Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Южный федеральный университет»

*Шерьбиния*На правах рукописи

# Щербинин Степан Александрович

# Делокализованные ангармонические колебания в системах с дискретной симметрией

Специальность 01.04.07 — «Физика конденсированного состояния»

Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук

Научный руководитель: кандидат физико-математических наук, доцент Чечин Георгий Михайлович

### Оглавление

		Стр.
Введен	ie	4
Глава 1	Нелинейные колебания систем с дискретной симметрией	10
1.1	Становление нелинейной динамики	10
1.2	Дискретные бризеры	16
1.3	Нелинейные нормальные моды и их буши	17
1.4	Метод функционала плотности	19
Глава 2	Симметрийно-обусловленные нелинейные нормальные	
	моды Розенберга в LC-цепочке	24
2.1	LC-модель	24
2.2	Симметрийно-обусловленные нелинейные нормальные моды	
	Розенберга	25
2.3	Метод исследования устойчивости нелинейных нормальных мод .	29
2.4	Расщепление вариационных систем для ННМ (2.15)-(2.19)	37
2.5	Анализ устойчивости $\pi$ -моды	40
2.6	Анализ устойчивости нелинейной нормальной моды $\phi_2$	45
2.7	Анализ устойчивости ННМ $\phi_3$	47
2.8	Анализ устойчивости мод $\phi_4$ и $\phi_5$	48
2.9	Асимптотическое поведение $A_c(N)$ при $N \to \infty$	49
Глава 3	Взаимодействия нелинейных нормальных мод в молекуле	
	$SF_6$ в рамках теории функционала плотности	51
3.1	Понятие о бушах нелинейных нормальных мод	51
3.2	Теоретико-групповой анализ нелинейных колебаний в $SF_6$	54
3.3	Исследование бушей нелинейных нормальных мод в молекуле	
	$SF_6$ с помощью теории функционала плотности	60
	3.3.1 Одномерный буш $B[O_h]$	61
	3.3.2 Двумерный буш $B[D_{4h}]$	62
	$3.3.3$ Трехмерный буш $B[C_{4v}]$	
	3.3.4 Нелинейность в динамике молекулы $SF_6$	67

		Cı	гр.	
Глава 4	. Буши нелинейных нормальных мод в графене		70	
4.1	Теоретико-групповой анализ		70	
4.2	Динамика бушей ННМ в монослое графена		75	
Глава 5	. Нелинейные нормальные моды в алмазе		79	
5.1	Группа симметрии алмаза и ее неприводимые представления		79	
5.2	HHM 1		80	
5.3	HHM 2		82	
5.4	Динамика решетки алмаза, соответствующая нелинейным			
	нормальным модам		84	
Заключение				
Список литературы				

#### Введение

### 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 микрокантилеверов, 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 *т* различных ННМ. Это число называется его *размерностью*. Если рассматриваемый буш ННМ является *устойчивым*, то его размерность *т* 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 HHM в кристаллах более реалистических методов исследования, таких как методы  $T\Phi\Pi$ , 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 теоретикогрупповых методов:

- 1. построены все возможные в монослое графена буши нелинейных нормальных мод низкой размерности, соответствующие точкам выделенной симметрии в зоне Бриллюэна;
- 2. построены симметрийно-обусловленные нелинейные нормальные моды в кристалле алмаза;
- 3. доказано, что в модели, описывающей одномерную нелинейную электрическую решётку, существует только 5 симметрийно-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, использующихся 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 СМОS-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 dyanmics (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.

## Объем и структура работы

Диссертация состоит из введения, пяти глав и заключения. Полный объем диссертации составляет 100 страниц, включая 22 рисунка и 5 таблиц. Список литературы содержит 115 наименований.

### Глава 1. Нелинейные колебания систем с дискретной симметрией

#### 1.1 Становление нелинейной динамики

Важной проблемой физики конденсированного состояния является исследование динамики кристаллических решеток твердых тел. Обычно речь идет об изучении такой динамики в гармоническом приближении, что позволяет использовать колебательные нормальные моды, квантование которых приводит к концепции фононов. Тем не менее, объяснение ряда эффектов: например, теплового расширения и теплового сопротивления — невозможно без принятия во внимание нелинейности атомных колебаний решетки [18]. При этом чаще всего рассматриваются малые ангармонизмы и, в квантово-механическом случае, строится теория возмущений для учета фонон-фононных взаимодействий. С другой стороны, значительный интерес представляет исследование различных видов существенно нелинейных атомных колебаний кристаллов, поскольку они оказывают влияние на свойства соответствующих материалов с кристаллической микроструктурой.

Различные нелинейные явления — объект исследования нелинейной динамики, которая выделилась в отдельное направление естествознания более полувека назад. Значительную роль в ее становлении сыграл знаменитый вычислительный эксперимент, проведенный в начале 50-х годов прошлого века Э. Ферми, Дж. Паста, С. Уламом и М. Цингу [19] в США на одной из первых в мире ЭВМ: MANIAC I. Авторы хотели изучить эволюцию кристалла в сторону теплового равновесия на модели одномерного нелинейного кристалла, в узлах которого находятся частицы единичной массы, взаимодействующие только с ближайшими соседями, а в потенциальной энергии, помимо квадратичных, присутствуют малые слагаемые либо третьей (FPU- $\alpha$ ), либо четвертой (FPU- $\beta$ ) степени. Так, цепочка FPU- $\alpha$  описывается гамильтонианом следующего вида:

$$H = \sum_{i=0}^{N} \frac{1}{2} p_i^2 + \sum_{i=0}^{N} \frac{1}{2} (u_{i+1} - u_i)^2 + \frac{\alpha}{3} \sum_{i=0}^{N} (u_{i+1} - u_i)^3,$$
 (1.1)

где  $u_i$  — смещение атома под номером i вдоль цепочки из положения равновесия, а  $p_i$  — его импульс. Жесткость гармонической пружины и постоянную решетки

можно положить равными единице без потери общности рассмотрения. Величина коэффициента  $\alpha \ll 1$  определяет силу нелинейности. Граничные условия в оригинальном исследовании FPU полагались фиксированными, т. е.  $u_0 = u_{N+1} = 0$ .

Можно воспользоваться распространенным подходом и перейти, как это часто делают, к переменным  $A_k$ , соответствующим *нормальным модам*, с помощью следующей замены переменных:

$$A_k = \sqrt{\frac{2}{N+1}} \sum_{i=1}^{N} u_i \sin(ik\pi/(N+1)), \tag{1.2}$$

где частоты  $\omega_k^2 = 4 \sin^2(k\pi/2(N+1))$ . Тогда гамильтониан (1.1) можно записать в следующем виде:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{N} (\dot{A}_{k}^{2} + \omega^{2} A_{k}^{2}) + \frac{\alpha}{3} \sum_{k,l,m=1}^{N} c_{klm} A_{k} A_{l} A_{m} \omega_{k} \omega_{l} \omega_{m},$$
 (1.3)

где  $c_{klm}$  – некоторые коэффициенты.

Второе слагаемое гамильтониана (1.3) в линейном случае отсутствует, поэтому в гармоническом приближении нормальные моды независимы друг от друга: если в начальный момент времени возбудить некоторую моду, то начальное возбуждение будет оставаться в этой моде бесконечно долго, не передаваясь никаким другим. В случае же цепочки FPU- $\alpha$  наличие в потенциале нелинейных слагаемых приводит к возникновению связи между модами. Авторы оригинального исследования цепочки FPU- $\alpha$  [19] ожидали, что из-за связей между модами, обусловленных нелинейностью взаимодействия, возбуждение, переданное моде k=1 будет постепенно передаваться другим модам, пока не будет достигнуто равнораспределение энергии по всем модам. Однако результаты эксперимента продемонстрировали локализацию начального возбуждения в пределах исходной и нескольких ближайших к ней мод, а на больших временах интегрирования — практически полный возврат возбуждения в начальную моду. Это так называемое "явление возврата" [19; 20].

Эксперимент FPU не только привел впоследствии к концепции солитонов и открытию многих особенностей хаотических явлений, как будет обсуждено далее, но также благодаря ему возникло понятие численного эксперимента, что привело к революции в исследовании физических явлений и возникновению вычислительной физики. Отныне ЭВМ использовались не только для расчетов, невыполнимых вручную одним человеком, но также для проверки теоретических

гипотез, недоказуемых аналитически, и даже для предоставления теоретикам «экспериментальных» данных, которые ждут математического обоснования. Разумеется, численный эксперимент неизмеримо проще истинного физического, однако сегодня численное моделирование в физике твердого тела достигло такого уровня доверия, что иногда лабораторный эксперимент ставится под сомнение, если численный дает противоположные результаты. Сегодня вычислительная физика представляет собой устоявшуюся дисциплину, рассматриваемую, в некотором роде, как отдельную от теоретической и экспериментальной.

Стоит подчеркнуть, что значительная часть настоящей диссертационной работы заключалась именно в проведении экспериментов указанного выше типа и анализе их результатов.

Можно выделить две основные линии рассуждений, следуя которым исследователи пытались разрешить парадокс FPU. С одной стороны, такие люди, как Дж. Форд [21], сконцентрировались на рассмотрении динамики мод для поиска нерезонансных условий, которые могли бы объяснить неэффективность передачи энергии между ними. Качественные объяснения явления возврата были получены благодаря теореме, доказанной Колмогоровым [22], а затем обобщенной Мозером [23] и Арнольдом [24] (теорема КАМ), которая утверждает, что большинство фазовых траекторий слабо возмущенных полностью интегрируемых гамильтоновых систем остаются квазипериодическими. Однако это не давало количественного объяснения и, более того, замечательный результат был получен Израилевым и Чириковым [25], следовавшим теории КАМ: если возмущение (нелинейность) достаточно велико, чтобы нелинейные резонансы «перекрывались», то явление возврата FPU разрушается и можно наблюдать быструю сходимость к тепловому равновесию. Это предсказание было проверено численно, и в настоящее время лежит в основе термина «порог сильной стохастичности» [26].

Другая линия рассуждений, которая шла к так называемому континуальному пределу (длина цепочки стремится к бесконечности, а расстояние между частицами – к нулю), привела к решению парадокса FPU Н. Забуски и М. Крускаллом [27] в терминах динамики солитонов [28]. Рассматривая уравнения движения цепочки FPU-α, полученные из гамильтониана (1.1):

$$\ddot{u}_i = (u_{i+1} + u_{i-1} - 2u_i) + \alpha [(u_{i+1} - u_i)^2 - (u_i - u_{i-1})^2], \tag{1.4}$$

и ограничившись рассмотрением длинноволновых мод, они смогли вывести предложенное для описания уединенных волн (солитонов) на мелкой воде уравнение Кортевега-де Фриза [29]:

$$y_{\tau} + \frac{1}{24} y_{\xi\xi\xi} + \alpha y y_{\xi} = 0, \tag{1.5}$$

где y представляет собой пространственную производную поля смещений  $u_i$ , а  $\tau$  – время и  $y_x = \frac{\partial y}{\partial x}$  после соответствующего масштабирования.

Оказалось, что синусоидальное начальное условие для уравнения Кортевега-де Фриза, соответствующее самой длинноволновой моде колебаний оригинальной цепочки FPU-α, распадается на ряд солитонов, которые сохраняют свою форму и скорость и взаимодействуют друг с другом, не теряя собственной идентичности. При этом время от времени наблюдается почти полное восстановление начального условия в результате временного слияния всех возникших солитонов. Вот почему наблюдается явление возврата FPU.

Оригинальный отчет FPU [19], не опубликованный, был известен лишь немногим людям, в основном в США. Поэтому японские исследователи Н. Саито и Х. Хирота в 1964 провели работы, близкие к эксперименту FPU, не зная ничего о результатах, полученных в США десятью годами ранее. Они рассматривали ангармонические цепочки с квадратичным и кубическим потенциалом взаимодействия соседних частиц и фиксировали оба конца. Начальное возбуждение было несколько иным, поскольку все частицы находились в состоянии покоя, тогда как к первой частице была приложена постоянная сила [30; 31]. Впоследствии они рассмотрели более простые начальные условия в цепочке FPU и обнаружили явление индукции и возникновение случайного характера колебаний решетки [32—34].

Значительный вклад в исследование динамики нелинейных цепочек внес также японский исследователь М.Тода, которому принадлежит открытие *полностью интегрируемой* цепочки [35; 36], названной впоследствии его именем. Отметим, что согласно недавним работам [37; 38], в модели FPU на сверхбольших временах достигается термализация, в то время как в модели цепочки Тоды достижение такой термализации невозможно.

С исследованием парадокса FPU связано также открытие таких динамических объектов как q-бризеры [39], которые, в отличие от локализованных в обычном пространстве бризеров (см. следующий раздел), представляют собой

экспоненциально локализованные в *модальном* пространстве точные решения уравнений движения.

Другим немаловажным направлением развития нелинейной динамики является теория хаоса, к которой имеет непосредственное отношение упоминавшаяся выше теория КАМ. Последняя дает описание прогрессирующего перехода к хаосу: для любой линейной системы все траектории являются регулярными, квазипериодическими. После введения небольшого нелинейного возмущения по-прежнему существует вероятность того, что будет наблюдаться квазипериодическое поведение (относительно произвольно выбранной в качестве начальных условий точки в фазовом пространстве). По мере увеличения этого возмущения, вероятность квазипериодического поведения уменьшается и все возрастающая доля траекторий становится хаотичной до тех пор, пока не будет достигнуто совершенно хаотическое поведение. Несмотря на некоторые универсальные характеристики, решения систем нелинейных дифференциальных уравнений обычно достаточно индивидуальные и своеобразные. В отличие от регулярных кривых для линейных уравнений, графическое представление решений нелинейных уравнений может демонстрировать разрывы, петли, рекурсии и т.д. При этом даже бесконечно малое воздействие в некоторых точках фазового пространства может иметь непропорционально большое воздействие на динамическую эволюцию системы.

"Официальным" первооткрывателем теории хаоса принято считать исследователя Э. Лоренца из США. Он сделал свое открытие случайно при исследовании диссипативной системы трех нелинейных дифференциальных уравнений первого порядка, названной позже "Система Лоренца", которая была предложена им для некоторых метеорологических задач, связанных с предсказанием погоды [40]. Эта динамическая модель используется также при исследовании, например, конвекции в слое жидкости [40], работы одномодового лазера [41; 42] конвекции в кольцевой трубке [43] и в модели диссипативного осциллятора с инерционной нелинейностью [44]. Система Лоренца продемонстрировала неожиданное для исследователей того времени явление чувствительности динамики системы к начальным условиям: даже малое отклонение начальных условий приводило к существенному изменению фазовой траектории (показательно в этом смысле название доклада Э. Лоренца на одной из конференций: "Прогнозируемость: породит ли взмах крыла бабочки в

Бразилии торнадо в Техасе?" [45]). Сам термин "теория хаоса" был введен позже Т.-Й. Ли и Дж. Йорком в 1975 году [46].

Другое открытие, связанное с системой Лоренца — это странные аттракторы [47; 48]. Аттрактором называется компактное притягивающее множество точек в фазовом пространстве, то есть такое множество, все траектории из некоторой окрестности которого стремятся к нему при времени, стремящемся к бесконечности. До открытия системы Лоренца были известны три типа аттракторов: точка, предельный цикл и предельный тор. Отличие странных аттракторов от перечисленных типов принципиальное: они не являются ни кривой, ни поверхностью и имеют сложную фрактальную структуру; траектории, лежащие на странных аттракторах, не замыкаются.

Еще одна широко известная динамическая система, допускающая хаотическое поведение и существование странных аттракторов, была предложена немецким физиком О. Ресслером в 1976 году [49]. Эта система также представляет собой систему трех нелинейных дифференциальных уравнений первого порядка и примечательна тем, что имеет еще более простой вид, чем система Лоренца. В связи с этим упомянем работу исследователя из Ростова-на-Дону Д. Рябова [50], в которой были найдены все возможные трехмерные системы с квадратичными нелинейностями, допускающие хаотическое поведение и инвариантные относительно действия одной из 32 точечных кристаллографических групп симметрии. Динамическая система с точечной группой симметрии  $D_2$  оказалась еще более простой и элегантной, нежели даже система Ресслера.

В завершение настоящего подраздела упомянем такое направление нелинейной науки, как синергетика, которое занимается изучением явлений самоорганизации в открытых нелинейных системах, далеких от состояния термодинамического равновесия. Возникновение и становление этого направления обычно связывают с именами Г. Хакена, который и является автором термина "синергетика" [41], а также И. Пригожина, автора теории диссипативных структур [51]. Явления самоорганизации играют исключительно важную роль во многих областях науки. В частности, любой живой организм есть ничто иное как диссипативная структура Пригожина.

Предметом исследования настоящей диссертационной работы являются различные нелинейные системы с дискретной симметрией, поэтому остановимся подробнее на нелинейных колебаниях таких систем и методах исследования.

### 1.2 Дискретные бризеры

Дискретные бризеры (ДБ) представляют собой колебания гамильтоновых решеток, *покализованные* в пространстве и периодические во времени. В литературе эти динамические объекты также называют внутренними локализованными модами (intrinsic localized modes) и дискретными солитонами.

История ДБ берет свое начало в работе А.А. Овчинникова [52], где была продемонстрирована возможность существования долгоживущих локализованных решений в модели двух связанных осцилляторов в классическом и квантовом случае. Изучению локализованных колебаний в дискретных моделях посвящена также статья 1986 года А.С. Долгова [53]. Однако отправной точкой возникновения теории ДБ принято считать работу А. Сиверса и С. Такено [54], которая послужила толчком для поиска строгого математического обоснования возможности существования дискретных бризеров как точных решений нелинейных уравнений, описывающих динамику гамильтоновых решеток. Такое доказательство было получено С. Обри и Р. Маккаем в работе [55] для случая цепочки слабо связанных нелинейных осцилляторов. Первые работы по ДБ были ограничены анализом одномерных цепочек частиц, взаимодействующих с ближайшими соседями посредством простых нелинейных потенциалов [53—56]. Примерно спустя десятилетие после теоретического предсказания ДБ, эти динамические объекты были экспериментально обнаружены в ряде различных физических систем: цепочки контактов Джозефсона [57], массивы оптических волноводов [58], массивы механических микрокантилеверов [59], массивы наноэлектромеханических челноков [60; 61], периодические электрически цепи [62; 63], конденсаты Бозе-Эйнштейна [64], антиферромагнитные цепочки [65], гранулированные кристаллы [66] и т.д.

Поскольку кристаллы также представляют собой дискретные нелинейные системы, исследование ДБ в них и возможного их влияния на свойства кристаллических материалов привлекли внимание многих исследователей. Микроскопические размеры этих динамических объектов в кристаллах сильно затрудняют их непосредственное экспериментальное исследование. Однако возможность существования ДБ в кристаллах была показана с помощью методов молекулярной динамики, основанных на использовании разных феноменологических потенциалов межчастичного взаимодействия [12]. В качестве примера укажем работы,

посвященные компьютерному моделированию ДБ в кристаллах NaI [67], в кристаллах структуры типа NaCl [68; 69], в кристаллах Si и Ge [70],  $Pt_3Al$  [71; 72] и двумерном кристалле графана (полностью гидрогенезированный графен) [73; 74]. Начиная с работы [75], где были исследованы движущиеся бризеры в ГЦК-решетке Ni и в ОЦК решетке Nb, ДБ такого типа широко изучаются в чистых металлах [76—79].

