На правах рукописи

НАУМОВ ЕВГЕНИЙ КОНСТАНТИНОВИЧ

ДЕЛОКАЛИЗОВАННЫЕ НЕЛИНЕЙНЫЕ КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ МОДЫ И ДИСКРЕТНЫЕ БРИЗЕРЫ В КВАДРАТНЫХ РЕШЕТКАХ

Специальность 1.3.8. Физика конденсированного состояния

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание учёной степени

кандидата физико-математических наук

Уфа - 2025

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте проблем сверхпластичности металлов Российской академии наук (ИПСМ РАН)

Научный руководитель: **Дмитриев Сергей Владимирович**
доктор физико-математических наук, профессор, главный научный сотрудник лаборатории нелинейной физики и механики материалов ИПСМ РАН, г. Уфа

Официальный оппонент: **Алфимов Георгий Леонидович**
доктор физико-математических наук, профессор, профессор кафедры «Высшая математика-1» Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский университет «Московский институт электронной техники», г. Зеленоград

Официальный оппонент: **Кузькин Виталий Андреевич**
доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник лаборатории Дискретные модели механики Федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт проблем машиноведения Российской академии наук, г. Санкт-Петербург

Ведущая организация: Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова», г. Барнаул

Защита состоится «23» сентября 2025 г. в 14:00 часов на заседании диссертационного совета 24.1.105.01 при Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте проблем сверхпластичности металлов Российской академии наук по адресу: 450001, г. Уфа, ул. Ст. Халтурина, 39.

С диссертацией можно ознакомится в библиотеке и на официальном сайте ИПСМ РАН по адресу https://www.imsp.ru/node/461.

Автореферат разослан «___»_____ 2025 г.

Учёный секретарь
диссертационного совета
кандидат технических наук

Авторатова Елена Викторовна

Общая характеристика работы

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

ДБ интересны в физике конденсированного состояния поскольку они осуществляют транспорт локализованной энергии по кристаллической решетке [7]. ДБ могут облегчать преодоление потенциальных барьеров образования или миграции дефектов кристаллической решетки. Другим важным для физики кристаллов эффектом нелинейности является передача энергии нелинейной решетке от периодического внешнего воздействия на частоте за пределами спектра малоамплитудных колебаний (явление супратрансмиссии). Важно, что названные выше эффекты нелинейности являются общими и проявляются в нелинейных решетках любой размерности, хотя имеются определённые аспекты, связанные с размерностью решетки. Это говорит о возможности изучения многих эффектов нелинейности на примере относительно простых решеток, где физическая суть явления проявляется наиболее ярко.

Большую роль в физике конденсированного состояния и в физике нелинейных явлений сыграли двумерные решетки. Квадратная решетка использовалась для изучения ферромагнетизма [8], при изучении нелинейных возбуждений в кристалле слюды [9], нелинейной локализации энергии в фотонных кристаллах [10]. Бурлаковым с соавторами удалось возбудить устойчивый покоящийся ДБ в квадратной нелинейной решетке [11], но попытки получения движущихся ДБ не увенчались успехом. В работе [12] доказано существование ДБ в треугольной и квадратной решетке с потенциалом Морзе. В работе [13] изучены ДБ, возникшие в результате потери устойчивости ДНКМ в квадратной решетке, а в работе [14] ДБ на поверхности упорядоченного сплава.

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

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

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

Цель работы: Разработка численных методов возбуждения стационарных и движущихся дискретных бризеров в квадратной решетке с дальнодействующим потенциалом β-ФПУЦ, получаемых путем наложения функций локализации на ДНКМ и по механизму супратрансмиссии.

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

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

Научная новизна:

1. Впервые для квадратной решетки с дальнодействующими взаимодействиями аналитически получены дисперсионные соотношения для фононов, найдены амплитудно-частотные характеристики и волновые векторы всех возможных 16-и ДНКМ. Показано, что 5 из 16-и ДНКМ могут иметь частоту выше фононного спектра, а именно ДНКМ 1, 6, 7, 9 и 16, что важно для изучения ДБ в рассматриваемой решетке.
2. Впервые описаны новые стационарные ДБ на основе ДНКМ 6 и 9 квадратной решетки с дальнодействием, которые не могут существовать в решетке без учета дальнодействия. Получен движущийся ДБ в квадратной решетке, тем самым решена задача Бурлакова для квадратной решетки.
3. При рассмотрении эффекта супратрансмиссии от пары колеблющихся атомов в квадратной решетке впервые найдены критические частоты в зависимости от амплитуды вынужденных колебаний, при превышении которых энергия перестает поступать в

квадратную решетку. При частотах внешнего воздействия на частотах близких к критическим, происходит генерация движущихся ДБ, испускаемых периодично, а при уменьшении частоты воздействия периодичность в испускании ДБ теряется.

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

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

Положения, выносимые на защиту:

1. Пять из шестнадцати ДНКМ квадратной решетки β-ФПУЦ с дальнодействием могут иметь частоту выше фононного спектра, а без учета дальнодействия - только две ДНКМ.
2. Квадратная решетка с дальнодействием может поддерживать новые типы ДБ, которые не существуют в решетке без дальнодействующих взаимодействий.
3. Различные типы ДБ возможны в квадратной решетке с дальнодействием при условии, что жесткость связей убывает с расстоянием, как и жесткость химических связей в кристаллах.
4. В квадратной решетке движущиеся ДБ могут испускаться квази-периодически парой атомов, совершающих вынужденные колебания на частоте выше фононного спектра решетки.
5. В квадратной решетке с дальнодействием ДБ могут испускаться при вынужденном внешнем воздействии на частоте внутри фононного спектра близко к его верхней границе.

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

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

Личный вклад автора работы: В работе над диссертацией автор самостоятельно изучил и обобщил научную литературу по теме исследования. Вывел дисперсионные соотношения для квадратной решётки с дальнодействием. Получил аналитические выражения амплитудно-частотных характеристик ДНКМ в кубическом приближении, а также провел численное моделирование дискретных бризеров, полученных наложением функции локализации на ДНКМ. Провел численное моделирование явления супратрансмиссии в квадратной решетке. Модифицировал программы компьютерного моделирования под свои задачи, принял непосредственное участие в интерпретации и анализе полученных результатов, формулировке выводов, подготовке научных статей и тезисов докладов к публикации. В работах, опубликованных в соавторстве, соискателю принадлежат основные аналитические результаты и результаты численного моделирования ДНКМ и дискретных бризеров в квадратной решетке β-ФПУЦ.

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

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

Объем и структура работы. Диссертация состоит из введения, четырёх глав и заключения. Полный объём диссертации составляет 101 страницу и содержит 23 рисунка и 1 таблицу. Список литературы включает 167 источников.

Основное содержание работы

Во **введении** обосновывается актуальность исследований, проводимых в рамках данной диссертационной работы, формулируется цель, ставятся задачи работы, представлены научная новизна и практическая значимость работы, положения выносимые на защиту, сведения об апробации работы и публикациях в научных изданиях, изложен метод исследования.

В первой главе проведён обзор литературы по теме диссертации, описаны важные достижения в нелинейной динамике решетки. Описано понятие ДБ, а так же два условия необходимые для их существования, а именно - дискретность и нелинейность среды. Дискретность обеспечивает ограниченность спектра малоамплитудных колебаний решетки, а нелинейность даёт возможность частоте колебаний ДБ выйти из этого спектра. Колеблясь на частоте вне спектра малоамплитудных колебаний, ДБ не затрачивает свою энергию на их возбуждение и, теоретически, в отсутствии возмущений, может существовать вечно [3].

