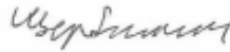


На правах рукописи



Щербинин Степан Александрович

**Делокализованные ангармонические колебания в системах с
дискретной симметрией**

Специальность 01.04.07 —
«Физика конденсированного состояния»

Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Работа выполнена в Федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Южный федеральный университет».

Научный руководитель: **Чечин Георгий Михайлович**,
кандидат физико-математических наук, доцент,
старший научный сотрудник НИИ физики,
ФГАОУ ВО «Южный федеральный университет»,
г. Ростов-на-Дону

Официальные оппоненты: **Старостенков Михаил Дмитриевич**,
доктор физико-математических наук, профессор,
заведующий кафедрой физики,
ФГБОУ ВО «Алтайский государственный техниче-
ский университет им. И.И. Ползунова», г. Барнаул

Еникеев Нариман Айратович,
доктор физико-математических наук, профессор,
профессор кафедры материаловедения и физики
металлов,
ФГБОУ ВО «Уфимский государственный авиаци-
онный технический университет», г. Уфа

Ведущая организация: ФГБУН «Институт физики молекул и кристаллов
Российской академии наук», г. Уфа

Защита состоится 28 ноября 2019 года в 14:00 на заседании диссертационного совета Д 002.080.03 при Федеральном государственном бюджетном учреждении науки «Институт проблем сверхпластичности металлов» Российской академии наук по адресу: 450001, Республика Башкирия, г. Уфа, ул. Степана Халтурина, 39.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте Института проблем сверхпластичности металлов РАН: <http://www.imsp.ru/node/228>.

Отзывы на автореферат в двух экземплярах, заверенные печатью учреждения, просьба направлять по адресу: 450001, Республика Башкирия, г. Уфа, ул. Степана Халтурина, 39, ученому секретарю диссертационного совета Д 002.080.03.

Автореферат разослан _____ 2019 года.
Телефон для справок: +7 (347) 223-64-07.

Ученый секретарь
диссертационного совета
Д 002.080.03,
доктор физико-математических наук



Имаев Марсель Фаниевич

Общая характеристика работы

Современное состояние темы и актуальность работы

Изучение различных видов нелинейных атомных колебаний кристаллов представляет значительный интерес, поскольку они оказывают влияние на свойства соответствующих материалов с кристаллической микроструктурой. Одним из видов таких колебаний являются дискретные бризеры (ДБ) – колебания гамильтоновых решеток, *локализованные* в пространстве и периодические во времени. Эти динамические объекты были *экспериментально* обнаружены в ряде систем различной физической природы (цепочки контактов Джозефсона, периодические электрически цепи, массивы оптических волноводов, массивы механических микроантителей, массивы наноэлектромеханических челноков, конденсаты Бозе-Эйнштейна, антиферромагнитные решетки, гранулированные кристаллы и т.д.).

Колебательные нелинейные нормальные моды (ННМ) и их буши – другой тип нелинейных колебаний, которые, в отличие от ДБ, являются *делокализованными* в пространстве.

Теория бушей ННМ была развита в [1–3]. Каждый буш представляют собой некоторое *точное* решение динамических уравнений гамильтоновой системы с дискретной симметрией, и соответствует определенной подгруппе $G_j \subseteq G_0$ группы симметрии G_0 рассматриваемой системы в состоянии равновесия. Все возможные в данной системе буши мод могут быть найдены с помощью специфических теоретико-групповых методов, *независимо* от конкретного типа межчастичных взаимодействий в системе. Актуальность применения теории бушей мод к колебаниям решеток связана с тем, что степень ангармонизма изучаемых колебаний может иметь произвольную величину.

Каждый буш представляет собой набор из некоторого числа m различных ННМ. Это число называется его *размерностью*. Если рассматриваемый буш ННМ является *устойчивым*, то его размерность m остается неизменной, а амплитуды входящих в него мод меняются с течением времени. Энергия начального возбуждения оказывается ”запертой” внутри такого динамического объекта. При достаточно больших энергиях рассматриваемый буш может потерять устойчивость и перейти в *другой* буш более *высокой размерности* и *меньшей симметрии*. Возможность существования бушей ННМ как точных динамических режимов обеспечивается некоторыми правилами отбора для передачи возбуждения между модами различной симметрии [1]. Одномерный буш ($m = 1$) описывает периодическое во времени движение и является нелинейной нормальной модой Розенберга [4], в то время как буши с размерностью $m > 1$ описывают *квазипериодическое* движение с m базисными частотами в соответствующем спектре Фурье. В ряде работ теоретически была показана возможность существования бушей ННМ в различных системах, среди которых отметим цепочки FPU [5; 6], молекулы [7] и графен [8].

Большинство из вышеуказанных работ посвящено теоретико-групповым методам исследования бушей мод, с помощью которых можно найти полный комплект мод, входящих в данный буш, а также установить некоторые *точные* соотношения между амплитудами этих мод. Такое рассмотрение определяет геометрический аспект бушей ННМ. С другой стороны, можно говорить о динамическом аспекте теории бушей мод, поскольку амплитуды входящих в буш мод зависят от времени и для их явного определения необходимо решать некоторые динамические уравнения. Исследование геометрической структуры бушей мод для разнообразных механических систем было проведено в серии работ, в которых рассматривались структурные фазовые переходы в кристаллах с различными пространственными группами [9–11].

Экспериментальное исследование нелинейных колебаний в кристаллах представляет собой весьма нетривиальную задачу и сопряжено с серьезными трудностями. В связи с этим особую значимость приобретают методы компьютерного моделирования. Наиболее распространенный подход к этой проблеме связан с применением методов молекулярной динамики на основе использования феноменологических потенциалов [12] межчастичного взаимодействия. Однако результаты такого моделирования существенным образом зависят от выбора конкретных потенциалов, что может особенно сказаться на результатах исследований высокоамплитудных атомных колебаний, поскольку для подгонки феноменологических параметров, входящих в используемые потенциалы, обычно используются линейные свойства кристаллов (частоты фононных мод, энергия межатомной связи и т.д.).

Альтернативой методам молекулярной динамики являются методы, основанные на применении квантово-механической теории функционала плотности (ТФП) [13]. В рамках этой теории были разработаны эффективные и достаточно точные численные методы расчета многоэлектронных молекулярных и кристаллических структур. Важным отличием таких методов от традиционных методов молекулярной динамики является автоматический учет поляризации электронных оболочек атомов при описании их колебаний, что оказывается существенным при рассмотрении ангармонических колебаний.

Исследованию динамики бушей мод посвящено существенно меньше исследований, нежели исследованию их структуры. Так, в работах [5–7] рассматривались простые модельные системы: цепочки FPU и молекулы, взаимодействие атомов которых описывается потенциалом Леннарда-Джонса. Однако использование в динамическом анализе бушей ННМ в кристаллах более реалистических методов исследования, таких как методы ТФП, до работ автора данной диссертации был развит слабо, что и определяет актуальность тематики настоящей работы.

На одно из возможных применений теории бушей мод было указано в работе [14], где с их помощью были построены локализованные на решетке возбуждения, являющиеся дискретными бризерами. Процедура построения осуществлялась с помощью наложения на ННМ (одномерный буш) некоторой

колоколообразной функции, которая приводит к пространственной локализации колебаний. Такая связь между бушами ННМ и ДБ также определяет актуальность задач построения в кристаллах бушей мод и моделирования их динамики с помощью ТФП-расчетов.

Цели настоящей диссертационной работы:

1. Используя специфические теоретико-групповые методы [3], разработать компьютерные программы для построения бушей нелинейных нормальных мод в структурах, описываемых пространственными группами симметрии.
2. С помощью моделирования на основе теории функционала плотности проверить теоретико-групповые выводы теории бушей мод для молекулярных и кристаллических структур на примере молекулы SF_6 , графена (2D структура) и алмаза (3D структура).
3. С помощью моделирования на основе теории функционала плотности исследовать динамические свойства бушей нелинейных нормальных мод малой размерности в указанных в предыдущем пункте физических системах.
4. Исследовать динамику и устойчивость нелинейных нормальных мод для 1D электрической цепочки, выполненной на кремниевой подложке с помощью CMOS технологии.

Научная новизна

В настоящей диссертационной работе **впервые** с помощью теоретико-групповых методов:

1. построены все возможные в монослое графена буши нелинейных нормальных мод низкой размерности, соответствующие точкам выделенной симметрии в зоне Бриллюэна;
2. построены симметрично-обусловленные нелинейные нормальные моды в кристалле алмаза;
3. доказано, что в модели, описывающей одномерную нелинейную электрическую решётку, существует только 5 симметрично-обусловленных нелинейных нормальных мод и получены зависимости критических амплитуд этих мод от размера решетки.

Также с помощью компьютерного моделирования на основе теории функционала плотности **впервые** исследована динамика:

4. бушей нелинейных нормальных мод в молекуле SF_6 ;
5. бушей нелинейных нормальных мод малой размерности в монослое графена;
6. одномерных бушей нелинейных нормальных мод в алмазе.