Дискретные бризеры могут влиять на свойства кристаллических материалов и происходящие в них процессы. В качестве примера можно упомянуть возможный вклад ДБ в теплоемкость кристаллов [80] и возможное влияние движущихся бризеров на процессы теплопроводности и перенос электрического заряда [81]. Поэтому интерес исследователей к локализованным нелинейным колебаниям в кристаллах остается на неизменно высоком уровне, а число работ, посвященных исследованию ДБ в кристаллах, неуклонно растет (см., например, обзор [82]),

Отметим отдельно симметрийно-обусловленные дискретные бризеры. Так, в одномерной цепочке связанных осцилляторов можно выделить два типа ло-кализованных нелинейных мод: симметричная (мода Сиверса-Такено) и антисимметричная (мода Пейджа). Существенным отличием этих мод друг от друга является то, что центр симметричного дискретного бризера находится на одном из узлов цепочки, тогда как центр антисимметричного — между двумя узлами. В двумерных же и трехмерных решетках существует гораздо больше типов симметрийно-обусловленных ДБ: в работе [83] сотрудников лаборатории нелинейной кристаллофизики НИИ физики ЮФУ для изучения локализованных колебаний в таких решетках был развит теоретико-групповой подход, используя который можно найти симметрийно-обусловленные инвариантные многообразия, допускающие локализацию возбуждений, что значительно облегчает поиск профилей начальных смещений дискретных бризеров.

### 1.3 Нелинейные нормальные моды и их буши

Наличие дискретной симметрии у нелинейных динамических систем позволяет значительно облегчить анализ также и *делокализованных* динамических

объектов, таких как нелинейные нормальные моды (ННМ) и их буши (от английского "bush" – куст). Концепция бушей нелинейных нормальных мод была разработана в Ростове-на-Дону Г.М. Чечиным и В.П. Сахненко в 90-е годы прошлого века [1; 2; 84] и далее успешно развивалась сотрудниками лаборатории нелинейной кристаллофизики ЮФУ, а также привлекла внимание зарубежных исследователей [11]. В ряде работ "ростовской группы" теоретически была показана возможность существования бушей ННМ в различных системах, среди которых отметим цепочки FPU [5; 6], молекулы [7] и графен [8]. 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. Такая процедура осуществлялась с помощью наложения на ННМ некоторой колоколообразной функции, которая приводит к пространственной локализации колебаний.

Буши колебательных ННМ представляют собой некоторые точные решения динамических уравнений гамильтоновых систем с дискретной симметрией. Каждый буш соответствуют определенной подгруппе  $G_i \subseteq G_0$  группы симметрии  $G_0$  рассматриваемой системы в состоянии равновесия. Все возможные в данной системе буши ННМ могут быть найдены с помощью специфических теоретико-групповых методов [1—3], независимо от конкретного типа межчастичных взаимодействий в физической системе. Каждый буш представляет собой набор из некоторого числа m различных HHM. Это число называется его pasмерностью. 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. Как показывают вычислительные эксперименты, буши мод (и в том числе симметрийно-обусловленные ННМ) являются устойчивыми не при любых амплитудах колебаний. При достижении некоторой критической амплитуды HHM может потерять устойчивость. Исследованию устойчивости в нелинейных цепочках только одной из возможных HHM – так называемой  $\pi$ -моды – посвящено большое число работ разных авторов [85—90].

Теория бушей мод берет свое начало от теории полного конденсата параметра порядка [9], которая была создана при изучении структурных фазовых переходов в рамках феноменологической теории Ландау. Теоретико-групповые результаты, полученные в теории полного конденсата параметра порядка, позволяют 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, и оно было проведено ранее [9—11]. 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. Для проведения таких исследований можно применить как подход, основанный на использовании феноменологических потенциалов межчастичного взаимодействия, так и расчеты, базирующиеся на методах теории функционала плотности (ТФП). Поскольку в настоящей диссертационной работе моделирование атомных колебаний проводится именно в рамках ТФП, остановимся на этой теории подробнее.

# 1.4 Метод функционала плотности

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 теории функционала плотности [13]. В рамках этой теории были разработаны эффективные и достаточно точные численные методы расчета многоэлектронных молекулярных и кристаллических структур.

В основе теории функционала плотности лежит многочастичное уравнение Шредингера, основополагающее уравнение квантовой механики. Это уравнение поддается аналитическому решению лишь в исключительно простых, весьма немногочисленных, случаях. Поэтому при квантово-механическом рассмотрении динамики молекул и кристаллов приходится использовать различные приближения. Одним из наиболее распространенных приближений является приближение Борна-Оппенгеймера [91], согласно которому можно разделить движение электронной и ионной подсистем: электроны, будучи на несколько порядков легче ядер, мгновенно подстраиваются под изменения их положений. Таким образом, задача сводится к рассмотрению системы взаимодействующих электронов в электрическом поле, создаваемом ионами. Гамильтониан такой системы можно записать в виде:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i} \nabla_i^2 + \sum_{i} v_{ext}(r_i) + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{e^2}{|r_i - r_j|},$$
(1.6)

где m — масса электрона, e - его заряд, а  $r_i$  — координаты i-го электрона в трехмерном пространстве и ext — внешнее поле ионов. Первое слагаемое в выражении (1.6) соответствует кинетической энергии электронов, второе описывает энергию электронов во внешнем поле, а третье отвечает за взаимодействие электронов между собой. Многочастичное стационарное уравнение Шредингера для рассматриваемой системы можно записать в виде задачи на собственные векторы и собственные значения оператора Гамильтона (1.6):

$$\hat{H}\Psi(r_1, r_2, ..., r_N) = E\Psi(r_1, r_2, ..., r_N), \tag{1.7}$$

где N — общее число электронов в системе, а собственные значения  $E=E_0,E_1,E_2,...$  представляют собой значения энергии, соответствующие стационарным состояниям системы электронов и  $\Psi(r_1,r_2,...,r_N)$  — волновая функция, зависящая от координат всех электронов. Нахождение аналитического вида этой функции представляется невозможным.

В начале 60-х годов прошлого века П. Хоэнберг и В. Кон разработали подход, в рамках которого считается, что волновая функция находящейся во внешнем

поле многоэлектронной системы, зависящая, в общем случае, от большого числа переменных, может быть выражена через электронную плотность системы n(r) — функции всего лишь трех переменных. Также они предположили, что существует некоторый функционал E(n(r)), зависящий от электронной плотности, такой, что его минимальное значение представляет собой энергию основного состояния системы, а соответствующая этому минимуму электронная плотность  $n(r) = n(r_0)$  суть электронная плотность системы в основном состоянии. Этот функционал можно записать в виде:

$$E(n(r)) = T(n(r)) + E_{int}(n(r)) + \int \mathbf{v}_{ext}(r)n(r)dr, \qquad (1.8)$$

где T — кинетическая энергия системы,  $E_{int}$  — энергия взаимодействия электронов между собой, а третье слагаемое описывает энергию электронов во внешнем поле, для которой точное аналитическое выражение неизвестно. Поэтому П. Хоэнберг и В. Кон предложили подход, согласно которому точная электронная плотность основного состояния может быть заменена на плотность некоторой вспомогательной системы свободных электронов, каждый из которых движется в эффективном одночастичном потенциале:

$$v = v_{ext} + v_H, (1.9)$$

где  $v_{ext}$  – потенциал внешнего поля ионов, а  $v_H = \int \frac{n(r')}{|r-r'|} dr'$  – потенциал, который получается в предположении, что каждый электрон движется в самосогласованном поле, создаваемом всеми электронами системы с некоторой плотностью n(r). Этот потенциал принято называть потенциалом Хартри, и он играет основополагающую роль в методах самосогласованного поля, таких как метод Хартри-Фока. Таким образом, функционал (1.8) можно переписать в виде:

$$E(n(r)) = T_S + V_H + V_{ext} + (T - T_S + U - V_H), \tag{1.10}$$

где T и U представляют собой соответственно кинетическую и потенциальную энергию рассматриваемой системы электронов,  $V_{ext}$  — энергию электронов во внешнем поле, а  $T_S$  и  $V_H$  — соответственно кинетическая и потенциальная энергии вспомогательной системы свободных электронов. Таким образом, последнее слагаемое  $V_{xc} = (T - T_S + U - V_H)$  представляет собой разность кинетических и потенциальных энергий рассматриваемой и вспомогательной системы электронов. Функционал  $V_{xc}$  (вид которого неизвестен) описывает все те взаимодействия в системе, которые выходят за рамки теории самосогласованного поля, и его принято называть обменно-корреляционным.

Варьируя выражение (1.10) по электронной плотности n(r), можно получить уравнения Кона-Шэма:

$$-\frac{1}{2}\nabla^2\Psi_i(r) + v_{KS}\Psi_i(r) = \varepsilon_i\Psi_i(r), \qquad (1.11)$$

где  $\Psi_i(r)$  – одночастичные волновые функции электронов вспомогательной системы (ясно, что  $n(r) = \sum_1^N \int |\Psi_i(r)|^2 dr$ ), а  $v_{KS}$  – потенциал Кона-Шэма, который можно записать в виде:

$$v_{KS}(r) = v_{ext}(r) + v_H(r) + v_{xc}(r),$$
 (1.12)

где

$$v_{xc} = \frac{\delta V_{xc}}{\delta n(r)} \tag{1.13}$$

называется обменно-корелляционным потенциалом, найти для которого точное выражение не представляется возможным.

Однако для  $v_{xc}$  можно найти удачные приближения. Одним из наиболее простых и наиболее распространенных является приближение локальной плотности (local density approximation — LDA), которое было использовано и в настоящей диссертационной работе при всех ТФП-расчетах. В рамках этого приближения истинная обменно-корелляционная энергия заменяется на таковую для однородного электронного газа. Тогда:

$$V_{xc}^{LDA} = \int v_{xc}(n(r))n(r)dr, \qquad (1.14)$$

где  $v_{xc}(n(r))$  представляет собой обменно-корелляционную энергия на одну частицу однородного электронного газа. Существует интерполяционная формула, позволяющая получить приближенное выражение для такой обменно-корелляционной энергии, справедливое при любой плотности.

Уравнения Кона-Шэма решаются стандартным методом самосогласованного поля, на каждом шаге которого решение системы (1.11) находится с помощью разложения волновых функций по некоторому базису, что позволяет свести исходную систему интегро-дифференциальных уравнений к системе нелинейных алгебраических уравнений относительно коэффициентов разложения волновых функций по выбранному базису. Моделирование динамики атомов в рамках ТФП производится следующим образом: на каждом временном шаге путем решения уравнений Кона-Шэма находится электронная плотность n(r), что позволяет рассчитать для атомов исследуемой системы действующие на них кулоновские силы

и записать классические уравнения Ньютона. Затем производится один шаг по времени с помощью традиционных методов молекулярной динамики и вычисляются новые положения атомов системы. Для этих новых положений снова находится электронная плотность n(r), после чего производится следующий шаг по времени и т.д.

Расчеты, основанные на теории функционала плотности, требуют достаточно большого времени и существенных вычислительных ресурсов, поэтому значительно уступают по частоте применения молекулярно-динамическим расчетам, основанным на использовании феноменологических потенциалов, при исследовании нелинейных колебаний кристаллических решеток. Однако важным отличием ТФП-методов от традиционных методов молекулярной динамики является автоматический учет поляризации электронных оболочек атомов при описании их колебаний, что оказывается существенным при рассмотрении ангармонических колебаний. Так, ТФП-методы использовались для моделирования дискретных бризеров в графане [92; 93], при этом было обнаружено существенное различие между амплитудно-частотными характеристиками ДБ, рассчитанными с использованием теории функционала плотности и с использованием феноменологических потенциалов.

ТФП-моделирование же делокализованных нелинейных колебаний в кристаллах, насколько нам известно, впервые осуществлено в настоящей диссертационной работе.

Глава 2. Симметрийно-обусловленные нелинейные нормальные моды Розенберга в LC-цепочке

#### 2.1 LС-модель

Рассмотрим электрическую цепочку, состоящую из нелинейных конденсаторов  $C_j$  (их емкости зависят от напряжений на обкладках  $V_j$ ), соединенных между собой линейными индуктивностями  $L_j$  (Рис. 2.1). Подобные конденсаторы были реализованы некоторыми экспериментальными группами [94—96], исследовавшими свойства различных электрических сигналов в линиях, выполненных на твердотельных подложках с помощью MOS и CMOS технологий. Вслед за теоретической работой [97], в настоящей диссертации была использована следующая форма функции C(V):

$$C(V) = C_0(1 - bV^2), (2.1)$$

где  $C_0$  и b — положительные константы.

Применяя законы Кирхгофа для квазистационарного тока к цепи на Рис. 2.1, можно получить следующие уравнения:

$$L_j \frac{dI_j}{dt} = V_j - V_{j+1}, \frac{dQ(V_j)}{dt} = I_{j-1} - I_j.$$
 (2.2)

Здесь  $Q(V_j)$  – заряд на j-том конденсаторе,  $V_j$  – напряжение на его обкладках, а  $I_j$  – ток через индуктивность  $L_j$ . Принимая во внимание, что  $I_j = \dot{Q}_j$  и  $Q_j(t) = \int_0^{V_j} C(V) dV = C_0 V_j (1 - \frac{b}{3} V_j^2)$ , можно свести систему дифференциальных уравнений первого порядка для токов и напряжений (2.2) к системе второго порядка для одних только напряжений:

$$\ddot{V}_j(1 - bV_j^2) - 2bV_j(V_j)^2 = \gamma(V_{j-1} - 2V_j + V_{j+1}), \tag{2.3}$$

где  $\gamma=1/(L_0C_0)$  (здесь и далее все индуктивности полагаются одинаковыми по величине:  $L_j=L_0(j=1,2,\ldots,N)$ ). Соответствующее масштабирование переменных уравнения (2.3) позволяет положить константы b и  $\gamma$  равными единице. В итоге, принимая во внимание периодические граничные (см. Рис. 2.1) условия, получим следующую LC-модель:

$$\ddot{V}_j(1 - bV_j^2) - 2bV_j(V_j)^2 = \gamma(V_{j-1} - 2V_j + V_{j+1}),$$

$$V_0(t) \equiv V_N(t), V_{N+1}(t) \equiv V_1(t)$$
(2.4)

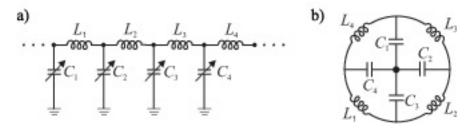


Рисунок 2.1 — Цепочка из 4-х нелинейных конденсаторов, соединенных линейными индуктивностями

### 2.2 Симметрийно-обусловленные нелинейные нормальные моды Розенберга

Концепция нелинейных нормальных мод (ННМ) была предложена Розенбрегом в 1962 году [4] (больше информации об этих динамических объектах можно найти в книге [98]). В динамическом режиме, соответствующем некоторой ННМ, колебания всех динамических переменных описываются одной и той же временной функцией f(t). Для рассматриваемой электрической модели (2.4) это значит, что все напряжения  $V_j(t)$  удовлетворяют соотношению:

$$V_j(t) = c_j * f(t), j = 1..N.$$
 (2.5)

Здесь  $c_j$  — некоторые константы. (Заметим, что линейные нормальные моды также удовлетворяют определению (2.5), если положить функцию f(t) равной  $\sin \omega t + \varphi_0$ , где  $\omega$  и  $\varphi_0$  представляют собой соответственно частоту и начальную фазу).

В общем случае нелинейные нормальные моды Розенберга могут существовать только в системах весьма специфических классов, например, таких, у которых потенциальная энергия является однородной функцией всех ее аргументов. Тем не менее, в системах с произвольным типом межчастичных взаимодействий существование ННМ может быть обеспечено наличием у них некоторой группы дискретной симметрии [2; 5; 6; 11; 99]. Здесь и далее такие моды будут называться симметрийно-обусловленными нелинейными нормальными модами или просто ННМ, ибо в настоящей диссертационной работе рассматриваются моды лишь этого типа. Важно заметить, что для большинства систем с дискретной симметрией обычно существует весьма небольшое число симметрийно-обусловленных ННМ.

Так, в работе [6] было установлено, что в цепочке FPU-β можно возбудить лишь 5 мод этого типа.

Каждая ННМ описывает колебательный режим с некоторой трансляционной симметрией, определяемой сдвигом на na. Здесь a — размер ячейки в состоянии равновесия, а n может быть равно 2, 3, 4 или 6 в зависимости от типа рассматриваемой моды [см. выражения (2.15)—(2.19) ниже]. Такой сдвиг не меняет распределение напряжений среди конденсаторов, так что можно говорить об элементарной ячейке (na) цепочки в колебательном состоянии.

Все возможные динамические режимы в физической системе, описываемой группой дискретной симметрии  $G_0$  (это значит, что динамические уравнения системы инвариантны относительно преобразований группы  $G_0$ ), могут быть классифицированы по подгруппам группы  $G_0$ . Легко проверить, что уравнения (2.4) инвариантны относительно действия элементов группы  $G_0$ , которая изоморфна группе симметрии  $D_n$  цепочки FPU- $\beta$ . Эта группа может быть описана некоторым набором генераторов, то есть элементов, все возможные произведения которых порождают все элементы группы. Эти генераторы определяются их действием на вектор

$$\mathbf{V} = [V_1(t), V_2t, \dots, V_N(t)], \tag{2.6}$$

описывающий колебательное состояние электрической цепочки.

Преобразование трансляции  $\hat{a}$  порождает циклическую перестановку переменных  $V_j$  (напомним, что граничные условия полагаются периодическими):

$$\hat{a}\mathbf{V} = [V_2(t), V_3(t), \dots, V_N(t), V_1(t)]. \tag{2.7}$$

Преобразование  $\hat{i}$  порождает инверсию компонент вектора **V** по отношению к про- извольно выбранному "центру" цепочки:

$$\hat{i}\mathbf{V} = [V_N(t), V_{N-1}(t), \dots, V_2(t), V_1(t)]. \tag{2.8}$$

Наконец, преобразование  $\hat{u}$  изменяет знаки всех переменных  $V_j$  на противоположные без их перестановки:

$$\hat{u}\mathbf{V} = [-V_1(t), -V_2t, \dots, -V_N(t)]. \tag{2.9}$$

Легко проверить, что действие всех генераторов группы  $G_0$  (т.е.,  $\hat{a}, \hat{i}, \hat{u}$ ) преобразуют систему (2.4) саму в себя и, таким образом, они являются инвариантными преобразованиями рассматриваемой электрической цепочки.

Порядки генераторов  $\hat{a}, \hat{i}, \hat{u}$  равны N, 2, 2 соответственно, т.е.:

$$\hat{a}^N = \hat{e}, \hat{i}^2 = \hat{e}, \hat{u}^2 = \hat{e}, \tag{2.10}$$

где  $\hat{e}$  — единичный элемент группы  $G_0$  . Таким образом, группа  $G_0$  состоит из 4N элементов симметрии, представляющими все произведения представленных выше генераторов. Отметим, что группа  $G_0$  - неабелева (например,  $\hat{i}\hat{a}\neq\hat{a}\hat{i}$ ).

