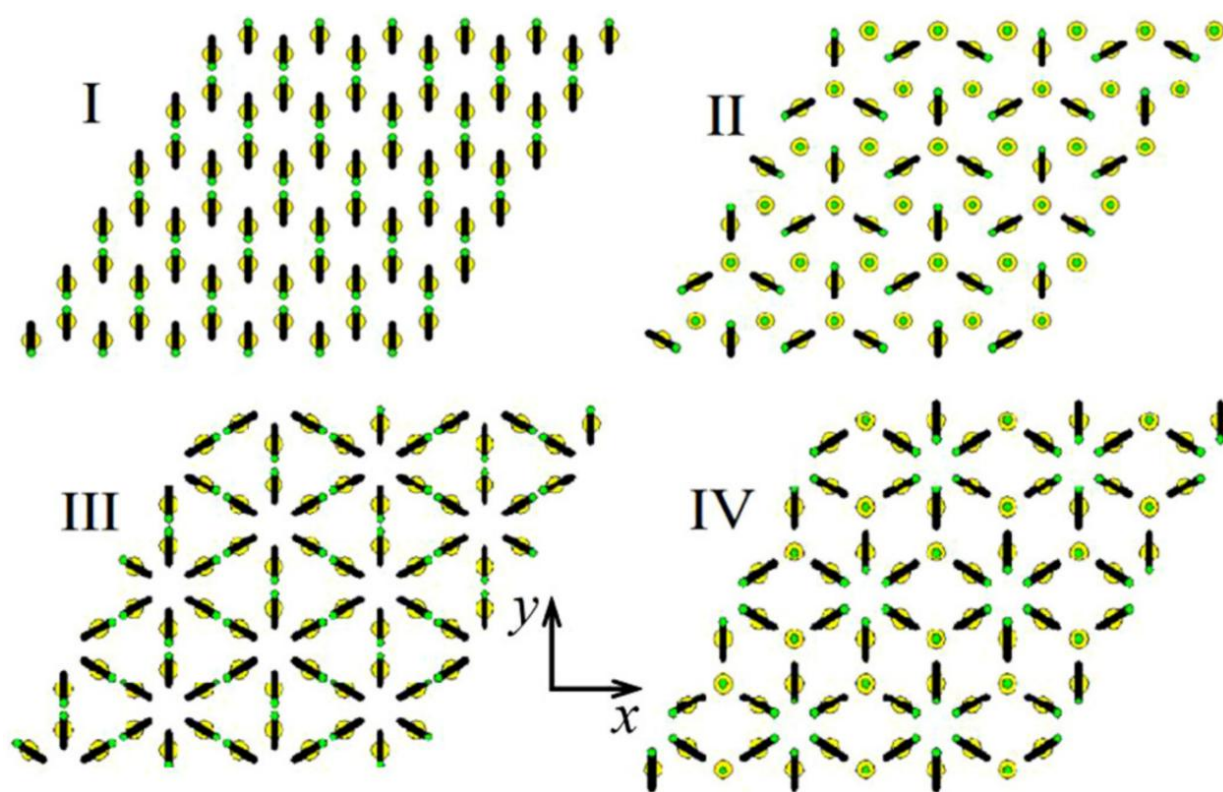


Рис. 24. Картины атомных колебаний четырех однокомпонентных ДНКМ в графене, имеющих смещения в плоскости листа графена [6, с. 11]. Большие

желтые кружки показывают точки гексагональной решетки, маленькие зеленые кружки показывают атомы углерода на удалении A от точек решеточных положений, черные линии показывают прямолинейные траектории колеблющихся атомов.

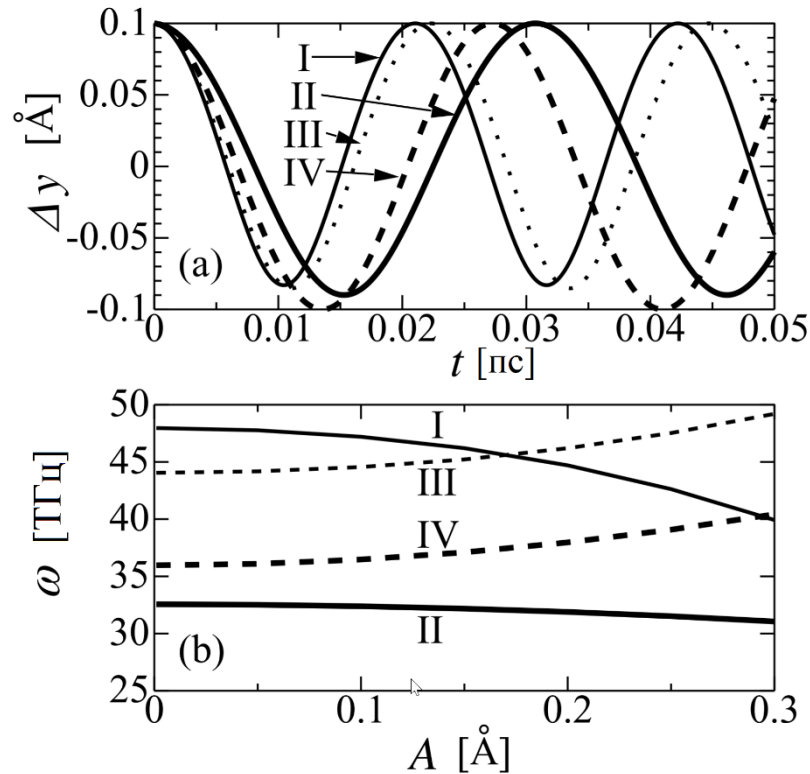


Рис. 25. (а) Атомные колебания для ДНКМ I-IV, показанные на графике в виде зависимости смещения Δy от времени для атома, колеблющегося вдоль оси y . Начальное смещение атомов во всех случаях составляет $A = 0,1 \text{ \AA}$. (б) Частоты колебаний ДНКМ как функции начального смещения A .

Интересно сравнить различные свойства изученных четырех ДНКМ. Во-первых, обратим внимание на то, что возбуждение ДНКМ I разрушает упругую изотропию графена, в то время как другие ДНКМ сохраняют изотропию решетки.

Частоты колебаний ДНКМ как функции начального смещения A показаны на рисунке 25 (б). Здесь, как и ранее, тонкие и толстые сплошные линии, соответственно, используются для мод I и II, а тонкие и толстые пунктирные линии, соответственно, для мод III и IV. Все ДНКМ имеют частоты в фононном спектре графена (максимальная частота фононов составляет 48 ТГц). Моды I и II демонстрируют нелинейность мягкого типа с уменьшением частоты колебаний с амплитудой, тогда как моды III и IV имеют нелинейность жесткого типа с противоположной тенденцией. Моды I и III имеют частоты выше, чем моды II и IV. Это легко объясняется тем, что в модах I и III колеблются все атомы, в то время как в модах II и IV некоторые атомы находятся в покое. Самая низкая частота у ДНКМ II, в которой наибольшая часть атомов (половина) находится в покое.

Таблица 1. Потенциальная энергия на атом, разделенная на энергии валентных связей и валентных углов для четырех исследованных ДНКМ, возбужденных с начальными атомными смещениями $A = 0,03 \text{ \AA}$.

Номер ДНКМ	Энергия валентных связей на атом, эВ	Энергия валентных углов на атом, эВ
I	$4,097 \times 10^{-2}$	$8,094 \times 10^{-3}$
II	$1,041 \times 10^{-2}$	$1,003 \times 10^{-3}$
III	$4,080 \times 10^{-2}$	0
IV	$2,148 \times 10^{-2}$	0

Нами была рассчитана потенциальная энергия на атом для всех ДНКМ в момент времени, когда атомы находятся на максимальном расстоянии от решеточных положений. Эта энергия была разделена на две составляющие, а именно на энергию, запасенную валентными связями и валентными углами. Результат представлен в Таблице 1 для начального смещения атомов $A = 0,03 \text{ \AA}$, которое использовалось для всех четырех мод. Можно видеть, что ДНКМ I и II имеют обе составляющие энергии, но ДНКМ III и IV не изменяют валентных углов на любой фазе колебаний, так что валентные углы остаются равными $2\pi/3$, и они не вносят вклад в потенциальную энергию системы.

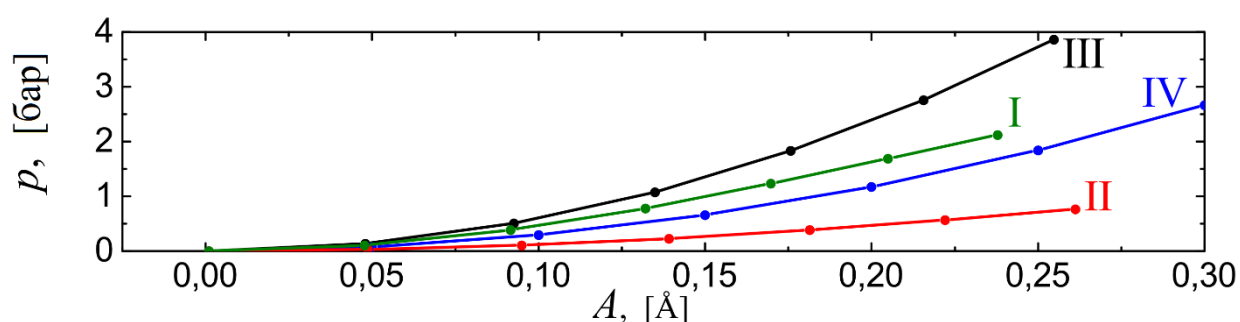


Рис. 26. Давление, создаваемое однокомпонентными ДНКМ I-IV в листе графена в зависимости от начального смещения атомов.

На рис. 26 показано давление, создаваемое в листе графена однокомпонентными ДНКМ I-IV, в зависимости от начального смещения атомов. Наибольшее давление создает ДНКМ III, а наименьшее ДНКМ II, что объясняется тем, что в ДНКМ III все атомы находятся в движении, а в ДНКМ

И только половина. Как и следовало ожидать, все однокомпонентные ДНКМ создают в графене положительное давление, растущее с увеличением A . Интересно, что некоторые двухкомпонентные ДНКМ создают отрицательное давление, как будет показано в следующем разделе.

3.3. Двухкомпонентные ДНКМ

Представим результаты молекулярно-динамического моделирования свойств двухкомпонентных ДНКМ в графене. Напомним, что существует четыре однокомпонентных и двенадцать двухкомпонентных ДНКМ [6], все они показаны на рис. 27. Четыре однокомпонентных ДНКМ обозначены римскими цифрами от I до IV, они повторяют картины атомных смещений, показанные на рис. 24 и приведены здесь для удобства читателя. Дело в том, что каждая из двухкомпонентных мод содержит определенную однокомпонентную в виде малой добавки, как это будет продемонстрировано ниже для ДНКМ IIIa. На рис. 27 двухкомпонентные моды разделены на четыре группы, по их связи с однокомпонентными модами, и они обозначены римской цифрой, соответствующей однокомпонентной моде, с добавлением латинской буквы. Желтым цветом на рис. 27 показаны узлы гексагональной решетки графена, черными линиями даны траектории атомов, а точками зеленого цвета – атомы углерода на максимальном удалении от узлов решетки.

Двухкомпонентные ДНКМ представляют собой колебательные моды с двумя степенями свободы.

Продemonстрируем связь между однокомпонентными и двухкомпонентными ДНКМ, взяв в качестве примера однокомпонентную моду III и двухкомпонентную моду IIIa (это первая и вторая моды в третьем ряду на рис. 27). Сначала возбудим колебательную моду в соответствии с картиной перемещений, показанной на рис. 28 (а), и назовем её гипотетической модой X. Для задания этой моды каждый атом смещается на вектор длины $A_X = 0,3 \text{ \AA}$, который определяет амплитуду моды.