В работах Чечина и Сахненко [4] был создан теоретико-групповой подход к нахождению точных решений динамики дискретной системы (молекулы или кристалла), которые были названы авторами бушами нелинейных нормальных мод (БННМ). Поскольку при поиске БННМ не привлекаются другие характеристики системы кроме ее симметрии, все получаемые решения существуют для любых типов взаимодействия между частицами. В более поздних работах, применительно к решеткам, БННМ именовались ДНКМ [7]. Заметим, что делокализованные колебания нелинейных решеток изучены гораздо меньше, чем ДБ.

Обсуждается необходимость изучения эффекта дальнодействия применительно к кристаллическим решеткам. В кристаллах атомы взаимодействуют не только с ближайшими, но и с более удаленными соседями, особенно в металлах, где дальнодействие обусловлено делокализацией валентных электронов, а также в ионных кристаллах, где действуют медленно затухающие с расстоянием кулоновские силы. В подавляющем числе работ по нелинейной динамике решеток рассматривались только ближайшие взаимодействия, однако в ряде работ, анализируемых в обзоре, были изучены эффекты дальнодействия и показано их влияние на транспорт тепла и возможность повышения подвижности ДБ.

Описан эффект супратрансмиссии - возможность передачи энергии решетке от внешнего воздействия на частотах за пределами фононного диапазона частот. Рассматривая нелинейные цепочки, физики обнаружили возможность такой передачи энергии и назвали это явление супратрансмиссией [15]. Установлено, что (i) супратрансмиссия может наблюдаться только при амплитудах колебаний, превышающих пороговое значение, (ii) в начале процесса передачи энергии её носителями являются ДБ, а затем могут быть активированы другие нелинейные возбуждения.

Далее представлены 16 однокомпонентных ДНКМ для квадратной решетки (см. рисунок 1), которые рассматриваются и анализируются в последующих главах.

Завершается первая глава математическим описанием исследуемой модели. В работе рассматривается квадратная решетка (см. рисунок 2) в которой учитывается связь каждой частицы с четырьмя ближайшими частицами, то есть, учитываются дальнодействующие силы. Расстояние между ближайшими узлами решетки равно h. Приняв базисные векторы

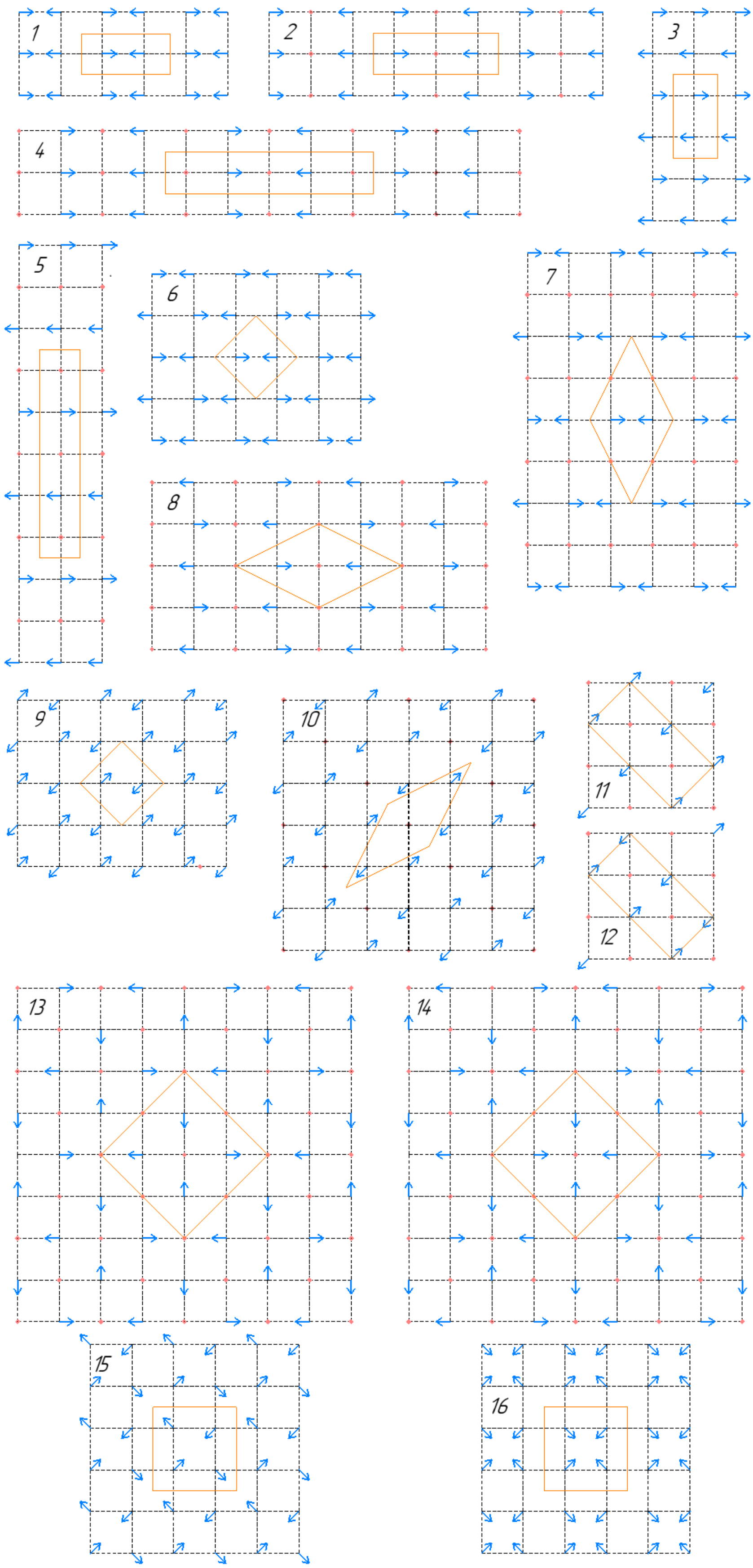


Рисунок 1 — Шестнадцать однокомпонентных ДНКМ квадратной решетки [16]. Показаны вектора начальных смещений частиц, приводящих, при нулевых начальных скоростях, к возбуждению ДНКМ. Трансляционные ячейки паттернов смещений выделены оранжевым

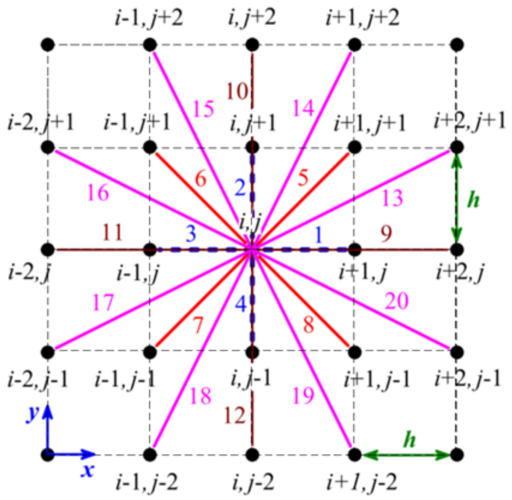


Рисунок 2 — Узлы квадратной решетки с шагом h, пронумерованные индексами i,j. Рассмотрены взаимодействия вплоть до четвертого соседа. Показана нумерация связей