Каждая подгруппа  $G_j(j \neq 0)$  группы  $G_0$  определяет специфический динамический режим, который может иметь место в модели (2.4). Такая подгруппа  $G_j$  здесь называтся группой симметрии соответствующего динамического режима поскольку вектор  $\mathbf{V}(t)$ , описывающий этот режим, инвариантен относительно действия всех элементов  $G_j$ .

Рассмотрим подгруппу  $G_j \subset G_0$ , состоящую из единичного элемента  $\hat{e}$  и преобразования  $\hat{a}^2$  для электрической цепочки из N=6 ячеек. Будем искать динамический режим  ${\bf V}$  который инвариантен относительно действия этой подгруппы:

$$\hat{a}^2 \mathbf{V} = \mathbf{V}.\tag{2.11}$$

Принимая во внимание, что:

$$\hat{a}^2 \mathbf{V} = [V_3, V_4, V_5, V_6, V_1, V_2], \tag{2.12}$$

можно получить следующие соотношения:

$$V_3 = V_1, V_4 = V_2, V_5 = V_3, V_6 = V_4, V_1 = V_5, V_2 = V_6.$$
 (2.13)

Таким образом, шестимерный вектор **V** определен только двумя независимыми переменными  $V_1(t)$  и  $V_2(t)$ :

$$\mathbf{V} = [V_1, V_2 | V_1, V_2 | V_1, V_2]. \tag{2.14}$$

Таким образом, получаем *двухпараметрический квазипериодический динамический режим* (2.14): в спектре Фурье такого типа колебаний будут две базисные частоты и их целочисленные комбинации.

Данная глава настоящей диссертационной работы посвящена исследованию *однопараметрических* симметрийно-обусловленных динамических режимов (только одна базисная частота присутствует в их Фурье-спектре), которые представляют собой нелинейные нормальные моды Розенберга.

Задача о нахождения всех однопараметрических симметрийнообусловленных динамических режимов в моноатомной цепочке может быть решена с помощью теоретико-групповых методов, которые описаны в деталях в [6] (отметим, что похожая задача для всех периодических структур, описываемых любой из 230 пространственных групп, была решена в работе [11]).

Ниже приведены только окончательные результаты выбора всех ННМ, определенных по симметрии, которые возможны в цепочках (2.4) для различного числа N электрических ячеек.

Было установлено, что в рассматриваемых LC-цепочках могут существовать только пять типов таких HHM. Подчеркнем, что этот результат не зависит от конкретной структуры уравнений (2.4), а следует лишь из группы симметрии рассматриваемой решеточной модели.

Ниже приведены все симметрийно-обусловленные ННМ для модели (2.4).

$$G_1 = [\hat{a}^2, \hat{\imath}\hat{u}] : \mathbf{\phi}_1 = V(t)[1, -1|1, -1|1, -1|...|1, -1](\pi$$
-мода). (2.15)

$$G_2 = [\hat{a}^4, \hat{\imath}\hat{u}] : \mathbf{\varphi}_2 = V(t)[1, 1, -1, -1|1, 1, -1, -1|\dots]. \tag{2.16}$$

$$G_3 = [\hat{a}^4, \hat{a}\hat{i}] : \mathbf{\varphi}_3 = V(t)[1, 0, -1, 0|1, 0, -1, 0|...].$$
(2.17)

$$G_4 = [\hat{a}^3, \hat{i}\hat{u}] : \mathbf{\varphi}_4 = V(t)[1, 0, -1|1, 0, -1|...]. \tag{2.18}$$

$$G_5 = [\hat{a}^3 \hat{u}, \hat{a} \hat{i} \hat{u}] : \mathbf{\varphi}_5 = V(t)[1, 1, 0, -1, -1, 0 | 1, 1, 0, -1, -1, 0 | \dots]. \tag{2.19}$$

Прокомментируем обозначения использованные в (2.15)-(2.19). Каждая подгруппа  $C_j \subset G_0$  (j=1..5) определена двумя генераторами, которые показаны в квадратных скобках. Например, генераторы  $\hat{a}^2$  и  $\hat{\imath}\hat{u}$  соответствуют подгруппе  $G_1 = [\hat{a}^2, \hat{\imath}\hat{u}]$ . Действие  $\hat{a}^2$  на вектор  $\mathbf{V}(t)$  для цепочки с N=6 было показано в уравнении (2.12), в то время как второй генератор,  $\hat{\imath}\hat{u}$  действует на этот вектор следующим образом:

$$\hat{\imath}\hat{u}\mathbf{V} = [-V_6(t), -V_5(t), -V_4(t), -V_3(t), -V_2(t), -V_1(t)]. \tag{2.20}$$

Требование инвариантности вектора V(t) относительно действия  $\hat{a}^2$ , приводит к динамическому режиму (2.14). Наличие второго генератора ( $\hat{\imath}\hat{u}$ ) в подгруппе  $G_1$  дает дополнительное соотношение между переменными  $V_1(t), V_2(t)$ :

$$V_2(t) = -V_1(t). (2.21)$$

Таким образом, найден однопараметрический режим, для которого в любой момент времени напряжения на двух соседних конденсаторах одинаковы по

величине и противоположны по знаку — это так называемая  $\pi$ -моду (2.15). Отметим, что в уравнениях (2.15)-(2.19) вертикальными черточками разделены различные ячейки *колебательного состояния* электрической цепочки. В обоих случаях, (2.14) и (2.15), эта ячейка в два раза больше, чем в состоянии равновесия и состоит из двух конденсаторов.

Колебательные ячейки, состоящие из четырех соседних конденсаторов, соответствуют модам (2.16) и (2.17), а модам (2.18) и (2.19) соответствуют колебательные ячейки из трех и шести конденсаторов соответственно.

Важно отметить, что моды с бОльшим размером колебательной ячейки не могут существовать в рассматриваемой электрической цепочке. Действительно, если попытаться построить динамический режим такого типа, он окажется квазипериодическим из-за зависимости от более чем одной независимой переменной (он представляет собой буш нелинейных нормальных мод с размерностью m>1)

После подстановки выражений (2.15)-(2.19) в динамические уравнения (2.4) они сведутся к одному независимому уравнению относительно переменной V(t):

$$\ddot{V}(t)[1 - V^2(t)] - 2V(t)[\dot{V}(t)]^2 + \mu V(t) = 0, \tag{2.22}$$

где следующие значения параметра  $\mu$  соответствуют HHM, определяемым выражениями (2.15)-(2.19):

$$G_{1} = [\hat{a}^{2}, \hat{\imath}\hat{u}] : \mu = 4,$$

$$G_{2} = [\hat{a}^{4}, \hat{\imath}\hat{u}] : \mu = 2,$$

$$G_{3} = [\hat{a}^{4}, \hat{a}\hat{\imath}] : \mu = 2,$$

$$G_{4} = [\hat{a}^{3}, \hat{\imath}\hat{u}] : \mu = 3,$$

$$G_{5} = [\hat{a}^{3}\hat{u}, \hat{a}\hat{\imath}\hat{u}] : \mu = 1.$$

Уравнение (2.22) будем называть *ведущим* для соответствующей нелинейной нормальной моды.

### 2.3 Метод исследования устойчивости нелинейных нормальных мод

Любая ННМ представляет собой периодический динамический режим, поэтому для исследования ее устойчивости можно применить стандартный метод Флоке. При использовании этого метода производится линеаризация исходной системы нелинейных дифференциальных уравнений вблизи рассматриваемой моды и, как результат, получатся так называемая вариационная система. Это система N дифференциальных уравнений второго порядка с зависящими от времени периодическими коэффициентами, период T которых равен периоду данной ННМ. Затем эта система сводится к системе F из 2N дифференциальных уравнений первого порядка, для которой строится матрица монодромии. Столбцы этой матрицы могут быть получены путем интегрирования системы F на период T с использованием столбцов  $2N \times 2N$  единичной матрицы в качестве соответствующих начальных условий.

Как уже было отмечено, вышеуказанная процедура Флоке очень сложна для случая  $N\gg 1$ , особенно когда  $N\to\infty$ . Для динамических систем с дискретными симметриями эти сложности часто могут быть преодолены с помощью теоретикогруппового метода, развитого в [100]. Ниже приведем краткий обзор этого метода.

Рассмотрим группу симметрии  $G_0$  динамической модели (2.4). Каждый элемент  $g \in G_0$  индуцирует некоторую перестановку переменных  $V_j$  (j=1..N), возможно, сопровождаемую изменением знаков некоторых из этих переменных. Отмечая, что  $\ddot{V}_j$  и  $\dot{V}_j$  преобразуются под действием элемента g так же, как и переменные  $V_j$ , заключаем, что этот элемент приводит к той же перестановке уравнений (2.4) с тем же изменением их знаков, что и множество  $V_j$  (j=1...N).

Очевидно, что произвольная выбранная перестановка переменных  $V_j$  может не принадлежать группе  $G_0$ . Например, если переставить только две переменные,  $V_2 \leftrightarrow V_3$ , без какой-либо перестановки других переменных, уравнения (2.4) существенно меняются. Действительно, уравнения 2 и 3 системы (2.4) имеют вид:

$$\ddot{V}_2(1 - V_2^2) - 2V_2(\dot{V}_2)^2 = (V_1 - 2V_2 + V_3),$$
  
$$\ddot{V}_3(1 - V_3^2) - 2V_3(\dot{V}_3)^2 = (V_2 - 2V_3 + V_4).$$

После описанной выше перестановки эти уравнения принимают следующую форму:

$$\ddot{V}_3(1 - V_3^2) - 2V_3(\dot{V}_3)^2 = (V_1 - 2V_3 + V_2),$$
  
$$\ddot{V}_2(1 - V_2^2) - 2V_2(\dot{V}_3)^2 = (V_3 - 2V_2 + V_4).$$

Поскольку уравнения 2 и 3 не переходят одно в другое как результат перестановки  $V_2 \leftrightarrow V_3$  (очевидно, их совпадение с любыми другими уравнениями (2.4) исключено), это преобразование не может принадлежать группе  $G_0$ .

В настоящей работе не обсуждаются методы нахождения группы симметрии  $G_0$  динамической модели (2.4) (один такой метод был развит в [6]). Отметим,

что все элементы симметрии равновесного состояния системы должны входить в группу  $G_0$ .

Рассмотрим динамический режим в рассматриваемой электрической цепочке (2.4), описываемой вектором  $\mathbf{V}(t) = [V_1(t), V_2(t), ... V_n(t)]$ . Действуя на этот вектор всеми элементами  $g \in G_0$ , можно выбрать только те, которые его не меняют, т.е. элементы, удовлетворяющие условию  $\hat{g}\mathbf{V} = \mathbf{V}$ . Полный набор таких элементов представляет подгруппу G группы  $G_0$ :  $G \subset G_0$ . Эта подгруппа является группой симметрии рассматриваемого динамического режима  $\mathbf{V}(t)$ .

Как уже говорилось выше, согласно теореме, доказанной в [100], вариационная система полученная линеаризацией нелинейных уравнений (2.4) в окрестности динамического режима V(t) инвариантна относительно указанной выше подгруппы  $G \subset G_0$ . Это значит, что некоторые элементы  $g \in G_0$ , которые сохраняют оригинальную систему (2.4), не сохраняют соответствующую вариационную систему.

Действие элемента симметрии  $g \in G$  на вектор  ${\bf V}$  можно заменить действием определенной матрицы размерности  $N \times N$ . Набор таких матриц сопоставлен со всеми элементами  $g \in G$ , действующими в N-мерном пространстве векторов состояния  ${\bf V}$ , является матричным представлением  $\Gamma$  группы G.

Условие того, что G является группой симметрии вариационной системы  $\ddot{\mathbf{\delta}} = J(t)\mathbf{\delta}$  (это форма вариационной системы для модели FPU- $\mathbf{\beta}$ ) приводит к условию коммутации матрицы J(t) со всеми матрицами представления  $\Gamma$  [100]. Этот факт позволяет применить хорошо известную теорему Вигнера, описывающую структуру матриц, коммутирующих со всеми матрицами *приводимого* представления данной конечной группы.

Утверждение теоремы Вигнера может быть пояснено следующим образом. Разложим приводимое представления  $\Gamma$  группы G на неприводимые представления (НП)  $\Gamma_i$  этой же группы:

$$\Gamma = \sum_{j}^{\oplus} m_{j} \Gamma_{j} \tag{2.23}$$

 $(m_j$  — неотрицательные целые числа). Такое разложение может быть выполнено подходящим преобразованием базиса N-мерного векторного пространства соответствующего  $\Gamma$  (несущее пространство). Тогда матрица J(t), коммутирующая со всеми матрицами  $\Gamma$ , принимает блочно-диагональную форму как результат вышеуказанного преобразования исходного базиса. Каждый блок  $D_j$  соответствует конкретному НП  $\Gamma_j$  и обладает размерностью равной  $n_j m_j$ , где  $n_j$  — размерность

 $\Gamma_j$ , в то время как  $m_j$  [см. выражение (2.23)] определяет сколько раз  $\Gamma_j$  входит в приводимое представление  $\Gamma$ . Более того, блок  $D_j$  представляет собой матрицу с весьма специфической структурой: она есть *прямое произведение* конкретной  $m_j$ -мерной матрицы и  $n_j$ -мерной единичной матрицы.

Как было показано в [100], эта структура матрицы J=J(t), полученная после преобразования базиса, порождаемого видом (2.23) представления  $\Gamma$ , приводит к расщеплению исходной вариационной системы  $\ddot{\delta}=J(t)\delta$  на ряд независимых подсистем, размерности которых могут быть значительно меньше, чем у исходной вариационной системы. А именно,  $n_j$  идентичных подсистем размерности  $m_j$  соответствуют каждому блоку  $D_j$  и, таким образом, НП  $\Gamma_j$ . Отметим, что числа  $m_j$ , входящие в выражение (2.23), могут быть найдены из теории представлений конечных групп [101] с помощью следующей формулы

$$m_i = \frac{1}{\|G\|} \sum_{g \in G} \chi_{\Gamma}(g) \bar{\chi}_{\Gamma_i}(g). \tag{2.24}$$

Здесь,  $\|G\|$  – порядок группы G (число ее элементов), тогда как  $\chi_{\Gamma}(g)$  и  $\bar{\chi}_{\Gamma_i}(g)$  это следы матриц, соответствующих элементу g в представлениях  $\Gamma$  и  $\Gamma_j$ , соответственно. Черта над  $\bar{\chi}_{\Gamma_i}(g)$  обозначает комплексное сопряжение.

Можно получить *точную* форму вариационной системы  $\ddot{\delta} = J(t)\delta$ , разложенной на независимые подсистемы, переходя от исходного базиса в пространстве всех инфинитиземальных векторов  $\delta$  к новому, который представляет набор W всех базисных векторов НП  $\Gamma_j$ , входящего в разложение (2.23). Этому преобразованию базиса соответствует следующее преобразование старых инфинитиземальных переменных  $\delta_i(t)$  к новым  $y_i(t)$  под действием ортогональной матрицы S:

$$y = S\delta, (2.25)$$

где столбцы S суть вектора из W.

Проиллюстрируем вышеописанный метод на простом примере. Для случая N=4, вариационная система для электрической цепочки (2.4) имеет вид:

$$\begin{cases}
(1 - V_1^2)\ddot{\delta_1} - 2(\dot{V_1^2})\dot{\delta_1} = 2(\dot{V_1}\dot{V_1} - 1)\delta_1 + \delta_2 + \delta_4, \\
(1 - V_2^2)\ddot{\delta_2} - 2(\dot{V_2^2})\dot{\delta_2} = 2(\dot{V_2}\dot{V_2} - 1)\delta_2 + \delta_3 + \delta_1, \\
(1 - V_3^2)\ddot{\delta_3} - 2(\dot{V_3^2})\dot{\delta_3} = 2(\dot{V_3}\dot{V_3} - 1)\delta_3 + \delta_4 + \delta_2, \\
(1 - V_4^2)\ddot{\delta_4} - 2(\dot{V_4^2})\dot{\delta_4} = 2(\dot{V_4}\dot{V_4} - 1)\delta_4 + \delta_1 + \delta_3.
\end{cases} (2.26)$$

Здесь  $V_i = V_i(t), \delta_i = \delta_i(t), i = 1..4.$ 

Пусть  $\alpha_i=1-V_i^2,$   $\beta_i=-2(\dot{V_i^2}),$   $\gamma_i=2(\ddot{V_i}\dot{V_i}-1).$  Тогда уравнение (2.26) может быть записано в матричной форме:

$$\hat{\alpha}(t)\ddot{\delta} + \hat{\beta}(t)\dot{\delta} = \hat{\gamma}(t)\delta, \tag{2.27}$$

где матрицы  $\hat{\alpha}(t)$ ,  $\hat{\beta}(t)$  и  $\hat{\gamma}(t)$  имеют вид:

$$\hat{\alpha}(t) = \begin{pmatrix} \alpha_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \alpha_4 \end{pmatrix}, \hat{\beta}(t) = \begin{pmatrix} \beta_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \beta_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \beta_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \beta_4 \end{pmatrix}, \tag{2.28}$$

$$\hat{\gamma}(t) = \hat{\gamma}_1(t) + \hat{\gamma}_2, \tag{2.29}$$

$$\hat{\gamma}_1(t) = \begin{pmatrix} \gamma_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \gamma_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \gamma_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \gamma_4 \end{pmatrix}, \hat{\gamma}_2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}. \tag{2.30}$$

В модели (2.4), среди прочих, возможен следующий динамический режим:

$$\mathbf{V}(t) = \{ U_1(t), U_2(t), U_2(t), U_1(t) \}. \tag{2.31}$$

Этот факт можно проверить прямой подстановкой этого вектора в выражение (2.4). Четыре уравнения относительно старых переменных  $V_i(t)$ , i=1..4 сводятся к двум уравнениям относительно новых переменных  $U_1(t)$  и  $U_2(t)$ .

Отметим, что вектор (2.31) определяет *квазипериодический* динамический режим.

Легко найти группу симметрии G динамического режима (2.31). Это группа второго порядка:

$$G = [\hat{e}, \hat{\imath}]. \tag{2.32}$$

Неединичный элемент этой группы  $\hat{\imath}$  действует на произвольный вектор состояния **V** следующим образом:

$$\hat{i}[V_1(t), V_2(t), V_3(t), V_4(t)] = [V_4(t), V_3(t), V_2(t), V_1(t)]. \tag{2.33}$$

Он переставляет напряжения следующим образом:  $V_2 \leftrightarrow V_3, V_1 \leftrightarrow V_4$  и оказывается определенным преобразованием симметрии модели (2.4). Очевидно, это преобразование одновременно является элементом симметрии режима (2.31).

Как и любая группа второго порядка, группа (2.32) обладает двумя неприводимыми представлениями,  $\Gamma_1$  и  $\Gamma_2$ . Эти НП (оба одномерные) приведены в Таблице 1.