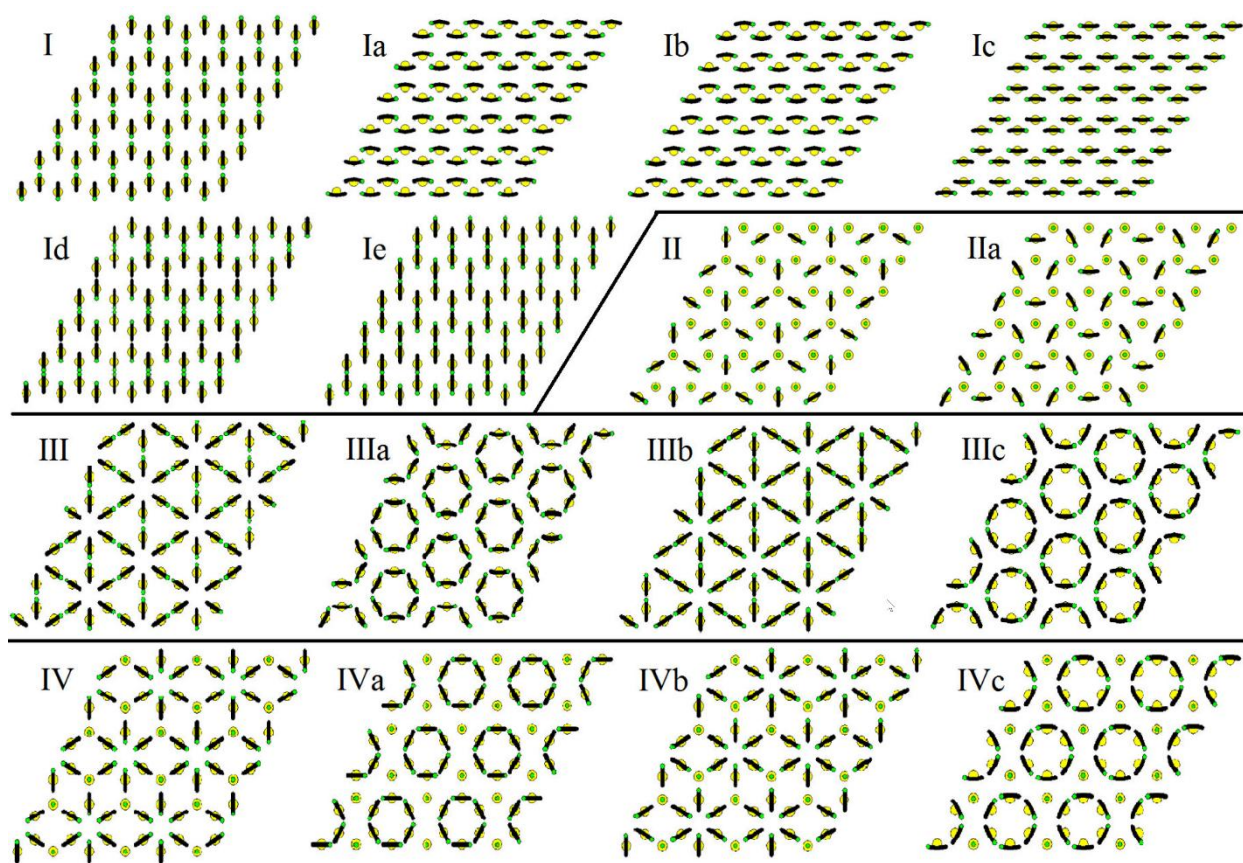


Рис. 27. Одно- и двухкомпонентные ДНКМ, поддерживаемые гексагональной решеткой графена [6]. Желтые кружки - узлы гексагональной решетки, черные линии - траектории атомов, зеленые точки - атомные позиции на максимальном удалении от решеточных позиций. Однокомпонентные ДНКМ

обозначены I, II, III и IV (они повторяют данные рис. 24). Все другие моды - двухкомпонентные. ДНКМ Ia-Ie включают моду I. Аналогично, ДНКМ IIa содержит моду II, ДНКМ IIIa-IIIc моду III, а ДНКМ IVa-IVc моду IV.

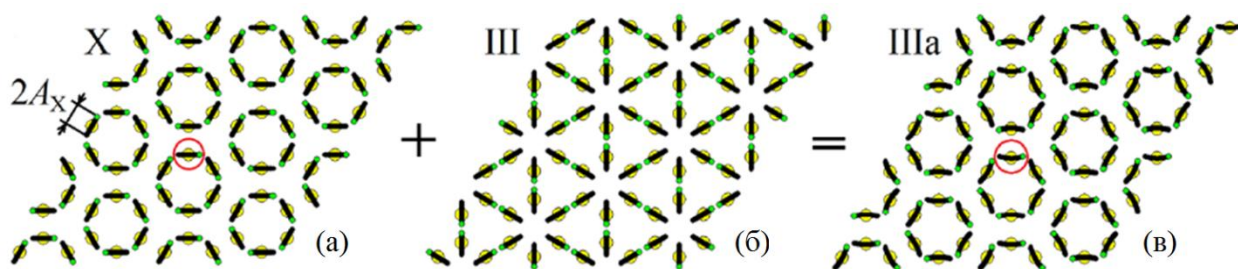


Рис. 28. (а) Картина колебаний гипотетической колебательной моды X, имеющей амплитуду A_X . Для атома, обведенного окружностью перемещения Δx и Δy показаны на рис. 29 (а) как функции времени. (б) Однокомпонентная ДНКМ III. (в) Двухкомпонентная ДНКМ IIIa, являющаяся суперпозицией гипотетической моды X и ДНКМ III с амплитудами $A_X = 0,3 \text{ \AA}$ и $A_{III} = 0,065 \text{ \AA}$. Перемещения Δx и Δy для атома, отмеченного окружностью, показаны на рис. 29 (в) как функции времени.

Для атома, обведенного окружностью на рис. 28 (а), были вычислены компоненты вектора смещения как функции времени, $\Delta x(t)$ и $\Delta y(t)$, и построены на рис. 29 (а). Отметим, что помимо основной компоненты колебаний, $\Delta x(t)$, возбуждается небольшая по величине компонента $\Delta y(t)$ и что колебания оказываются непериодическими. Согласно теории, развитой в работе [6], возбуждение моды X неизбежно приводит к возбуждению дополнительной ДНКМ III. Если сложить моды III и IIIa со специально

подобранными амплитудами, можно добиться периодических во времени колебаний. Суперпозиция гипотетической моды X и ДНКМ III с амплитудами $A_X = 0,3 \text{ \AA}$ и $A_{III} = 0,065 \text{ \AA}$, породила периодическую во времени двухкомпонентную ДНКМ IIIa, как показано на рис. 29 (б).

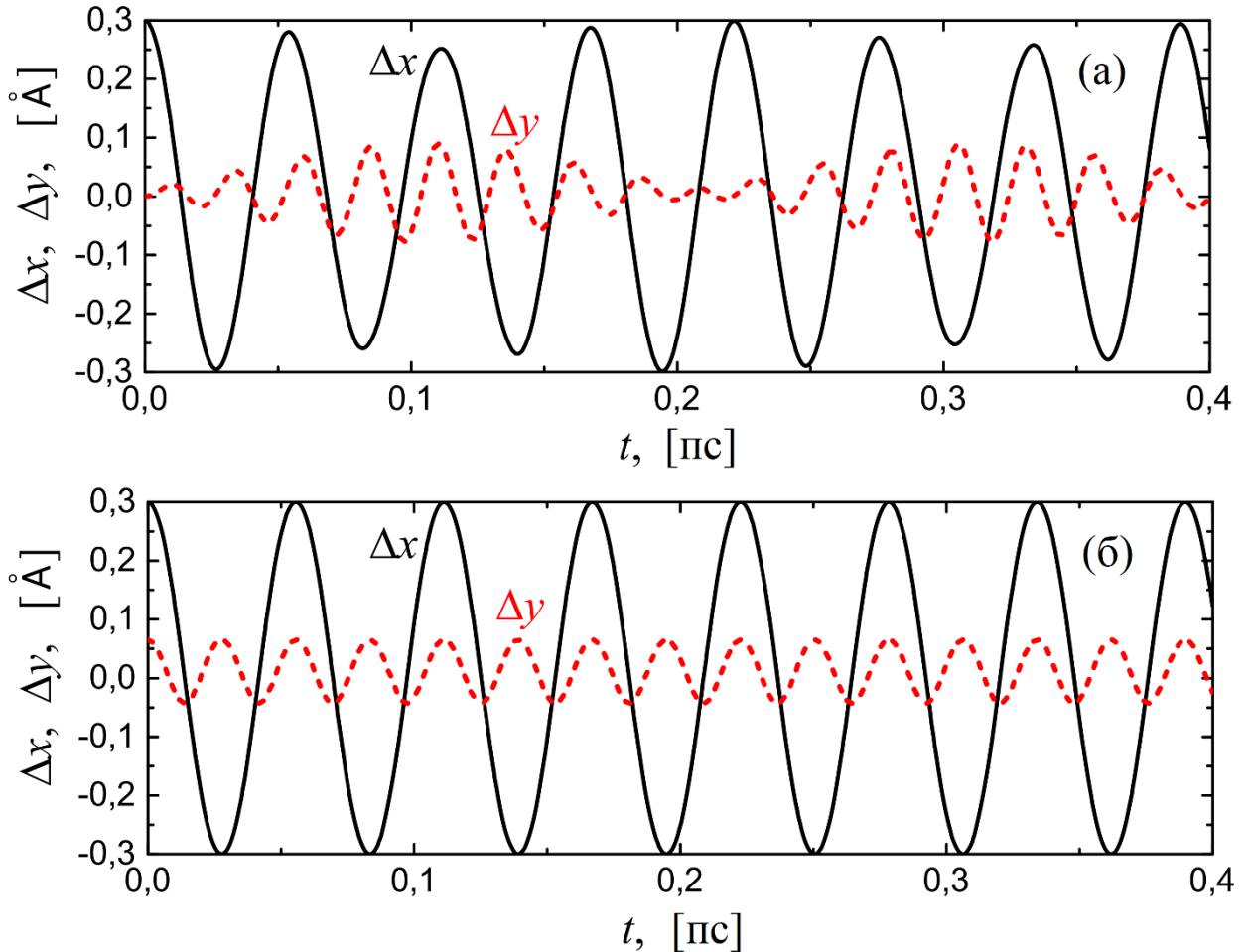


Рис. 29. (а) Перемещения Δx и Δy атома, обведенного кружком на рис. 28 (а), как функции времени для гипотетической моды X, имеющей начальную амплитуду $A_X = 0,3 \text{ \AA}$. (б) Перемещения Δx и Δy атома, обведенного кружком на рис. 29 (в), как функции времени для ДНКМ IIIa, составленной из мод X и III с амплитудами $A_X = 0,3 \text{ \AA}$ и $A_{III} = 0,065 \text{ \AA}$.

Согласно представленным выше данным, опишем, как задавать начальные условия в молекулярно-динамическом моделировании для запуска двухкомпонентных ДНКМ. Для этого нужно сложить начальные смещения атомов в соответствии с картинками, показанными зелеными точками на рис. 27 для однокомпонентных и двухкомпонентных ДНКМ. Точнее говоря, моды Ia-Ie суммируются с модой I для возбуждения мод Ia-Ie. Аналогично, мода IIa суммируется с модой II; моды IIIa-IIIc суммируются с модой III; и моды IVa-IVc суммируются с модой IV. Амплитуды двух складываемых мод необходимо выбирать так, чтобы получаемые колебания были периодическими, как показано на рис. 29 (б) для мод III и IIIa.

Изучение двухкомпонентных ДНКМ приводит нас к интересному явлению генерации второй гармоники, хорошо известному в нелинейной оптике [116, с. 114]. Действительно, из рис. 29 (б) видно, что ДНКМ IIIa имеет частоту $\omega = 18,0$ ТГц для компоненты $\Delta x(t)$ и удвоенную частоту для дополнительной компоненты $\Delta y(t)$, что можно считать эффектом генерации второй гармоники. Анализ всех двухкомпонентных ДНКМ показал, что любая из них включает в себя однокомпонентную ДНКМ с должным образом подобранной амплитудой для достижения периодичности колебаний. Однокомпонентная ДНКМ в графене всегда имеет малую амплитуду и удвоенную частоту, по сравнению с амплитудой и частотой основной колебательной моды. Тем самым, можно заключить, что любая двухкомпонентная ДНКМ генерирует вторую гармонику. В ряде случаев, частота второй гармоники может оказаться значительно выше максимальной

частоты фононного спектра. В частности, ДНКМ Ia, имеющая основную амплитуду $0,15 \text{ \AA}$ и основную частоту $\omega = 46,3 \text{ ТГц}$, включает в себя ДНКМ I с амплитудой $A_1 = -0,0163789 \text{ \AA}$ и частотой $\omega = 92,6 \text{ ТГц}$, и эта частота почти в два раза выше максимальной частоты фононов (48 ТГц).

Заметим, что ДНКМ - это естественные колебательные моды решетки графена. Тот факт, что решетка графена может осуществлять естественные колебания на частотах, значительно превосходящих максимальную частоту фононов, является, по нашему мнению, интересным и важным. Разумеется, что генерация второй гармоники – это существенно нелинейный эффект, так как амплитуда высокочастотной составляющей квадратично убывает с уменьшением амплитуды основной моды.