решетки в виде $e_1 = (h,0)$ и $e_2 = (0,h)$, радиус-векторы точек решетки на плоскости xy определяются по формуле

$$\boldsymbol{\xi}_{i,j} = i\boldsymbol{e}_1 + j\boldsymbol{e}_2, \tag{1}$$

где i и j - номера точек. В узлах решетки располагаются точечные частицы массы m. Вектор смещения частицы i,j относительно ее равновесного положения в решетке обозначим $(u_{i,j},v_{i,j})$. Тогда радиус-вектор частицы в момент времени t будет равен $\boldsymbol{r}_{i,j}(t) = \boldsymbol{\xi}_{i,j} + (u_{i,j}(t),v_{i,j}(t))$. Каждая частица взаимодействует с 20 частицами, расположенными на четырех координационных оболочках, пронумерованных индексом l, посредством β-ФПУЦ потенциалов в соответствии с формулой

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

где r - расстояние между частицами, радиусы координационных оболочек квадратной решетки равны $\zeta_1 = h$, $\zeta_2 = \sqrt{2}h$, $\zeta_3 = 2h$ и $\zeta_4 = \sqrt{5}h$; k_l и β_l - это коэффициенты при гармонической и ангармонической частях потенциала соответственно. Принимаем $h = 1$ и $k_1 = 1$, выбирая должным образом единицы измерения расстояния и энергии соответственно. Рассматриваются различные значения $k_{2,3,4}$, которые удовлетворяют условию

$$k_1 = 1 > k_2 > k_3 > k_4 > 0. \tag{3}$$

Это условие учитывает, что жесткость межатомных связей в кристаллах обычно положительна и уменьшается с расстоянием. Для коэффициентов ангармоничности берём $\beta_l = 10$ для всех четырех типов связей, $l = 1,...,4$.

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

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

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

считывается по формуле

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

где точка над переменной означает дифференцирование по времени, векторы $\boldsymbol{R}_{i,j,k}$, соединяют частицу i,j с ее соседями в четырех первых координационных оболочках.

Первое слагаемое в гамильтониане (4) дает кинетическую энергию частиц, а четыре последующих слагаемых определяют потенциальные энергии связей между частицами в четырех координационных оболочках.

Приведем уравнения движения, вытекающие из гамильтониана (4):

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

где D_l определяется из уравнения

$$D_l = \frac{\varphi_l'(|\boldsymbol{R}_{i,j,k}|)}{|\boldsymbol{R}_{i,j,k}|}, \quad l = 1,...,4. \quad (6)$$

Симплектический метод Штормера шестого порядка используется для численного интегрирования уравнений движения (5). Размер вычислительной ячейки равен $I = J = 12$ при анализе ДНКМ, $I = J = 120$ при изучении ДБ, $I = J = 500$ при изучении супратрансмиссии.

Далее квадратная решетка будет рассматриваться для коэффициентов линейной жесткости, соответствующих одному из трех наборов, перечисленных в таблице 1. По большей части будем работать с набором параметров 1 из таблицы 1, поскольку он удовлетворяет условию (3), обеспечивающему убывание жесткости связей с расстоянием.

Во второй главе главе представлены аналитические результаты. Выписаны линеаризованные уравнения движения, предполагая, что $u_{ij} \ll h$ и $v_{ij} \ll h$. Их решение разыскива-

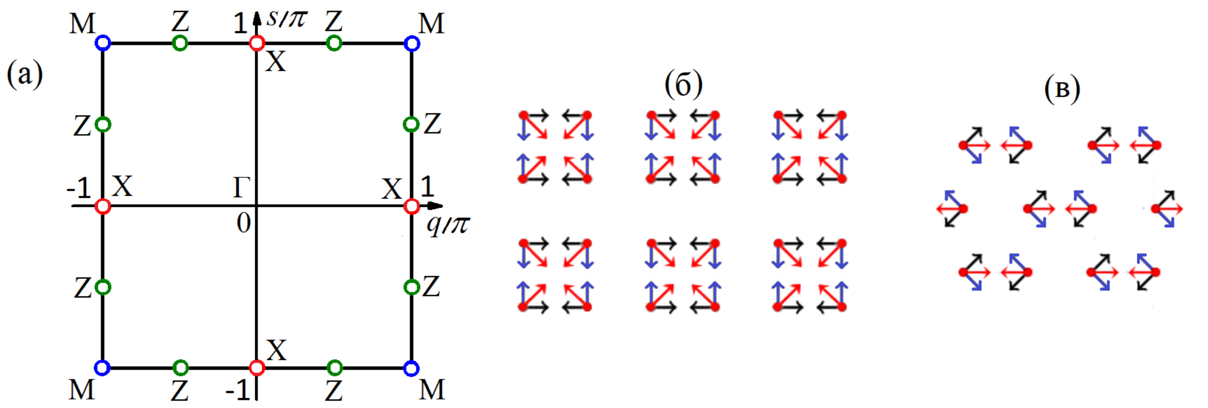


Рисунок 3 — (а) Первая зона Бриллюэна квадратной решетки. Высокосимметричные точки обозначены буквами Г, X, M и Z. Точки X показывают волновые векторы ДНКМ 1 и 16; точкам M соответствуют ДНКМ 6 и 9; точкам Z - ДНКМ 7. (б) ДНКМ 16 - это сумма ДНКМ 1 и её поворота на 90°. (в) ДНКМ 6 - это сумма ДНКМ 9 и её поворота на 90°

ется в стандартном виде бегущих волн, $u_{i,j} = U\exp[\mathrm{i}(qi+sj-\omega t)]$, $v_{i,j} = V\exp[\mathrm{i}(qi+sj-\omega t)]$, где U, V - компоненты собственного вектора, i - мнимая единица, s и q - волновые числа, а ω - частота. Подстановка уравнений этих уравнений в линеаризованные уравнения движения позволяет найти следующее дисперсионное соотношение квадратной решетки:

$$\begin{aligned} \omega_{1,2}^2 &= \frac{-A-C\pm\sqrt{(A-C)^2+4B^2}}{2m}, \quad A = -\gamma-\eta-\theta-a-4c-4d-e-f, \\ B &= -\eta+\theta-2c-2e+2f+2d, \quad C = -\delta-\eta-\theta-b-4e-4f-c-d, \end{aligned} \tag{7}$$

где

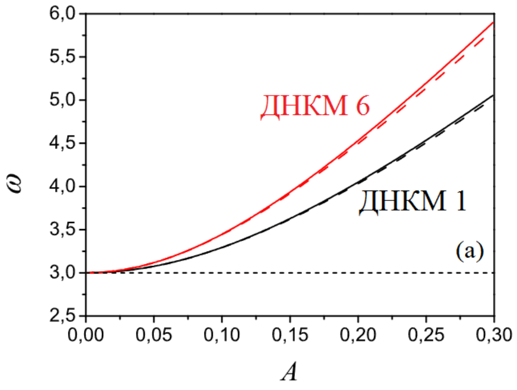
$$\begin{aligned} &\gamma = 4k_1\sin^2\frac{q}{2}, \quad \delta = 4k_1\sin^2\frac{s}{2}, \quad \eta = 2k_2\sin^2\frac{q+s}{2}, \quad \theta = 2k_2\sin^2\frac{q-s}{2}, \\ &a = 4k_3\sin^2 q, \quad b = 4k_3\sin^2 s, \quad c = \frac{4}{5}k_4\sin^2\frac{2q+s}{2}, \quad d = \frac{4}{5}k_4\sin^2\frac{2q-s}{2}, \\ &e = \frac{4}{5}k_4\sin^2\frac{q+2s}{2}, \quad f = \frac{4}{5}k_4\sin^2\frac{q-2s}{2}. \end{aligned} \tag{8}$$