Практическая значимость

Полученные в настоящей диссертационной работе результаты представляют интерес для специалистов в области физики кристаллов и нелинейной динамики систем с дискретной симметрией. Свойства бушей колебательных нелинейных нормальных мод, рассчитанные в данной работе с помощью надежных и достаточно точных методов теории функционала плотности, могут применяться для верификации феноменологических потенциалов, используемых в молекулярной динамике, а также использоваться для построения дискретных бризеров в кристаллических решетках.

Методы исследования и достоверность результатов

Проведенное в настоящей диссертационной работе построение бушей нелинейных нормальных мод осуществлено с помощью точных теоретико-групповых методов, развитых в работах [1; 2]. Моделирование динамики бушей мод в молекуле SF_6 и кристаллах графена и алмаза проведено с помощью программных пакетов Quantum Espresso [15; 16] и ABINIT [17], которые являются популярными реализациями методов теории функционала плотности. Достоверность полученных результатов подтверждается надежностью указанных методов и их согласием с литературными данными в тех случаях, когда такое сравнение было возможно провести.

Положения, выносимые на защиту:

1. В монослое графена могут существовать нелинейные атомные колебания, описываемые бушами мод малой размерности. Их структура и свойства могут быть найдены с помощью общей теории бушей нелинейных нормальных мод.
2. Компьютерное моделирование ангармонических атомных колебаний на основе теории функционала плотности в 2D (графен) и 3D (алмаз) кристаллических структурах подтверждает возможность существования в этих системах бушей (кустов) нелинейных нормальных мод, построенных с помощью теоретико-групповых методов.
3. Компьютерное моделирование бушей нелинейных нормальных мод в молекуле SF_6 на основе теории функционала плотности подтверждает справедливость теоретико-групповых правил отбора для передачи возбуждения между нелинейными нормальными модами разной симметрии, входящими в эти буши. При эволюции буша возбуждение может передаваться только от входящих в него колебательных мод более низкой симметрии к модам более высокой симметрии, но не наоборот.
4. Для исследования устойчивости периодических колебаний в модели, описывающей одномерную нелинейную электрическую решетку, выполненную на кремниевой подложке с помощью CMOS-технологии, показана эффективность теоретико-группового метода расщепления многомерной вариационной системы на независимые подсистемы малой размерности.

Апробация работы

Основные результаты работы были представлены на следующих научных конференциях:

- 4-th International Conference on nonlinear dynamics (ND-KhPI2013), 19-22 June 2013, Sevastopol, Ukraine.
- International Workshop "Discrete Breathers in Crystals", 21-25 September 2015, Ufa, Russia.
- V International Symposium on Strong Nonlinear Vibronic and Electronic Interactions in Solids, 1-3 May 2015, Tartu, Estonia.
- International Conference on "Physics and Mechanics of New Materials and Their Applications" (PHENMA 2015), 19-22 May 2015, Azov, Russia.
- International Symposium on Intrinsic Localized Modes: 30th Anniversary of Discovery, 25-27 January 2018, Kyoto, Japan.
- VI International Symposium on Strong Nonlinear Vibronic and Electronic Interactions in Solids, 28 April – 1 May 2018, Tartu, Estonia.

Личный вклад

Все численные эксперименты, результаты которых представлены в диссертации, подготовлены и проведены лично автором. Комплекс программ для нахождения картин атомных смещений, соответствующих бушам нелинейных нормальных мод в кристаллических структурах, был реализован лично автором. Постановка задач и анализ полученных результатов проводились совместно с научным руководителем. Основные положения и выводы диссертационной работы сформулированы автором.

Публикации

Основное содержание диссертационной работы изложено в 8 научных публикациях в рецензируемых журналах, включенных в перечень изданий, рекомендованных ВАК РФ, 6 из которых индексируются в системе Scopus.

Содержание работы

Во введении обосновывается актуальность исследований, проведенных в рамках диссертационной работы, формулируются цели представляемой работы, излагается ее научная новизна и практическая значимость.

В первой главе представлен обзор современного состояния исследований по теме диссертационной работы.

Вторая глава посвящена исследованию симметрично-обусловленных нелинейных нормальных мод Розенберга в LC-цепочке.

В разделе 2.1 описана рассматриваемая модель: одномерная электрическая система (LC-цепочка), предложенная в работе [18]. Эта система, выполненная

на силиконовой подложке с помощью технологии CMOS, представляет собой цепочку нелинейных конденсаторов (емкость которых зависит от напряжений $V_i = V_i(t)$ на обкладках), соединенных линейными индуктивностями (схематическое изображение приведено на Рис. 1). Все емкости и индуктивности полагаются одинаковыми, а граничные условия – периодическими. Изменение напряжений на конденсаторах в такой одномерной решетке, состоящей из N ячеек, описывается следующей системой дифференциальных уравнений второго порядка:

$$\ddot{V}_j(1 - V_j^2) - 2V_j(\dot{V}_j)^2 = V_{j+1} - 2V_j + V_{j-1}, j = 1..N, \quad (1)$$

$$V_0(t) \equiv V_N(t), V_{N+1}(t) \equiv V_1(t).$$

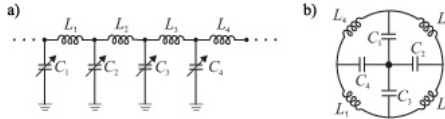


Рис. 1 — Цепочка из 4-х нелинейных конденсаторов соединенных линейными индуктивностями.

В разделе 2.2 рассматриваются симметрично-обусловленные нелинейные нормальные моды в LC-цепочке.

Концепция нелинейных нормальных мод (ННМ) была предложена Розенбергом в 1962 году [4]. Каждая ННМ описывает режим, в котором колебания всех динамических переменных $x_i(t)$ некоторой механической системы с n степенями свободы пропорциональны одной и той же периодической по времени функции $f(t)$:

$$x_i(t) = c_i f(t), i = 1..n, \quad (2)$$

где c_i – некоторые константы. Следует отметить, что линейные нормальные моды (ЛНМ) также удовлетворяют определению (2) с $f(t) = \sin(\omega t + \varphi_0)$, где ω и φ_0 – частота и начальная фаза, соответственно. В отличие от линейных нормальных мод, общее количество которых равно числу степеней свободы n механической системы, число ННМ Розенберга от n не зависит и может быть как меньше его, так и больше. Как следствие этого, полный набор ННМ для динамических уравнений не является базисом, по которому можно разложить любое их решение.

В общем случае, нелинейные нормальные моды Розенберга могут существовать в системах весьма специфических классов, например, таких, у которых потенциальная энергия является однородной функцией всех ее аргументов. Тем не менее, в системе с произвольным типом межчастичных взаимодействий существование ННМ может быть обеспечено наличием у нее некоторой группы дискретной симметрии [2; 5; 6; 11; 19]. Здесь и далее мы будем называть такие моды симметрично-обусловленными нелинейными нормальными модами или

просто ННМ, ибо в диссертационной работе рассматриваются моды лишь этого типа. Существенно, что для большинства систем с дискретной симметрией обычно существует весьма небольшое число симметрично-обусловленных ННМ. Так, в работе [6] было установлено, что в цепочке FPU- β можно возбудить лишь 5 мод этого типа.

Работа [18] посвящена исследованию существования и устойчивости в LC-цепочке так называемой π -моды, которая представляет собой ННМ следующего вида:

$$\phi_1 = \{V(t), -V(t)|V(t), -V(t)|\dots|V(t), -V(t)\}, \quad (3)$$

т.е. напряжения на каждой паре соседних конденсаторов в любой момент времени противоположны по знаку.

Помимо π -моды, в LC-цепочке можно возбудить и другие симметрично-обусловленные ННМ. Ввиду того, что группа симметрии модели (1) изоморфна группе симметрии модели FPU- β , все полученные для нее в работе [6] теоретико-групповые результаты справедливы и для нашего случая. Следовательно, число всех возможных в рассматриваемой электрической системе ННМ равно 5 и вид этих мод следующий [6]:

$$\phi_1 = V(t)\{1, -1|1, -1|1, -1|1, -1|\dots|1, -1\} \text{ (}\pi\text{-мода)}, \quad (4)$$

$$\phi_2 = V(t)\{1,1, -1, -1|1,1, -1, -1|\dots|1,1, -1, -1\}, \quad (5)$$

$$\phi_3 = V(t)\{1,0, -1,0|1,0, -1,0|\dots|1,0, -1,0\}, \quad (6)$$

$$\phi_4 = V(t)\{1,0, -1|1,0, -1|\dots|1,0, -1\}, \quad (7)$$

$$\phi_5 = V(t)\{1,1,0, -1, -1,0|1,1,0, -1, -1,0|\dots|1,1,0, -1, -1,0\}. \quad (8)$$

После подстановки выражений (4)-(8) в систему динамических уравнений (1), она сводится к одному уравнению для переменной $V(t)$:

$$\ddot{V}(t)[1 - V^2(t)] - 2V(t)[\dot{V}(t)]^2 + \mu V(t) = 0, \quad (9)$$

где следующие значения параметра μ соответствуют различным ННМ (4)-(8):

$$\phi_1 : \mu = 4; \phi_2 : \mu = 2; \phi_3 : \mu = 2; \phi_4 : \mu = 3; \phi_5 : \mu = 1. \quad (10)$$

Уравнение (9) будем называть ведущим. Его решение определяет временную эволюцию всех динамических переменных рассматриваемой системы, колеблющейся в режиме, соответствующем той или иной моде.