Таблица 1 — Неприводимые представления группы  $G = [\hat{e}, \hat{i}]$ 

НП	$\hat{e}$	î
$\Gamma_1$	1	1
$\Gamma_2$	1	-1

Теперь построим базисные векторы  $\varphi$  и  $\psi$  этих представлений, которые являются определенными четырехмерными векторами. Любое представление  $\Gamma$  (приводимое или неприводимое) произвольной конечной группы G можно определить следующим образом:

$$\hat{g}\mathbf{\phi} = \tilde{M}(g)\mathbf{\phi}, \forall g \in G. \tag{2.34}$$

Здесь  $\varphi = [\varphi_1, \varphi_2, ..., \varphi_N]$  это "супервектор", представляющий список базисных векторов данного n-мерного представления, M(g) — матрица, соответствующая в этом представлении элементу  $g \in G$ , а  $\tilde{M}(g)$  обозначает транспонирование матрицы M(g). Уравнение (2.34) представляет систему линейных алгебраических уравнений относительно неизвестных векторов  $\varphi_i$ , i=1..n.

Традиционно базисные векторы неприводимого представления находятся с помощью проекционных операторов (см., например, [101]). Однако здесь удобнее получить эти векторы, используя простой метод [3] на основе определения (2.34) матричного представления (некоторые детали этого метода можно найти в [100]). Очевидно, достаточно использовать уравнения (2.34) только для генераторов группы G.

Найдем базисные векторы  $\varphi$  и  $\psi$  неприводимых представлений  $\Gamma_1$  и  $\Gamma_2$ , одномерные матрицы которых даны в Таблице 1.

Из выражения (2.34) получаем для  $\Gamma_1$  и  $\Gamma_2$  следующие уравнения:

$$\Gamma_1: \hat{\imath}\boldsymbol{\varphi} = (1)\boldsymbol{\varphi},\tag{2.35}$$

$$\Gamma_2: \hat{\imath} \mathbf{\psi} = (-1) \mathbf{\psi}. \tag{2.36}$$

Мы ищем  $\varphi$  и  $\psi$  в форме  $\varphi = [V_1, V_2, V_3, V_4]$  и  $[U_1, U_2, U_3, U_4]$ , где  $V_i, U_i (i=1..4)$  – произвольные скалярные значения. Из уравнения (2.35) находим:

$$\hat{\imath}\boldsymbol{\varphi} = \hat{\imath}[V_1, V_2, V_3, V_4] = [V_4, V_3, V_2, V_1] = [V_1, V_2, V_3, V_4].$$

Таким образом,  $V_1 = V_4, V_2 = V_3$  и

$$\mathbf{\phi} = [V_1, V_2, V_2, V_1]. \tag{2.37}$$

Из уравнения (2.36) получаем:

$$\hat{\imath}\psi = \hat{\imath}[U_1, U_2, U_3, U_4] = [U_4, U_3, U_2, U_1] = [-U_1, -U_2, -U_3, -U_4].$$

Таким образом,  $U_4 = -U_1, U_3 = -U_2$  и

$$\mathbf{\psi} = [U_1, U_2, -U_2, -U_1]. \tag{2.38}$$

В нашем примере, оба вектора  $\psi$  и  $\phi$  представляют двумерные подпространства пространства всех векторов состояния и могут быть записаны в форме:

$$\mathbf{\phi} = V_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} + V_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \tag{2.39}$$

$$\mathbf{\psi} = V_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} + V_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}. \tag{2.40}$$

Каждый из этих векторов определяет два базисных вектора четырх-мерного пространства нелинейной модели (2.4) при N=4 или линейной модели (2.26). После нормирования этих базисных векторов можно записать их как столбцы матрицы S, входящей в выражение (2.25):

$$S = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}. \tag{2.41}$$

Столбцы матрицы  $\hat{S}$  представляют собой ортогональный и нормализованный базис в пространстве всех переменных динамической модели (2.4) и (2.26) при N=4.

Используя матрицу (2.41), можно расщепить вариационную систему в форме (2.26) или (2.27) на две независимые подсистемы.

В самом деле, для динамического режима (2.31), матрицы  $\hat{\alpha}, \hat{\beta}, \hat{\gamma}$  принимают форму:

$$\hat{\alpha}(t) = \begin{pmatrix} \alpha_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \alpha_1 \end{pmatrix}, \tag{2.42}$$

$$\hat{\beta}(t) = \begin{pmatrix} \beta_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \beta_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \beta_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \beta_1 \end{pmatrix}, \tag{2.43}$$

$$\hat{\gamma}(t) = \begin{pmatrix} \gamma_1 & 1 & 0 & 1\\ 1 & \gamma_2 & 1 & 0\\ 0 & 1 & \gamma_2 & 1\\ 1 & 0 & 1 & \gamma_1 \end{pmatrix}. \tag{2.44}$$

После ортогонального преобразования с использованием матрицы  $\hat{S}$  из (2.41) получим:

$$\hat{\alpha}(t) = \begin{pmatrix} \alpha_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \alpha_2 \end{pmatrix}, \tag{2.45}$$

$$\hat{\beta}(t) = \begin{pmatrix} \beta_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \beta_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \beta_1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \beta_2 \end{pmatrix}, \tag{2.46}$$

$$\hat{\gamma}(t) = \begin{pmatrix} \gamma_1 + 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & \gamma_2 + 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \gamma_1 - 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & \gamma_2 - 1 \end{pmatrix}.$$
 (2.47)

Каждая из этих матриц может быть записана как прямая сумма вполне определенных двухмерных блоков. Таким образом, вариационная система (2.26) разложена

[в переменных  $y_j$  (j=1..4) из выражения (2.25)] на две независимые подсистемы:

$$\begin{pmatrix} \alpha_1(t) & 0 \\ 0 & \alpha_2(t) \end{pmatrix} \ddot{\boldsymbol{y}} + \begin{pmatrix} \beta_1(t) & 0 \\ 0 & \beta_2(t) \end{pmatrix} \dot{\boldsymbol{y}} = \begin{pmatrix} \gamma_1(t) + 1 & 1 \\ 1 & \gamma_2(t) + 1 \end{pmatrix} \boldsymbol{y}, (2.48a)$$

$$\begin{pmatrix} \alpha_1(t) & 0 \\ 0 & \alpha_2(t) \end{pmatrix} \ddot{\boldsymbol{y}} + \begin{pmatrix} \beta_1(t) & 0 \\ 0 & \beta_2(t) \end{pmatrix} \dot{\boldsymbol{y}} = \begin{pmatrix} \gamma_1(t) - 1 & 1 \\ 1 & \gamma_2(t) - 1 \end{pmatrix} \boldsymbol{y}, (2.48b)$$

где  $y = (y_1, y_2)$ .

# 2.4 Расщепление вариационных систем для ННМ (2.15)-(2.19)

Каждая нелинейная нормальная мода (2.15)-(2.19) обладает некоторой группой симметрии G, которая содержит трансляционную подгруппу  $T_n$ . Рассмотрим режим  $\varphi_2$ . Он может быть возбужден в цепочках, для которых  $n=\frac{N}{4}$  — целое числом( $N \mod 4=0$ ). Режим  $\varphi_2$  [см. (2.16)] определяется расширенной элементарной ячейкой (РЭЯ) вида [V(t),V(t),-V(t),-V(t)], которая повторяется вдоль цепочки. Эта РЭЯ, будучи в четыре раза больше, чем ячейка в равновесном состоянии, описывает специфический колебательный режим напряжений в электрической цепи (2.4) с периодическими граничными условиями.

Очевидно, что сдвиг распределения напряжений (2.16) на 4a, где a - размер ячейки в равновесном состоянии, не меняет вид этого распределения и, следовательно,  $\hat{a}^4$  является одним из его элементов симметрии. Этот элемент является генератором трансляционной симметрии  $T_n$ .

Та же самая трансляционная группа соответствует режиму  $\phi_3$  (2.17). Однако полные группы симметрии мод  $\phi_2$  и  $\phi_3$  различны: они отличаются вторым генератором  $\hat{\imath}\hat{u}$  для  $\phi_2$  и  $\hat{a}\hat{\imath}$  для  $\phi_3$ .

Можно расщепить вариационную систему для  $\varphi_2$  и  $\varphi_3$  по полным группам симметрии соответствующих динамических режимов  $[\hat{a}^4,\hat{\imath}\hat{u}]$  и  $[\hat{a}^4,\hat{\imath}\hat{\imath}]$ , но для нашей цели более удобно использовать общую группу  $G=[\hat{a}^2\hat{u}]$  этих мод, которая определяется генератором  $\hat{a}^2\hat{u}$ . Действие этого элемента симметрии на распределение напряжений  $\{V_j(t)|j=1..N\}$  сводится к трансляции на 2a, сопровождаемой изменением знака всех переменных  $V_j(t)$  на противоположный. Заметим, что квадрат элемента симметрии  $\hat{a}^2\hat{u}$  равен рассмотренному выше трансляционному генератору  $\hat{a}^4$ . Используя группу  $G=[\hat{a}^2u]$ , можно расщепить

вариационные системы для обеих ННМ  $\phi_2$  и  $\phi_3$ , используя одну и ту же матрицу S.

Теперь, согласно общему рецепту, следует построить базисные векторы неприводимых представлений группы G. Все такие представления одномерны, потому что эта группа циклическая и, следовательно, абелева. Каждое НП  $\Gamma_j$  G может быть полностью определено одномерной матрицей  $\gamma_j$ , связанной с генератором  $\hat{a}^2\hat{u}$  этой группы. Число НП группы G равно ее порядку  $n=\frac{N}{2}$ . Можно определить эти НП  $\Gamma_j$  следующими  $1\times 1$  матрицам:  $\gamma_j=e^{\frac{2\pi ij}{n}}, j=0,1,2,...(n-1)$   $[\gamma_j$  являются корнями из единицы порядка j].

Как было описано в предыдущем разделе, базисные векторы  $\psi_j$  одномерных НП  $\Gamma_j$  могут быть найдены посредством решения следующего уравнения:

$$\hat{a}^2 \hat{u} \psi_j = \gamma_j \psi_j, \tag{2.49}$$

где  $\psi_j = [V_1, V_2, ... V_N]$  – произвольное распределение напряжений для нашей электрической цепочки. В рассматриваемом случае, можно легко найти (см. подробности в работе [100]) это решение для уравнения (2.49), представляющее собой двумерное пространство L всех возможных распределений напряжений, которое может быть записано в виде:

$$\psi_{j} = [|a,b,-\gamma_{j}^{-1}a,-\gamma_{j}^{-1}b|\gamma_{j}^{-2}a,\gamma_{j}^{-2}b,-\gamma_{j}^{-3}a,-\gamma_{j}^{-3}b| 
|\gamma_{j}^{-4}a,\gamma_{j}^{-4}b,-\gamma_{j}^{-5}a,-\gamma_{j}^{-5}b|...],$$
(2.50)

где a и b – произвольные константы. Полагая a=1,b=0 и a=0,b=1, выбираем два базисных вектора указанного выше подпространства.

Наконец, перебирая все значения  $j=0,1,2,...,(\frac{N}{2}-1)$ , находим явный вид базиса полного пространства L:

$$\psi_{j}^{(1)} = [|1,0,-\gamma_{j}^{-1},0|\gamma_{j}^{-2},0,-\gamma_{j}^{-3},0|\gamma_{j}^{-4},0,-\gamma_{j}^{-5},0|...], 
\psi_{j}^{(2)} = [|0,1,0,-\gamma_{j}^{-1}|0,\gamma_{j}^{-2},0,-\gamma_{j}^{-3},0|0,\gamma_{j}^{-4},0,-\gamma_{j}^{-5}|...].$$
(2.51)

После нормирования можно использовать векторы (2.51) как столбцы матрицы S, которые расщепляют вариационные системы для  $\varphi_2$  и  $\varphi_3$  на независимые подсистемы. Заметим, что с учетом дополнительных элементов симметрии, отличных от элементов группы  $G=[\hat{a}^2\hat{u}]$ , можно, вообще говоря, уменьшить размеры указанных подсистем, полученных с помощью группы G.

Действуя таким образом, было обнаружено, что вариационные системы для изучения устойчивости ННМ (2.15)-(2.19) можно разбить на независимые подсистемы, размерности которых равны 1, 2, 2, 3, 3, соответственно.

Ниже приводим эти подсистемы в матричной форме:

$$\hat{A}\ddot{\delta} + \hat{B}\dot{\delta} + \hat{D}\delta = 0, \tag{2.52}$$

где матрицы  $\hat{A},\hat{B},\hat{D}$  построены из следующих элементов:

$$c(t) = 1 - V^{2},$$

$$f(t) = 2(\dot{V}^{2} + V\ddot{V} - 1),$$

$$g(t) = -4V\dot{V}.$$
(2.53)

Здесь V=V(t) – решение ведущего уравнения (2.22) для соответствующей нелинейной нормальной моды.

1) 
$$\varphi_1 = V(t)[1, -1|1, -1|1, -1|...]$$

Для этого случая все подсистемы (2.52) оказываются одномерными со следующими матрицами:

$$\hat{A} = c(t), \hat{B} = g(t), \hat{D} = f(t) - 2\cos(k),$$
 (2.54)

где  $k = \frac{2\pi j}{N}$ .

Для ННМ  $\phi_2$  и  $\phi_3$ , подсистемы (2.52) двумерные:

2)
$$\varphi_2 = V(t)[1,1,-1,-1|1,1,-1,-1|...].$$

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} c & 0 \\ 0 & c \end{pmatrix}, \hat{B} = \begin{pmatrix} g & 0 \\ 0 & g \end{pmatrix}, \hat{D} = \begin{pmatrix} f & 1+\gamma \\ 1+\bar{\gamma} & f \end{pmatrix}. \tag{2.55}$$

3) $\varphi_3 = V(t)[1,0,-1,0|1,0,-1,0|...].$ 

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} c & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \hat{B} = \begin{pmatrix} g & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \hat{D} = \begin{pmatrix} f & 1+\gamma \\ 1+\bar{\gamma} & -2 \end{pmatrix}. \tag{2.56}$$

В выражениях (2.55)-(2.56),  $\gamma = e^{\frac{4\pi j}{N}j}$ .

4) Для ННМ 
$${f \phi}_4=V(t)[1,\!0,-1|1,\!0,-1|...]$$
 и

 $\mathbf{\phi}_5 = V(t)[1,1,0,-1,-1,0|1,1,0,-1,-1,0]$  трехмерные подсистемы (2.52) оказываются *одинаковыми*. Эти подсистемы определяются матрицами:

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} c & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & c \end{pmatrix}, \hat{B} = \begin{pmatrix} g & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & g \end{pmatrix}, \hat{D} = \begin{pmatrix} f & 1 & \gamma \\ 1 & -2 & 1 \\ \bar{\gamma} & 1 & f \end{pmatrix}, \tag{2.57}$$

где  $\gamma = e^{\frac{6\pi i}{N}j}$ .

Таким образом, устойчивость всех NNM в LC-цепочке (2.4) может быть исследована путем анализа набора одно-, двух- и трехмерных систем дифференциальных уравнений с периодическими во времени коэффициентами, определяемыми функцией V(t).

### 2.5 Анализ устойчивости $\pi$ -моды

Самое простое расщепление имеет место для  $\pi$ -моды. Действительно, в этом случае исходная вариационная система для цепочки с любым четным числом ячеек (N) может быть расщеплена на одномерные подсистемы, которые определяются уравнениями (2.52)-(2.54). Явный вид этих уравнений следующий:

$$(1 - V^2)\ddot{\delta} - 4(V\dot{V})\dot{\delta} - 2(\dot{V}^2 + 2V\ddot{V})\delta = -4\cos^2(k/2)\delta, \qquad (2.58)$$

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

Уравнение (2.58) является линейным дифференциальным уравнением второго порядка с первой производной. Его можно свести к так называемой нормальной форме, которая не содержит первой производной путем соответствующей замены переменных  $\delta$  и t [102]. В нашем случае эта процедура существенно упрощается, так как левая часть уравнения (2.58) может быть записана как вторая производная выражения  $[(1-V^2)\delta]$ . Поэтому, вводя новую бесконечно малую переменную

$$y(t) = [1 - V^{2}(t)]\delta(t), \qquad (2.59)$$

мы немедленно получим очень простое выражение

$$\ddot{y} + 4c(t)\cos^2(k/2)y = 0, (2.60)$$

где  $c(t) = [1 - V^2(t)]^{-1}$ .

Периодическая во времени функция

$$c(t) = 1/[1 - V^{2}(t)]$$
(2.61)

определяется ведущим уравнением (2.22) с  $\mu = 4$  при начальных условиях:

$$V(0) = A, \dot{V}(t) = 0. {(2.62)}$$

Здесь A — амплитуда колебаний напряжения на конденсаторах. Вместо номера моды j удобно ввести переменную  $k=\frac{2\pi}{N}j,\,j=1..N$  (для предельного случая  $N\to\infty$  она представляет собой одномерный волновой вектор).

Как было показано в работе [97], ведущее уравнение (2.22) описывает периодический динамический режим для A < 1. Значение A = 1 представляет собой особую точку, за которой движение становится инфинитным.

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Отметим, что условие  $N \ mod \ 2 = 0$  является *необходимым* для существования  $\pi$ -моды.

На Рис. 2.2 представлены графики функции V(t) для трех значений ее амплитуды: A=0.1, A=0.8, A=0.99. Как можно видеть, практически гармонические колебания имеют место при малой амплитуде (A=0.1), а нелинейность наблюдается при A=0.8. При  $A\to 1$  колебания приобретают специфическую "треугольную" форму.

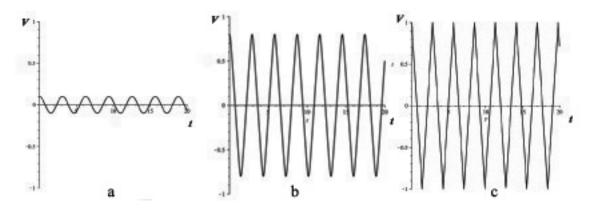


Рисунок 2.2 — Функция V(t) для трех значений амплитуды  $\pi$ -моды: a) A=0.1; b) A=0.8; c) A=0.999

Физической причиной потери устойчивости  $\pi$ -моды, а также других ННМ, является *параметрический резонанс*. Рассмотрим эту причину для случая малых амплитуд колебаний. При  $A \to 0$  можно пренебречь всеми нелинейными членами в уравнении (2.22), и тогда это уравнение приобретает вид:

$$\ddot{V} + 4V = 0. {(2.63)}$$

Это уравнение гармонического осциллятора с собственной частотой  $\omega=2$  и, таким образом, можно записать его общее решение в форме:

$$V(t) = A\sin(2t + \varphi_0), (2.64)$$

где  $\phi_0$  — начальная фаза.