Проанализируем частоты фононов в точках X, Z и M первой зоны Бриллюэна, см. рисунок 3(а). Цель анализа - найти условия, при которых максимальная частота фононов достигается в одной из точек X, Z и M. Частоты фононов в точках X, $(q,s) = (\pm\pi,0)$ и $(0,\pm\pi)$ рассчитываются по формуле

$$\omega_{1,\mathrm{X}}^2 = \frac{4}{m}(k_1+k_2+\frac{2}{5}k_4), \quad \omega_{2,\mathrm{X}}^2 = \frac{4}{m}(k_2+\frac{8}{5}k_4). \tag{9}$$

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

$$\omega_{1,\mathrm{M}}^2 = \omega_{2,\mathrm{M}}^2 = \frac{4}{m}(k_1+2k_4). \tag{10}$$



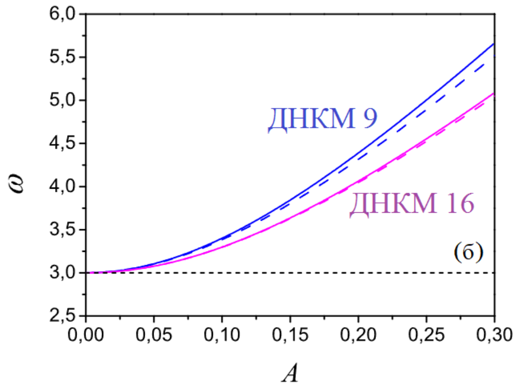


Рисунок 4 — Амплитудно-частотные характеристики для ДНКМ (а) 1 и 6, (б) 9 и 16. Сплошными линиями показана аналитическая оценка с использованием кубического приближения, см. уравнения (13), (14), (15) и (16), в то время как пунктирные линии показывают численный (точный) результат. Горизонтальная линия показывает максимальную частоту фононов. Для выбранных параметров $k_1 = k_2 = 1$, $k_3 = 4/5$ и $k_4 = 5/8$, частоты ДНКМ имеют одинаковую частоту $\omega = 3$ в пределе малых амплитуд

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

$$\omega_{1,\mathrm{Z}}^2 = \frac{4}{m}\left(\frac{k_1}{2} + \frac{k_2}{2} + k_3 + \frac{1}{5}k_4\right), \quad \omega_{2,\mathrm{Z}}^2 = \frac{4}{m}\left(k_1 + \frac{k_2}{2} + \frac{4}{5}k_4\right). \tag{11}$$

Несложно показать, что в точке Z максимальная частота может быть получена только для весьма частного набора параметров жесткости и далее этот случай не рассматривается.

Максимальная частота фононов достигается в точке M, которая является волновым вектором ДНКМ 6 и 9, при выполнении условия

$$k_4 > \frac{5}{8}k_2. \tag{12}$$

В частности, условие (12) выполняется для набора параметров 1, см. таблицу 1. Если уравнение (12) не выполняется, то максимальная частота фононов реализуется в точке X, которая является волновым вектором ДНКМ 1 и 16.

Далее анализируются наиболее интересные однокомпонентные ДНКМ с волновыми векторами на границе первой зоны Бриллюэна (см. рисунок 3), а именно моды 1, 6, 9 и 16. Для них, с учетом кубической нелинейности, получены приближенные аналитические зависимости частоты от амплитуды:

$$\omega_1^2 \approx \frac{4}{m}\left(k_1 + k_2 + \frac{2}{5}k_4\right) + \frac{3}{4m}\left(16\beta_1 + 8\beta_2 + \frac{32}{25}\beta_4 - \frac{6k_2}{h^2}\right)A^2. \tag{13}$$

$$\omega_6^2 \approx \frac{4}{m}(k_1 + 2k_4) + \frac{3}{4m}\left(16\beta_1 + \frac{544}{25}\beta_4 + \frac{8k_1}{h^2} - \frac{48k_4}{25h^2}\right)A^2. \tag{14}$$

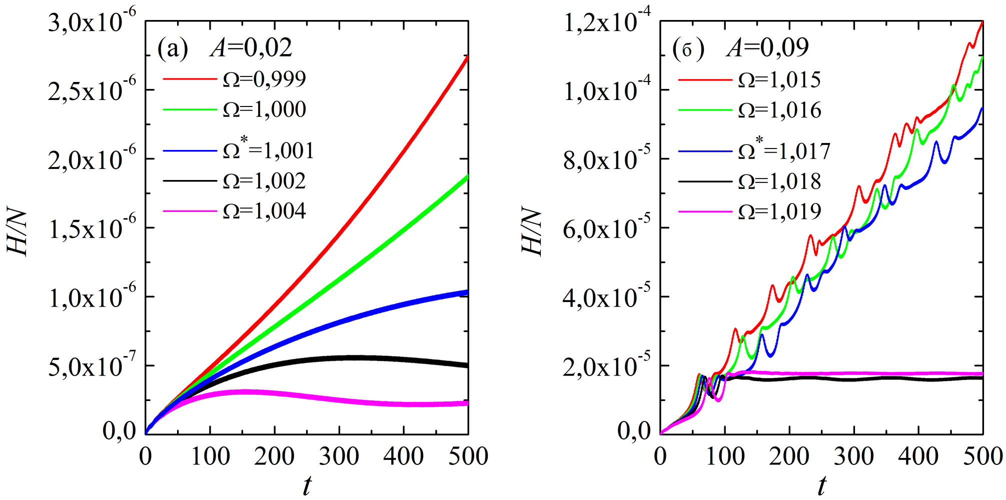


Рисунок 5 — Зависимость полной энергии частиц решетки, нормированной на число частиц, от времени для (а) A=0,02 и (б) A=0,09. Результаты для разных значений Ω показаны кривыми разных цветов в соответствии с условными обозначениями. Напомним, что согласно уравнению (18) случай $\Omega = 1$ соответствует возбуждению с частотой на верхнем краю фононного спектра. Результаты для случая $\phi = 0$

$$\omega_9^2 \approx \frac{4}{m}(k_1 + 2k_4) + \frac{3}{4m}\left(8\beta_1 + \frac{656}{25}\beta_4 + \frac{8k_4}{25h^2}\right)A^2. \quad (15)$$

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

О точности приведённых зависимостей частоты ДНКМ от амплитуды можно судить глядя на рисунок 4, где аналитические результаты сравниваются с полученными из численного интегрирования уравнений движения (5). Как видно из представленных данных, кубическая аппроксимация даёт достаточно хороший результат для амплитуд до $A = 0{,}3$.