В разделе 2.3 описан метод исследования устойчивости нелинейных нормальных мод в LC-цепочке.

Устойчивость π -моды, как и всякого периодического динамического режима, может быть исследована с помощью стандартного метода Флоке. Однако, размерность вариационной системы (получаемой линеаризацией исходной системы в окрестности рассматриваемого динамического режима) и соответствующей матрицы монодромии равна $2N$, что делает исследование линейной

устойчивости π -моды крайне затруднительным в случае $N \gg 1$, и особенно при $N \rightarrow \infty$. Для решения этой проблемы в статье [18] авторы используют особый метод, который существенно базируется на специфической структуре динамической модели LC-цепочки и представляется достаточно сложным. С другой стороны, в работе [20] был развит *общий* теоретико-групповой метод расщепления вариационной системы на независимые подсистемы значительно меньших размерностей, нежели размерность исходной системы. Он базируется только на симметричных соображениях и использует аппарат неприводимых представлений группы симметрии рассматриваемого динамического режима.

В диссертационной работе с помощью этого метода было установлено, что вариационные системы для всех мод $\phi_1, \phi_2, \phi_3, \phi_4, \phi_5$ расщепляются при любом значении N на независимые подсистемы размерности 1, 2, 2, 3, 3, соответственно. Эти подсистемы имеют следующий вид:

$$\hat{A}\ddot{\delta} + \hat{B}\dot{\delta} + \hat{D}\delta = 0, \quad (11)$$

где δ – инфинитезимальный вектор добавок к точному решению динамических уравнений (1), по которым производилась линеаризация системы, а матрицы $\hat{A}, \hat{B}, \hat{D}$ состоят из следующих элементов:

$$\begin{aligned} c &= c(t) = 1 - V^2, \\ f &= f(t) = 2(\dot{V}^2 + V\ddot{V} - 1), \\ g &= g(t) = -4V\dot{V}. \end{aligned} \quad (12)$$

Здесь $V = V(t)$ – решение ведущего уравнения (9) для соответствующей моды. Ниже приведем конкретный вид матриц для каждой из пяти ННМ.

$$1) \phi_1 = V(t)\{1, -1|1, -1|1, -1|\dots\}.$$

В этом случае все подсистемы (11) оказываются одномерными с матрицами:

$$\hat{A} = c(t), \hat{B} = g(t), \hat{D} = f(t) - 2 \cos(k), \quad (13)$$

где $k = \frac{2\pi j}{N}$, $j = 1, 2, \dots, N$.

Для ННМ ϕ_2 и ϕ_3 , подсистемы (11) двумерные:

$$2) \phi_2 = V(t)\{1, 1, -1, -1|1, 1, -1, -1|\dots\}.$$

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} c & 0 \\ 0 & c \end{pmatrix}, \hat{B} = \begin{pmatrix} g & 0 \\ 0 & g \end{pmatrix}, \hat{D} = \begin{pmatrix} f & 1 + \gamma \\ 1 + \bar{\gamma} & f \end{pmatrix}. \quad (14)$$

$$3) \phi_3 = V(t)\{1, 0, -1, 0|1, 0, -1, 0|\dots\}.$$

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} c & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \hat{B} = \begin{pmatrix} g & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \hat{D} = \begin{pmatrix} f & 1 + \gamma \\ 1 + \bar{\gamma} & -2 \end{pmatrix}. \quad (15)$$

В уравнениях (14)-(15) $\gamma = e^{\frac{4\pi j}{N}I}$, $j = 1, 2, \dots, \frac{N}{2}$, а I - мнимая единица.

$$4) \text{ Для ННМ } \phi_4 = V(t)\{1, 0, -1|1, 0, -1|\dots\} \text{ и}$$

$\phi_5 = V(t)\{1,1,0, -1, -1,0|1,1,0, -1, -1,0\}$ трехмерные подсистемы (11) оказываются *идентичными*. Эти подсистемы определяются матрицами:

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} c & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & c \end{pmatrix}, \hat{B} = \begin{pmatrix} g & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & g \end{pmatrix}, \hat{D} = \begin{pmatrix} f & 1 & \gamma \\ 1 & -2 & 1 \\ \bar{\gamma} & 1 & f \end{pmatrix}, \quad (16)$$

где $\gamma = e^{\frac{6\pi j}{N}I}$, $j = 1, 2, \dots, \frac{N}{3}$.

Таким образом, исследование устойчивости всех ННМ в LC-цепочке (1) сводится к анализу устойчивости *нулевых решений* набора одно-, двух- и трехмерных систем линейных дифференциальных уравнений с периодическими по времени коэффициентами, определяемыми функцией $V(t)$.

В **разделах 2.4-2.9** проведен анализ устойчивости нелинейных нормальных мод в LC-цепочке.

Коэффициенты систем (11) являются периодическими во времени и определяются решением ведущего уравнения (9) с начальными условиями

$$V(0) = A, \dot{V}(0) = 0. \quad (17)$$

Таким образом, A представляет собой амплитуду колебаний напряжения на обкладках конденсаторов. Отметим, что ведущее уравнение (9) описывает периодический режим при $A < 1$, а значение $A = 1$ является точкой сингулярности, выше которой движение перестает быть финитным.

Потеря устойчивости некоторой ННМ обусловлена взаимодействием этой моды с какой-либо линейной нормальной модой, которая в методе Флоке фигурирует в виде некоторого бесконечно малого возмущения. В силу независимости подсистем общей вариационной системы, достаточно проанализировать устойчивость нулевого решения каждой из них.

Рассмотрим набор расщепленных систем (11) для некоторой фиксированной ННМ. Потеря устойчивости нулевых решений разных подсистем из набора (11) происходит при различных значениях критической амплитуды напряжения $V(0) = A$. Обозначим такую амплитуду для системы под номером j как A_c^j . Тогда критическая амплитуда A_c , при которой теряет устойчивость колебательный режим, соответствующий данной ННМ, будет определяться *наименьшим* значением из набора всех A_c^j .

Для мод ϕ_1 и ϕ_2 в пределе больших значений N нам удалось получить аналитическое выражение для A_c^j . Для ϕ_1 оно имеет вид:

$$A_c^j = \frac{2}{\sqrt{3}} \operatorname{tg}\left(\frac{\pi j}{N}\right), j = 1, 2, \dots, N, \quad (18)$$

а для ϕ_2 :

$$A_c^j(N) = \frac{2}{\sqrt{3}} \sqrt{\frac{\sin\left(\frac{2\pi}{N}j\right)}{1 - \sin\left(\frac{2\pi}{N}j\right)}}, j = 1, 2, \dots, \frac{N}{2}. \quad (19)$$

Из выражений (18)-(19) можно получить следующий асимптотический закон зависимости критических амплитуд A_c рассматриваемых мод от числа N ячеек в цепочке:

$$A_c(N) = CN^{-\beta}, \quad (20)$$

где для моды ϕ_1 : $\beta = -1$ и $C \approx 3.629$, а для моды ϕ_2 : $\beta = -\frac{1}{2}$ и $C \approx 2.89$.

Для мод ϕ_3 , ϕ_4 и ϕ_5 аналитическое рассмотрение провести не удалось, но численно было получено в результате применения стандартного метода Флоке к исследованию устойчивости нулевых решений расщепленных систем (11), что асимптотический закон (20) справедлив и для этих мод. Результаты численных расчетов, проведенных для мод ϕ_1 и ϕ_2 , совпали с результатами теоретического анализа. Ниже приведены рассчитанные численно коэффициенты β и C для всех пяти мод:

$$\begin{aligned} \phi_1 : \beta_1 &= 0.99, C_1 = 3.62; \\ \phi_2 : \beta_2 &= 0.49, C_2 = 2.89; \\ \phi_3 : \beta_3 &= 0.99, C_3 = 8.57; \\ \phi_4, \phi_5 : \beta_4 &= 0.99, C_4 = 7.54. \end{aligned} \quad (21)$$

Графики функции (20), соответствующие этим значениям констант (β, C), приведены на Рис. 2

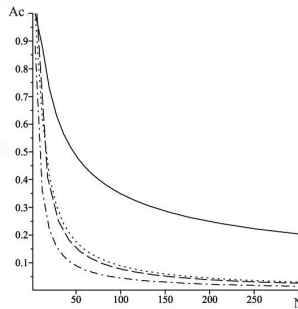


Рис. 2 — Устойчивость нелинейных нормальных мод (4)-(8) в LC-цепочках при разных N . Сплошная линия соответствует моде ϕ_2 , пунктирная – моде ϕ_3 , штриховая - π -моду ϕ_1 , штрих-пунктирная – модам ϕ_4 и ϕ_5

Таким образом, была исследована устойчивость всех 5 возможных симметрично-обусловленных нелинейных нормальных мод в модели, описывающей одномерную нелинейную электрическую решетку.