На этом удивительные свойства двухкомпонентных ДНКМ не заканчиваются. Как говорилось выше, некоторые из них, а именно IIIa и IVa, создают отрицательное давление в решетке графена (тогда как все однокомпонентные ДНКМ создают положительное давление, см. рис. 26). На рис. 30 приведены параметры ДНКМ IIIa в зависимости от амплитуды основной моды: (а) амплитуда дополнительной моды (однокомпонентная ДНКМ III), (б) частота ДНКМ IIIa, (в) давление, создаваемое ДНКМ IIIa в решетке графена. Эти данные были получены следующим образом. Прежде всего, для выбранной амплитуды основной моды IIIa, A , находится амплитуда моды III, таким образом, чтобы колебания были периодическими во времени. Для $A_x = 0,3 \text{ \AA}$ пример приведен на рис. 29 (б), где было

установлено, что для такой основной амплитуды случае следует взять амплитуду добавочной моды $A_{III} = 0,065 \text{ \AA}$. Зависимость A_{III} от A , которая обеспечивает периодическое движение, приведена на рис. 30 (а), откуда видно, что $A_{III} \sim A^2$. Частота основной моды ω находится из рис. 29 (б) для основной колебательной моды $\Delta x(t)$. Она показана как функция A на рис. 30 (б). Дополнительная мода III имеет частоту колебаний 2ω , см. компоненту $\Delta y(t)$ на рис. 29 (б). Давление p для выбранного значения A рассчитывается как $p = (\sigma_{xx} + \sigma_{yy})/2$, при этом средние за период колебаний напряжения определены уравнением (2). Давление p как функция A построено на рис. 30 (в).

Как видно из рис. 30 (в), давление для ДНКМ IIIa меньше нуля, и качественно такой же результат был получен для ДНКМ IVa. Важно понять механизм возникновения отрицательного давления этими двумя колебательными модами. Детальный анализ показал, что ДНКМ IIIa и IVa создают отрицательное давление ввиду того, что они реализуются за счет вращения углеродных гексагонов (см. рис. 27). Если присмотреться к закономерности смещений атомов ДНКМ IIIa и IVa на рис. 27, то можно увидеть, что зеленые точки, отображающие положение атомов на максимальном удалении от решеточных положений (т.е. от желтых точек), смещаются для гексагонов синхронно по часовой стрелке у ДНКМ IIIa и против часовой стрелки у ДНКМ IVa. Для большей ясности, эти атомные смещения следует сравнить со смещениями в модах IIIc и IVc (создающих

положительное давление), где атомы, принадлежащие гексагонам, движутся попарно навстречу друг другу. Именно вращение гексагонов в модах IIIa и IVa создает натяжение валентных связей, соединяющих гексагоны, что приводит к появлению отрицательного давления. Такое поведение кажется логичным в свете работ, где было показано, что в средах со структурными единицами, имеющими вращательные степени свободы, могут возникать аномалии свойств материалов [117, с. 93; 118, с. 184; 119, с. 82; 120, с. 79].

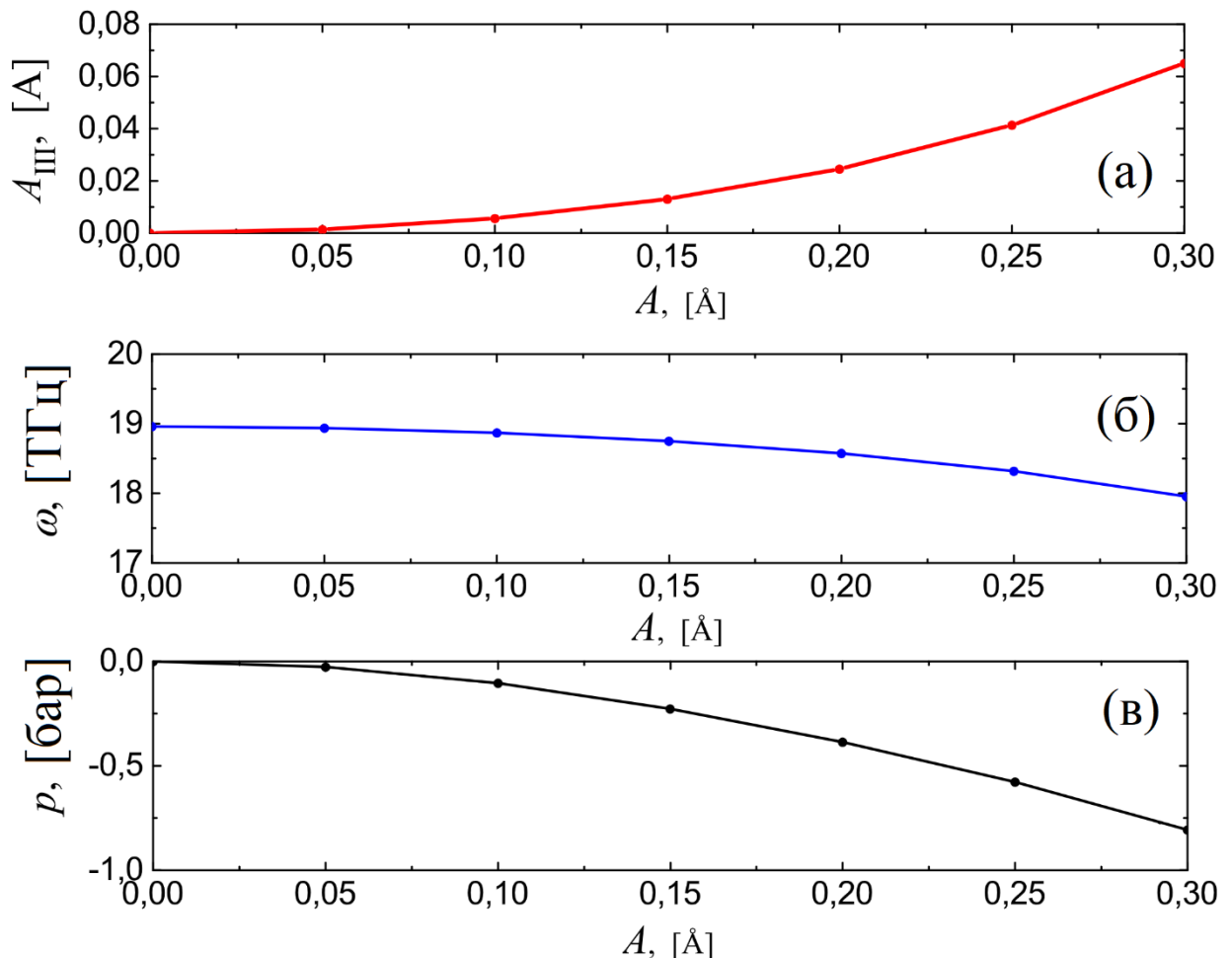


Рис. 30. Параметры ДНКМ IIIa в зависимости от амплитуды основной моды: (а) амплитуда дополнительной моды (однокомпонентная ДНКМ III), (б) частота ДНКМ IIIa, (в) давление, создаваемое ДНКМ IIIa в решетке графена.

3.4. Трехкомпонентные ДНКМ

Итак, выше были изучены свойства однокомпонентных и двухкомпонентных ДНКМ в графене, однако для гексагональной решетки известна также и единственная трехкомпонентная ДНКМ. Для неё не известно, можно ли синхронизировать три компоненты так, чтобы результирующие колебания получились периодическими во времени. Для всех двухкомпонентных ДНКМ такая возможность была показана. Также не известно, генерирует ли трехкомпонентная ДНКМ старшую гармонику, и если да, то какую. Ниже будет проанализирована трехкомпонентная ДНКМ в графене, что, помимо прочего, позволит численно проверить выводы теоретико-группового анализа [6, с. 13], на основе которого строятся ДНКМ различной сложности.

Запуск трехкомпонентной ДНКМ осуществляется заданием начальных смещений атомов согласно картинкам, представленным на рис. 31 (а), при нулевых начальных скоростях всех атомов. Вектора перемещений имеют одинаковую длину равную A . Трансляционная ячейка минимальной площади для трехкомпонентной ДНКМ включает 12 атомов (выделена прямоугольником). Координаты x и y на рис. 31 нормированы на расстояние $d = \sqrt{3}\rho = 2.456 \text{ \AA}$, где $\rho = 1.418 \text{ \AA}$ – межатомное расстояние в графене.

В представленных расчетах ячейка моделирования содержала 24 атома углерода, то есть она включала две примитивные трансляционные ячейки, оттранслированные вдоль оси y . Вдоль координатных направлений x и y использовались периодические граничные условия. Моделирование

основывалось на NVE ансамбле, предполагающем постоянное число частиц, постоянный объем и постоянную энергию системы.

Уравнения движения интегрировались численно методом Штормера шестого порядка с шагом по времени 0.1 фс.

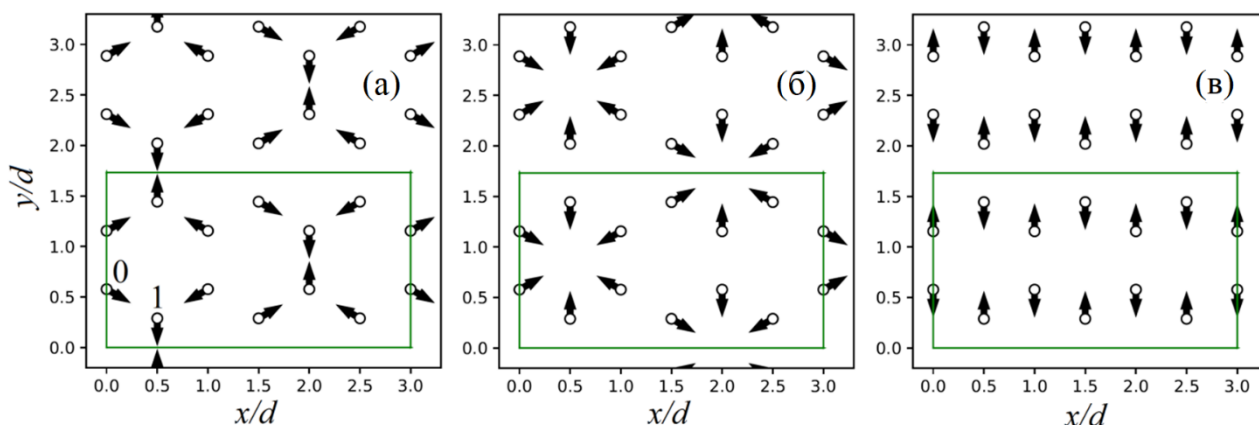


Рис. 31. Вектора перемещений атомов для (а) корневой моды и (б,в) однокомпонентных ДНКМ решетки графена. Все вектора перемещений на (а) имеют одинаковую длину A , а на (б) и (в) также одинаковую длину B и C , соответственно. Трансляционная ячейка минимальной площади для данной трехкомпонентной ДНКМ включает 12 атомов (выделена прямоугольником). Координаты x и y нормированы на величину $d = \sqrt{3}\rho$, где $\rho = 1.418 \text{ \AA}$ – межатомное расстояние в графене.

Следует заметить, что на рис. 31 (б) и (в) показаны картины начальных смещений атомов для инициации однокомпонентных ДНКМ I и IV, которые ранее были представлены на рис. 24. Все вектора перемещений на (б) и (в) имеют длину B и C , соответственно. Оказывается, что возбуждение корневой колебательной моды, изображенной на рис. 31 (а), неизбежно вызывает

инициацию обеих однокомпонентных ДНКМ, представленных на (б) и (в), и при этом не возбуждает никаких других мод (в режиме устойчивого движения трехкомпонентной ДНКМ). Трехкомпонентная ДНКМ может быть разложена на три составляющие, а именно на корневую моду (A) и две однокомпонентные моды (B и C), амплитуды которых можно выразить следующим образом

$$A = \frac{x_0}{\sqrt{3}} - \frac{y_0}{3} - \frac{y_1}{3}, \quad B = \frac{x_0}{\sqrt{3}} + \frac{y_0}{3} + \frac{y_1}{3}, \quad C = \frac{y_1 - 2y_0}{3}, \quad (4)$$

где (x_i, y_i) , $i=0,1$ – вектора смещений атомов с номерами 0 и 1, как отмечено на рис. 31 (а).