В третьей главе анализируется квадратная решетка с учетом взаимодействий между первыми и вторыми соседями, то есть эффект дальнодействия не учитывается, иными словами, полагается $k_3 = k_4 = 0$ и $\beta_3 = \beta_4 = 0$. Это связано с тем, что передача энергии квадратной решетке от пары частиц и от плотноупакованного ряда частиц, совершающих вынужденные колебания, ранее не рассматривалась. Первые работы в этом направлении естественно выполнить для простейшей модели квадратной решетки.

Согласно первому выражению в уравнении (9), для $k_1 = 1$, $k_2 = 0{,}9$ и $m = 1$ максимальная частота фононов рассматриваемой квадратной решетки равна

$$\omega_{\max} = 2\sqrt{(k_1 + k_2)/m} = 2{,}757. \quad (17)$$

Две частицы в центре расчетной ячейки совершают вынужденное движение по закону

$$\begin{aligned} u_{\frac{I}{2},\frac{J}{2}} &= A\sin(\Omega\omega_{\max}t), \quad v_{\frac{I}{2},\frac{J}{2}} = 0, \\ u_{\frac{I}{2}+1,\frac{J}{2}} &= -A\sin(\Omega\omega_{\max}t + \phi), \quad v_{\frac{I}{2}+1,\frac{J}{2}} = 0, \end{aligned} \quad (18)$$

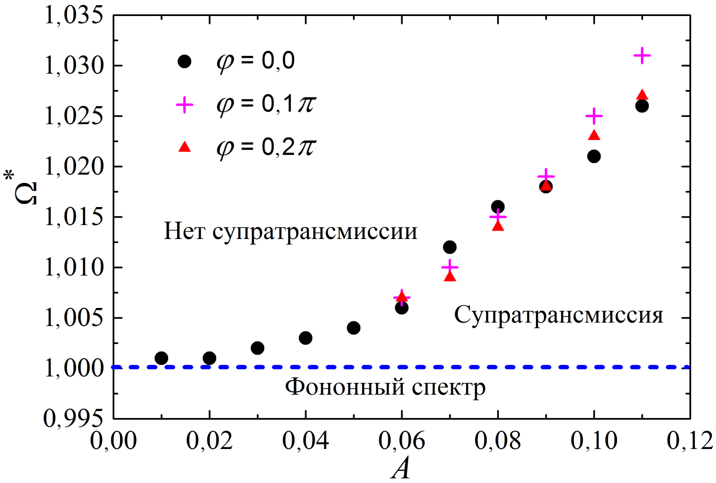


Рисунок 6 — Критическое значение Ω^* как функция амплитуды возбуждения A для различных значений ϕ, указанных в легенде

где A и $\Omega\omega_{\max}$ - амплитуда и частота колебаний, соответственно. Параметр ϕ управляет относительным сдвигом фаз для двух колеблющихся частиц; при $\phi = 0$ частицы колеблются в противофазе.

Две движущиеся частицы рассматриваются как источник энергии, а полная энергия решетки H вычисляется как функция времени для различных параметров A, Ω и ϕ, входящих в уравнение (18). Несколько примеров графиков зависимости $H(t)/N$, где $N = IJ$ - количество частиц в расчетной ячейке, показаны на рисунке 5. На (а) амплитуда внешнего воздействия равна $A = 0{,}02$, а на (б) $A = 0{,}09$; сдвиг фазы равен $\phi = 0$ в обоих случаях. Различные кривые показывают результаты для разных значений Ω. Значению $\Omega = 1$ соответствует внешнее воздействие на частоте равной верхнему краю фононного спектра.

Как видно из рисунка 5, существует критическое значение $\Omega = \Omega^*$, выше которого энергия перестает поступать в решетку и $H(t)$ достигает насыщения. При $\Omega \leq \Omega^*$ энергия решетки увеличивается со временем. На панелях (а) и (б) критическими значениями являются $\Omega^* = 1{,}001$ и $\Omega^* = 1{,}017$ соответственно. По мере того, как Ω уменьшается и приближается к фононной зоне, скорость потока энергии к решетке от движущихся частиц увеличивается.

Критические значения Ω^* для различных амплитуд возбуждения A и различных сдвигов фаз ϕ представлены на рисунке 6. Супратрансмиссия происходит выше фононного диапазона и ниже критических значений Ω^*. Функция $\Omega^*(A)$ растет и не показывает четкой зависимости от ϕ, например, для $A = 0{,}07$ и $0{,}08$ критическое значение Ω^* уменьшается с увеличением ϕ, но для $A = 0{,}10$ и $0{,}11$ критическое значение Ω^* растёт с увеличением ϕ.

Интересно проанализировать механизм передачи энергии решетке. Для этой цели распределение плотности энергии по решетке во время моделирования $t = 250$ показано на рисунке 7 для амплитуды возбуждения $A = 0{,}07$, сдвига фазы $\phi = 0$, и разных значений параметра Ω, управляющего частотой внешнего воздействия, как указано на каждой панели. Две возбуждаемые частицы показаны черным цветом, они расположены в центре рисунка. Остальные частицы окрашены в соответствии с их суммарной энергией с градиентом от

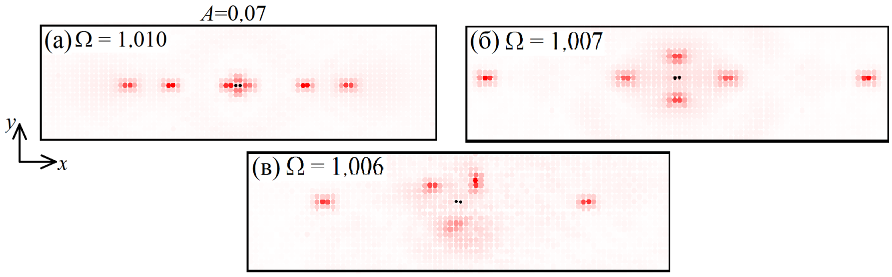


Рисунок 7 — Распределение энергии в вычислительной ячейке в момент времени $t = 250$ для вынужденного движения пары частиц с амплитудой $A = 0{,}07$, сдвигом фазы $\varphi = 0$ и значением Ω, указанным на каждой панели (критическое значение $\Omega^* = 0{,}012$). Интенсивность красного цвета увеличивается с увеличением энергии частиц. Можно видеть ДБ, излучаемые парой движущихся частицами, которые показаны черным цветом

белого к красному. Белый цвет соответствует нулевой энергии, а красный - максимальной энергии.

Панель (а) на рисунке 7 представляет результат для Ω близкого к Ω^*, в то время как на (б) и (в) рассматриваются меньшие значения Ω, но выше фононной полосы. Можно видеть, что на рисунке (а) ДБ периодически испускаются источником энергии и продолжают свое движение в разные стороны параллельно оси x. Поток энергии к решетке на рисунке (а) симметричен относительно вертикальной линии, проходящей между двумя движущимися частицами. На (б) и особенно на (в), при меньших значениях Ω, испускание ДБ является менее периодичным и менее симметричным. Можно сделать вывод, что при меньших значениях Ω симметричное излучение энергии становится нестабильным, даже если две движущиеся частицы движутся строго в противофазе, то есть симметрично. Для $\phi \neq 0$, как и ожидалось, излучение энергии движущимися частицами асимметрично даже для Ω близкого к Ω^*.