Результаты этой главы были опубликованы в работах:

1. Исследование устойчивости нелинейных нормальных мод в электрических цепях / Чечин Г.М., Гончаров П.П., Щербинин С.А. // Известия ВУЗов. Прикладная нелинейная динамика.– 2013.– Т. 21. No 2.

2. Delocalized periodic vibrations in nonlinear LC and LCR electrical chains / Chechin G., Shcherbinin S. // Communications in nonlinear science and numerical simulations.– 2014.– Vol. 22. No 1-3.

В третьей главе исследуются взаимодействия нелинейных нормальных мод в молекуле SF_6 в рамках теории функционала плотности.

В разделе 3.1 дано понятие о бушах нелинейных нормальных мод.

Линейные нормальные моды (ЛНМ) представляют собой точные решения для гамильтоновых систем в гармоническом приближении. Они перестают быть таковыми, если мы принимаем во внимание ангармонические слагаемые в гамильтониане. Если таковые слагаемые малы, то можно говорить о взаимодействиях между ЛНМ и строить на их основе некоторые *приближенные* решения. Но существуют ли точные решения в гамильтоновых системах за пределами гармонического приближения? На этот вопрос дает ответ теория бушей нелинейных нормальных мод [1; 2].

Рассмотрим элементы теории бушей мод на примере молекулы SF_6 , имеющей структуру октаэдра (Рис. 3), в центре которого находится атом серы, а в вершинах – атомы фтора. При описании любого колебательного режима в этой системе можно говорить о конфигурационном векторе $\mathbf{X}(t)$, определяющем смещения всех атомов из положений равновесия в любой фиксированный момент времени t . Для каждой нелинейной нормальной моды (ННМ), так же как и для ЛНМ, этот вектор обладает определенной группой точечной симметрии.

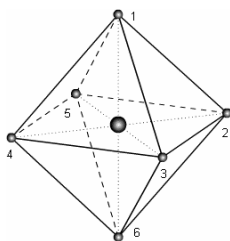


Рис. 3 — Модель октаэдрической молекулы.

Согласно теореме Вигнера [21], линейные моды классифицируются по неприводимым представлениям (НП) группы симметрии G_0 равновесного состояния системы. Тогда можно ввести базис $\Phi = \{\phi_j | j = 1, \dots, N\}$ (N – число степеней свободы) в пространстве всех возможных атомных смещений, определяемый полным набором базисных векторов неприводимых представлений, входящих в механическое представление рассматриваемой системы. Таким образом, конфигурационный вектор $\mathbf{X}(t) = \{x_1(t), x_2(t), \dots, x_N(t)\}$, соответствующий произвольному динамическому режиму в этой системе, может быть разложен по

указаному базису с зависящими от времени коэффициентами:

$$\mathbf{X}(t) = \sum_{j=1}^N c_j(t) \phi_j. \quad (22)$$

В этом выражении каждое слагаемое $c_j(t) \phi_j$ может трактоваться как ННМ согласно определению (2): векторный множитель ϕ_j определяет вектор смещений всех атомов, т.е. пространственную структуру ННМ, тогда как $c_j(t)$ определяют временную эволюцию моды. Однако, для краткости, мы часто используем термин ННМ (или колебательная мода) отдельно как для ϕ_j , так и для $c_j(t)$.

Поскольку базисные векторы ϕ_j соответствуют различным НП Γ_n группы G_0 , конфигурационный вектор $X(t)$ в выражении (22) может быть записан в виде суммы вкладов, соответствующих отдельным неприводимым представлениям группы симметрии равновесного состояния системы:

$$\mathbf{X}(t) = \sum_n (\mathbf{C}_n(t), \Phi[\Gamma_n]), \quad (23)$$

где $\Phi[\Gamma_n]$ – набор базисных векторов неприводимого представления Γ_n .

Малые, т.е. линейные, колебания молекулы, соответствующие различным неприводимым представлениям Γ_n , независимы друг от друга. В случае же нелинейных колебаний (с большими амплитудами), вообще говоря, происходит передача возбуждения между модами. В работе [1] было установлено, что существуют определенные правила отбора для передачи возбуждения от одной моды к другой, следующие из соответствующих теоретико-групповых ограничений, которые могут быть записаны как определенные системы линейных алгебраических уравнений. В частности, можно вывести, что возбуждение от моды с данной группой симметрии G может передаться только тем ННМ, симметрия которых выше или равна G . Указанные правила отбора ведут к возможности существования *бушей мод*, каждый из которых представляет собой набор ННМ, сохраняющийся в течении временной эволюции буша: энергия начального возбуждения оказывается локализованной внутри этого динамического объекта.

Каждый буш обладает своей собственной симметрией, которая определяется *пересечением* всех групп симметрии его мод. Обсуждая *динамические* аспекты теории бушей, мы исследуем временную эволюцию нелинейных мод, входящих в данный буш и соответствующих разным неприводимым представлениям группы G_0 .

Раздел 3.2 посвящен теоретико-групповому анализу нелинейных колебаний в молекуле SF_6 .

Теоретико-групповой анализ нелинейных колебаний структуры, представленной на Рис. 3, был выполнен в [7], где были найдены все возможные в данной структуре буши нелинейных нормальных мод. Рассмотрим ННМ ϕ_1, ϕ_2, ϕ_3 , соответствующие одномерному НП Γ_1 , двумерному НП Γ_5 и трехмерному НП Γ_{10} .

Картины смещений атомов, соответствующие этим модам приведены в Таблице 1, где для каждого атома фтора, в соответствии с нумерацией на Рис. 3, указаны координаты x, y, z , которые определяют смещения атомов из их положений равновесия.

Таблица 1 — Картины атомных смещений для ННМ в молекуле SF_6 .

НП	ННМ	Картина смещений
Γ_1	ϕ_1	$\frac{1}{\sqrt{6}}(0,0, - 1 - 1,0,0 0, - 1,0 1,0,0 0,1,0 0,0,1)$
Γ_5	ϕ_2	$\frac{1}{\sqrt{12}}(0,0,2 - 1,0,0 0, - 1,0 1,0,0 0,1,0 0,0, - 2)$
Γ_{10}	ϕ_3	$\frac{1}{\sqrt{12}}(0,0, - 2 0,0,1 0,0,1 0,0,1 0,0,1 0,0, - 2)$

Мода ϕ_1 представляет собой одномерный буш $B[O_h]$, так как обладает симметрией O_h , которая выше, чем у любой другой колебательной моды, и, таким образом, возбуждение от этой моды не может передаваться другим модам. Здесь и далее мы обозначаем соответствующий буш как $B[G_n]$, где G_n – группа симметрии этого буша.

Иначе обстоит дело с модой ϕ_2 , симметрия которой описывается точечной группой симметрии $G_2 = D_{4h}$. Данная мода не может существовать независимо от всех других мод: ее возбуждение приводит к возбуждению (“вытягиванию”) моды ϕ_1 , группа симметрии которой $G_1 = O_h$ выше, чем группа симметрии $G_2 = D_{4h}$. Это утверждение представляет собой результат исключительно теоретико-группового анализа. Таким образом, возбуждение моды ϕ_2 приводит к возникновению в системе двумерного буша $B[D_{4h}]$ с точечной группой симметрии $G_2 = D_{4h}$.

Мода же ϕ_3 , будучи возбуждена в начальный момент времени $t = t_0$, вытягивает две моды, ϕ_2 и ϕ_1 , порождая трехмерный буш $B[C_{4v}]$, полная симметрия которого совпадает с группой симметрии $G_3 = C_{4v}$ моды ϕ_3 .

Моды, симметрия которых определяет симметрию всего буша, называются “корневыми”, другие же моды, которые автоматически возбуждаются при возбуждении корневой моды, принято называть “вторичными”.

В **разделах 3.3-3.4** обсуждаются результаты моделирования бушей нелинейных нормальных мод в молекуле SF_6 на основе теории функционала плотности.

Исследование бушей мод в реальных физических системах сопряжено с большими трудностями и, насколько нам известно, не может быть проведено с использованием современных экспериментальных технологий. Поэтому в диссертационной работе была проведена верификация теории бушей мод с помощью моделирования на основе теории функционала плотности (ТФП) [13]. Такое моделирование представляется достаточно адекватным способом описания реальных физических систем и обычно позволяет, например, рассчитать атомную структуру материалов с точностью до 1%.

В данной главе диссертационной работы для моделирования динамики молекулы SF_6 на основе теории функционала плотности был использован программный пакет ABINIT [17], в котором применяются: приближение Борна-Оппенгеймера для разделения движения тяжелых ядер и легких электронов, приближение локальной плотности (LDA) и метод псевдопотенциалов.