На рис. 32 как функции времени показаны вертикальное перемещение атома 1, y_1 , а также амплитуды мод A , B и C для случая, когда в момент времени $t=0$ атомы были смещены из согласно картине, представленной на рис. 31 (а), с длиной векторов перемещений $A=0.1 \text{ \AA}$. Как следует из рисунка, при нулевых значениях амплитуд однокомпонентных мод B и C , корневая мода приводит к их возбуждению. Отметим, что амплитуды мод A , B и C вычислялись из перемещений атомов согласно выражениям (4).

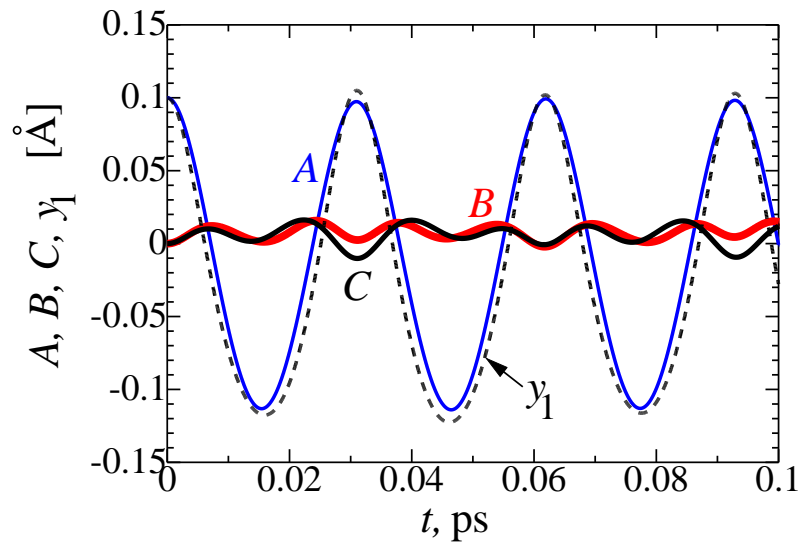


Рис. 32. Амплитуды корневой моды (A) и однокомпонентных ДНКМ (B и C), вместе с y -перемещением атома 1 [обозначен на рис. 31 (а)] в зависимости от времени. Начальные перемещения атомов были заданы в соответствии с картиной представленной на рис. 31 (а), при этом длина векторов перемещений была равна $A=0.1 \text{ \AA}$. При этом амплитуды мод B и C в нулевой момент времени равны нулю, однако эти моды неизбежно возбуждаются корневой модой.

Для двухкомпонентных ДНКМ в графене выше было установлено, что выбором начальных амплитуд компонент, их можно синхронизовать, и получить периодические во времени результирующие колебания. Здесь было выяснено, что и для трехкомпонентной ДНКМ, при должном выборе значений амплитуд B и C , можно получить периодические колебания, что продемонстрировано на рис. 33. В качестве начальных условий здесь бралась суперпозиция всех трех мод, показанных на рис. 31 (а-с) с амплитудами

$A=0.1 \text{ \AA}$, $B=0.933 \times 10^{-3} \text{ \AA}$ и $C=0.5471 \times 10^{-2} \text{ \AA}$, соответственно. Для поиска значений амплитуд B и C использовался метод покоординатного спуска с целью минимизации разницы между периодами колебаний двух однокомпонентных мод и периодом корневой моды. Итоговое периодическое колебание трехкомпонентной ДНКМ осуществляется с периодом 0.031 пс на частоте 32.3 ТГц . Кроме того, из рис. 33 видно, что на одном периоде колебания корневой моды [см. (а)] укладывается две осцилляции однокомпонентных ДНКМ, что аналогично эффекту генерации второй гармоники, который был отмечен для двухкомпонентных мод. Удвоенная частота однокомпонентных ДНКМ, составляет 64.6 ТГц , что заметно выше верхней границы фононного спектра графена, которая расположена, по разным источникам, на отметке от 46 до 48 ТГц [121, с. 83; 122, с. 141].

Таблица 2. Амплитуды составляющих трехкомпонентной ДНКМ, A , B и C , при которых наблюдаются периодические во времени колебания.

$A, \text{ \AA}$	$B, \text{ \AA}$	$C, \text{ \AA}$
0.01	0.969×10^{-5}	-0.1318×10^{-4}
0.02	0.400×10^{-4}	-0.674×10^{-4}
0.04	0.1724×10^{-3}	-0.3944×10^{-3}
0.06	0.408×10^{-3}	-0.1194×10^{-2}
0.08	0.7144×10^{-3}	-0.27464×10^{-2}
0.1	0.933×10^{-3}	-0.5471×10^{-2}

В Таблицу 2 сведены значения амплитуд A , B и C , обеспечивающих периодические колебания изучаемой трехкомпонентной ДНКМ. Можно видеть, что амплитуда корневой моды на порядки превосходит амплитуды однокомпонентных мод, однако, с ростом амплитуды A наблюдается рост относительных величин амплитуд B и C . Так, при $A=0.01$ амплитуды B и C на три порядка меньше чем A , но при $A=0.1$ амплитуды B и C уже только на два порядка меньше, чем A .

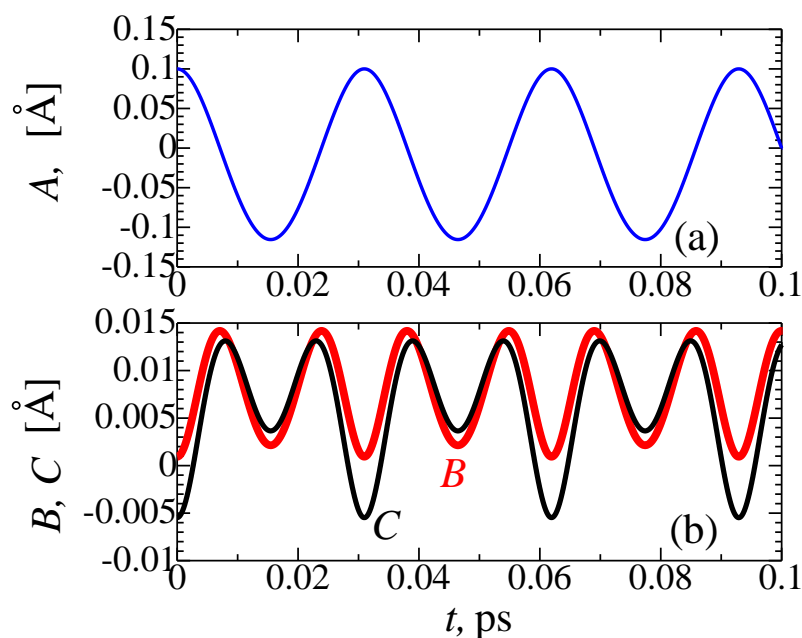


Рис. 33. Значения амплитуд (а) корневой моды и (б) двух однокомпонентных ДНКМ в зависимости от времени. Для задания начальных условий складывались все три моды, изображенные на рис. 31 (а-в), с амплитудами $A=0.1 \text{ \AA}$, $B=0.933 \times 10^{-3} \text{ \AA}$ и $C=0.5471 \times 10^{-2} \text{ \AA}$, соответственно. Результирующие колебания трехкомпонентной ДНКМ являются периодическими с периодом 0.031 пс и частотой 32.3 ТГц (следует сравнить с несинхронизированными колебаниями на рис. 32). На один период корневой моды, [см. на (а)],

приходится две осцилляции однокомпонентных мод [см. на (б)] с частотой 64.6 ТГц, что заметно выше верхнего края спектра фононных колебаний графена.

Опишем некоторые физические параметры трехкомпонентной ДНКМ в режиме периодических во времени колебаний. На рис. 34, как функции амплитуды корневой моды, показаны (а) частота, (б) энергия на атом и (в) средние за период колебания напряжения σ_{xx} и σ_{yy} , которые возникают в листе графена после инициации ДНКМ. Заметим, что при расчете напряжений предполагалось, что лист графена имеет толщину 3.3 \AA , равную расстоянию между атомными плоскостями в графите. Как следует из полученных результатов, частота трехкомпонентной ДНКМ уменьшается с ростом амплитуды то есть данная мода имеет мягкий тип нелинейности. Энергия ДНКМ пропорциональна квадрату амплитуды корневой моды. Рост амплитуды корневой моды приводит к увеличению разницы между компонентами напряжений σ_{xx} и σ_{yy} . Отсюда следует, что возбуждение трехкомпонентной ДНКМ разрушает изотропию упругих свойств графена, который в обычном состоянии является упруго-изотропным. Аномалии в виде появления отрицательного давления при возбуждении трехкомпонентной ДНКМ не наблюдается, поскольку давление, определяемое как $p = -(\sigma_{xx} + \sigma_{yy})/2$, оказывается положительным при отрицательных значениях нормальных напряжений. Результаты

свидетельствуют о том, что колебания с амплитудой $A < 0.02 \text{ \AA}$ можно считать малыми, поскольку в этом диапазоне амплитуд влияние трехкомпонентной ДНКМ на свойства графена пренебрежимо малы, но становятся заметными при больших амплитудах.

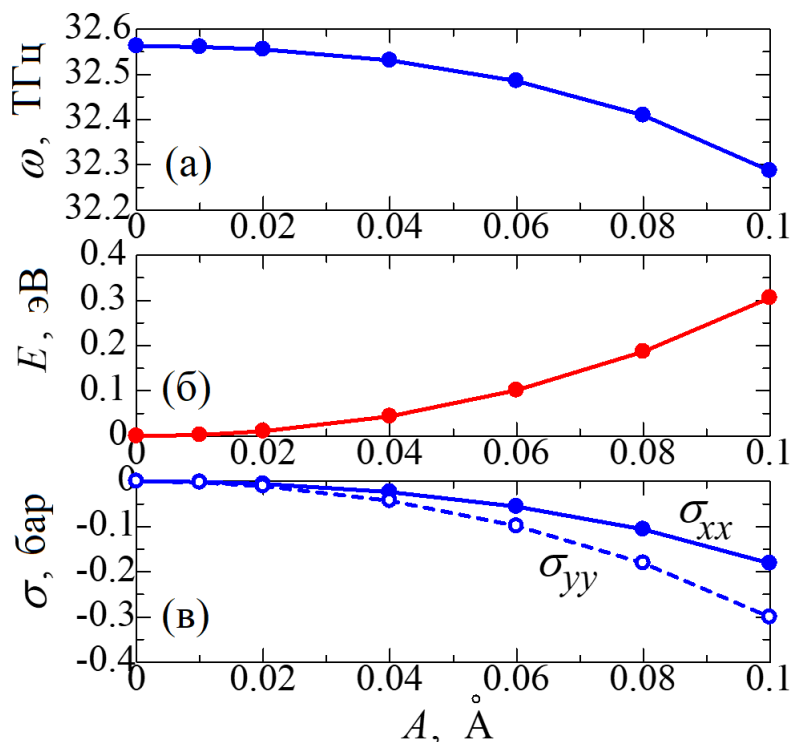


Рис. 34. Как функции амплитуды корневой моды трехкомпонентной ДНКМ представлены зависимости (а) частоты корневой моды, (б) полной энергии в расчете на атом и (в) средних за период напряжений σ_{xx} и σ_{yy} в графене, в режиме периодических колебаний. Амплитуды однокомпонентных мод B и C брались из Табл. 2 для выбранных значений амплитуды корневой моды A .

3.5. Выводы по главе

Метод молекулярной динамики, основанный на хорошо апробированных межатомных потенциалах Савина [19, с. 93] применен к анализу свойств всех

возможных одно- двух- и трехкомпонентных ДНКМ в графене. Результаты компьютерного моделирования находятся в полном согласии с предсказаниями теории, основанной на анализе симметрии решеток [6, с. 14]. Подтверждено, что при запуске в гексагональной решетке графена однокомпонентной ДНКМ (см. рис. 24) никакие другие моды не возбуждаются, двухкомпонентная ДНКМ содержит корневую и однокомпонентную моду (см. рис. 27), а трехкомпонентная – корневую моду и две однокомпонентные ДНКМ (см. рис. 31).

Показано, что для двухкомпонентных и трехкомпонентной ДНКМ можно подобрать амплитуды компонент рассматриваемой моды так, что колебания становятся периодическими.

Представлены некоторые физические свойства одно- двух- и трехкомпонентных ДНКМ в режиме периодического движения для различных амплитуд корневой моды A . Среди них не нашлось ни одной моды с частотами выше фононного спектра графена, что говорит о невозможности запуска дискретных бризеров в недеформированном графене, моделируемом с помощью потенциала Савина. Энергия ДНКМ растет с амплитудой пропорционально A^2 . Некоторые из одно- и двухкомпонентных ДНКМ превращают упруго-изотропный графен в анизотропный (ортотропный) двумерный материал, но имеются ДНКМ, сохраняющие изотропию. Трехкомпонентная ДНКМ разрушает изотропию.