Далее изучается передача энергии квадратной решетке от ряда колеблющихся частиц. В вычислительной ячейке, включающей $I \times J$ частиц, ряд частиц с $i = 0$ совершает вынужденное движение по синусоидальному закону в направлении оси x

$$u_{0,j}(t) = A\sin(\Omega t), \quad v_{0,j}(t) = 0, \quad j = 0,\ldots,J-1, \tag{19}$$

где A и Ω - это амплитуда и частота вынужденного движения. Все частицы с $i \neq 0$ при $t = 0$ находятся в своих равновесных положениях и имеют нулевую начальную скорость, $\dot{u}_{i,j}(0) = \dot{v}_{i,j}(0) = 0$, для $i \neq 0$. Изучены относительно небольшие значения амплитуды вынужденных колебаний A. При этом будем в основном интересоваться частотами вынужденного движения внутри фононного спектра, $0 < \Omega \leq \omega_{\max}$.

Решается задача о передаче энергии решетке от ряда вынужденно колеблющихся частиц, и мощность этого источника, то есть энергия передаваемая решетке за единицу времени, определяется для различных значений A и Ω. В пределе малых значений амплитуды вынужденного движения, $A \ll h$, задачу можно решить аналитически, рассмотрев её как одномерную, считая, что $u_{i,j} = u_i$, $v_{i,j} = 0$. В таком предположении уравнение движения относительно $u_i(t)$ имеет вид $m\ddot{u}_i = (k_1 + k_2)(u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1})$. Фонон с амплитудой A и частотой Ω имеет плотность энергии

$$e = \frac{1}{2} m A^2 \Omega^2, \tag{20}$$

при этом зависимость Ω от волнового числа q имеет вид

$$\Omega^2 = \frac{4(k_1 + k_2)}{m} \sin^2 \frac{q}{2}. \tag{21}$$

Далее вычислим групповую скорость фононов

$$v(q) = h \frac{\mathrm{d}\Omega}{\mathrm{d}q} = \frac{h}{2} \sqrt{\frac{k_1 + k_2}{m}} \frac{\sin q}{\sin \frac{q}{2}}. \tag{22}$$

Исключив с помощью дисперсионного соотношения (21) волновое число q из уравнения (22), групповую скорость можно записать как функцию частоты Ω.

Фонон, распространяющийся от источника энергии с групповой скоростью v в вычислительной ячейке с поперечным размером J, за время t передает решетке энергию $E(A,\Omega) = tJev(\Omega) = tJv(\Omega)mA^2\Omega^2/2$. Мощность такого источника энергии будет

$$W(A,\Omega) = \frac{dE}{dt} = Jev(\Omega) = \frac{J}{2} m A^2 \Omega^2 v(\Omega). \tag{23}$$

Анализ зависимости (23) показывает, что мощность источника отлична от нуля в диапазоне частот возбуждения $0 < \Omega < \omega_{\max}$, а вне этого диапазона она равна нулю, поскольку фонон не испускается при частотах внешнего воздействия вне фононного спектра. Этот вывод справедлив для гармонического приближения, но с ростом амплитуды внешнего воздействия A наблюдается отклонение мощности источника от формулы (23) за счет влияния нелинейности взаимодействия между частицам.

Проведённые численные расчёты с учетом нелинейности показали, что, во-первых, мощность в диапазоне $0 < \Omega < \omega_{\max}$ оказывается выше, чем предсказывает линейная теория и, во вторых, положительная мощность источника наблюдается также в узком диапазоне частот выше фононного спектра, что и является эффектом супратрансмиссии [15]. Чем выше амплитуда A, тем шире интервал частот выше фононной полосы, где $W > 0$.

Как сказано выше, особый интерес представляет передача энергии на частотах внутри фононного спектра. Покажем как энергия передается решетке в случае частот внешнего воздействия $0{,}9\omega_{\max}$ и $0{,}97\omega_{\max}$, см. рисунок 8(а) и (б), соответственно. И в том и в другом случае частота лежит в пределах фононного спектра. В обоих случаях амплитуда внешнего воздействия составляет $A = 0{,}05$. Как видно из рисунка 8(а) и (б), несмотря на то, что частота внешнего воздействия в обоих случаях находится в фононном спектре, распространение энергии в системе происходит по-разному, причем, различия носят качественный характер. На (а) источник энергии испускает бегущую волну, которая через какое-то время распадается на волновые пакеты из-за модуляционной неустойчивости. На (б) энергия передается решетке периодически испускаемыми локализованными возбуждениями. Расчет частоты ко-

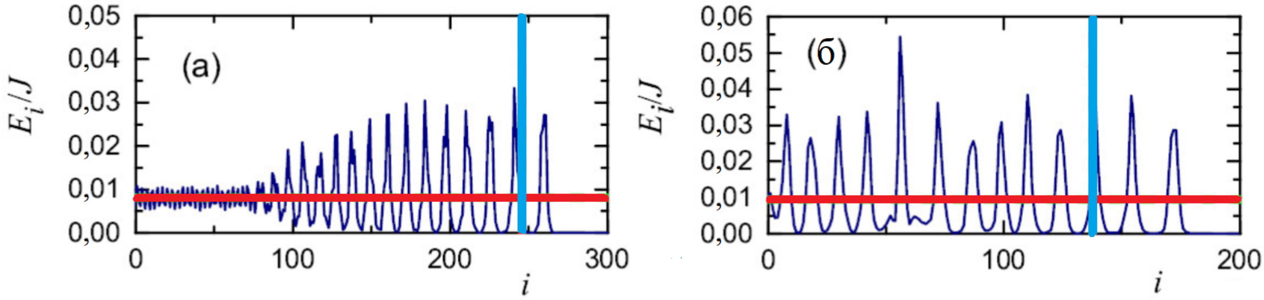


Рисунок 8 — Плотность энергии как функция номера ряда частиц i в момент времени $t = 400$. Атомный ряд, совершающий вынужденное движение, находится слева при $i = 0$. Амплитуда вынужденного движения равна $A = 0{,}05$, а частота (а) $\Omega = 0{,}9\omega_{\max}$ и (б) $\Omega = 0{,}97\omega_{\max}$. Представлены результаты для одномерной модели ($J = 1$). Горизонтальные красные линии показывают плотность энергии фонона: (а) $e = 0{,}0081$ и (б) $e = 0{,}0094$, рассчитанные по (20). Предполагаемое из линейной теории положение фронта волны, рассчитанное из (22), показано вертикальной голубой линией. На (а), излучаемая фононная волна неустойчива, в результате чего она распадается на волновые пакеты с основной частотой колебаний $0{,}9292\omega_{\max}$, то есть внутри фононного спектра. На (б) излучаются ДБ с основной частотой колебаний $1{,}001\omega_{\max}$, то есть выше фононного спектра

лебаний частиц в пределах данных локализованных возбуждений показал, что на (б) они представляют собой ДБ, поскольку их основная частота колебаний превышает частоту внешнего воздействия, $\Omega = 0{,}97\omega_{\max}$, и лежит выше фононного спектра, составляя $1{,}001\omega_{\max}$. На (а) волновые пакеты имеют основную частоту колебаний $0{,}9292\omega_{\max}$, что также превышает частоту внешнего воздействия $\Omega = 0{,}9\omega_{\max}$, но лежит в пределах фононного спектра.