Как уже отмечалось, вариационная система для стандартного Флокеанализа  $\pi$ -моды может быть расщеплена на набор независимых уравнений (2.60) с различными значениями параметра k. Вследствие условия малости амплитуд,  $|V(t)| \ll 1$ , функцию  $c(t) = [1-V^2(t)]^{-1}$  можно разложить в ряд Тейлора. Принимая во внимание только первое нелинейное слагаемое, получим:

$$\ddot{\delta} + 4\gamma [1 + V^2(t)]\delta = 0, \tag{2.65}$$

где  $\gamma = \cos^2(\frac{k}{2})$ . Введение новой временной переменной  $\tau = 2t + \phi_0$  позволяет преобразовать это уравнение к стандартной форме уравнение Матье [103]:

$$y'' + \{a - 2q\cos(2\tau)\}y = 0.$$
 (2.66)

Здесь

$$y(\tau) = \delta(\frac{\tau - \varphi_0}{2}), \ a = (1 + \frac{A^2}{2})\gamma, \ q = \frac{A^2}{4}\gamma,$$
 (2.67)

в то время как дифференцирование по новому временному аргументу обозначено штрихом.

Из уравнения (2.67) следует, что между параметрами a и q уравнения Матье существует линейное соотношение:

$$a = \gamma + 2q. \tag{2.68}$$

С другой стороны, хорошо известно, что существует бесконечное число областей неустойчивого движения в плоскости (a-q) для уравнения Матье (2.66) (см. диаграмму Айнса-Стретта в [103]), и эти области появляются из-за параметрического резонанса.

Для изучения потери устойчивости  $\pi$ -модой достаточно рассматривать только первую область неустойчивости на диаграмме Айнса-Стретта. Она изображена серым цветом на Рис. 2.3. На этом рисунке также изображено несколько прямых  $a = \gamma + 2q$  (см. уравнение (2.68)] для разных значений параметра  $\gamma$ , связанного с номером моды j соотношением:

$$\gamma = \cos^2(\pi j/N). \tag{2.69}$$

Для A=0, функция c(t) из выражения (2.61) оказывается равной единице и (2.60) представляет собой набор гармонических осцилляторов с собственными частотами

$$\omega_j = \cos(k/2) = \cos(\pi j/N), j = 1..N.$$
 (2.70)

С другой стороны, для  $A \neq 0$  уравнение (2.58) преобразуется в набор уравнений Матье с параметрами a и q, зависящими от номера моды j.

Функция c(t) является периодической во времени и для некоторых номеров мод j коэффициенты a(j) и q(j) могут попасть в область неустойчивости, изображенную на Рис. 2.3. В таком случае удовлетворяется условие параметрического резонанса, в результате чего соответствующий коэффициент  $\delta_j(t)$  начинает экспоненциально расти. Это означает потерю устойчивости  $\pi$ -моды, поскольку этот режим может быть устойчивым только тогда, когда все  $\delta_j(t)$  остаются малыми, если их начальные значения  $\delta_j(0)$  (j=1..N) малы.

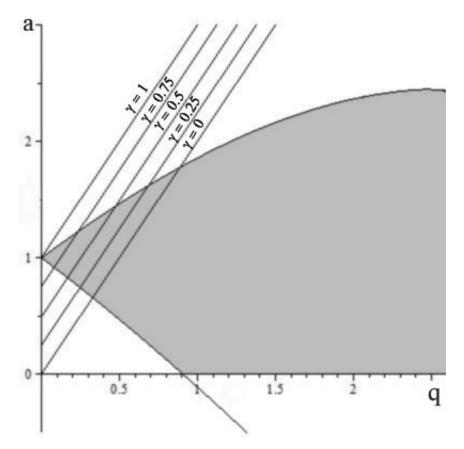


Рисунок 2.3 — Первая зона неустойчивости для уравнения Матье и набор прямых линий, определяемый уравнением (2.68)

Рассмотрим взаимодействие  $\pi$ -моды со «спящей» линейной нормальной модой  $\delta_j(t)$ , то есть модой, равной нулю в начальный момент t=0. Если постепенно увеличивать амплитуду  $\pi$ -моды A от значения A=0, точка (a,q) движется вверх по одной из прямых, изображенных на Рис.2.3 из его исходного положения  $(\gamma,0)$ , потому что  $a=\gamma+2q$  и  $q=\gamma\frac{A^2}{4}$  [см. уравнения (2.68) и (2.68)]. До пересечения указанной прямой с *нижней границей* серой области на Рис.2.3  $\pi$ -мода устойчива, а пересечение соответствует максимальной амплитуде  $A_c^j$   $\pi$ -моды, для которой еще не происходит возбуждение спящего режима  $\delta_j(t)$ .

С другой стороны, значение  $A_c^j$  может быть получено как решение уравнений:

$$a = 1 - q - \frac{q^2}{8}...,$$
 (2.71)  
 $a = \gamma + 2q,$ 

где первое уравнение определяет нижнюю границу серой области на Рис.2.3 (см., например, [103]). В результате решения уравнений (2.71), получим:<sup>2</sup>

$$q = \frac{1 - \gamma}{3} \tag{2.72}$$

Принимая во внимание соотношение  $q=\gamma \frac{A^2}{4}$  и выражение (2.69), можно, наконец, получить:

$$A_c^j = \frac{2}{\sqrt{3}} tg(\frac{\pi j}{N}). \tag{2.73}$$

Очевидно, что потеря устойчивости  $\pi$ -моды определяется той спящей модой  $\delta_j(t)$ , которой соответствует минимальное значение  $A_c^j$  (j=1..N). Тогда из выражения (2.73) получим, что это минимальное значение  $A_c$  соответствует j=1, т.е. мода  $\delta_1(t)$  возбуждается первой, когда амплитуда  $\pi$ -моды A начинает увеличиваться с нулевого значения. В дальнейшем будем называть  $A_c$  критической амплитудой  $\pi$ -моды, потому что этот режим теряет свою устойчивость при любой амплитуде, большей, чем  $A_c$ . Из уравнения (2.73) следует, что для  $\pi$ -моды  $A_c \to 0$  при  $N \to \infty$ .

На Рис.2.4 представлен график функции  $A_c(N)$  для  $\pi$ -моды, который показывает зависимость критической амплитуды  $A_c$  от разной длины (N) рассматриваемой LC-цепочки. Сплошная линия на Рис.2.4 соответствует функции  $A_c(N)$ , полученной из уравнения (2.73) при j=1, а штрих-пунктирная линия построена с помощью анализа устойчивости  $\pi$ -моды по Флоке. Были вычислены показатели Флоке путем интегрирования выражения (2.58) для заданной амплитуды V(0)=A и для всех возможных значений  $\gamma$ :  $\pi$ -моды считалась неустойчивой, если хотя бы один из этих показателей превышал единицу больше, чем на  $\varepsilon=10^{-5}$ .

Оба графика на Рис.2.4 находятся в очень хорошем согласии друг с другом для больших значений N. Некоторые расхождения, происходящие при малых N, можно объяснить приближением, которое было сделано для упрощения ведущего уравнения (2.22).

Для j = 1 и  $N \gg 1$  находим из уравнения (2.73):

$$A_c(N) = \frac{2}{\sqrt{3}} tg\left(\frac{\pi}{N}\right) = \frac{2\pi}{\sqrt{3}} \frac{1}{N} + O\left(\frac{1}{N^3}\right). \tag{2.74}$$

Таким образом, уменьшение  $A_c(N)$  при  $N \to \infty$  определяется степенным законом:

$$A_c(N) = CN^{-\beta}, (2.75)$$

 $<sup>^{-2}</sup>$ Для  $|q| \ll 1$  можно пренебречь слагаемым  $\frac{q^2}{8}$  в (2.71).

где  $C \approx 3.629$ ,  $\beta = -1$ .

Очевидно, что проведенный анализ устойчивости  $\pi$ -моды, основанный на переходе от уравнения (2.58) к уравнению Матье, оказывается *точным* в термодинамическом пределе  $N \to \infty$ .

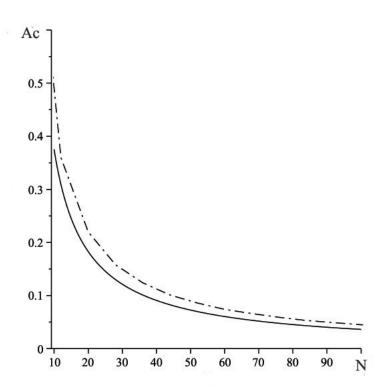


Рисунок 2.4 — Зависимость критической амплитуды  $A_c$  от числа N ячеек в цепочке для  $\pi$ -моды. Сплошная линия соответствует функции  $A_c(t)$ , полученной из уравнения (2.73) при j=1, а штрих-пунктирная линия получена в результате численного расчета

### 2.6 Анализ устойчивости нелинейной нормальной моды φ2

Согласно уравнениям (2.52) и (2.55), устойчивость ННМ  $\phi_2$  определяется устойчивостью нулевого решения двумерных систем с разными значениями  $\gamma = e^{\frac{4\pi i}{N}j}$ .

Однако нетрудно заметить, что матрицы  $\hat{A}, \hat{B}, \hat{D}$  из уравнения (2.55) ком-мутируют друг с другом и, следовательно, они могут быть диагонализированы

*одновременно* с помощью соответствующего унитарного преобразования. В результате этого преобразования каждая из этих двумерных вариационных систем разбивается на два независимых скалярных дифференциальных уравнения.

Действительно, уравнения (2.52) и (2.55) можно записать в виде:

$$\begin{cases} (1 - V^2)\ddot{\delta}_1 - 4V\dot{V}\dot{\delta}_1 - (2\dot{V}^2 + V\ddot{V})\delta_1 = -2\delta_1 + (1 + \gamma)\delta_2, \\ (1 - V^2)\ddot{\delta}_2 - 4V\dot{V}\dot{\delta}_2 - (2\dot{V}^2 + V\ddot{V})\delta_2 = -2\delta_2 + (1 + \bar{\gamma})\delta_1. \end{cases}$$
(2.76)

Вводя новые инфинитиземальные переменные  $y_i = (1 - V^2)\delta_i$  вместо старых перменных  $\delta_i$  (i = 1,2) [см. выражение (2.25)], получим:

$$\begin{pmatrix} 1 - V^2 & 0 \\ 0 & 1 - V^2 \end{pmatrix} \ddot{\boldsymbol{y}} = \begin{pmatrix} -2 & 1 + \gamma \\ 1 + \bar{\gamma} & -2 \end{pmatrix} \boldsymbol{y}, \tag{2.77}$$

T.e.

$$\hat{M}\ddot{\boldsymbol{y}} = \hat{R}\boldsymbol{y}.\tag{2.78}$$

С помощью вполне определенного унитарного преобразования  $\hat{T}$  можно диагонализовать матрицу  $\hat{R}$  без изменения матрицы  $\hat{M}$  которая пропорциональна единичной матрице. В результате такого преобразования получим:

$$\begin{pmatrix} 1 - V^2 & 0 \\ 0 & 1 - V^2 \end{pmatrix} \ddot{\mathbf{\varepsilon}} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix} \mathbf{\varepsilon}, \tag{2.79}$$

где  $\varepsilon = \hat{T} y$ , а  $\lambda_1 = -2 + 2\sin(\frac{k}{2}), \lambda_2 = -2 - 2\sin(\frac{k}{2})$  – собственные значения матрицы  $\hat{R}$ .

Таким образом, анализ устойчивости моды  $\phi_2$  сводится к анализу устойчивости нулевых решений независимых уравнений:

$$\begin{cases} \ddot{\varepsilon}_1 + 2c(t)[1 - \sin(\frac{k}{2})]\varepsilon_1 = 0, \\ \ddot{\varepsilon}_2 + 2c(t)[1 + \sin(\frac{k}{2})]\varepsilon_2 = 0, \end{cases}$$
 (2.80)

где  $c(t)=(1-V^2)^{-1}$ . Очевидно, что эти уравнения могут быть исследованы в термодинамическом пределе  $N\to\infty$  точно так же, как и вариационное уравнение (2.60) для  $\pi$ -моды (отметим, что  $k=\frac{2\pi}{N}j$  для  $\pi$ -моды, а для  $\phi_2$ -моды  $k=\frac{4\pi}{N}j$ ). Соответствующий результат имеет следующий вид:

$$A_c(N) = \frac{2}{\sqrt{3}} \sqrt{\frac{\sin(\frac{2\pi}{N}j)}{1 - \sin(\frac{2\pi}{N}j)}}.$$
 (2.81)

Скейлинг  $A_c(N)$  в пределе  $N \to \infty$  для моды  $\varphi_2$ , а также для моды  $\varphi_1$ , определяется по формуле (2.75). Однако в этом случае показатель  $\beta$  равен  $\frac{1}{2}$ . Окончательный результат устойчивости для ННМ  $\varphi_2$  изображен на Рис.2.5.

Таким образом, было получено полное расщепление вариационной системы для ННМ  $\varphi_2$  в два этапа. Во-первых, использован общий теоретико-групповой подход, основанный на использовании свойств группы симметрии  $G=[\hat{a}^2\hat{u}]$ , с помощью которого получена двумерная система (2.77). Во-вторых, эта система была расщеплена на отдельные скалярные уравнения (2.80). Заметим, что этот конечный результат можно получить только за один шаг, если производить расщепление на основе полной группы симметрии  $G_2=[\hat{a}^4,\hat{\imath}\hat{u}]$  режима  $\varphi_2$ .

# **2.7** Анализ устойчивости ННМ $\phi_3$

Анализ устойчивости нелинейной нормальной моды  $\varphi_3$  сводится к изучению двумерной системы, определяемой уравнениями (2.52), (2.56), которые не могут быть расщеплены на скалярные уравнения. Действительно, матрицы  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$  не коммутируют с матрицей  $\hat{D}:\hat{A}\hat{D}\neq\hat{D}\hat{A},\hat{B}\hat{D}\neq\hat{D}\hat{B}$ . Как следствие, невозможно диагонализовать эти три матрицы,  $\hat{A},\hat{B},\hat{D}$ , одновременно, то есть с помощью одного и того же унитарного преобразования, так как это было возможно в случае режима  $\varphi_2$ . В свою очередь это означает, что двумерную вариационную подсистему для ННМ  $\varphi_3$  нельзя разложить на независимые скалярные уравнения, и поэтому приходится исследовать устойчивость нулевого решения для следующей двумерной системы:

$$\begin{cases} c(t)\ddot{\delta}_1 + g(t)\dot{\delta}_1 - f(t)\delta_1 - (1+\gamma)\delta_2 = 0, \\ \ddot{\delta}_2 - 2\delta_2 - (1+\bar{\gamma})\delta_1 = 0, \end{cases}$$
(2.82)

где  $\gamma=e^{ik}(k=\frac{4\pi j}{N})$ . Временные функции c(t),g(t) и f(t) определены в (2.53).

Можно рассматривать бесконечно малые переменные  $\delta_1$  и  $\delta_2$  как линейные нормальные моды (фононные моды), соответствующие некоторым волновым числам. Напомним, что, строго говоря, каждая фононная мода представляет зависящую от времени переменную  $\delta_k(t)$ , умноженную на некоторый N-мерный вектор, определяющий распределение напряжений на всех конденсаторах электрической цепи. Из матрицы S, которая приводит к расщеплению исходных

вариационных систем, следует, что указанные нормальные моды  $\delta_1$  и  $\delta_2$  связаны с различными волновыми числами, k и  $\pi-k$ :

$$\delta_1 = \delta_k(t), \delta_2 = \delta_{\pi-k}(t).$$

Интересно отметить, что волновые числа k и  $\pi-k$  расположены симметрично относительно центра примитивной ячейки  $[0;\pi]$  обратной решетки, которая соответствует исходной решетке нашей электрической цепочки в колебательном состоянии, описываемом модой  $\varphi_3$ <sup>3</sup>.

Как и в случае  $\phi_1$  - и  $\phi_2$ -мод, ННМ  $\phi_3$  оказывается устойчивой при достаточно малых амплитудах A=V(0). Увеличение амплитуды приводит к появлению параметрического резонанса, в результате чего одновременно возбуждаются две спящие фононные моды  $\delta_1=\delta_k(t)$  и  $\delta_2=\delta_{\pi-k}(t)$ .

Потеря устойчивости ННМ  $\phi_3$  определяется теми спящими фононными модами (модами с определенными номерами j), которые первыми возбуждаются в результате увеличения амплитуды этой нелинейной нормальной моды. Вычисляя показатели Флоке для электрических цепочек разных длин N, можно обнаружить соответствующие фононные моды. В свою очередь, это дает возможность получить функцию  $A_c(N)$ , подобную той, что изображена на Рис.2.4 для моды  $\phi_1$ .

### **2.8** Анализ устойчивости мод $\phi_4$ и $\phi_5$

Анализ устойчивости нелинейных нормальных мод мод  $\phi_4$  и  $\phi_5$  сводится к исследованию устойчивости нулевого решения одной и той же трехмерной системы, определяемой выражеиями (2.52) и (2.57):

$$\begin{cases} c(t)\ddot{\delta}_{1} + g(t)\dot{\delta}_{1} - f(t)\delta_{1} - \delta_{2} - \gamma\delta_{3}, \\ \ddot{\delta}_{2} - \delta_{1} - 2\delta_{2} - \delta_{3} = 0, \\ c(t)\ddot{\delta}_{3} + g(t)\dot{\delta}_{3} - \bar{\gamma}\delta_{1} - \delta_{2} - \delta_{3} = 0. \end{cases}$$
(2.83)

Здесь функции c(t),g(t),f(t) определены в (2.53), а  $\gamma=e^{ik}$  с  $k=\frac{6\pi j}{N}(j=1,2,...,\frac{N}{6}).$ 

 $<sup>\</sup>frac{1}{3}$  Примитивная ячейка  $[0; \frac{2\pi}{a}]$  в обратной решетке соответствует одномерной решетке с периодом a.

# **2.9** Асимптотическое поведение $A_c(N)$ при $N \to \infty$

Критические амплитуды  $A_c(N)$  для всех симметрийно обусловленных нелинейных нормальных мод (2.15)-(2.19) стремятся к нулю при  $N \to \infty$ . Для мод  $\varphi_1$  и  $\varphi_2$  соответствующий скейлинг убывания  $A_c(N)$  был представлен в (2.75) с  $\beta$  равным 1 и  $\frac{1}{2}$ , соответственно. Естественно, интересно найти аналогичные асимптотические формулы для других ННМ. Численные эксперименты позволяют получить Рис.2.6, где представлены функции  $A_c(N)$  в логарифмическом масштабе для больших N (N > 100). Из графиков, изображенных на этом рисунке, очевидно, что  $A_c(N)$  для всех ННМ являются степенными функциями, так как зависимость  $\ln A_c(N)$  от  $\ln N$  представляет собой прямые. Коэффициент  $\beta$  в формуле  $A_c(N) = CN^{-\beta}$  определяется наклоном соответствующей прямой к горизонтальной оси.