Все двухкомпонентные ДНКМ и единственная трехкомпонентная приводят к генерации второй гармоники. При этом однокомпонентные

малоамплитудные добавки имеют частоту в два раза выше корневой моды. Удвоенная частота некоторых мод может существенно (почти вдвое) превышать максимальную частоту фононного спектра графена.

Отметим еще раз, что изученные ДНКМ существуют в любой гексагональной решетке, независимо от типа взаимодействий между частицами, потому что для их поиска используются только симметричные соображения, однако конкретные физические свойства ДНКМ зависят от используемых потенциалов.

Глава 4. Анализ устойчивости ДНКМ в треугольной решетке Морзе и в графене

В данной главе анализируется явление модуляционной неустойчивости, упоминавшееся в главе 3, для всех восьми однокомпонентных ДНКМ в треугольной решетке Морзе (см. рис. 16) и для всех четырех однокомпонентных ДНКМ гексагональной решетки графена (см. рис. 24).

4.1. Подход к анализу устойчивости ДНКМ

В рассматриваемой решетке запускается исследуемая ДНКМ с заданной амплитудой A , и для того, чтобы стимулировать развитие неустойчивости, ко всем степеням свободы добавляются малые случайные начальные смещения. Для двумерной решетки Морзе рассматриваются движения атомов в плоскости, поэтому вектор случайных возмущений имеет вид $(\xi_1, \xi_2) \times 10^{-9}$, где $\xi_{1,2}$ - случайные числа, однородно распределенные на отрезке $[-1,1]$. В графене атомы углерода имеют три степени свободы, поэтому вектор начальных возмущений также имеет три компоненты: $(\xi_1, \xi_2, \xi_3) \times 10^{-13}$ Å, где $\xi_{1,2,3}$ - случайные числа, однородно распределенные на отрезке $[-1,1]$. В однокомпонентных ДНКМ все движущиеся атомы колеблются вдоль прямых линий с очень небольшими добавленными возмущениями. Развитие неустойчивости отслеживается путем нахождения максимального по всем атомам расстояния от этих линий в плоскости xy , $|\Delta_{xy}|$, а для графена ещё и в направлении z , $|\Delta_z|$. Логарифмы данных отклонений строятся как функции времени. Учитывая, что в режиме неустойчивости отклонения растут во времени экспоненциально быстро, логарифм отклонения растёт линейно и

нами были определены углы наклона этих прямых, которые являются показателями экспонент развития неустойчивости. Далее для каждой ДНКМ показатели экспонент строились как функции амплитуды моды A и экстраполяция этой зависимости до нулевого значения позволила найти критические значения амплитуд A^* , ниже которых ДНКМ устойчивы.

4.2. Устойчивость однокомпонентных ДНКМ в треугольной решетке Морзе

На рис. 35, в качестве примера, приведены численные результаты анализа устойчивости ДНКМ 2 (см. рис. 16). Было обнаружено, что в неустойчивом режиме максимальное отклонение атомов от прямолинейных траекторий экспоненциально растет со временем, $|\Delta_{xy}| \sim e^{\alpha t}$, с критическим показателем α . Это показано на рис. 35 (а) для трех значений амплитуд ДНКМ 2, $A = 0,03, 0,04$ и $0,05$. Обратим внимание, что для ординаты используется логарифмическая шкала. Отрезки прямых показывают скорость развития неустойчивости, по которым были оценены показатели критических экспонент. На рис. 35 (б) показатель критической экспоненты показан как функция амплитуды ДНКМ 2. Прямая линия, проведенная по методу наименьших квадратов, имеет уравнение $\alpha = a + bA$ с коэффициентами $a = -0,641$ и $b = 45,3$. Отсюда находим, что критический показатель обращается в ноль при $A^* = 0,0142$. При меньших значениях амплитуды ДНКМ 2 является устойчивой. Коэффициент b показывает чувствительность критического показателя к амплитуде ДНКМ 2.

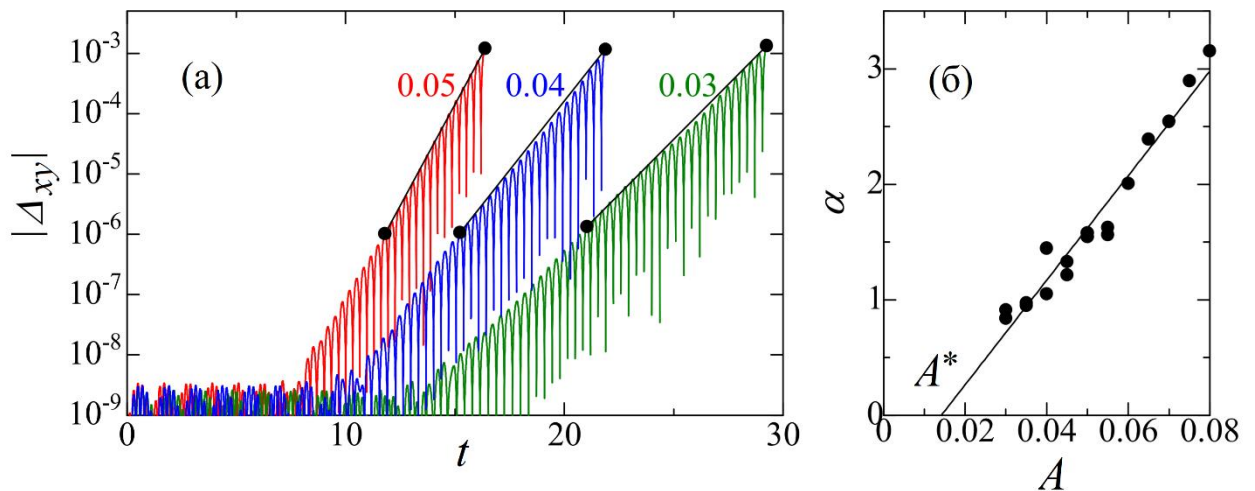


Рис. 35. Результаты для ДНКМ 2. (а) Максимальная абсолютная величина отклонения движущегося атома от прямолинейной траектории, $|\Delta_{xy}|$, как функция времени. Три кривые дают результаты для трех различных значений амплитуд ДНКМ 2, $A = 0,03, 0,04$ и $0,05$, как показано на рисунке. Прямые линии показывают скорость развития неустойчивости, по которым были оценены показатели критических экспонент, α , (отметим логарифмический масштаб, выбранный для оси ординат). (б) Показатель критической экспоненты как функция амплитуды ДНКМ 2. Прямая линия проведена по методу наименьших квадратов. Точка обращения α в ноль дает критическое значение амплитуды ДНКМ, A^* , ниже которой она устойчива.

В Таблице 3 даны коэффициенты a и b для всех исследованных ДНКМ. Результаты показывают, что критическое значение амплитуды ДНКМ, A^* , выше которого она становится неустойчивой, для всех мод имеет порядок величины 1% от межатомного расстояния.

Таблица 3. Коэффициенты линейной зависимости критического показателя экспоненты от амплитуды ДНКМ, $\alpha = a + bA$, для восьми изученных ДНКМ.

ДНКМ	1	2	3	4	5	6	7	8
a	-0.383	-0.641	-1.75	-0.811	-3.92	-1.49	-0.170	-0.055
b	13.3	45.3	70.1	23.8	125	73.3	23.4	11.8

4.3. Устойчивость однокомпонентных ДНКМ в графене

Развитие модуляционной неустойчивости ДНКМ от I до IV показано на рис. 36 (а-г), соответственно, путем построения максимального по всем атомам расстояния от начальных атомных траекторий в плоскости xy , $|\Delta_{xy}|$ (черные линии) и в направлении z $|\Delta_z|$ (красные линии). Расчеты сделаны для амплитуды $A = 0,06 \text{ \AA}$ для ДНКМ I, II и III и $A = 0,04 \text{ \AA}$ для ДНКМ IV. Можно видеть, что для мод I, III и IV отклонения из плоскости, $|\Delta_z|$, с течением времени остаются небольшими, в то время как отклонения от начальных траекторий в плоскости, $|\Delta_{xy}|$, растут экспоненциально во времени (обратим внимание на использование логарифмической шкалы для ординаты) до значения порядка $0,01 \text{ \AA}$. Для ДНКМ II, см. рис. 36 (б), ситуация прямо противоположная, здесь отклонения в плоскости остаются небольшими, но отклонения из плоскости растут экспоненциально во времени. Однако, когда $|\Delta_z|$ достигает значения порядка 10^{-5} \AA , отклонения в плоскости начинают расти экспоненциально и даже быстрее, чем $|\Delta_z|$.

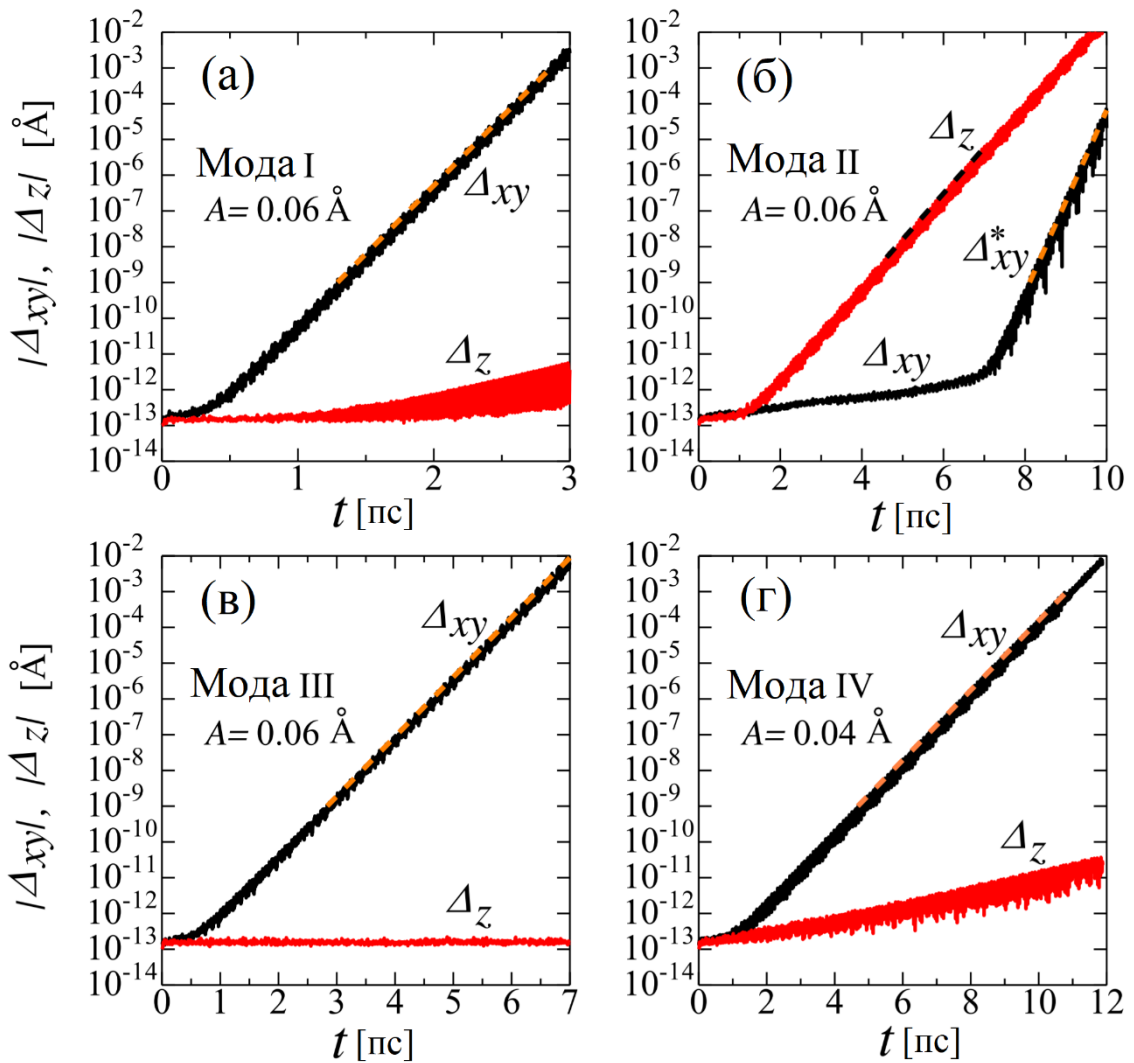


Рис. 36. (а-г) Развитие модуляционной неустойчивости ДНКМ I, II, III и IV, соответственно. Начальная амплитуда мод I, II и III равна $A = 0,06 \text{ \AA}$ и $A = 0,04 \text{ \AA}$ для моды IV. Показаны временные эволюции максимального по всем атомам расстояния от начальных траекторий в плоскости xy , $|\Delta_{xy}|$ (черные линии) и в направлении z , $|\Delta_z|$ (красные линии). Для ординаты используется логарифмическая шкала. Пунктирные линии показывают линейные приближения, из которых находят показатели критических экспонент.