На Рис. 4 можно видеть пример динамики одномерного буша $B[O_h]$. Было установлено, что никакие другие колебательные моды при этом не возбуждаются. Из рисунка видно, что колебания носят нелинейный характер.

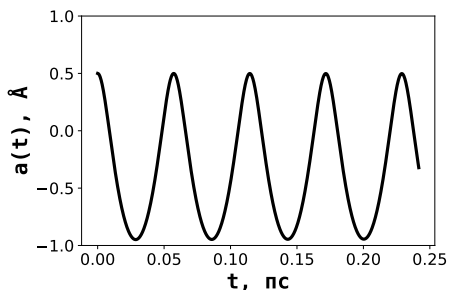


Рис. 4 — Пример динамики буша $B[O_h]$.

На Рис. 5 представлена зависимость частоты данного буша от его амплитуды, которая демонстрирует *мягкий* тип нелинейности.

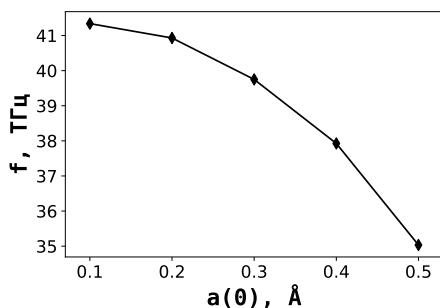


Рис. 5 — Зависимость частоты одномерного буша $B[O_h]$ от его амплитуды.

На Рис. 6 представлен пример динамики двумерного буша $B[D_{4h}]$. Из этого рисунка видно, что вторичная мода ϕ_1 , будучи нулевой в начальный момент времени, постепенно вовлекается в колебательный процесс. При этом никакие другие моды не возбуждаются.

На Рис. 7 приведен пример динамики трехмерного буша $B[C_{4v}]$. Было установлено, что только две вторичные моды (ϕ_2 и ϕ_1) вовлекаются в данный колебательный режим, а все остальные моды остаются в ”спящем” состоянии.

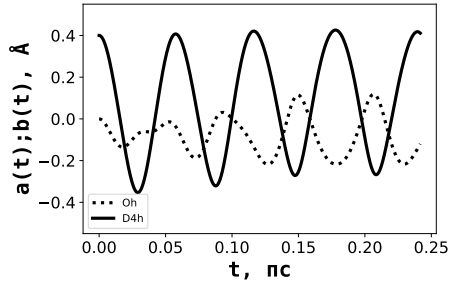


Рис. 6 — Динамика двумерного буша $B[D_{4h}]$.

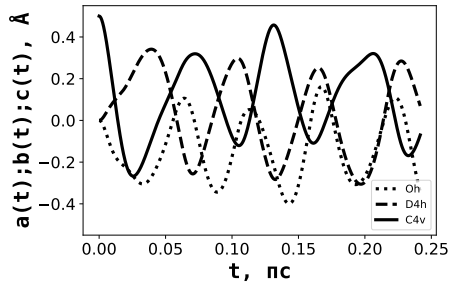


Рис. 7 — Динамика трехмерного буша $B[C_{4v}]$.

Таким образом, с помощью моделирования на основе теории функционала плотности было доказана на конкретном примере молекулы SF_6 справедливость выводов общей теории бушей мод при описании взаимодействия между нелинейными колебательными модами разной симметрии.

Результаты этой главы были опубликованы в работе:

1. Nonlinear normal mode interactions in the SF_6 molecule studied with the aid of density functional theory / Chechin G., Ryabov D., Shcherbinin S. // Physical Review E.— 2015.— Vol. 92.

В четвертой главе исследуются буши нелинейных нормальных мод в графене.

В **Разделе 4.1** представлены результаты теоретико-группового анализа нелинейных делокализованных колебаний в монослое графена (пространственная группа симметрии $G_0 = P6mm$).

Как уже говорилось, каждый m -мерный буш $B_j(t)$ представляет собой сохраняющийся во времени набор из m взаимодействующих друг с другом нелинейных нормальных мод:

$$B_j(t) = \sum_{k=1}^m c_{jk}(t)\psi_k. \quad (24)$$

Здесь ψ_k – N -мерные вектора, N – число степеней свободы в ячейке повторяемости кристалла в *колебательном* состоянии, которую мы называем расширенной элементарной ячейкой (РЕЯ). Такая ячейка больше примитивной ячейки кристалла в некоторое целое число раз s . Векторы ψ_k представляют собой базисные векторы различных неприводимых представлений группы симметрии G_0 рассматриваемой системы (для монослоя графена $G_0 = P6mm$). Каждый вектор ψ_k определяет конкретную картину атомных смещений со своей собственной группой симметрии $G_k \subseteq G_0$.

Как уже отмечалось, математический аппарат теории бушей базируется на использовании неприводимых представлений (НП) группы симметрии G_0 системы в равновесном состоянии. Все динамические режимы данной физической системы можно классифицировать по подгруппам G_j группы G_0 ($G_j \subseteq G_0$). Группа симметрии любого динамического режима G_j определяется симметрией картины его атомных смещений δ_j :

$$\hat{G}_j \delta_j = \delta_j. \quad (25)$$

Для любого устойчивого движения группа G_j сохраняется в течение временной эволюции.

Картина атомных смещений δ_j может быть записана как сумма вкладов от различных НП группы G_0 :

$$\delta_j = \sum_i \delta(\Gamma_i). \quad (26)$$

В рамках теории бушей было доказано, что из уравнения (26) можно получить следующие инвариантные отношения для индивидуального НП Γ_i :

$$(\Gamma_i \downarrow G_j) c_i = c_i \quad (27)$$

для всех Γ_i группы G_j . Здесь $(\Gamma_i \downarrow G_j)$ есть ограничение НП Γ_i группы G_0 на ее подгруппе G_j . Вектор, удовлетворяющий условию (27), называется инвариантным вектором НП Γ_i . В общем случае, инвариантный вектор данного НП зависит от набора *произвольных параметров*. Построение бушей ННМ начинается с нахождения всех неэквивалентных инвариантных векторов каждого неприводимого представления. Затем фиксируется некоторое НП Γ_i и один из его инвариантных векторов c_j , а затем просматриваем все НП группы G_0 для нахождения тех, которым может соответствовать *вторичная мода* буша (каждый буш определяется парой Γ_i и c_j). Для каждого ограничения $(\Gamma_i \downarrow G_j)$ находится инвариантный вектор из решения системы линейных алгебраических уравнений (27). В результате можно найти ”полный конденсат параметров порядка”, который определяет набор произвольных коэффициентов, входящих в определяющую данный динамический режим линейную комбинацию базисных векторов НП Γ_i . В случае колебательных бушей эти базисные векторы должны быть построены в пространстве всех атомных смещений. Эта процедура была описана в [3]. Она позволяет определить явную форму картин атомных смещений δ_j , инвариантных по отношению к выбранной группе $G_j \subseteq G_0$.

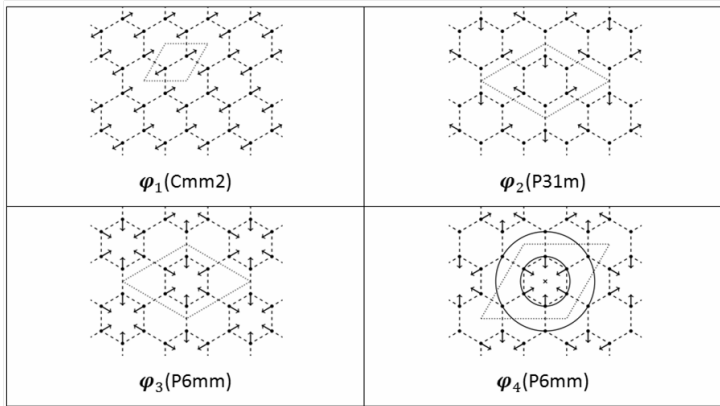


Рис. 8 — Картины атомных смещений для мод $\psi_1 - \psi_4$. Для каждой моды указана соответствующая ей группа симметрии.

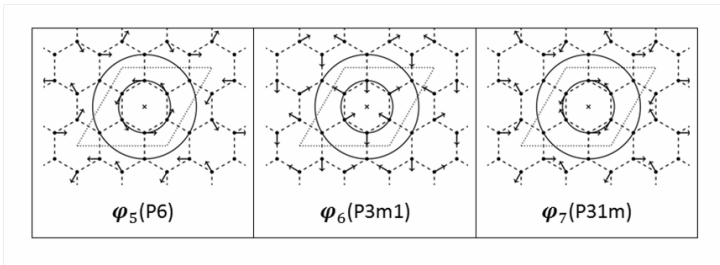


Рис. 9 — Картины атомных смещений для мод $\psi_5 - \psi_7$. Для каждой моды указана соответствующая ей группа симметрии.

С помощью описанных методов в диссертационной работе были найдены все возможные в графене буши мод, соответствующие точкам выделенной симметрии зоны Бриллюэна. В частности, было установлено, что в монослое графена могут существовать только 4 одномерных, 12 двумерных, 1 трехмерный и 6 четырехмерных колебательных бушей.