Таким образом, были получили следующие значения констант  $\beta$  и C, входящих в закон  $A_c(N) = CN^{-\beta}$ :

$$\begin{aligned}
& \mathbf{\phi}_{1}[\hat{a}^{2}, \hat{\imath}\hat{u}] : \ \beta_{1} = 0.99, C_{1} = 3.62; \\
& \mathbf{\phi}_{2}[\hat{a}^{4}, \hat{\imath}\hat{u}] : \ \beta_{2} = 0.49, C_{2} = 2.89; \\
& \mathbf{\phi}_{3}[\hat{a}^{4}, \hat{\imath}\hat{u}] : \ \beta_{3} = 0.99, C_{3} = 8.57; \\
& \mathbf{\phi}_{4}[\hat{a}^{3}, \hat{\imath}\hat{u}], \mathbf{\phi}_{5}[\hat{a}^{3}\hat{u}, \hat{a}\hat{\imath}\hat{u}] : \ \beta_{4} = 0.99, C_{4} = 7.54.
\end{aligned} (2.84)$$

Графики функции (2.75), соответствующие этим значениям констант ( $\beta$ , C), приведены на Рис. 2.5

Опираясь на приведенные выше данные, можно утверждать, что для всех ННМ, за исключением моды  $\varphi_2$ , константа  $\beta$ , определяющая скорость уменьшения критической амплитуды  $A_c$  с ростом N, равна единице ( $\beta=1$ ), тогда как для  $\varphi_2$  она равна  $\frac{1}{2}$ . Заметим, что значения параметра  $\beta$  для мод  $\varphi_1$  и  $\varphi_2$  получены аналитически, а также численно, тогда как для ННМ  $\varphi_3$ ,  $\varphi_4$ ,  $\varphi_5$  этот параметр был найден только численно. Можно предположить, что он может быть получен также аналитически по асимптотическому методу, разработанному в [104]. Однако это не было сделано в настоящей работе, поскольку численные результаты (2.84) кажутся достаточными для гипотезы о том, что параметр  $\beta$  для ННМ  $\varphi_3$ ,  $\varphi_4$  и  $\varphi_5$  равно единице. Действительно, числовые данные (2.84) показывают, что отклонение параметра  $\beta$  от 1 для мод  $\varphi_1$ ,  $\varphi_3$ ,  $\varphi_4$ ,  $\varphi_5$  и от  $\frac{1}{2}$  для моды  $\varphi_2$  равны 0.01. Эти отклонения вызваны, вероятнее всего, некоторыми вычислительными ошибками,

поскольку числовые данные демонстрируют то же самое отклонение от точных значений  $\beta_1=1,$   $\beta_2=\frac{1}{2}.$  Естественно предположить, что точные значения  $\beta_3,$   $\beta_4$  и  $\beta_5$  равны единице.

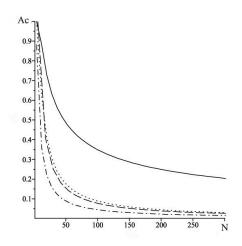
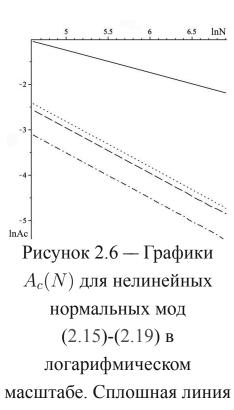


Рисунок 2.5 — Устойчивость нелинейных нормальных мод (2.15)-(2.19) в LC-цепочках при разных N. Сплошная линия соответствует моде  $\phi_2$ , пунктирная — моде  $\phi_3$ , штриховая -  $\pi$ -моде  $\phi_1$ , штрих-пунктирная — модам  $\phi_4$  и  $\phi_5$ 



соответствует моде  $\phi_2$ , пунктирная — моде  $\phi_3$ , штриховая -  $\pi$ -моде  $\phi_1$ , штрих-пунктирная — модам  $\phi_4$  и  $\phi_5$ .

Таким образом, в данной главе настоящей диссертационной работы исследована устойчивость всех 5 возможных симметрийно-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.

Глава 3. Взаимодействия нелинейных нормальных мод в молекуле  $SF_6$  в рамках теории функционала плотности

### 3.1 Понятие о бушах нелинейных нормальных мод

Обычные или линейные нормальные моды (ЛНМ) являются точными решениями динамических уравнений в гармоническом приближении [105]. Это приближение означает, что потенциальная энергия рассматриваемой системы разлагается в многомерный ряд Тейлора и учитываются только квадратичные слагаемые для получения классических уравнений Ньютона. ЛНМ перестают быть точными решениями, когда учитываются не только квадратичные, но и некоторые ангармонические слагаемые. Если они достаточно малы, то можно говорить о некоторых взаимодействиях между ЛНМ. Во многих физических задачах изучаются такие взаимодействия и роль различных ангармонизмов. Можно построить некоторые *приближенные* решения для рассматриваемой нелинейной задачи.

В связи с этим можно задать вопрос, существуют ли какие-то *точные* решения нелинейных динамических уравнений за пределами гармонического приближения?

Рассмотрим нелинейную систему, потенциальная энергия которой содержит помимо квадратичных (что позволяет использовать гармоническое приближение), также и некоторые ангармонические слагаемые с общим множителем  $\gamma$ . Величина этого параметра определяет степень нелинейности системы. А. Ляпунов доказал, что каждую ЛНМ можно продолжить по  $\gamma$  для получения точного периодического решения нелинейной системы. Он также описал процедуру построения некоторого точного решения вплоть до некоторой величины параметра  $\gamma$ . В результате можно найти множество N нелинейных нормальных мод Ляпунова (ННМ), где N - размерность системы. К сожалению, процедура построения ННМ Ляпунова очень громоздка, и обычно сходится только при очень малых значениях  $\gamma$ . Это не позволяет использовать Ляпуновские моды во многих физических задачах.

Другой тип нелинейных нормальных мод — это симметрийно-обусловленные нелинейные нормальные моды Розенберга [4] (см. также книгу

[98]), все возможные из которых для системы (2.4) были исследованы в предыдущей главе. Эти моды могут существовать при больших значениях параметра у и даже для существенно нелинейных систем, потенциальная энергия которых не содержит квадратичных членов (такие системы не допускают гармонического приближения). Число ННМ Розенберга, если они существуют, может быть меньше или даже больше, чем полное число степеней свободы системы.

Как уже говорилось в предыдущей главе, для механической системы с N степенями свободы в динамическом режиме, описываемом некоторой модой Розенберга, все степени свободы  $x_i(t)$  колеблются в соответствии с формулой:

$$x_i(t) = a_i f(t), i = 1..N.$$
 (3.1)

Как уже говорилось в Главе 2 настоящей диссертационной работы, в [1; 84] также было введено понятие бушей HHM для динамических систем, описываемых произвольной группой  $G_0$  дискретной симметрии. Каждый буш обладает некоторой группой симметрии G, являющейся подгруппой группы  $G_0$  ( $G \subset G_0$ ) и представляет собой некоторое точное решение нелинейных динамических уравнений. Как следствие, "энергия" начального возбуждения данного буша оказывается запертой в этом динамическом объекте до тех пор, пока он не утратит свою устойчивость (тогда данный буш превращается в другой буш, меньшей симметрии и большей размерности). Каждый буш, размерность m которого больше единицы (m>1), описывает квазипериодический динамический режим, который определяется m ведущими дифференциальными уравнениями, а одномерные буши представляют собой моды Розенберга. Существенно, что по симметрийным причинам в физической системе с данной группой симметрии  $G_0$  может существовать только конечное число бушей каждой размерности.

В работе [7] были изучены геометрические и динамические свойства одномерных, двумерных и трехмерных бушей в простой октаэдрической механической системе, которая изображена на Рис. 3.1. Она представляет собой обычный октаэдр с одинаковыми точечными массами в вершинах и с другой точечной массой в его центре. Было установлено, что 18 бушей колебательных мод могут существовать в случае, когда центральная частица неподвижна. Среди этих бушей - 1D, 2D и 3D буши с точечными группами симметрии  $O_h$ ,  $D_{4h}$  и  $C_{4v}$  соответственно. Эти буши изучались не только как геометрические объекты, но и как динамические объекты в предположении, что межчастичные взаимодействия в рассматриваемой

системе описываются произвольным парным потенциалом U(r), в частности, потенциалом Леннарда-Джонса:

$$U(r) = \frac{A}{r^{12}} - \frac{B}{r^6}. (3.2)$$

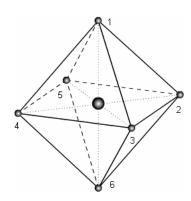


Рисунок 3.1 — Октаэдрическая молекула.

Естественно, можно спросить: "Существуют ли какие-то физические системы, нелинейная динамика которых может быть описана с помощью вышеуказанной простой механической модели?". Более общий вопрос можно сформулировать следующим образом: "Может ли концепция бушей нелинейных нормальных мод и методы их изучения быть справедливыми для нелинейной динамики реальных физических систем?"

Прежде всего, отметим, что существуют некоторые молекулы, состояние равновесия которых соответствует механической модели на Рис. 3.1. В качестве примера выберем молекулу  $SF_6$ . Экспериментальное исследование нелинейных колебаний таких молекул представляет большие трудности (см., например, обзорную статью [106], посвященную изучению взаимодействий между нормальными модами в простых молекулах).

С другой стороны, расчеты на основе теории функционала плотности (ТФП) [13; 107; 108], зарекомендовали себя как эффективные и достаточно корректные при изучении молекул и кристаллов. ТФП позволяет определять геометрические структуры многих микроскопических объектов с точностью до 1% [13]. Поэтому изучение нелинейной динамики в рамках ТФП-методов представляет значительный интерес. Так, в работе [92], посвященной изучение дискретных бризеров в графане, было обнаружено, что ТФП-расчеты приводят к кардинально иным результатам для колебаний с большими амплитудами по сравнению с методами молекулярной динамики, основанными на концепции точечных масс,

взаимодействующих посредством широко используемых феноменологических потенциалов межчастичного взаимодействия. В [109] потенциал Бреннера [110] использовался для изучения дискретных бризеров при исследовании нелинейных колебаний методами молекулярной динамики в графане, где была обнаружена немонотонная зависимость  $\nu(A)$  амплитуды бризера A от его частоты  $\nu$ . Напротив, с помощью пакета ABINIT [17] была получена монотонная функция  $\nu(A)$ , которая демонстрирует, что для щелевых бризеров в графане имеет место только мягкая нелинейность. Это можно объяснить тем, что модель точечных масс не может учесть сложный процесс поляризации атомных оболочек при существенно нелинейных колебаниях.

Данная глава настоящей диссертационной работы посвящена проверке теоретико-групповых выводов теории бушей мод для нелинейной динамики молекулы  $SF_6$  с помощью ТФП-моделирования.

### 3.2 Теоретико-групповой анализ нелинейных колебаний в $SF_6$

Теоретико-групповой анализ нелинейных колебаний структуры, представленный на Рис. 3.1, уже выполнен в работе [7]. Воспроизведем некоторые результаты этой работы, необходимые для дальнейшего обсуждения.

В любом колебательном режиме ядра атомов молекулы  $SF_6$  смещаются из положений равновесия, изображенных на Рис. 3.1, и можно говорить о картине атомных смещений в любой фиксированный момент t. Все динамические режимы (в том числе ЛНМ и ННМ) в рассматриваемой физической системе с группой симметрии  $G_0$  могут быть классифицированы по ее подгруппам  $G_j(G_j\subseteq G_0)$ . Группа симметрии  $G_j$  любого динамического режима определяется симметрией картины его атомных смещений  $\delta_j$ . Для любого устойчивого динамического режима группа  $G_j$  сохраняется в течение его временной эволюции. Действуя на  $\delta_j$  всеми элементами симметрии группы  $G_0$ , можно выбрать только те, относительно действия которых он является инвариантным. Полный набор этих элементов образует группу  $G_j(G_j\subseteq G_0)$ . В частности, группа  $G_j$  может быть тривиальной, т. е. состоящей только из единичного элемента. Отметим, что в стандартном анализе фононного спектра (случай малых колебаний) указанные картины определяются собственными векторами матрицы силовых постоянных.

Существует теорема Вигнера [111] о теоретико-групповой классификации линейных нормальных мод. Согласно этой теореме, моды классифицируются по неприводимым представлениям (НП) группы симметрии  $G_0$  системы в состоянии равновесия. Таким образом, можно ввести базис  $\Phi = [\phi_j | j = 1..N]$  в пространстве всех возможных атомных смещений, составляющий полный набор базисных векторов НП, входящих в механическое представление рассматриваемой системы. Поэтому любой колебательный режим  $\mathbf{X}(t) = [x_1(t), x_2(t), \dots, x_n(t)]$  в этой системе может быть разложен по приведенному выше базису с коэффициентами, зависящими от времени t:

$$\mathbf{X}(t) = \sum_{j=1}^{N} c_j(t) \mathbf{\varphi}_j \equiv (C(t), \mathbf{\Phi}). \tag{3.3}$$

В этом уравнении каждое слагаемое  $c_j(t)\phi_j$  можно рассматривать как нелинейную нормальную моду согласно определению (3.1). Действительно, векторный множитель  $\phi_j$  определяет картину смещений всех атомов, т. е. пространственную структуру ННМ, а  $c_j(t)$  определяет временную эволюцию моды. Однако для краткости здесь и далее часто используется термин "нелинейная нормальная мода" (или колебательная мода) как для  $\phi_j$ , так и для  $c_j(t)$ .

Базисным векторам  $\varphi_j$  соответствуют разные НП  $\Gamma_n$  группы  $G_0$  и, следовательно, вектор смещения  $\mathbf{X}(t)$  в (3.3) можно записать в виде суммы вкладов, связанных с отдельными неприводимыми представлениями группы симметрии  $G_0$ :

$$\mathbf{X}(t) = \sum (\mathbf{C}_n(t), \mathbf{\Phi}[\Gamma_n]). \tag{3.4}$$

Здесь  $\Phi[\Gamma_n]$  представляет собой набор базисных векторов НП  $\Gamma_n$ .

Согласно теореме Вигнера, *малые* колебания молекулы, связанные с различными неприводимыми представлениями  $\Gamma_n$ , являются *независимыми друг от друга*. Это означает, что если возбудить (используя соответствующие начальные условия при решении линейных дифференциальных уравнений) динамический режим  $\mathbf{X}(t)$ , соответствующий данному НП  $\Gamma_n$ , этот режим никогда не может привести к возбуждению мод, принадлежащих другим НП в разложении (3.4). Поэтому можно спросить: "Что произойдет, если рассмотреть большие и, следовательно, *нелинейные* колебания молекулы?" Теория бушей нелинейных нормальных мод начинается с этого вопроса.

Ответ был дан в работе [1] (см. также [2], посвященную обсуждению теории бушей). Оказывается, существуют определенные *правила от обора* для передачи возбуждения от одной моды к другой. Эти правила следуют из некоторых теоретико-групповых ограничений, которые могут быть записаны как система линейных алгебраических уравнений [1]. В частности, из этой системы можно вывести, что возбуждение от моды с заданной группой симметрии G может быть передано к тем нелинейным нормальным модам, чья собственная симметрия *выше* или *равна* G. Вышеуказанные правила отбора приводят к возможности существования бушей ННМ.

Каждый буш представляет собой набор ННМ, который сохраняет энергию начального возбуждения, пока не потеряет устойчивость из-за явления, аналогичного параметрическому резонансу с некоторыми модами вне данного буша. Это явление возникает, если амплитуды некоторых мод буша достигают достаточно больших значений (см. подробнее в [2; 6]).

Каждый буш обладает собственной симметрией, которая определяется пересечением всех групп симметрии его мод. Как уже упоминалось, когда данный буш теряет устойчивость, он превращается в другой буш с более низкой симметрией и более высокой размерностью.

Рассмотрим простейшие буши для нелинейных колебаний молекулы  $SF_6$ , используя некоторые результаты, полученные в [7]. В равновесном состоянии, изображенном на Рис. 3.1, молекула  $SF_6$  обладает группой точечной симметрии  $G_0 = O_h$ . Все колебательные моды для этой молекулы, классифицированные по НП группы  $O_h$ , можно найти в Таблице. 3 в [7] [три запрещенных трансляционных режима должны быть исключены, так как предполагается, что центральный атом (S) неподвижен].

Для дальнейших рассуждений потребуются явные формы картин атомных смещений ННМ  $\phi_1$ ,  $\phi_2$ ,  $\phi_3$ , соответствующих одномерному НП  $\Gamma_1$ , двумерному НП  $\Gamma_5$  и трехмерному НП  $\Gamma_{10}$ . Эти картины смещений приведены в Таблице 2.

Таблица 2 — Картины атомных смещений ННМ в молекуле  $SF_6$ 

НП	HHM	Картина атомных смещений
$\Gamma_1$	$\mathbf{\phi}_1$	$\frac{1}{\sqrt{6}}[0,0,-1 -1,0,0 0,-1,0 1,0,0 0,1,0 0,0,1 ]$
$\Gamma_5$	$\mathbf{\phi}_2$	$\frac{1}{\sqrt{12}}[0,0,2 -1,0,0 0,-1,0 1,0,0 0,1,0 0,0,-2 ]$
$\Gamma_{10}$	$\phi_3$	$\frac{1}{\sqrt{12}}[0.0, -2 0.0, 1 0.0, 1 0.0, 1 0.0, 1 0.0, -2 ]$

В этой таблице для каждого атома фтора, согласно нумерации на Рис. 3.1, указаны три координаты x,y,z, которые определяют смещение ядра этого атома из положения равновесия. Из Таблицы 2 видно, что форма молекулы в колебательном режиме, соответствующая моде  $\varphi_1$ , представляет в *любой* момент времени t правильный октаэдр. Его размер колеблется со временем, становясь больше или меньше по сравнению с октаэдром, соответствующим состоянию равновесия. Эта ННМ называется "дышащей" модой. Она представляет собой одномерный буш с группой симметрии  $O_h$ . Группа симметрии дышащей моды  $O_h$  выше, чем у любой другой колебательной моды и поэтому, согласно вышеупомянутым правилам отбора, возбуждение от этой моды не может быть передано другим модам. Поэтому дышащая мода будет существовать в течение долгого (в принципе, бесконечного) времени, не вовлекая в колебательное движение никакие другие колебательные моды. Иными словами, если разложить  $\mathbf{X}(t)$  для дышащей моды в соответствии с уравнением (3.3), то получим, что правая часть этого уравнения сводится только к одному слагаемому:

$$\mathbf{X}(t) = c_1(t)\mathbf{\varphi}_1 \equiv a(t)\mathbf{\varphi}_1. \tag{3.5}$$

Здесь зависящий от времени коэффициент  $c_1(t)$  переобозначен как a(t).

Это означает, что дышащая мода представляет собой *точное* решение нелинейных дифференциальных уравнений, описывающих динамику нашей механической системы для *пюбого типа* межатомных взаимодействий. Явный вид дифференциального уравнения для зависящего от времени коэффициента a(t) можно найти, если в полную исходную систему  $3 \times 6 = 18$  нелинейных уравнений подставить выражение (3.5) с учетом конкретного типа межатомных взаимодействий. Таким образом можно установить, что приведенная выше система 18 уравнений сводится к одному дифференциальному уравнению для a(t). Подчеркнем, что a(t) действительно зависит от межатомных взаимодействий, в то время как картина атомных смещений не зависит от этих сил и может быть найдена только с помощью теоретико-групповых методов (см. Таблицу 2).

Таким образом, дышащая мода представляет собой одномерный буш с группой симметрии  $O_h$  и обозначается символом  $B[O_h]$ . В [7] приведен явный вид дифференциального уравнения для a(t) в случае произвольного парного межатомного потенциала U(r), а также для потенциала Леннарда-Джонса.