Плотность энергии, испускаемой источником, можно оценить в гармоническом приближении с помощью уравнения (20); она показана горизонтальными красными линиями на рисунке 8. Скорость распространения волны, согласно линейной теории, оценивается по уравнению (22). Вертикальные голубые линии показывают фронт волны по этой оценке. Видно, что локализованные возбуждения на (а) и (б) движутся быстрее, чем предсказывает линейная теория, обгоняя вертикальную голубую линию. Тот факт, что частота волновых пакетов на (а) и ДБ на (б) выше частоты внешнего воздействия имеет простое объяснение. Потенциал β-ФПУЦ, используемый в модели, имеет жесткий тип нелинейности и рост амплитуды локализованных волн по сравнению с фононной волной приводит к росту частоты колебаний.

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

Численно исследовался и двумерный случай, когда размер вычислительной ячейки составлял $I = 200$ и $J = 160$. Параметры внешнего воздействия были выбраны равными $A = 0{,}05$, $\Omega = 0{,}9\omega_{\max}$ и $\Omega = 0{,}97\omega_{\max}$, как в одномерной модели, см. рисунок 8.

Результаты для двумерного случая при относительно малых временах моделирования практически совпадали с тем, что наблюдалось в одномерном случае, а именно, для частоты внешнего воздействия $\Omega = 0{,}9\omega_{\max}$, испускался фонон, который затем распадался на волновые пакеты, а для $\Omega = 0{,}97\omega_{\max}$ наблюдалось испускание линейных ДБ. С течением времени, линейные ДБ распадались на обычные ДБ, локализованные в обоих пространственных измерениях, распространяющиеся вдоль направлений $y = \pm x$.

В четвертой главе показана возможность получения новых стационарных и движущихся ДБ в квадратной решете. О ДБ, основанных на ДНКМ 1 и 16, сообщалось в работе [17], в которой рассматривалась квадратная решетка с ближайшими и вторыми соседями. В главе 2 было показано, что ДНКМ 6 и 9 могут иметь частоты выше фононного спектра только тогда, когда $k_4 > 0$, точнее, когда выполняется условие (12). В соответствии с этим условием новые стационарные и движущиеся ДБ найдены в данной работе путем применения функций локализации к ДНКМ 6 и 9.

Применим известный и весьма продуктивный подход к нахождению ДБ, разработанный для решеток высокой размерности [7]. Основная идея очень проста. Поскольку частота ДБ должна быть выше фононного спектра, можно изучить все ДНКМ рассматриваемой решетки, а их число конечно, так как конечно число преобразований симметрии, которые используются для нахождения ДНКМ, и выделить те из них, которые имеют частоту выше фононного спектра. Можно далее пытаться получить долгоживущий ДБ, накладывая на ДНКМ функцию локализации, экспоненциально убывающую с расстоянием от центра ДБ. Разумеется, что при таком подходе не ставится задача нахождения точных бризерных решений, а осуществляется поиск долгоживущих квазибризеров [18].

Функции локализации имеют три основных параметра: амплитуду A, параметры, описывающие центр локализации дискретного бризера относительно точек решетки, и степень пространственной локализации. Амплитуда принимается равной порядка $A \sim 0{,}1$, поскольку этого достаточно для проявления эффектов ангармонизма при принятом выборе параметров $\beta_l = 10$, $l = 1,\ldots,4$ в β-ФПУЦ потенциале (2). Центр функции локализации выбирается на высокосимметричных линиях или точках квадратной решетки. Степень локализации выбирается путем минимизации энергии, излучаемой ДБ во время его стабилизации. Выброс части энергии от ДБ в решетку происходит из-за неточных начальных условий, и чем меньше выброс, тем лучше начальные условия.

Для примера рассмотрим получение одномерных ДБ, локализованных вдоль прямой

$$p_1 x + p_2 y + p_3 = 0. \tag{24}$$

Известно, что ДБ экспоненциально локализован в пространстве, то есть амплитуды колебаний частиц убывают экспоненциально быстро с удалением от этой прямой. Для этого функцию локализации можно взять в виде

$$a_{ij} = \frac{A}{\cosh(\kappa d_{ij})}, \quad d_{ij} = \frac{|p_1 x_{ij} + p_2 y_{ij} + p_3|}{\sqrt{p_1^2 + p_2^2}}, \tag{25}$$

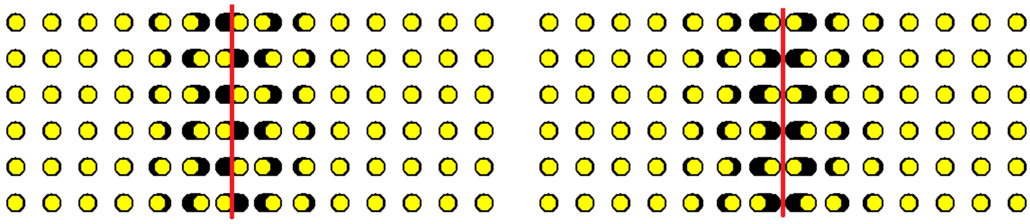


Рисунок 9 — Линейные ДБ, основанные на ДНКМ 6. Линии локализации показаны красным цветом. Параметрами линии локализации (24) и функции локализации (25) являются (а) $p_1 = 1$, $p_2 = 0$, $p_3 = 0$, $A = 0{,}15$ и $\kappa = 0{,}94$; (б) $p_1 = 1$, $p_2 = 0$, $p_3 = h/2$, $A = 0{,}15$ и $\kappa = 0{,}89$. Смещения частиц для наглядности умножены на коэффициент 2

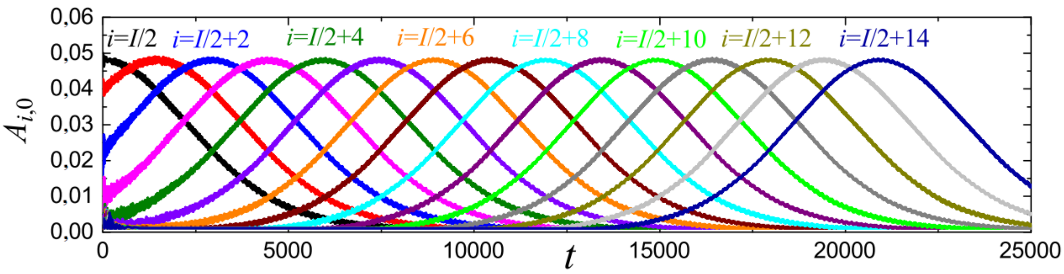


Рисунок 10 — Движущийся одномерный ДБ основанный на ДНКМ 6. Показаны амплитуды колебаний частиц ряда $j = 0$ в зависимости от времени. Частицы пронумерованы индексом i, как указано для каждой кривой. Параметры линейной жесткости соответствуют набору праметров 1 из таблицы 1. Параметрами функции локализации (26) являются: $A = 0{,}05$, $\omega_{\mathrm{DB}} = 3{,}05$, $\kappa = 0{,}35$, и сдвиг фазы $\rho = 0{,}15$. Параметры уравнения прямой локализации (24) следующие: $p_1 = 1$, $p_2 = 0$, $p_3 = h/2$ (центр локализации располагается посередине между двумя вертикальными рядами частиц)

здесь через a_{ij} обозначена длина вектора начального смещения частицы с решеточным положением $\boldsymbol{\xi}_{i,j}$, A - амплитуда ДНКМ, параметр κ определяет степень пространственной локализации ДБ, а d_{ij} - это расстояние от узла решетки i,j до прямой (24). Все частицы в момент времени $t = 0$ имеют нулевую начальную скорость.