На Рис. 8 изображены картины атомных смещений для нелинейных мод $\psi_1 - \psi_4$, представляющие собой мгновенные снимки колебательного движения решетки графена. Все стрелки на каждом из Рис. 8 одинаковы по длине, но различны по направлениями. Они определяют смещения атомов из их равновесных положений. Временная эволюция этих смещений описывается коэффициентами $c_{jk}(t)$ в (24), которые различны для разных мод (индекс k) и разных бушей (индекс j). Моды $\psi_1 - \psi_4$ представляют собой одномерные буши $B_1(t) - B_4(t)$: будучи возбужденными в начальный момент времени, эти моды существуют, не приводя к возбуждению никаких других мод.

На Рис. 9 приведены картины атомных смещений мод $\psi_5 - \psi_7$. Эти моды являются *корневыми* модами двумерных бушей $B_5(t) - B_7(t)$, т.е. каждая из этих мод, будучи возбуждена в начальный момент времени, приводит к возбуждению еще одной, вторичной, моды. Для этих трех бушей вторичная мода *одна и та же*: ψ_4 .

В разделе 4.2 представлены результаты моделирования динамики бушей колебательных мод в графене, проведенного с помощью программного пакета Quantum Espresso [15; 16] с использованием тех же приближений, что и в предыдущей главе.

В качестве примера рассмотрим динамику одномерного буша $B_3(t)$ с пространственной группой симметрии $G_3 = P6mm$. Разложение (24), соответствующее этому бушу, сводится к одному слагаемому $c_{31}(t)\psi_3$. Тогда временная эволюция смещений атомов решетки графена описывается одной и той же периодической во времени функцией $c_{31}(t)$. Более того, как уже отмечалось, *каждый* одномерный буш описывает однопараметрический периодический динамический режим.

На Рис. 10 приведены колебания одного атома углерода графена для буша $B_3(t)$, т.к. та же самая временная эволюция соответствует и всем другим атомам. На Рис. 11 представлены зависимости частоты нелинейных атомных колебаний графена от их амплитуды для всех четырех ННМ. Зависимости для бушей $B_1(t)$ и $B_2(t)$ демонстрируют *мягкий* тип нелинейности (уменьшение частоты с увеличением амплитуды), а для бушей $B_3(t)$ и $B_4(t)$ – *жесткий* тип нелинейности (частота увеличивается с увеличением амплитуды).

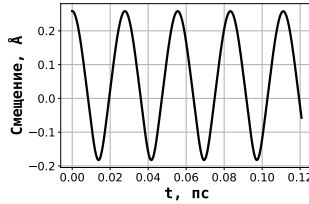


Рис. 10 — Колебания одного атома углерода, соответствующие бушу $B_3(t)$.

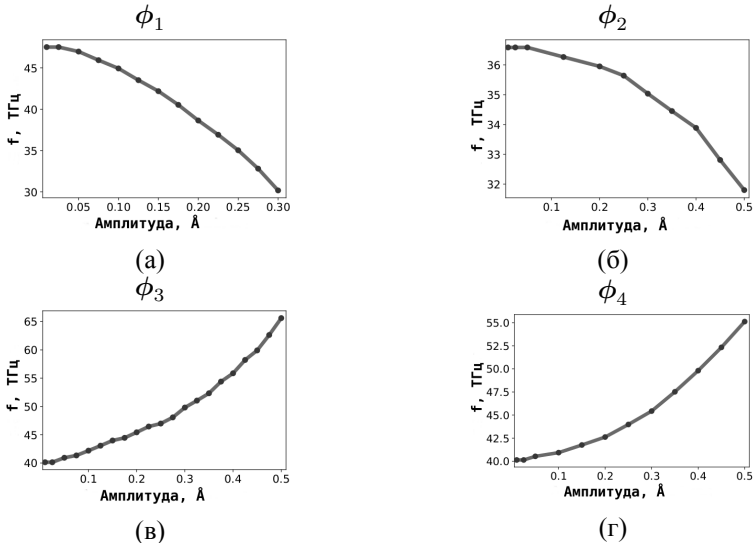


Рис. 11 — Зависимость частоты от амплитуды для бушей:
 (а) B_1 , (б) B_2 , (в) B_3 , (г) B_4 .

Нами также было проведено моделирование динамики двумерных бушей $B_5(t)–B_7(t)$, результаты которого приведены на Рис. 12. В начальный момент времени возбуждалась только корневая мода соответствующего буша (ψ_5 для буша $B_5(t)$, ψ_6 – для $B_6(t)$ и ψ_7 для буша $B_7(t)$). Из рисунков видно, что вторичная мода, ψ_4 , будучи нулевой в начальный момент времени, вовлекается в колебательный процесс в течение временной эволюции буша, причем степень такого ”вытягивания” оказывается различной для разных бушей. Было установлено, что никакие другие моды при этом не возбуждаются.

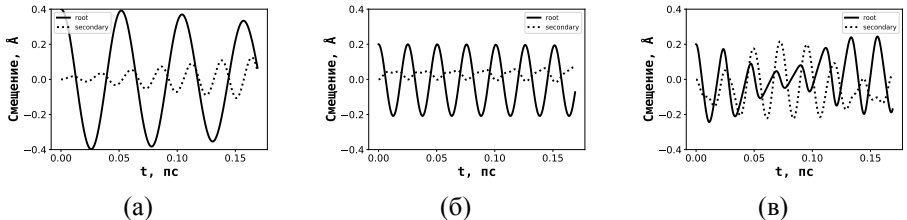


Рис. 12 — Динамика двумерных бушей: (а) $B_5(t)$, (б) $B_6(t)$, (в) $B_7(t)$. Корневой моде соответствует сплошная линия, а вторичной - пунктирная.

Результаты этой главы были опубликованы в работах:

1. Nonlinear vibrational modes in graphene: group-theoretical results / Chechin G., Ryabov D., Shcherbinin S. // Letters on Materials – 2016.– Vol. 6. No. 1.

2. Large-amplitude in-plane atomic vibrations in strained graphene monolayer: bushes of nonlinear normal modes / Chechin G., Ryabov D., Shcherbinin S. // Letters on Materials – 2017.– Vol. 7. No. 4.
3. Об устойчивости одномерных бушей нелинейных колебательных мод в графене / Баимова Ю.А., Щербинин С.А., Чечин Г.М., Дмитриев С.В. // Физика и механика материалов – 2017.– Т. 33. No. 1.
4. Delocalized Nonlinear Vibrational Modes in Graphene: Second Harmonic Generation and Negative Pressure / Korznikova E., Shcherbinin S., Ryabov D., Chechin G., Ekomasov E., Barani E., Zhou K., Dmitriev S. // Physica Status Solidi (B) – 2019 – Vol. 256.

В пятой главе исследуются нелинейные нормальные моды в алмазе.

В **разделе 5.1** представлены теоретико-групповые результаты анализа нелинейных делокализованных колебаний в алмазе.

Структура алмаза в состоянии равновесия обладает пространственной группой симметрии, которая в международных обозначениях записывается как $Fd\bar{3}m$, а в обозначениях Шенфлиса – O_h^7 . Примитивная ячейка алмаза, в которой расположены два атома углерода, определяется тремя векторами решетки $\mathbf{a}_1 = (a, a, 0)$, $\mathbf{a}_2 = (a, 0, a)$, $\mathbf{a}_3 = (0, a, a)$. Здесь приведены декартовы координаты этих векторов, a – постоянная решетки, равная $a = 1.79 \text{ \AA}$. Поскольку группе $Fd\bar{3}m$ соответствует гранецентрированная решетка, то эти вектора направлены из угла единичной ячейки Бравэ в центры трех соседних граней, пересекающихся в этом углу.

Примитивная ячейка содержит два атома углерода и, таким образом, ячейка Бравэ содержит восемь атомов. Эти атомы расположены в углах ячейки и в четырех точках внутри нее. Декартовы координаты этих точек $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$, $(\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4})$, $(\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4})$, $(\frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4})$ для кубической ячейки с единичным ребром.

Симметрия (G_j) колебательного состояния в общем случае ниже, чем симметрия ($G_0 = Fd\bar{3}m$) кристалла в положении равновесия. С использованием теоретико-групповых методов [3] в диссертационной работе для структуры алмаза были найдены две нелинейные нормальные моды, симметрии которых определяются пространственными группами $R\bar{3}m$ (мода 1) и $P4_132$ (мода 2) (в обозначениях Шенфлиса D_{3d}^5 и O^7 , соответственно), которые являются подгруппами группы $Fd\bar{3}m$.

На Рис. 13 и 14 представлены трехмерные картины атомных смещений, соответствующие моде 1 и моде 2, как набор плоских двумерных сечений, перпендикулярных оси Z . Смещения атомов углерода в плоскости XY отмечены стрелками, в то время как z -смещения обозначены кругами с точками (направление вдоль оси Z) и кругами с крестами (направление против оси Z). Величины смещений вдоль X -, Y -, и Z -направлений *равны между собой*. В случае моды 1 размер примитивной ячейки в колебательном состоянии *совпадает* с таковым в состоянии равновесия, а в случае моды 2 размер примитивной ячейки в колебательном состоянии *в четыре раза больше* такового в состоянии равновесия.