Другая ситуация возникает при возбуждении моды  $\phi_2$  путем отклонения атомов фтора из положения равновесия согласно картине атомных смещений,

приведенной в Таблице 2. Собственная точечная симметрия этого режима описывается группой  $G_2=D_{4h}$ , являющейся подгруппой группы симметрии системы в состоянии равновесия  $G_0=O_h$  ( $D_{4h}\subset O_h$ ). Картина атомных смещений, связанный с  $\varphi_2$ , представляет собой октаэдр с квадратным основанием, образованный атомами 2, 3, 4, 5 (см. Рис. 3.1), и атомами 1, 6, расположенных на оси Z, и смещенных на одинаковое расстояние из их равновесных положений в сторону от основания октаэдра. На Рис. 3.1 вышеперечисленные смещения всех шести F атомов изображены стрелками. В отличие от случая возбуждения дышащей моды, в данном случае мода  $\varphi_2$  не может существовать независимо от всех других мод. Действительно, ее возбуждение приводит к возбуждению дышащей моды  $\varphi_1$ , группа симметрии которой  $G_1=O_h$  выше, чем группа симметрии  $G_2=D_{4h}$ . Этот вывод является результатом теоретико-группового анализа. Таким образом, получается  $\partial$ вумерный буш  $B[D_{4h}]$  с группой точечной симметрии  $G_2=D_{4h}$ . Общее разложение (3.3) для этого случая примет вид:

$$\mathbf{X}(t) = c_2(t)\mathbf{\varphi}_2 + c_1(t)\mathbf{\varphi}_1 \equiv b(t)\mathbf{\varphi}_2 + a(t)\mathbf{\varphi}_1. \tag{3.6}$$

Здесь  $c_1(t)$  и  $c_2(t)$  переобозначены как a(t) и b(t), соответственно.

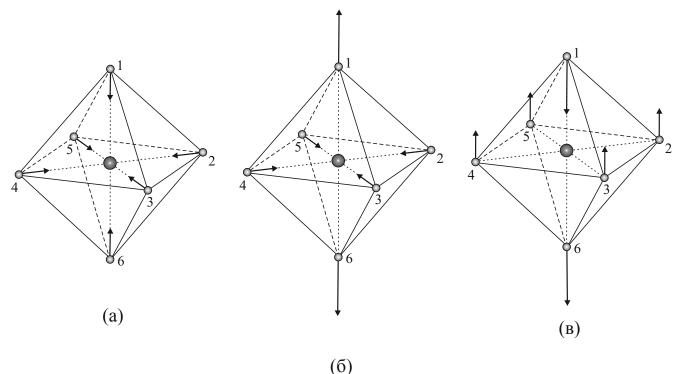


Рисунок 3.2 — Картины атомных смещений мод  $\phi_1$ ,  $\phi_2$  и  $\phi_3$ .

Подстановка выражения (3.6) в систему 18 исходных нелинейных уравнений подтверждает, что все эти уравнения сводятся к двум дифференциальных

уравнениям относительно неизвестных коэффициентов a(t) и b(t). Эти две зависящие от времени функции полностью описывают динамику двумерного буша  $B[D_{4h}]^1$ . Он описывает *квазипериодические* колебания с двумя основными частотами  $\omega_1$  и  $\omega_2$ , соответствующими модам  $a(t)\phi_1$  и  $b(t)\phi_2$  (из-за нелинейности рассматриваемой системы в спектре Фурье такого колебательного режима можно наблюдать не только частоты  $\omega_1$ ,  $\omega_2$ , но и различные их целочисленные комбинации).

Подчеркнем еще раз, что в разложении (3.3) нет других мод, т.е. выражение (3.6) представляет собой точное решение исходных нелинейных уравнений, коэффициенты которого  $c_1(t) = a(t)$  и  $c_2(t) = b(t)$  можно получить как решение двух ведущих дифференциальных уравнений, зависящих от конкретных межатомных взаимодействий.

Заметим, что в колебательном режиме, описываемом бушем  $B[D_{4h}]$ , конфигурация атомов представляет собой октаэдр с квадратным основанием и с атомами 1 и 6, смещенными на одинаковое расстояние в противоположных направлениях (это следствие наличия у группы  $D_{4h}$  горизонтальной зеркальной плоскости, определяемой основанием октаэдра).

Мода  $\varphi_3$  (см. Таблицу 2 и Рис. 3.2), возбуждаемая в начальный момент  $t=t_0$ , порождает *техмерный* буш  $B[C_{4v}]$ , полная симметрия которого совпадает с группой $G_3=C_{4v}$  моды  $\varphi_3$ .

Моды, симметрия которых определяет симметрию всего буша, принято называть "корневыми модами", а другие моды, которые автоматически возбуждаются в результате возбуждения корневой моды, называются "вторичными".

В отличие от группы  $G_2 = D_{4h}$ , в группе  $G_3 = C_{4v}$  нет горизонтальной зеркальной плоскости, поэтому смещения атомов фтора 1 и 6 не должны быть одинаковыми по величине. Вследствие этого октаэдр, соответствующий бушу  $B[C_{4v}]$ , обладает разными высотами, опущенными из атомов 1 и 6 на основание октаэдра, образованное атомами 2, 3, 4, 5.

Таким образом, получаем трехмерный буш  $B[C_{4v}]$ , которому соответствует следующее разложение  $\mathbf{X}(t)$ :

$$\mathbf{X}(t) = c_1(t)\mathbf{\phi}_1 + c_2(t)\mathbf{\phi}_2 + c_3(t)\mathbf{\phi}_3 \equiv a(t)\mathbf{\phi}_1 + b(t)\mathbf{\phi}_2 + c(t)\mathbf{\phi}_3. \tag{3.7}$$

Здесь коэффициенты  $c_1(t)$ ,  $c_2(t)$ ,  $c_3(t)$  переименованы как a(t), b(t), c(t), соответственно. В результате подстановки выражения (3.7) 18 исходных нелинейных

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Отметим, что a(t) в уравнении (3.6) никак не связано с a(t) в формуле (3.5)!

дифференциальных уравнений сводятся к трем ведущим уравнениям (все остальные исходные уравнения оказываются эквивалентными этим ведущим уравнениям), явный вид которых для случая парного потенциала U(r), приведены в [7].

Для всех рассмотренных выше бушей сохраняется симметрия колебательного состояния, а также полный набор мод буша, в то время как амплитуды этих мод [они описываются коэффициентами  $c_i(t)$  в уравнениях (3.5), (3.6), (3.7)] эволюционируют с течением времени.

Итак, было рассмотрено три простейших буша  $B[O_h]$ ,  $B[D_{4h}]$ ,  $B[C_{4v}]$  в молекуле  $SF_6$  в рамках теоретико-группового подхода. Существование этих бушей было подтверждено прямыми численными экспериментами с использованием потенциалов Леннарда-Джонса и Морзе. Однако существует принципиальный вопрос: "Могут ли эти буши существовать в реальных физических системах?". Действительно, при нелинейных колебаниях реальных атомов их электронные оболочки поляризуются, поэтому вовсе не очевидна возможность описания сложного физического процесса такой поляризации (характеризуемого многими степенями свободы!) с помощью простых механических моделей точечных масс, взаимодействие которых описывается посредством парных потенциалов. Необходимо проверить адекватность понятия бушей нелинейных нормальных мод и теоретико-групповых методов их построения в случае реальных физических экспериментов. К сожалению, такие прямые эксперименты, насколько нам известно, не могут быть выполнены с помощью существующих экспериментальных технологий. Однако можно использовать моделирование на основе теории функционала плотности для проверки теории бушей ННМ.

# 3.3 Исследование бушей нелинейных нормальных мод в молекуле $SF_6$ с помощью теории функционала плотности

В данной главе настоящей диссертационной работы для моделирования динамики молекулы  $SF_6$  на основе теории функционала плотности был использован программный пакет ABINIT [17], в котором реализована методика расчета, описанная в Разделе 1.4. При этом применяются: приближение Борна-Оппенгеймера для разделения движения тяжелых ядер и легких электронов, приближение локальной плотности (LDA) и метод псевдопотенциалов.

## **3.3.1** Одномерный буш $B[O_h]$

Прежде всего была рассчитана равновесная конфигурация молекулы  $SF_6$ , в результате чего было установлено, что расстояние между атомом серы и любым атомом фтора составляет  $a_0=1.58$  Ангстрема. Это значение находится в хорошем согласии с экспериментальным значением, которое равно 1.56 Ангстрема.

Далее возбуждались колебания атомов фтора путем смещения в начальный момент времени их ядер из положений равновесия согласно картине атомных смещений для дышащей моды  $\varphi_1$ , которая представляет буш  $B[O_h]$  в Таблице 2 (см. также Рис. 3.2a); затем изучались свободные колебания, возникающие в системе в результате такого возбуждения. На Рис. 3.3 представлена функция a(t) из разложения (3.3) для трех начальных значений a(0). На этом рисунке можно видеть периодические колебания, которые оказываются устойчивыми по крайней мере на временах наблюдения этого динамического процесса. При этом было проверено, что никакие другие моды, кроме первоначально возбужденной дышащей моды  $\varphi_1$  не возбуждаются, что полностью согласуется с результатами теоретикогруппового анализа в предыдущем разделе.

На Рис. 3.4 изображена зависимость частоты дышащей моды от ее амплитуды. Как видно из рисунка, эта зависимость демонстрирует *мягкий тип* нелинейности.

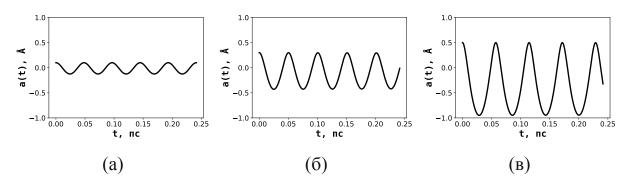


Рисунок 3.3 — Колебания буша  $B[O_h]$  с различными амплитудами.

Стоит отметить, что, согласно Таблице 2, амплитуда моды  $\phi_1$  в  $\sqrt{6}$  раз больше амплитуды смещения отдельного атома из положения равновесия.

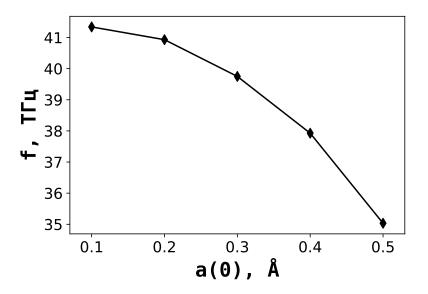


Рисунок 3.4 — Зависимость частоты дышащей моды от ее амплитуды.

## **3.3.2** Двумерный буш $B[D_{4h}]$

Этот буш можно возбудить путем присвоения определенных значений обеим составляющим его модам при t=0:  $a_2(0)=\mu$ ,  $a_1(0)=\nu$  с нулевыми начальными скоростями  $[a_1(0)=0,a_2(0)=0]$ . Буш  $B[D_{4h}]$  может возникнуть только в том случае, если  $a_2(0)\neq 0$  (иначе будет возбуждаться одномерный буш  $B[O_h]$ ). Действительно, симметрия  $\phi_2$  ниже, чем симметрия  $\phi_1$  и, следовательно, мода  $\phi_2$  оказывается корневой модой для двумерного буша  $B[D_{4h}]$ .

Наиболее интересным способом возбуждения буша  $B[D_{4h}]$  является случай  $\mu \neq 0$ ,  $\nu = 0$ . Таким образом, в начальный момент времени возбуждается только корневая мода  $\varphi_2$ , которая должна вовлечь вторичную моду  $\varphi_1$  в колебательный процесс из-за "силового взаимодействия" [2] с модой  $\varphi_2$ , в то время как все остальные колебательные моды молекулы  $SF_6$  должны оставаться невозбужденными.

На Рис. 3.5 представлены результаты такого возбуждения буша  $B[D_{4h}]$ . Из этого рисунка видно, что мода  $\phi_1$ , будучи нулевой при t=0, постепенно вовлекается в колебательный процесс.

Каждый буш может рассматриваться как замкнутая гамильтонова система. В случае буша  $D_{4h}$  такая система описывается двумя динамическими переменными  $a_1(t) = a(t)$ ,  $a_2(t) = b(t)$ . В [2; 84] изучались "классы динамической универсальности" бушей. Это понятие естественно возникает при разложении

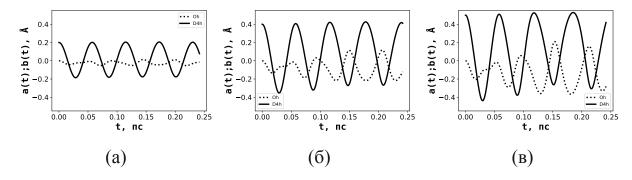


Рисунок 3.5 — Динамика буша  $B[D_{4h}]$  с различными амплитудами корневой моды.

потенциальной энергии разных бушей во многомерные ряды Тейлора. Действительно, оказывается, что многие буши в разных физических системах и даже в одной и той же системе обладают идентичными формами разложения потенциальной энергии до некоторой степени. По этой причине интересно проанализировать разложение потенциальной энергии буша  $B[D_{4h}]$ . Это можно сделать следующим образом.

Выберем некоторую сетку в пространстве двух переменных  $\mu$  и  $\nu$ . Каждый узел этой сетки определяет значения динамических переменных a(t) и b(t) буша  $B[D_{4h}]$  при t=0. Линейная комбинация векторов мод  $\phi_1$ ,  $\phi_2$  с коэффициентами  $\mu_{ij}$ ,  $\nu_{ij}$ , соответствующих выбранным (i,j), определяет некоторую картину смещений атомов фтора:

$$\mathbf{X}_{ij}(0) = \mu_{ij}\boldsymbol{\varphi}_1 + \mathbf{v}_{ij}\boldsymbol{\varphi}_2 \tag{3.8}$$

и, следовательно, определенную начальную конфигурацию молекулы  $SF_6$ .

С другой стороны, используя ABINIT, можно найти потенциальную энергию  $u_{ij}$  этой конфигурации [для каждого узла эта программа находит электронную плотность, соответствующую положениям атомов фтора, определяемых (3.8)]. Тогда можно построить потенциальную энергию U(a,b) как многочлен фиксированной степени в переменных a,b:

$$U(a,b) = \sum_{m,n} \gamma_{mn} a^m b^n. \tag{3.9}$$

Коэффициенты  $\gamma_{mn}$  были определены методом наименьших квадратов (напомним, что a и b суть динамические переменные, соответствующие модам,

входящим в данный буш). В результате была получена следующая потенциальная энергия U(a,b) буша  $B[D_{4h}]$ :

$$U(a,b) = 0.13418b^{2} + 0.19269a^{2} - 0.20382ab^{2} + 0.04220b^{3} - 0.09507a^{3} - 0.04813ab^{3} + 0.12396a^{2}b^{2} + 0.03085b^{4} + 0.03013a^{4}.$$
(3.10)

Здесь приведены только те слагаемые в U(a,b), которые допускаются группой симметрии  $D_{4h}$ , т. е. выраженит (3.10) представляет собой разложение U(a,b) по первым *полиномиальным инвариантам* [2] группы  $G = D_{4h}$ .

При построении U(a,b) с помощью метода наименьших квадратов были также вычислены полиномиальные члены, которые не допускаются группой симметрии  $D_{4h}$ , чтобы убедиться в достаточной их малости (около  $10^{-3}-10^{-4}$ ).

Заметим, что аналогичное выражение для U(a,b) было получено в [7] с помощью разложения в ряд Тейлора точной потенциальной энергии для октаэдрической механической структуры, частицы которой взаимодействуют посредством потенциала Леннарда-Джонса.

Теперь можно написать уравнения Ньютона для двумерной системы, соответствующей бушу  $B[D_{4h}]$ :

$$\ddot{a} + 0.38538a = 0.28521a^{2} + 0.20382b^{2} - 0.24791ab^{2} - 0.12051a^{3} + 0.04813b^{3},$$

$$\ddot{b} + 0.26835b = b(-0.12658b + 0.40763a - 0.12340b^{2} - 0.24791a^{2} + 0.14440ab).$$
(3.11)

Из этих уравнений видно "неравенство прав" корневой и вторичной моды. Действительно, если возбудить при t=0 только вторичную моду a(t) заданием соответствующих начальных условий  $[a(0)\neq 0,\,\dot{a}(0)=b(0)=\dot{b}(0)=0],$  она будет эволюционировать в течение произвольного долгого времени согласно уравнению  $\ddot{a}+0.38538a=0.28521a^2-0.12051a^3,$  тогда как корневая мода не возбудится:  $b(t)\equiv 0.$  В противном случае, когда только корневая мода b(t) возбуждается начальными условиями  $[b(0)\neq 0,\,\dot{b}(0)=a(0)=\dot{a}(0)=0],$  вторичная мода a(t) не может быть равна нулю, поскольку существуют "внешние" силы, пропорциональные  $b^2(t)$  и  $b^3(t)$  в правой части первого уравнения (3.11).

Согласно теории бушей (см. [2]), этот факт является прямым следствием разницы между симметриями мод  $a(t) \mathbf{\phi}_1$  и  $b(t) \mathbf{\phi}_2$ , которые описываются группами  $O_h$  и  $D_{4h}$  соответственно (группа  $D_{4h}$  является nodгруппой группы  $O_h$ ).

## **3.3.3** Трехмерный буш $B[C_{4v}]$

Согласно уравнению (3.7), трехмерный буш  $B[C_{4v}]$  можно записать в виде

$$\mathbf{X}(t)[C_{4v}] = a(t)\mathbf{\phi}_1 + b(t)\mathbf{\phi}_2 + c(t)\mathbf{\phi}_3. \tag{3.12}$$

Здесь  $\varphi_1$ ,  $\varphi_2$ ,  $\varphi_3$  – колебательные моды из Таблицы 2, которые определяют картины смещений атомов фтора в молекуле  $SF_6$ , а a(t), b(t), c(t) – зависящие от времени функции, описывающие эволюцию буша во времени.

Как уже обсуждалось, группы симметрии мод  $\phi_1$ ,  $\phi_2$ ,  $\phi_3$  суть  $O_h$ ,  $D_{4h}$ ,  $C_{4v}$ , соответственно. Между этими точечными группами существует следующее соотношение:

$$O_h \supset D_{4h} \supset C_{4v}. \tag{3.13}$$

Таким образом, мода  $\varphi_3$  имеет самую низкую симметрию среди трех мод буша  $B[C_{4v}]$  и, следовательно, она оказывается корневой модой этого буша. Точечная группа всего буша  $B[C_{4v}]$  совпадает с группой моды  $\varphi_3$ . Моды  $\varphi_2$  и  $\varphi_1$  являются вторичными модами рассматриваемого буша и, согласно общей теории бушей [2], они должны автоматически вовлекаться в колебательный процесс вследствие начального возбуждения корневой моды  $\varphi_3$ .

Чтобы проверить это предсказание, было выполнено моделирование колебаний молекулы  $SF_6$  с помощью программного пакета ABINIT. Результаты этого моделирования представлены на Рис. 3.6 для трех разных значений начальных амплитуд c(0) корневой моды  $\phi_3$  (две другие начальные амплитуды, также как и скорости всех трех мод буша  $B[C_{4v}]$  считаются нулевыми). Этот рисунок иллюстрирует возбуждение вторичных мод  $\phi_2$  и  $\phi_3$  из-за их взаимодействия с корневой ННМ  $\phi_3$ .