Экспоненциальный во времени рост отклонений смещений от начальных траекторий представим выражениями

$$|\Delta_{xy}| = K_{xy} \exp(\alpha_{xy}t), \quad |\Delta_z| = K_z \exp(\alpha_z t), \quad (5)$$

где K_{xy} и K_z – предэкспоненциальные множители, α_{xy} и α_z – показатели критических экспонент, характеризующие скорость развития неустойчивости в плоскости и из плоскости, соответственно. Предэкспоненциальные множители в основном определяются величиной начальных возмущений, и здесь они не анализируются. Пунктирные линии на рис. 36 показывают линейные аппроксимации максимальных отклонений атомов от своих траекторий, из которых были найдены критические показатели α_{xy} и α_z для отклонений в плоскости и из плоскости, соответственно.

На рис. 37 (а-г) показаны критические показатели для отклонений атомов от исходных траекторий в плоскости и из плоскости для ДНКМ от I до IV соответственно как функции амплитуд мод. Черные точки показывают результаты для отклонений в плоскости (α_{xy}), а красные треугольники для отклонений из плоскости (α_z). На рис. 37 (б) для ДНКМ II голубыми кружками показан критический показатель для второго режима с быстрым ростом отклонений в плоскости (α_{xy}^*) [см. рис. 36 (б)].

Из результатов, изображенных на рис. 37 видно, что ДНКМ I, III и IV имеют почти нулевой показатель α_z , и неустойчивость развивается за счет экспоненциального роста отклонений в плоскости с положительными значениями α_{xy} . Для ДНКМ II неустойчивость развивается в два этапа: на первом этапе имеем положительные значения α_z и почти нулевые α_{xy} , а на втором этапе, который начинается, когда $|\Delta_z|$ достигает значения порядка 10^{-

⁵, отклонения в плоскости начинают расти с критическим показателем α_{xy}^* .

Интересно, что α_{xy}^* в два раза больше, чем α_z .

Из рис. 37 также видно, что положительные критические показатели уменьшаются с уменьшением амплитуды ДНКМ A почти линейно для относительно больших A и быстрее для меньших значений A , и они обращаются в ноль при определенном значении A^* . Для $A < A^*$ ДНКМ устойчивы. Наиболее устойчивой является ДНКМ III с $A^* = 0,019 \text{ \AA}$, следующей по устойчивости является ДНКМ I с $A^* = 0,009 \text{ \AA}$, несколько менее устойчива ДНКМ II с $A^* = 0,006 \text{ \AA}$, и наименее устойчивой является ДНКМ IV с $A^* = 0,002 \text{ \AA}$.

Наиболее интригующий результат заключается в том, что неустойчивость ДНКМ II развивается за счет роста отклонений из плоскости от начальных траекторий атомов, в то время как для трех других мод отклонения в плоскости экспоненциально растут, а отклонения из плоскости остаются весьма малыми (см. рис. 36). Интересно сравнить различные свойства изученных четырех ДНКМ с целью выяснить причину этого качественного различия в неустойчивой динамике ДНКМ II.

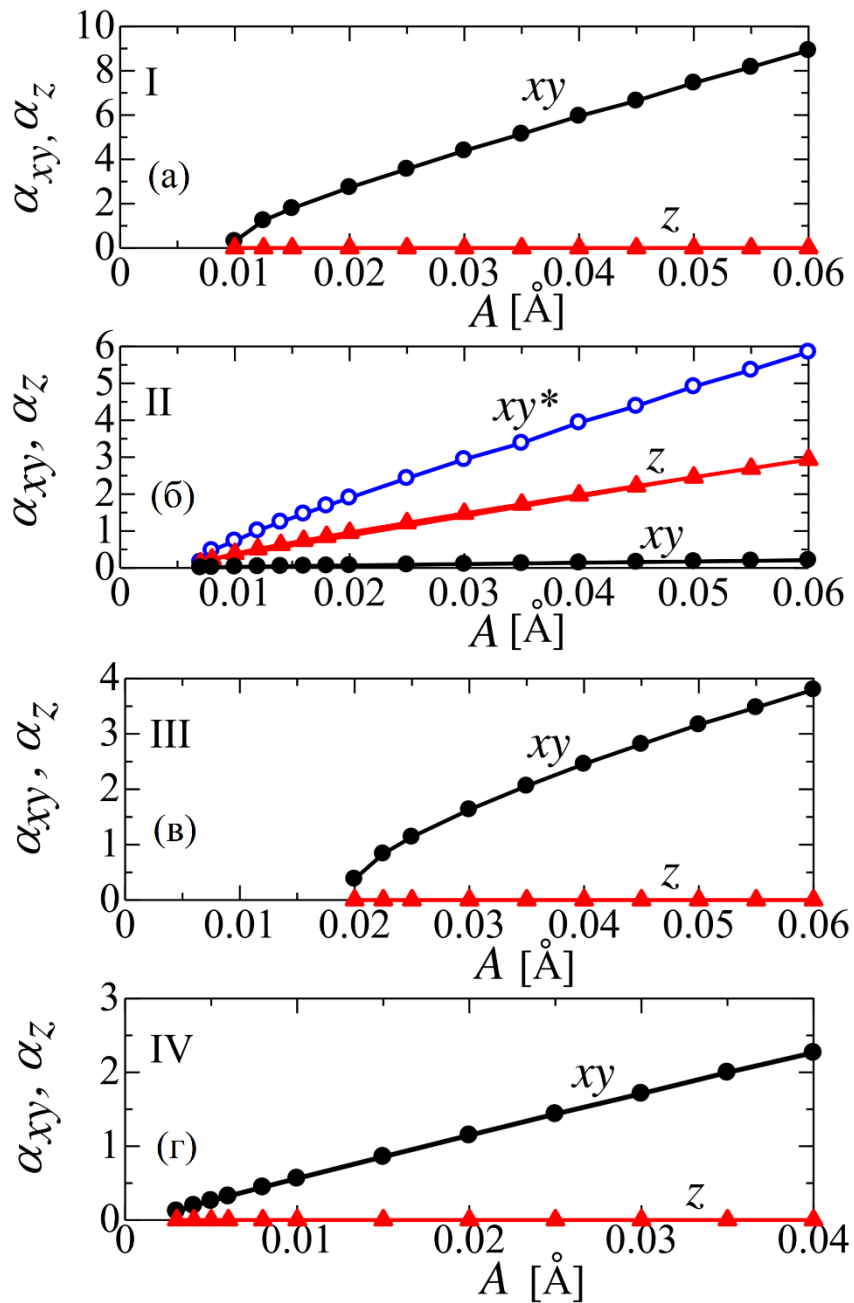


Рис. 37. (а-г) Показатели критических экспонент для ДНКМ от I до IV соответственно, как функции амплитуд мод. Показаны показатели критических экспонент для отклонений в плоскости α_{xy} (черные точки) и из плоскостных α_z (красные треугольники). На (б) также приведен показатель критической экспоненты α_{xy}^* для второго (быстрого) режима отклонения в плоскости (голубые кружки).

Во-первых, вспомним, что возбуждение ДНКМ I разрушает упругую изотропию графена, в то время как другие ДНКМ не разрушают. В этом отношении ДНКМ II аналогична ДНКМ III и IV.

Колебания атомов для ДНКМ I-IV были представлены на рис. 25 (а). В приведенном примере начальное смещение атомов во всех случаях составляет $A = 0,1 \text{ \AA}$. Как отмечалось, только ДНКМ IV демонстрирует симметричные колебания с одинаковыми максимальными и минимальными значениями отклонений от решеточных положений, тогда как для остальных трех мод максимальное положительное отклонение больше максимального отрицательного. Опять же, ДНКМ II не является уникальной в отношении симметрии колебаний.

Нами анализировались вклады энергий валентных связей и валентных углов в полную потенциальную энергию кристалла, см. Табл. 1. Было отмечено, что ДНКМ I и II включают в себя обе энергии, но ДНКМ III и IV не изменяют валентные углы и они не вносят вклад в потенциальную энергию системы. В этом отношении ДНКМ II аналогична ДНКМ I.

ДНКМ I и II демонстрируют нелинейность мягкого типа, тогда как ДНКМ III и IV имеют нелинейность жесткого типа. Мода II имеет наименьшую частоту из всех мод, поскольку в ней большая часть атомов (половина) находится в покое. Таким образом, устойчивость ДНКМ II по отношению к отклонениям атомов от начальных траекторий в плоскости листа может быть объяснена тем фактом, что каждый движущийся атом колеблется между двумя покоящимися атомами (см. рис. 24). Эти

покоящиеся атомы производят стабилизирующий эффект для колебаний в плоскости, но не для колебаний из плоскости.

4.4. Выводы по главе

С использованием метода молекулярной динамики, впервые была изучена устойчивость всех восьми однокомпонентных ДНКМ в треугольной решетке Морзе и всех четырех однокомпонентных ДНКМ в графене. При изучении графена сравнивались скорости развития неустойчивости по отношению к отклонениям атомов в плоскости и из плоскости листа. Основные результаты можно сформулировать следующим образом.

1. Для всех ДНКМ, как в треугольной решетке, так и в гексагональной решетке графена было показано существование критического значения амплитуды ниже которого моды устойчивы. Критические значения амплитуд для треугольной решетки Морзе составляют по порядку величины 1% от межатомного расстояния. В решетке графена наиболее устойчивая мода (ДНКМ III) также показывает критическую амплитуду порядка 1% от межатомного расстояния, а наименее устойчивая (ДНКМ IV) – порядка 0.1% от межатомного расстояния.

2. При изучении развития неустойчивости четырех ДНКМ в графене, наиболее интригующий результат состоит в том, что неустойчивость ДНКМ II развивается за счет роста отклонений начальных траекторий атомов из плоскости, в то время как для трех других мод экспоненциально во времени растут отклонения в плоскости, а отклонения из плоскости остаются весьма

малыми. Устойчивость ДНКМ II по отношению к отклонениям атомов от начальных траекторий в плоскости листа графена может быть объяснена тем, что в данной моде половина атомов покоится и каждый движущийся атом колеблется между двумя покоящимися, которые производят стабилизирующий эффект для колебаний в плоскости, но не для колебаний из плоскости листа графена.

Представленные результаты расширяют наше понимание о нелинейной динамике решеток и устойчивости делокализованных нелинейных колебательных мод.

Основные результаты и выводы:

1. Методом молекулярной динамики изучены свойства одно- и двухкомпонентных ДНКМ в двумерной решетке Морзе, а также одно- двух- и трехкомпонентных ДНКМ в решетке графена. Для всех мод посчитаны зависимости частоты, энергии и внутренних напряжений, возникающих в решетках, как функции амплитуды.

2. В обоих из исследованных решетках имеются симметричные и несимметричные однокомпонентные ДНКМ, в первом случае середина прямолинейных траекторий атомов совпадает с решеточными положениями, а в последнем не совпадает.

3. Установлено, что в треугольной решетке Морзе только лишь одна однокомпонентная и одна двухкомпонентная ДНКМ имеют частоту выше фононного спектра решетки для всех амплитуд колебаний. Такие моды порождают дискретные бризеры в результате их модуляционной неустойчивости, либо дискретные бризеры можно получить путем наложения на ДНКМ локализирующей функции с должным образом выбранными параметрами.

4. Ни одна из исследованных ДНКМ в графене с потенциалом Савина не имеет частоту выше фононного спектра решетки для всех амплитуд колебаний. Следовательно, графен с потенциалом Савина, вероятнее всего, не поддерживает долгоживущих дискретных бризеров.

5. Энергии всех исследованных ДНКМ в обеих решетках монотонно растут с амплитудой колебаний. При не слишком больших амплитудах

энергия пропорциональна квадрату амплитуды, но при больших амплитудах наблюдается незначительное отклонение от этой зависимости из-за влияния геометрической нелинейности.