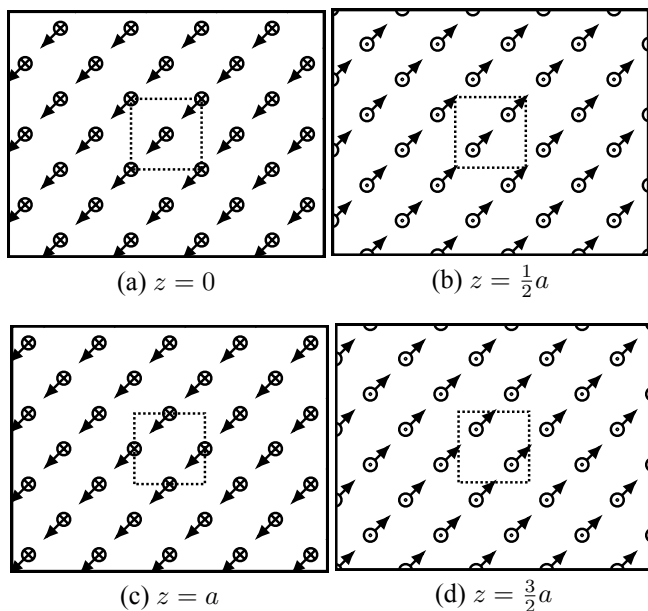


Рис. 13 — Трехмерная картина атомных смещений, соответствующая моде 1, как набор плоских двумерных сечений, перпендикулярных оси Z . Координаты даны в единицах постоянной решетки $a = 1.79 \text{ \AA}$.

В разделе 5.2 приведены результаты моделирования динамики нелинейных нормальных мод в алмазе, проведенного с помощью программного пакета Quantum Espresso [15; 16] с использованием тех же приближений, что и в предыдущей главе.

Если в качестве начальных условий для решения нелинейных динамических уравнений рассматриваемой гамильтоновой системы выбрать произвольную картину атомных смещений, то эта картина практически мгновенно разрушится с течением временной эволюции. Если же такая картина соответствует некоторой нелинейной нормальной моде, то следует ожидать, что она будет сохраняться бесконечно долго, так как любая ННМ является точным решением этих уравнений. Такое численное решение системы уравнений с определенными начальными условиями можно рассматривать как некоторую проверку корректности найденных картин атомных смещений.

В диссертационной работе картины атомных смещений нелинейных нормальных мод 1 и 2 были проверены посредством расчетов на основе теории функционала плотности, проведенных с помощью пакета Quantum Espresso [15] с использованием тех же приближений, что и в предыдущих главах.

На Рис. 15 представлены колебания одного из атомов углерода решетки алмаза для моды 1 при двух значениях ее амплитуды. Колебания всех остальных атомов кристалла будут точно такими же.

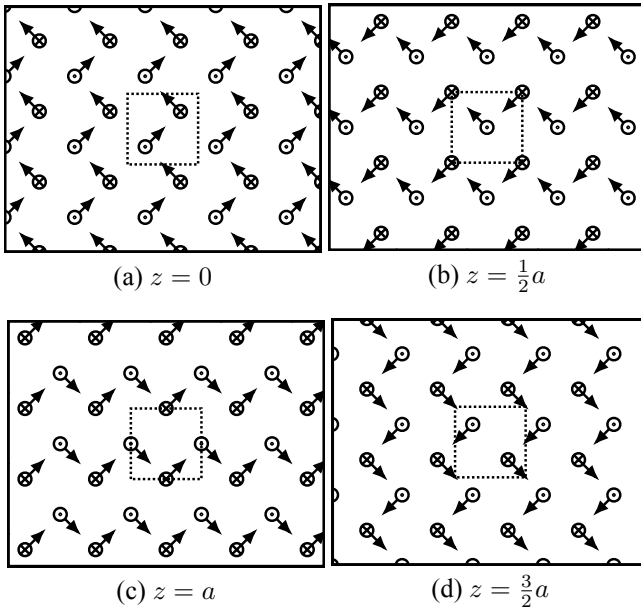


Рис. 14 — Трехмерная картина атомных смещений, соответствующая моде 2, как набор плоских двумерных сечений, перпендикулярных оси Z . Координаты даны в единицах постоянной решетки $a = 1.79 \text{ \AA}$.

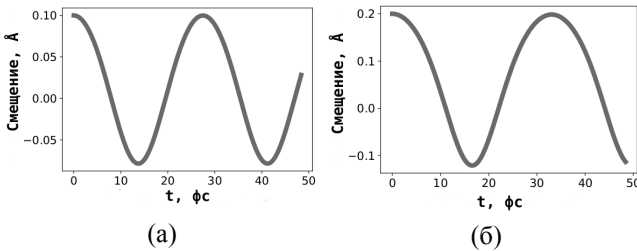


Рис. 15 — Атомные колебания, соответствующие ННМ 1 для двух амплитуд: (а) 0.1 \AA и (б) 0.2 \AA .

На Рис. 16а можно видеть зависимость частоты моды 1 от ее амплитуды. Эта зависимость демонстрирует мягкий тип нелинейности: частота моды 1 уменьшается от 37.17 ТГц до 21.19 ТГц , когда амплитуда увеличивается от 0.05 \AA до 0.3 \AA . На Рис. 16б приведена зависимость частоты моды 2 от ее амплитуды. Эта зависимость также демонстрирует мягкий тип нелинейности: частота моды 2 уменьшается от 31.35 ТГц до 27.78 ТГц при увеличении амплитуды от 0.05 \AA до 0.3 \AA .

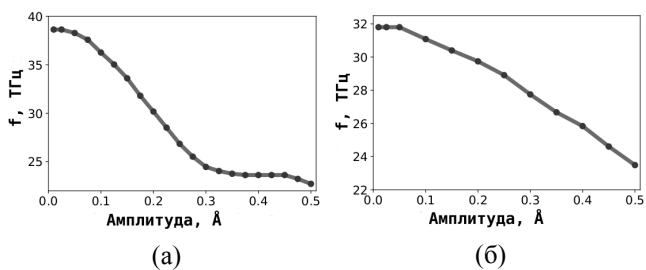


Рис. 16 — Зависимость частоты от амплитуды для (а) моды 1 и (б) моды 2.

Таким образом, было показано сохранение с течением временной эволюции картин атомных смещений найденных двух ННМ в алмазе и установлены некоторые динамические свойства этих мод.

Результаты этой главы были опубликованы в работе:

1. Large-amplitude periodic atomic vibrations in diamond / Chechin G., Ryabov D., Shcherbinin S. // Journal of Micromechanics and Molecular Physics – 2018.– Vol. 03, No. 01-02.

В заключении формулируются основные результаты и выводы:

1. Для монослоя графена, описываемого пространственной группой симметрии $P6mm$, найдены низкоразмерные буши нелинейных нормальных мод и построены соответствующие им картины атомных смещений. В частности, было установлено, что в монослое графена могут существовать одномерных бушей только 4, двумерных – 12, трехмерных – 1, четырехмерных – 6.
2. С помощью компьютерного моделирования на основе теории функционала плотности для одномерных бушей в монослое графена рассчитаны зависимости частот от их амплитуды и проверено «вытягивание» вторичных мод корневой модой.
3. Для решетки алмаза, описываемой пространственной группой симметрии O_h^7 , найдены симметрично-обусловленные нелинейные нормальные моды и построены соответствующие им картины атомных смещений.
4. С помощью компьютерного моделирования на основе теории функционала плотности для нелинейных нормальных мод в алмазе смоделирована их динамика и рассчитаны зависимости их частот от амплитуды.
5. С помощью компьютерного моделирования на основе теории функционала плотности исследована динамика бушей нелинейных нормальных мод в октаэдрической молекуле SF_6 . Построена зависимость частоты нормальной моды симметрии O_h от ее амплитуды. Проверено «вытягивание» вторичных мод корневой модой.
6. Доказано, что в модели, описывающей одномерную нелинейную электрическую решетку, существует только 5 симметрично-обусловленных нелинейных нормальных мод. С помощью теоретико-группового метода расщепления многомерной вариационной системы на независимые подсистемы малой размерности получены зависимости критических амплитуд всех 5 мод от размера решетки и определены скейлинги этих зависимостей в термодинамическом пределе.

Список литературы

1. Сахненко, В. П. Симметричные правила отбора в нелинейной динамике атомных систем / В. П. Сахненко, Г. М. Чечин // Доклады Академии Наук. — 1993. — Т. 330. — С. 308—310.
2. Chechin, G. M. Interactions between normal modes in nonlinear dynamical systems with discrete symmetry. Exact results / G. M. Chechin, V. P. Sakhnenko // Physica D. — 1998. — Vol. 117, no. 1—4. — P. 43—76.
3. Chechin, G. Computers and group-theoretical methods for studying structural phase transitions / G. Chechin // Computers and Mathematics with Applications. — 1989. — Vol. 17. — P. 255—278.