Два линейных ДБ, основанных на ДНКМ 6, показаны в качестве примера на рисунке 9. Здесь частицы колеблются перпендикулярно линии локализации (показана красным). На панелях (а) и (б) показаны ДБ Сивера-Такено и Пейджа, соответственно. Аналогичные одномерные ДБ были получены на основе ДНКМ 6 и для случая, когда частицы колеблются вдоль линии локализации. Одномерные ДБ Сиверса-Такено и Пэйджа также были получены для ДНКМ 9, только для них линиями локализации выступают $y = \pm x$, а не $y = \mathrm{const}$ и $x = \mathrm{const}$, как для ДБ основанных на ДНКМ 6. Кроме того, на основе ДНКМ 9 был получен обычный ДБ, локализованный в обоих пространственных направлениях около точки пересечения двух ортогональных прямых.

Одномерные движущиеся ДБ были получены с использованием следующей функции локализации

$$a_{ij}(t) = \frac{\pm A\cos(\omega_{\mathrm{DB}}t + \rho d_{ij})}{\cosh(\kappa d_{ij})}. \tag{26}$$

Здесь A - амплитуда ДНКМ, знак плюс или минус выбирается в соответствии с паттерном смещений ДНКМ; ω_{DB} - это частота ДБ, которая определяется численно для стационарного ДБ; сдвиг фазы ρ вводится для приведения ДБ в движение; κ - степень пространственной локализации, которая также оценивается для стационарного ДБ; d_{ij} - это расстояние от точки решетки i,j до линии локализации ДБ. Отметим, что $\rho = 0$ соответствует стационарному ДБ, поскольку именно набег фазы колебаний частиц приводит к движению ДБ. Пример движущегося ДБ на основе ДНКМ 6 приведён на рисунке 10, он получен используя анзац (26).

Основные результаты работы заключаются в следующем:

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

Исходя из представленных выводов по задачам, поставленным в рамках данного исследования, можно заключить, что в условиях нелинейности рассматриваемых решеток при учете дальнодействующего потенциала β–ФПУЦ возможны новые типы ДБ, которые не реализуются в решетке со взаимодействием только между первыми и вторыми соседями. Дальнодействующие взаимодействия реализуются, например, в кристаллах с металлической и ионной связью. Данная работа так же вносит вклад в развитие знаний о транспорте энергии в квадратной решетке. Доказано, что при наложении функций локализации на делокализованные нелинейные колебательные моды и при помощи механизма супратрансмисии возможно численное возбуждение движущихся дискретных бризеров, способных к переносу энергии.

Перспективой дальнейшего развития существующей работы является использование разработанных методов численного возбуждения стационарных и движущихся дискретных бризеров в трехмерных решетках.

Основные публикации автора по теме диссертации

Статьи в журналах из Перечня ВАК:

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

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

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

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

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

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

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

Список литературы

1. *Dolgov A. S.* On localization of oscillations in nonlinear crystal structure / A. S. Dolgov // Sov. Phys. Solid State. — 1986. — т. 28. — с. 907.
2. *Sievers A. J.* Intrinsic localized modes in anharmonic crystals / A. J. Sievers, S. Takeno // Phys. Rev. Lett. — 1988. — т. 61, № 8. — с. 970—973.
3. *Flach S.* Discrete breathers — Advances in theory and applications / S. Flach, A. V. Gorbach // Physics Reports. — 2008. — т. 467, № 1. — с. 1—116.
4. *Chechin G. M.* Interactions between normal modes in nonlinear dynamical systems with discrete symmetry. Exact results / G. M. Chechin, V. P. Sakhnenko // Phys. D. — NLD, 1998. — т. 117, № 1—4. — с. 43—76.

5. *Bezuglova G. S.* Discrete breathers on symmetry-determined invariant manifolds for scalar models on the plane square lattice / G. S. Bezuglova, G. M. Chechin, P. P. Goncharov // Phys. Rev. E. — 2011. — т. 84, № 3. — с. 036606.

6. Discrete breathers in scalar dynamical models on the plane square lattice / G. S. Bezuglova, P. P. Goncharov, Y. V. Gurov, G. M. Chechin // Izvestiya Vysshikh Uchebnykh Zavedeniy. Prikladnaya Nelineynaya Dinamika. — 2011. — т. 19, № 3. — с. 89—103.

7. Discrete breathers in crystals / S. V. Dmitriev, E. A. Korznikova, J. A. Baimova, M. G. Velarde // Physics–Uspekhi. — 2016. — т. 59, № 5. — с. 446—461.

8. *Hema P.* Quasi discreteness analysis of a two dimensional ferromagnetic spin system / P. Hema, M. M. Latha // Chinese Journal of Physics. — 2023. — т. 82. — с. 75—88.

9. *Bajars J.* Two-dimensional mobile breather scattering in a hexagonal crystal lattice. / J. Bajars, J. C. Eilbeck, B. J. Leimkuhler // Phys. Rev. E. — 2021. — т. 103 2—1. — с. 022212.

10. *McGurn A. R.* Transmission through Kerr media barriers within waveguides: Device applications / A. R. McGurn. — 2011. — с. 149—171.

11. *Burlakov V. M.* Computer simulation of intrinsic localized modes in one-dimensional and two-dimensional anharmonic lattices / V. M. Burlakov, S. A. Kiselev, V. N. Pyrkov // Phys. Rev. B. — 1990. — т. 42, вып. 8. — с. 4921—4927.

12. *Lü B.-b.* Discrete breathers in a two-dimensional Morse lattice with an on-site harmonic potential / B.-b. Lü, Q. Tian // Frontiers of Physics in China. — 2009. — т. 4, № 4. — с. 497—504.

13. Influence of the relative stiffness of second-neighbor interactions on chaotic discrete breathers in a square lattice / I. A. Shepelev, E. G. Soboleva, A. A. Kudreyko, S. V. Dmitriev // Chaos, Solitons and Fractals. — 2024. — т. 183.

14. Surface discrete breathers in Pt_3Al intermetallic alloy / P. V. Zakharov, E. A. Korznikova, S. V. Dmitriev, E. G. Ekomasov, K. Zhou // Surf. Sci. — 2019. — т. 679. — с. 1.

15. *Caputo J.-G.* Nonlinear energy transmission in the gap / J.-G. Caputo, J. Leon, A. Spire // Phys. Lett. A. — 2001. — т. 283, № 1/2. — с. 129—135.

16. One-component delocalized nonlinear vibrational modes of square lattices / D. S. Ryabov, G. M. Chechin, E. K. Naumov, Y. V. Bebikhov, E. A. Korznikova, S. V. Dmitriev // Nonlinear Dynamics. — 2023. — т. 111. — с. 8135—8153.

17. Discrete breathers in square lattices from delocalized nonlinear vibrational modes. / E. K. Naumov, Y. V. Bebikhov, E. G. Ekomasov, E. G. Soboleva, S. V. Dmitriev // Phys. Rev. E. — 2023. — т. 107 3—1. — с. 034214.

18. *Chechin G. M.* Quasibreathers as a generalization of the concept of discrete breathers / G. M. Chechin, G. S. Dzhelauhova, E. A. Mehonoshina // Phys. Rev. E. — 2006. — т. 74, вып. 3. — с. 036608.