6. Как в треугольной решетке Морзе, так и в гексагональной решетке графена имеются ДНКМ как сохраняющие упругую изотропию решетки, так и разрушающие её. В первом случае ДНКМ создают в решетке напряжения с равными нормальными компонентами, $\sigma_{xx} = \sigma_{yy}$, а во втором $\sigma_{xx} \neq \sigma_{yy}$.

7. Как правило, ДНКМ создают в решетке отрицательные (сжимающие) напряжения, при использовании периодических граничных условий с постоянной формой расчетной ячейки. Однако в треугольной решетке имеется одна однокомпонентная ДНКМ, создающая напряжения с одной отрицательной и одной положительной компонентой нормальных напряжений. Однако давление $p = -(\sigma_{xx} + \sigma_{yy})/2$ в решетке остается положительным, поскольку отрицательная компонента напряжения имеет большее абсолютное значение чем положительная. В графене имеются две изотропные двухкомпонентные ДНКМ, создающие аномальное отрицательное давление за счет наличия в структуре ДНКМ вращающихся углеродных гексагонов.

8. Показано, что для двухкомпонентных и трехкомпонентной ДНКМ в обеих исследованных решетках можно подобрать амплитуды компонент рассматриваемой моды так, что колебания становятся периодическими.

9. Все двухкомпонентные ДНКМ в треугольной решетке, а также все двухкомпонентные и единственная трехкомпонентная ДНКМ в графене приводят к генерации второй гармоники. При этом однокомпонентные малоамплитудные добавки имеют частоту в два раза выше корневой моды. Удвоенная частота некоторых мод может существенно (почти вдвое) превышать максимальную частоту фононного спектра решетки.

10. Для всех ДНКМ, как в треугольной решетке Морзе, так и в гексагональной решетке графена было показано существование критического значения амплитуды, ниже которого моды устойчивы. Критические значения амплитуд для треугольной решетки Морзе составляют по порядку величины 1% от межатомного расстояния. В решетке графена наиболее устойчивая мода (ДНКМ III) также показывает критическую амплитуду порядка 1% от межатомного расстояния, а наименее устойчивая (ДНКМ IV) – порядка 0.1% от межатомного расстояния.

11. В целом результаты данной работы показывают, что упругими свойствами нелинейных решеток можно управлять, возбуждая в них ДНКМ.

Список литературы

1. Борн М., Кунь Х. Динамическая теория кристаллических решеток. - М.: Издательство иностранной литературы, - 1958. - 488 с.
2. G.M. Chechin, V.P. Sakhnenko. Interactions between normal modes in nonlinear dynamical systems with discrete symmetry. Exact results. // *Physica D.* - 1998. - V. 117. - P. 43 - 76.
3. G. Chechin, D. Ryabov, S. Shcherbinin. Nonlinear normal mode interactions in the SF₆ molecule studied with the aid of density functional theory // *Physical Review E.* - 2015. - V. 92. - № 1. - P. 21 - 35.
4. G.M. Chechin, S.A. Shcherbinin. Delocalized periodic vibrations in nonlinear LC and LCR electrical chains // *Commun in Nonlinear Sci and Numer Simulat.* - 2015. - V. 22. - P. 244 - 262.
5. Abdullina D.U., Semenova M.N., Semenov A.S., Ryabov D.S., Chechin G.M., Korznikova E.A., Baimova J.A., Dmitriev S.V. Stability of in-plane delocalized vibrational modes in triangular Morse lattice // *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering.* - 2018. - V. 447. - P. 48 - 99.
6. G.M. Chechin, D.S. Ryabov, S.A. Shcherbinin. Nonlinear vibrational modes in graphene: group-theoretical results // *Letters on Materials.* - 2016. - V. 6. - № 1. - P. 9 - 15.
7. Dolgov, A.S. The localization of vibrations in a nonlinear crystalline structure / A.S. Dolgov // *Soviet Physics of Solid State.* - 1986. - V. 28. - P. 907 - 909.

8. Sievers, A. J. Intrinsic localized modes in anharmonic crystals / A. J. Sievers, and S. Takeno // *Physical Review Letters*. - 1988. - V. 61. - 970 p.
9. S. Flach, A. V. Gorbach. Discrete breathers. Advances in theory and applications // *Physics Reports*. - 2008. - V. 467. - P.1 - 116.
10. Medvedev, N.N. Energy localization on the Al sublattice of Pt₃Al with L12 order / N.N. Medvedev, M.D. Starostenkov, M.E. Manley // *Journal of Applied Physics*. - 2013. - V. 114. - 120 p.
11. Дмитриев С.В., Корзникова Е.А., Баимова Ю.А., Веларде М.Г.. Дискретные бризеры в кристаллах // *ФН*. - 2016. - Т. 186. - № 5. С. 3 - 16.
12. Кистанов А.А. Почему существуют дискретные бризеры в двумерных и трехмерных монокристаллах Морзе? / А.А. Кистанов, Е.А. Корзникова, К.С. Сергеев, Д.А. Шепелев, А.Р. Давлетшин, Д.И. Бокий, С.В. Дмитриев // *Письма о материалах*. - 2016. - Т. 6. - № 3 . - С. 221 - 226.
13. Korznikova E.A., Fomin S., Soboleva E., Dmitriev S.V. Highly symmetric discrete breather in a two-dimensional Morse crystal // *JETP Lett.* - 2016. - P. 277 - 281.
14. Barani E., Lobzenko I.P., Korznikova E.A., Soboleva E., Dmitriev S.V., Zhou K., Marjaneh A. Transverse discrete breathers in unstrained grapheme // *Eur. Phys. J. B.* - 2017. – P. - 29 - 89.
15. Burlakov V.M., Kiselev S.A., Rupasov V.I. // *JETP Lett.* - 1990. - P 21 - 37.
16. Cretegny T., Dauxois T., Ruffo S., Torcini A. *Physica D.* - 1998. - 201 p.

17. Khadeeva L.Z., Dmitriev S.V. *Physica*. - 2010. - 245 p.
18. Dmitriev S.V., Korznikova E.A., Bokij D.I., Zhou K. Auxeticity from nonlinear vibrational modes // *Phys. Status Solidi B*. - 2016. - P. 11 - 32.
19. Savin A.V., Kivshar Y.S., Hu B., Suppression of thermal conductivity in graphene nanoribbons with rough edges // *Phys. Rev.* - 2010. - P. 84 - 90.
20. Russell F.M., Eilbeck J.C. // *Europhys. Lett.* 78. - 2007. - P. 34 - 51.
21. Bajars J., Eilbeck J.C., Leimkuhler B. *Physica D*. - 2015. - 300 p.
22. Bajars J., Eilbeck J.C., Leimkuhler B. In *Quodons in Mica*, edited by J. Archilla, N. Jimenez, V. Sanchez-Morcillo, L. Garcia-Raffi. Springer Series in Materials Science. - 2015. - 165 p.
23. Bachurina O.V. *Model. Simul. Mater.* - 2019. - 121 p.
24. Geim A.K., Novoselov K.S. *Nat. Mater.* - 2007. - 341 p.
25. Akinwande D. *Extreme Mech // Lett.* - 2017. - № 17. - P - 46 - 71.
26. Bao Q., Loh K.P., *ACS Nano*. - 2012. - 291 p.
27. Krivtsov, A. The ballistic heat equation for a one-dimensional harmonic crystal. - 2019 - P. 345 - 358.
28. Podolskaya, E.A., Krivtsov, A.M., Tsvetkov, D.V. Anomalous heat transfer in one-dimensional diatomic harmonic crystal 2018 *Materials Physics and Mechanics*. - 2019. - P. 172 - 180.
29. Krivtsov, A.M., Sokolov, A.A., Müller, W.H., Freidin, A.B. One-dimensional heat conduction and entropy production. - 2018. - P. 197 - 213.
30. Krivtsov A.M. Heat transfer in infinite harmonic one-dimensional crystals // *Doklady Physics*. - 2015. - № 60 - P. 407 - 411.

31. Gavrilov S.N., Krivtsov A.M. Thermal equilibration in a one-dimensional damped harmonic crystal. - 2019. - 300 p.
32. Krivtsov A.A., Müller A.M., Vilchevskaya W.H., Sokolov E.N. Change of entropy for the one-dimensional ballistic heat equation: Sinusoidal initial perturbation. - 2019. - 255 p.
33. Murachev A.S., Krivtsov A.M., Tsvetkov D.V. Thermal echo in a finite one-dimensional harmonic crystal. - 2019. - 222 p.
34. Kuzkin V.A. Unsteady ballistic heat transport in harmonic crystals with polyatomic unit cell. Continuum Mech. Therm. - 2019. - 337 p.
35. Kuzkin V.A. Thermal equilibration in infinite harmonic crystals. Continuum Mech. Therm. - 2019. - 200 p.
36. Kanel G.I., Zaretsky E.B., Razorenov S.V., Ashitkov S.I., Fortov V.E. Unusual plasticity and strength of metals at ultra-short load durations. - 2017. - 401 p.
37. Kanel' G.I., Fortov V.E., Razorenov S.V. Shock waves in condensed-state physics. - 2007. - 228 p.
38. Holian B.L., Lomdahl P.S. Plasticity induced by shock waves in nonequilibrium molecular-dynamics simulations. - 1998. - 2088 p.
39. Zakharov P.V., Starostenkov M.D., Korznikova E.A., Eremin A M, Lutsenko I.S., Dmitriev S.V. Excitation of soliton-type waves in crystals of the A_3B stoichiometry. - 2019. - 2170 p.

40. Zorya I.V., Poletaev G.M., Rakitin R.Y., Ilyina M.A., Starostenkov M.D. Interaction of impurity atoms of light elements with self-interstitials in fcc metals. - 2019. - 241 p.
41. Bukkuru S., Bhardwaj U., Rao K.S., Rao A.D.P., Warriier M., Valsakumar M.C. Kinetics of self-interstitial migration in bcc and fcc transition metals. - 2018. - 400 p.
42. Bhardwaj U., Sand A.E., Warriier M. Classification of clusters in collision cascades. - 2020. - 600 p.
43. Chen D., Murakami K., Abe H., Li Z., Sekimura N. Investigation of interactions between defect clusters in stainless steels by in situ irradiation at elevated temperatures. - 2019. - 203 p.
44. Vérité G., Domain C., Fu C.-C., Gasca P., Legris A., Willaime F. Self-interstitial defects in hexagonal close packed metals revisited: Evidence for low-symmetry configurations in Ti, Zr, and Hf. - 2013. - 195 p.
45. Kononenko V.G., Bogdanov V.V., Turenko A.N., Volosyuk M.A., and A.V. Volosyuk. Probl. At. Sci. Technol. - 2016. - 702 p.
46. Babicheva R.I., Evazzade I., Korznikova E.A., Shepelev I.A., Zhou K., Dmitriev S.V. Low-energy channel for mass transfer in Pt crystal initiated by molecule impact. - 2019. - 270 p.
47. Moradi Marjaneh A., Saadatmand D., Evazzade I., Babicheva R.I., Soboleva E.G., Srikanth N., Zhou K., Korznikova E.A., Dmitriev S.V.. Mass transfer in the Frenkel-Kontorova chain initiated by molecule impact. - 2018. - 200 p.

48. Dmitriev S.V., Korznikova E.A., Chetverikov A.P. Supersonic N-crowdions in a two-dimensional Morse crystal. - 2018. - 270 p.
49. Dmitriev S.V., Medvedev N.N., Chetverikov A.P., Zhou K., Velarde M.G. Highly enhanced transport by supersonic N-crowdions. - 2017. - 301 p.
50. Feodosyev S.B., Gospodarev I.A., Manzhelii E.V., Sirenko V.A., Syrkin E.S. Discrete atomic vibrations localized on defects in linear chains of atoms adsorbed by carbon nanobundles. - 2019. - 900 p.
51. Yuan H., Zhou X., Cao Y., Bian Q., Zhang Z., Sun H., Li S., Shao Z., Hu J., Zhu Y., Mao Z., Ji W., Pan M. Raman detection of hidden phonons assisted by atomic point defects in a two-dimensional semimetal. - 2019. - 312 p.
52. McCloy J.S., Wolf W., Wimmer E., Poisl W.H., Zelinski B.J.J. Computational and experimental identification of hydrogen defect vibrational modes in zinc sulfide. - 2019. - 531 p.
53. Shafir I., Nagli L., Katzir A. Raman spectroscopy of rare earth doped silver halide crystals. - 2009. - 206 p.
54. Lin-Chung P.J., Fong C.Y. Defect vibrational modes in germanium crystals. - 1987. - 300 p.
55. MacKay R.S. Proof of existence of breathers for time-reversible or Hamiltonian networks of weakly coupled oscillators / R.S. MacKay, and S. Aubry // *Nonlinearity*. - 1994. - V. 7. - P. 1623 - 1643.
56. Bambusi D. Proof of existence of breathers for time-reversible or Hamiltonian networks of weakly coupled oscillators / D. Bambusi // *Nonlinearity*. - 1996. - V. 9. - P. 433 - 457.