4. *Rosenberg, R. M.* The Normal Modes of Nonlinear n-Degree-of-Freedom Systems / R. M. Rosenberg // Journal of Applied Mechanics. — 1962. — Vol. 29, no. 1. — P. 7–14.
5. *Chechin, G. M.* Bushes of vibrational modes for Fermi-Pasta-Ulam chains / G. M. Chechin, N. V. Novikova, A. A. Abramenko // Physica D. — 2002. — Vol. 166, no. 3/4. — P. 208.
6. *Chechin, G. M.* Stability of low-dimensional bushes of vibrational modes in the Fermi-Pasta-Ulam chains / G. M. Chechin, D. S. Ryabov, K. G. Zhukov // Physica D. — 2005. — Vol. 203, no. 3. — P. 121.
7. *Chechin, G. M.* Existence and stability of bushes of vibrational modes for octahedral mechanical systems with Lennard-Jones potential / G. M. Chechin, A. V. Gnezdilov, M. Y. Zekhtser // International Journal of Non-Linear Mechanics. — 2003. — Vol. 38, no. 10. — P. 1451.
8. *Chechin, G.* Nonlinear vibrational modes in graphene: group-theoretical results / G. Chechin, D. Ryabov, S. Shcherbinin // Letters on Materials. — 2016. — Vol. 6, no. 1. — P. 9–15.
9. *Chechin, G.* Complete order parameter condensate of low-symmetry phases upon structural phase transitions / G. Chechin, T. Ivanova, V. Sakhnenko // Physica Status Solidi(b). — 1989. — Vol. 152, no. 2. — P. 431.
10. *Chechin, G.* Peculiarities of the low-symmetry phase structure near the phase-transition point / G. Chechin, E. Ipatova, V. Sakhnenko // Acta Crystallographica Section A. — 1993. — Vol. 49, no. 6. — P. 824–831.
11. *Chechin, G. M.* Nonlinear normal modes for systems with discrete symmetry / G. M. Chechin, V. P. Sakhnenko, H. T. Stokes, A. D. Smith, D. M. Hatch // International Journal of Non-Linear Mechanics. — 2000. — Vol. 35, no. 3. — P. 497.
12. *Холмуродов, X.* Методы молекулярной динамики для моделирования физических и биологических процессов / X. Холмуродов, М. Алтайский, И. Пузынин, Т. Дардин, Ф. Филатов // Физика Элементарных Частиц и Атомного Ядра. — 2003. — Т. 34. — С. 472–515.
13. *Kohn, W.* Nobel Lecture: Electronic structure of matter—wave functions and density functionals / W. Kohn // Reviews of modern physics. — 1999. — Vol. 71, no. 5. — P. 1253–1266.
14. *Barani, E.* Transverse discrete breathers in unstrained graphene / E. Barani, I. Lobzenko, E. Korznikova, E. Soboleva, S. Dmitriev, K. Zhou, A. M. Marjaneh // European Physical Journal B. — 2017. — Vol. 90, no. 38.

15. *Giannozzi, P.* QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials / P. Giannozzi, S. Baroni, N. Bonini, M. Calandra, R. Car, C. Cavazzoni, D. Ceresoli, G. Chiarotti, M. Cococcioni, I. Dabo, A. Dal Corso, S. de Gironcoli, S. Fabris, G. Fratesi, R. Gebauer, U. Gerstmann, C. Gougoussis, A. Kokalj, M. Lazzeri, L. Martin-Samos, N. Marzari, F. Mauri, R. Mazzarello, S. Paolini, A. Pasquarello, L. Paulatto, C. Sbraccia, S. Scandolo, G. Sclauzero, A. Seitsonen, A. Smogunov, P. Umari, R. Wentzcovitch // *Journal of Physics: Condensed Matter*. — 2009. — Vol. 21, no. 39. — P. 395502.
16. *Giannozzi, P.* Advanced capabilities for materials modelling with QUANTUM ESPRESSO / P. Giannozzi, O. Andreussi, T. Brumme, O. Bunau, M. Nardelli, M. Calandra, R. Car, C. Cavazzoni, D. Ceresoli, M. Cococcioni, N. Colonna, I. Carnimeo, A. Dal Corso, S. de Gironcoli, D. P., R. DiStasio Jr, A. Ferretti, A. Floris, G. Fratesi, G. Fugallo, R. Gebauer, U. Gerstmann, F. Giustino, T. Gorni, J. Jia, M. Kawamura, H.-Y. Ko, A. Kokalj, E. Küçükbenli, M. Lazzeri, M. Marsili, N. Marzari, F. Mauri, N. Nguyen, H.-V. Nguyen, A. Otero-de-la-Roza, L. Paulatto, S. Poncé, D. Rocca, R. Sabatini, B. Santra, M. Schlipf, A. Seitsonen, A. Smogunov, I. Timrov, T. Thonhauser, P. Umari, N. Vast, X. Wu, S. Baroni // *Journal of Physics: Condensed Matter*. — 2017. — Vol. 29, no. 46. — P. 465901.
17. *Gonze, X.* Recent developments in the ABINIT software package / X. Gonze, F. Jollet, F. Abreu Araujo, D. Adams, B. Amadon, T. Applencourt, C. Audouze, J.-M. Beuken, J. Bieder, A. Bokhanchuk, E. Bousquet, F. Bruneval, D. Caliste, M. Côté, F. Dahm, F. Da Pieve, M. Delaveau, M. Di Gennaro, B. Dorado, C. Espejo, G. Geneste, L. Genovese, A. Gerossier, M. Giantomassi, Y. Gillet, D. Hamann, L. He, G. Jomard, J. Laflamme Janssen, S. Le Roux, A. Levitt, A. Lherbier, F. Liu, I. Lukačević, A. Martin, C. Martins, M. Oliveira, S. Poncé, Y. Pouillon, T. Rangel, G.-M. Rignanese, A. Romero, B. Rousseau, O. Rubel, A. Shukri, M. Stankovski, M. Torrent, M. Van Setten, B. Van Troeye, M. Verstraete, D. Waroquiers, J. Wiktor, B. Xu, A. Zhou, J. Zwanziger // *Computational Physics Communications*. — 2009. — Vol. 205. — P. 106.
18. *Bhat, H. S.* The zone boundary mode in periodic nonlinear electrical lattices / H. S. Bhat, B. Osting // *Physica D*. — 2009. — Vol. 238, no. 14. — P. 1228.
19. *Rink, B.* Symmetry and resonance in periodic FPU chains / B. Rink // *Physica D*. — 2001. — Vol. 218, no. 3. — P. 665—685.
20. *Chechin, G. M.* Stability analysis of dynamical regimes in nonlinear systems with discrete symmetries / G. M. Chechin, K. G. Zhukov // *Physical Review E*. — 2006. — Vol. 73, 3 pt.2. — P. 362.
21. *Wigner, E.* Group Theory and Its Application to the Quantum Mechanics of Atomic Spectra, expanded and improved edition / E. Wigner. — New York : Academic Press, 1959.

Список публикаций автора по теме диссертации:

1. Исследование устойчивости нелинейных нормальных мод в электрических цепях / Чечин Г.М., Гончаров П.П., Щербинин С.А. // Известия ВУЗов. Прикладная нелинейная динамика.– 2013.– Т. 21. No 2.
2. Delocalized periodic vibrations in nonlinear LC and LCR electrical chains / Chechin G., Shcherbinin S. // Communications in nonlinear science and numerical simulations.– 2014.– Vol. 22. No 1-3.
3. Nonlinear normal mode interactions in the SF_6 molecule studied with the aid of density functional theory / Chechin G., Ryabov D., Shcherbinin S. // Physical Review E.– 2015.– Vol. 92.
4. Nonlinear vibrational modes in graphene: group-theoretical results / Chechin G., Ryabov D., Shcherbinin S. // Letters on Materials – 2016.– Vol. 6. No. 1.
5. Large-amplitude in-plane atomic vibrations in strained graphene monolayer: bushes of nonlinear normal modes / Chechin G., Ryabov D., Shcherbinin S. // Letters on Materials – 2017.– Vol. 7. No. 4.
6. Об устойчивости одномерных бушей нелинейных колебательных мод в графене / Баимова Ю.А., Щербинин С.А., Чечин Г.М., Дмитриев С.В. // Физика и механика материалов – 2017.– Т. 33., No. 1.
7. Large-amplitude periodic atomic vibrations in diamond / Chechin G., Ryabov D., Shcherbinin S. // Journal of Micromechanics and Molecular Physics – 2018.– Vol. 03, No. 01-02.
8. Delocalized Nonlinear Vibrational Modes in Graphene: Second Harmonic Generation and Negative Pressure / Korznikova E., Shcherbinin S., Ryabov D., Chechin G., Ekomasov E., Barani E., Zhou K., Dmitriev S. // Physica Status Solidi (B) – 2019 – Vol. 256.