57. Kimura M., Matsushita Y., Hikihara, T. Parametric resonance of intrinsic localized modes in coupled cantilever arrays. - 2016. - 2830 p.

58. Page J.B. Asymptotic solutions for localized vibrational modes in strongly anharmonic periodic systems / J.B. Page // Physical Review B. - 1990. - V. 41. - P. 46 - 53.

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

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

61. Chetverikov A.P. Soliton assisted control of source to drain electron transport along natural channels – crystallographic axes – in two-dimensional triangular crystal lattices / A.P. Chetverikov, W. Ebeling, M.G. Velarde // European Physical Journal B. - 2016. - V. 89. - № 9. - P. 193 - 202.

62. Medvedev N.N. Energy localization on the Al sublattice of Pt₃Al with L12 order / N.N. Medvedev, M.D. Starostenkov, and M.E. Manley // Journal of Applied Physics. - 2013. - V. 114. - P. 61 - 73.

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

64. Medvedev N.N. Exciting discrete breathers of two types in a computer 3D model of Pt₃Al crystal / N.N. Medvedev, M.D. Starostenkov, P.V. Zakharov, and S.V. Dmitriev // Technical Physics Letters. - 2015. - V. 41. - P. 993 - 999.

65. Liu B. Discrete breathers in hydrogenated graphene / B. Liu, J.A. Baimova, S.V. Dmitriev, X. Wang, H. Zhu, K. Zhou // J Journal of Physics D: Applied Physics. - 2013. - V. 46. - P. 77 - 89.

66. Chechin G.M. Properties of discrete breathers in graphane from ab initio simulations / G.M. Chechin, S.V. Dmitriev, I.P. Lobzenko, D.S. Ryabov // Physical Review B. - 2014. - V. 90. - P. 63 - 75.

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

68. Korznikova E.A. Effect of strain on gap discrete breathers at the edge of armchair graphene nanoribbons / E.A. Korznikova, J.A. Baimova, S.V. Dmitriev // Europhysics Letters. - V. 102. - P. 110 - 121.

69. Yamayose Y. Excitation of intrinsic localized modes in a graphene sheet / Y. Yamayose, Y. Kinoshita, Y. Doi, A. Nakatani, T. Kitamura // Europhysics Letters. - 2007. - V. 80. - P. 79 - 88.

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

71. Khadeeva L.Z. Discrete breathers in deformed graphene / L.Z. Khadeeva, S.V. Dmitriev, and Yu. S. Kivshar // Letters to Journal of Experimental and Theoretical Physics. - 2011. - V. 94. - P. 539 - 543.
72. Hizhnyakov V. Transverse intrinsic localized modes in monatomic chain and in graphene / V. Hizhnyakov, M. Klopov, A. Shelkan // Physics Letters A. - 2016. - V. 380. - P.1075 - 1081.
73. Fraile A. Long-lived discrete breathers in freestanding graphene / A. Fraile, E.N. Koukaras, K. Papagelis, N. Lazarides, G.P. Tsironis // Chaos, Solitons and Fractals. - V. 87. - P.262 - 267.
74. Kinoshita Y. Selective excitations of intrinsic localized modes of atomic scales in carbon nanotubes / Y. Kinoshita, Y. Yamayose, Y. Doi, A. Nakatani, T. Kitamura // Physical Review B. - 2008. - V. 77. - P. 31 - 38.
75. Shimada T. Stone-Wales transformations triggered by intrinsic localized modes in carbon nanotubes / T. Shimada, D. Shirasaki, T. Kitamura // Physical Review B. - 2010. - V. 81. - P. 60 - 71.
76. Shimada T. Influence of nonlinear atomic interaction on excitation of intrinsic localized modes in carbon nanotubes / T. Shimada, D. Shirasaki, Y. Kinoshita, Y. Doi, A. Nakatani, T. Kitamura // Physica D. - 2010. - V. 239. - P. 407 - 413.
77. Barani E., Korznikova E.A., Chetverikov A.P., Zhou K., Dmitriev S.V. Gap discrete breathers in strained boron nitride. - 2017. - 3560 p.

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

79. Лобзенко И.П. Ab initio моделирование щелевых дискретных бризеров в деформированном графене / И.П. Лобзенко, Г.М. Чечин, Г.С. Безуглова, Ю.А. Баимова, Е.А. Корзникова, С.В. Дмитриев // Физика твердого тела. - 2016. - V. 58. - № 3. С. 616 - 622.

80. Manley M.E. Impact of intrinsic localized modes of atomic motion on materials properties / M.E. Manley // Acta Mater. - 2010. - V. 58. - № 8. P. 2926 - 2935.

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

82. Archilla J.F.R. Long range annealing of defects in germanium by low energy plasma ions / J.F.R. Archilla, S.M.M. Coelho, F.D. Auret, V.I. Dubinko, and V. Hizhyakov // Physica D. - 2015. - V. 297. - P. 54 - 63.

83. Archilla J.F.R. Ultradiscrete kinks with supersonic speed in a layered crystal with realistic potentials / J. F. R. Archilla, Yu. A. Kosevich, N. Jiménez, V.J. Sánchez-Morcillo, and L.M. García-Raffi // Physical Rev. E. - 2015. - V. 91. - P. 71 - 88.

84. Archilla J.F.R. Discrete breathers for understanding reconstructive mineral processes at low temperatures / J.F.R. Archilla, J. Cuevas, M.D. Alba, M. Naranjo and J.M. Trillo // J. Physical Chem. B. - 2006. - V. 110. - P. 69 - 81.

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

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

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

88. Haas M. Prediction of high-frequency intrinsic localized modes in Ni and Nb / M. Haas, V. Hizhnyakov, A. Shelkan, M. Klopov, A.J. Sievers// Physical Review B. - 2011. - V. 84. - P. 75 - 92.

89. Hizhnyakov V. Modeling of self-localized vibrations and defect formation in solids / V. Hizhnyakov, M. Haas, A. Pishtshev, A. Shelkan, M. Klopov// Nuclear Instruments Methods. - 2013. - V. 303. - P. 89 - 99.

90. Hizhnyakov V. Theory and molecular dynamics simulations of intrinsic localized modes and defect formation in solids / V. Hizhnyakov, M. Haas, A. Shelkan, M. Klopov// Physica Scripta. -2014. - V. 89. - P. 25 - 51.

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

92. Khadeeva L.Z. Lifetime of gap discrete breathers in diatomic crystals at thermal equilibrium / L.Z. Khadeeva, S.V. Dmitriev // Physical Review B. - 2011. - V. 84. - № 14 - P. 81 - 93.

93. Захаров П.В. Возбуждение щелевых дискретных бризеров в кристалле состава АЗВ потоком частиц / П.В. Захаров, М.Д. Старостенков, А.М. Ерёмин, Е.А. Корзникова, С.В. Дмитриев// Физика твердого тела. - 2017. - Т. 59. - № 2. С. 51 - 66.

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

95. Stolyarov V.V. Deformability and nanostructuring of TiNi shape-memory alloys during electroplastic rolling / V. V. Stolyarov// Material Science and Engineering A. - 2009. - V. 503. - P. 11 - 25.

96. Potapova A.A. Deformability and structural features of shape memory TiNi alloys processed by rolling with current / A.A. Potapova, V.V. Stolyarov// Material Science and Engineering A. - 2013. - V. 579. - P. 111 - 119.

97. Dubinko V.I. Reaction-rate theory with account of the crystal anharmonicity / V.I. Dubinko, P.A. Selyshchev, J.F.R. Archilla // Physical Rev. E. - 2011. - V. 83. - P. 113 - 122.

98. Dubinko V.I., Nonlinear Localized Travelling Excitations in Crystals / V.I. Dubinko, J.F.R. Archilla, S.V. Dmitriev, V. Hizhnyakov, in Quodons in Mica // Springer Series in Materials Science. - 2015. - V. 221. - P. 371 - 388.

99. Dubinko V.I. Modification of reaction rates under irradiation of crystalline solids: Contribution from intrinsic localized modes / V.I. Dubinko, A.V. Dubinko // Nucl. Instrum. Meth. Physical Res. B. - 2013. - V.303. - P. 130 - 139.

100. Dubinko V.I. Radiation-induced formation, annealing and ordering of voids in crystals: Theory and experiment / V.I. Dubinko, A.G. Guglya, S.E. Donnelly // Nucl. Instrum. Meth. Physical Res. B. - 2011. - V. 269. - P.1631 - 1639.

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

102. Xiong D., Saadatmand D., Dmitriev S.V. Crossover from ballistic to normal heat transport in the ϕ^4 lattice: If nonconservation of momentum is the reason, what is the mechanism? - 2017. - 330 p.

103. Singh M., Morkina A.Y., Korznikova E. A., Dubinko V.I., Terentiev D.A., Xiong D., Naimark O.B., Gani V.A., Dmitriev S.V. Effect of discrete breathers on the specific heat of a nonlinear chain. - 2020. - 401 p.

104. Morse P.M. Diatomic molecules according to the wave mechanics. II. Vibrational levels. Phys. Rev. - 1929. - 200 p.

105. Skeel R.D., Zhang G., Schlick T. A Family of symplectic integrators: Stability, accuracy, and molecular dynamics applications // SIAM J. Sci. Comput. - 1997. - № 1. P. 200 - 212.
106. Savin A.V., Kivsha, Y.S. Transport of fullerene molecules along graphene nanoribbons. - 2012. - № 2. - P. 70 - 79.
107. Savin A.V. Edge vibrations of graphane nanoribbons. - 2018. - 1063 p.
108. Saadatmand D., Xiong D., Kuzkin V.A., Krivtsov A.M., Savin A.V., Dmitriev S.V. Discrete breathers assist energy transfer to ac-driven nonlinear chains. - 2018. - 301 p.
109. Savin A.V., Kivshar Y.S. Phononic Fano resonances in graphene nanoribbons with local defects. - 2017. - 237 p.
110. Savin A.V., Kivshar Y.S. Spatial localization and thermal rectification in inhomogeneously deformed lattices. - 2017. - 221 p.
111. Savin A.V., Kivshar, Y.S. Localized vibrations of graphene nanoribbons. - 2016. - 720 p.
112. Savin A.V., Korznikova E.A., Dmitriev S.V. Dynamics of surface graphene ripplocations on a flat graphite substrate. - 2019. - 199 p.
113. Savin A.V., Korznikova E.A., Dmitriev S.V. Improving bending rigidity of graphene nanoribbons by twisting. - 2019. - 230 p.
114. Korznikova E.A., Rysaeva L.K., Savin A.V., Soboleva E.G., Ekomasov E.G., Ilgamov M.A., Dmitriev S.V. Chain model for carbon nanotube bundle under plane strain conditions. - 2019. - 351 p.

115. Savin A.V., Savina O.I. Bistability of multiwalled carbon nanotubes arranged on plane substrates. – 2019. - 300 p.
116. Franken A.E., Hill C.W., Peters, G. Weinreich. Generation of Optical Harmonics. Phys P. A. - 1961. - 322 p.
117. Grima J.N., Gatt R., Alderson A., Evans K.E. On the auxetic properties of 'rotating rectangles' with different connectivity. - 2005. - № 5. - P. 31 - 51.
118. Attard D., Grima J. N. Auxetic behaviour from rotating rhombi // Phys. Status Solidi B. - 2008. - № 1. - P. 61 - 69
119. Attard D., Grima J. N. A three-dimensional rotating rigid units network exhibiting negative Poisson's ratios // Phys. Status Solidi B. - 2012. - № 5. – P. 84 – 99.
120. Chetcuti E., Ellul B., Manicaro E., Brincat J. P., Attard D., Gatt R., Grima J. N. Modeling auxetic foams through semi-rigid rotating triangles // Phys. Status Solidi B. - 2014. № 9. - P. 94 – 100.
121. Zimmermann J., Pavone P., Cuniberti G. Phys. - 2008. - 120 p.
122. Nika D.L., Balandin A.A. Rep. Prog. Phys. - 2017. - 222 p.