С помощью метода наименьших квадратов, как и для буша  $B[D_{4h}]$ , было получено следующее полиномиальное выражение для потенциальной энергии U(a,b,c) буша  $B[C_{4v}]$  как функции трех переменных a,b,c:

$$U(a,b,c) = 0.19280a^{2} + 0.15057c^{2} + 0.13254b^{2} + 0.21180bc^{2} - 0.23103ac^{2} - 0.22387ab^{2} + 0.04395b^{3} - 0.08708a^{3} + 0.02772c^{4} + 0.16522b^{2}c^{2} + 0.03186b^{4} - 0.2562abc^{2} - 0.05031ab^{3} + 0.13336a^{2}c^{2} + 0.13581a^{2}b^{2} + 0.02575a^{4}.$$

$$(3.14)$$

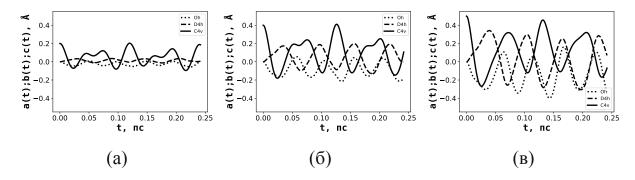


Рисунок 3.6 — Динамика буша  $B[C_{4v}]$  с различными амплитудами корневой моды.

Заметим, что только полиномиальные *инварианты* группы  $G_3=C_{4v}$  дают существенные вклады в U(a,b,c) (все остальные полиномиальные члены, полученные методом наименьшего квадрата, оказываются довольно маленькими).

Весьма интересно отметить, что согласно теоремам, доказанным в [2], соотношение (3.13) обеспечивает особую структуру динамических уравнений буша  $B[C_{4v}]$ , Действительно, в потенциальную энергию U(a,b,c) входят инварианты, которые являются *линейными* по вторичным модам и содержат при этом некоторые степени корневой моды. Такие инварианты есть в уравнении (3.14):

$$c^2a, c^2b.$$
 (3.15)

Динамические уравнения Ньютона для буша  $B[C_{4v}]$  как замкнутой гамильтоновой системы можно записать следующим образом:

$$\ddot{a} + 0.3856a = 0.26125a^{2} + 0.22387b^{2} + 0.23103c^{2} - 0.10301a^{3} + + 0.05031b^{3} - 0.27163ab^{2} - 0.26672ac^{2} + 0.256bc^{2},$$

$$\ddot{b} + 0.26508b = -0.13184b^{2} - 0.21180c^{2} + 0.44775ab - 0.12743b^{3} - - 0.27163a^{2}b + 0.15093ab^{2} + 0.256ac^{2} - 0.33045bc^{2},$$

$$\ddot{c} + 0.30114c = c(0.46205a - 0.42361b - 0.11087c^{2} - 0.26672a^{2} + + 0.512ab - 0.33045b^{2}).$$

$$(3.16)$$

Инварианты (3.15) порождают в правой части уравнений (3.16) cилы, которые действуют со стороны корневой моды c(t) на вторичные моды a(t) и b(t). Именно эти силы и формируют буш как единый динамический объект. Полный набор его мод сохраняется во времени, а их амплитуды a(t), b(t), c(t) изменяются.

# **3.3.4** Нелинейность в динамике молекулы $SF_6$

В настоящей диссертационной работе рассматриваются существенно нелинейные колебания молекулы  $SF_6$ . К сожалению, нам неизвестны экспериментальные данные, которые позволили бы провести прямое сравнение с нашими результатами. Однако в случае колебаний с малыми амплитудами эти результаты должны согласоваться с результатами анализа линейных нормальных мод. Обсудим этот момент более подробно.

Полученные в гармоническом приближении линейные нормальные моды представляют собой синусоидальные колебания, частоты которых не зависят от их амплитуд, и все такие моды не зависят друг от друга. Это означает, что если в рассматриваемой системе возбудить только одну ЛНМ, то она существует произвольно долго без возбуждения каких-либо других нормальных мод.

Результаты проведенного моделирования демонстрируют нарушение этих свойств для колебаний с большими амплитудами. Из Рис. 3.3 видно, что колебания моды  $a(t) \varphi_1$  с группой симметрии  $O_h$  не являются строго синусоидальными. Частота f этой моды зависит от ее амплитуды A (зависимость f(A) на Рис. 3.4). Для малых амплитуд частота изменяется незначительно, при больших же амплитудах происходит значительное уменьшение f(A) с увеличением амплитуды. Поэтому колебания  $a(t) \varphi_1$  демонстрируют мягкий тип нелинейности. В пределе  $A \to 0$  частота обсуждаемой моды примерно равна 21.28 ТГц. Это значение можно сравнить с частотами 21.52 ТГц [112] и 21.69 ТГц [113] для моды  $A_g$ , которые были найдены с помощью программного пакета  $DMol_3$  и экспериментальным значением 23.15 ТГп.

На Рис. 3.5 можно видеть взаимодействие между колебательными модами  $b(t) \mathbf{\phi}_2$  и  $a(t) \mathbf{\phi}_1$ , симметрия которых  $D_{4h}$  и  $O_h$ , соответственно. Действительно, в начальный момент t=0 возбуждался только мода  $b(t) \mathbf{\phi}_2$  (корневая мода). Однако возбуждение от этой моды постепенно переходит к моде  $a(t) \mathbf{\phi}_1$ , которая является вторичной модой [ее симметрия выше, чем у моды  $b(t) \mathbf{\phi}_2$ ]. Взаимодействие между указанными выше модами важно, так как амплитуда вторичной моды достигает порядка 30% начальной амплитуды корневой моды. Более того, динамика вторичной моды радикально отличается от простых синусоидальных колебаний, и эта разница становится все более заметной с увеличением амплитуды корневой моды.

Главное, что возбуждение от корневой моды передается только одной из всех других ННМ, и именно той, которая должна возбуждаться в соответствии с теорией бушей (возбуждение передается только модам с более высокой или равной симметрией).

В рассматриваемом случае вторичная мода a(t)  $\phi_1$  связана с двумерным неприводимым представлением, традиционно обозначаемым оптическим символом  $E_g$ . Частота  $f[D_{4h}]$  этой моды для колебаний малой амплитуды была получена с ошибкой 9% по сравнению с ее экспериментальным значением, а частота корневой моды  $f[O_h]$  рассчитана с ошибкой 8%. Однако интересно отметить, что найденное в наших расчетах отношение  $f[O_h] \setminus f[D_{4h}]$  оказалось равным 1.2, что почти точно совпадает с отношением, полученным из экспериментальных данных.

Все рассмотренные выше проявления нелинейности в динамике двумерного буша  $B[D_{4h}]$  можно найти и во временной эволюции трехмерного буша  $B[C_{4v}]$ , динамика которого показана на Рис. 3.6. Из этого рисунка видно, что две колебательные моды  $a(t) \mathbf{\varphi}_1$  и  $b(t) \mathbf{\varphi}_2$  (только эти моды!) вовлекаются в колебательный процесс из-за взаимодействия с корневой модой  $c(t) \mathbf{\varphi}_3$ , связанной с трехмерным НП  $F_n^1$ .

Согласно [113], спектр инфракрасного поглощения  $SF_6$  состоит из двух полос, максимумы которых расположены в  $f_3=28.12$  ТГц и  $ff_4=17$  ТГц. Обе эти нормальные моды являются троекратно вырожденными, так как они принадлежат НП  $F_u^1$ . Наша грубая оценка частоты моды  $c(t)\phi_3$  в случае малых амплитуд дает  $f[C_{4v}]=16$  ТГц, что позволяет идентифицировать эту частоту как  $f_4$ .

На Рис. 3.5 и 3.6 ясно видно, что буш с размерностью m>1 представляет собой квазипериодический динамический объект, потому что является суперпозицией мод с разными частотами.

В заключение отметим, что из мод, принадлежащих трехмерному НП  $F_u^1$ , только одна мода c(t)  $\phi_3$  является корневой для буша  $B[C_{4v}]$ . Что произойдет, если изначально возбудить другую моду НП  $F_u^1$ ? Легко понять, что результатом этого станет возбуждение другого буша, который оказывается динамически эквивалентным бушу  $B[C_{4v}]$ . Такие буши называются "динамическими доменами" одного и того же буша в полном соответствии с соответствующим термином теории фазовых переходов в кристаллах. В случае НП  $F_u^1$  существуют три динамических

домена буша  $B[C_{4v}]$ , которые отличаются только направлениями колебаний атомов. Ось симметрии рассмотренного буша  $B[C_{4v}]$  совпадает с осью координат Z, а оси симметрии двух других его доменов совпадают с осями координат X и Y.

Таким образом, с помощью моделирования на основе теории функционала плотности в настоящей диссертационной работе была доказана на конкретном примере молекулы  $SF_6$  справедливость выводов общей теории бушей мод при описании взаимодействия между нелинейными колебательными модами разной симметрии. Именно, было проверено, что теоретико-групповые правила отбора [1] для передачи возбуждения между такими модами полностью выполняются.

### 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.

### Глава 4. Буши нелинейных нормальных мод в графене

### 4.1 Теоретико-групповой анализ

Рассмотрим нелинейные колебания атомов углерода в плоскости монослоя графена, который представляет собой двумерную систему, описываемую пространственной группой симметрии P6mm.

Как было сказано в предыдущей главе, каждый m-мерный буш  $B_j(t)$  представляет собой сохраняющийся во времени набор из m взаимодействующих друг с другом нелинейных нормальных мод:

$$B_j(t) = \sum_{k=1}^{m} c_{jk}(t) \psi_k.$$
 (4.1)

Здесь  $\psi_k - N$ -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  $\psi_k$  представляют собой базисные векторы различных неприводимых представлений группы симметрии  $G_0$  рассматриваемой системы (для монослоя графена  $G_0 = P6mm$ ). Каждый вектор  $\psi_k$  определяет конкретную картину атомных смещений со своей собственной группой симметрии  $G_k \subseteq G_0$ . Любой вектор  $\delta_j$ , соответствующий некоторому бушу (и, вообще говоря, любому динамическому режиму в рассматриваемой системе), можно записать в виде суммы вкладов от разных НП группы  $G_0$ :

$$\delta_j = \sum_i \delta(\Gamma_i). \tag{4.2}$$

В рамках теории бушей было доказано [3], что из (4.2) можно получить следующие инвариантные соотношения для индивидуальных неприводимых представлений  $\Gamma_i$ :

$$(\Gamma_i \downarrow G_i) \mathbf{c}_i = \mathbf{c}_i \tag{4.3}$$

для всех  $\Gamma_i$  группы  $G_j$ . Здесь  $(\Gamma_i \downarrow G_j)$  является *ограничением* НП  $\Gamma_i$  группы  $G_0$  на ее подгруппе  $G_j^{-1}$ . Вектор, удовлетворяющий соотношению (4.3), называется

 $<sup>^1</sup>$  Это ограничение состоит из всех матриц НП  $\Gamma_i$  группы  $G_0$ , которые соответствуют элементам симметрии только группы  $G_j(G_j\subseteq G_0).$ 

инвариантным вектором НП  $\Gamma_i$ . В общем случае инвариантный вектор заданного НП зависит от ряда произвольных параметров, которые будем обозначать буквами a,b,c,d и т. д. Для простоты будем обозначать вышеприведенные произвольные параметры для разных  $\Gamma_i$  одними и теми же буквами, то есть по умолчанию они считаются различающимися для различных НП.

Процедура построения бушей ННМ начинается с нахождения всех неэкивиалентных инвариантных векторов каждого НП (алгоритм этой процедуры был развит в [3]). Таким образом можно выбрать все подгруппы  $G_j$  группы  $G_0$ , связанные с набором инвариантных векторов этого НП. Затем фиксируется конкретное НП  $\Gamma_i$ , один из его инвариантных векторов  $c_j$  и просматриваются все НП группы  $G_0$  для определения тех из них, которым могут соответствовать вторичные моды буша (каждый буш определяется парой  $\Gamma_i$  и  $c_j$ ). Затем для каждого ограничения ( $\Gamma_i \downarrow G_j$ ) находится инвариантный вектор путем решения системы линейных алгебраических уравнений (4.3). В результате получается «полный конденсат параметров порядка» [9; 10; 114], который определяет множество произвольных коэффициентов, входящих в линейную комбинацию базисных векторов НП  $\Gamma_i$ . Для случая колебательных бушей эти базисные векторы должны быть построены в пространстве всех атомных смещений. Эта процедура позволяет определить явный вид картины атомных смещений  $\delta_j$ , которая является инвариантной относительно выбранной группы  $G_i(G_i \subseteq G_0)$ .

Вышеописанный алгоритм реализован в виде комплекса программ, который позволяет построить буши ННМ для *любого* кристалла.

Продемонстрируем механизм построения бушей на примере четырехмерного колебательного буша B[Cmm2] в графене с родительской группой симметрии  $G_0 = P6mm$ . Одно из НП этой группы – представление  $\Gamma_i = \Gamma_{12-2}{}^2$ . У рассматриваемого представления четыре неэквивалентных инвариантных вектора: (a,a,a), (a,a,0), (a,0,0), (a,b,c). Пространственные группы, относительно которых инвариантны эти вектора, суть P6, Cmm2, Pba2 и P112, соответственно.

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>Неприводимые представления пространственных групп симметрии характеризуются двумя индексами, одним из которых является волновой вектор k, непрерывно изменяющийся внутри примитивной ячейки обратной решетки (в качестве такой ячейки обычно выбирается зона Бриллюэна). Второй (дискретный) индекс — это номер НП группы симметрии вышеупомянутого волнового вектора k. Неприводимые представления последней группы часто называют «малыми НП», в отличие от полных НП, которые определяются звездой вектора k (она получается путем действия на этот вектор всеми точечными элементами рассматриваемой пространственной группы). Неприводимые представления всех 230 пространственных групп можно найти в справочнике [115]

Рассмотрим инвариантный вектор (a,a,0). Он соответствует корневой моде следующей формы:

$$\delta[\Gamma_{12-2},(a,a,0)] = a\phi_1 + a\phi_2 + 0\phi_3, \tag{4.4}$$

где  $\varphi_1$ , (i=1..3) являются базисными векторами НП  $\Gamma_{12-2}$ , которые построены в пространстве всех атомных смещений. Эти 16-мерные векторы представлены в Таблице 3. Для каждого атома приведены его смещения вдоль оси X и Y косоугольной системы координат (угол между осями X и Y составляет 120 градусов, а ось Z перпендикулярна плоскости XY). Нумерация атомов графена дана в соответствии с Рис. 4.1.

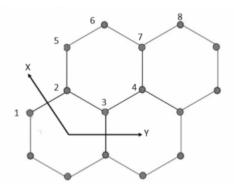


Рисунок 4.1 — Фрагмент решетки графена с нумерацией атомов

Теперь рассмотрим все вторичные моды, соответствующие указанной выше корневой моде. С помощью теоретико-групповых методов можно установить, что этой корневой моде соответствуют только две вторичные моды, одна из которыз соответствует двумерному НП  $\Gamma_{16-6}$ , а другая — трехмерному НП  $\Gamma_{12-1}$ . Картины атомных смещений, отвечающие этим модам, можно записать в виде:

$$\delta[\Gamma_{12-1},(a,-a,b)] = a\psi_1 - a\psi_2 + b\psi_3, 
\delta[\Gamma_{16-6},(a,-(\sqrt{3}/2)a)] = a\xi_1 - (\sqrt{3}/2)a\xi_2.$$
(4.5)

Заметим, что термин «мода» здесь используется для любой линейной комбинации базисных векторов неприводимого представления, которая может зависеть от ряда произвольных параметров (каждая мода соответствует некоторой группе симметрии колебательного состояния кристалла). В приведенном выше примере мода, соответствующая НП  $\Gamma_{16-6}$ , зависит только от одного параметра (a), а мода, соответствующая НП  $\Gamma_{12-1}$ , зависит от двух параметров (a, b).

В Таблице 3 приведены базисные векторы указанных выше НП  $\Gamma_{16-6}$  и  $\Gamma_{12-1}$ , порождающих вторичные моды. Таким образом, получаем окончательный вид рассматриваемого колебательного буша B[Cmm2]:

Таблица 3 — Картины атомных смещений, соответствующие базисным векторам неприводимых представлений группы симметрии графена  $G_0 = P6mm$ 

Атом		1		2	F J -	3		4		5		6		7		8
Вектор		1				3		•				0		,		0
$\mathbf{\phi}_1(\Gamma_{12-2})$	0	-1	0	-1	0	-1	0	-1	0	1	0	1	0	1	0	1
$\mathbf{\phi}_2(\Gamma_{12-2})$	-1	0	1	0	1	0	-1	0	1	0	-1	0	-1	0	1	0
$\mathbf{\phi}_3(\Gamma_{12-2})$	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1
$\mathbf{\psi}_1(\Gamma_{12-1})$	2	1	2	1	2	1	2	1	-2	-1	-2	-1	-2	-1	-2	-1
$\boldsymbol{\psi}_2(\Gamma_{12-1})$	-1	-2	1	2	1	2	-1	-2	1	2	-1	-2	-1	-2	1	2
$\mathbf{\psi}_2(\Gamma_{12-1})$	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1
$\chi_1(\Gamma_{16-6})$	-2	-1	2	1	-2	-1	2	1	-2	-1	2	1	-2	-1	2	1
$\mathbf{\chi}_2(\Gamma_{16-6})$	0	$-\sqrt{3}$	0	$\sqrt{3}$	0	$-\sqrt{3}$	0	$\sqrt{3}$	0	$-\sqrt{3}$	0	$\sqrt{3}$	0	$-\sqrt{3}$	0	$\sqrt{3}$

$$\delta(B[Cmm2]) = (a\phi_1 + a\phi_2) + (a\psi_1 - a\psi_2 + b\psi_3) + (a\xi_1 - (\sqrt{3}/2)a\xi_2).$$
(4.6)

Здесь вклады от отдельных НП заключенны в скобки с разными значениями параметра для разных представлений. Следующая картина атомных смещений соответствует рассматриваемому бушу:

$$\delta(B[Cmm2]) = (A, B|2C, -C|2D, -D| - A, A + B| |A, -A - B| - 2D, D| - 2C, |-A, -B|.$$
(4.7)

Этот выражение определяет мгновенные x- и y-смещения всех восьми атомов примитивной ячейки графена в колебательном состоянии, и зависит от четырех произвольных параметров A, B, C, D.

В некотором смысле теория бушей представляет собой обобщение теории полного конденсата параметров порядка, которая была развита ранее в рамках изучения структурных фазовых переходов [9; 10; 114] (в свою очередь, это обобщение теории Ландау фазовых переходов второго рода [105]).

Особенно важную роль в теории Ландау играют так называемые соразмерные переходы [105], при которых объем примитивной ячейки в низкосимметричной фазе в *целое* число раз больше, чем в высокосимметричной фазе. В рамках этой теории было доказано, что для устойчивости низкосимметричной фазы по отношению к длинноволновым флуктуациям требуется выполнение так называемого мягкого условия Лифшица [105], согласно которому структура низкосимметричной фазы должна соответствовать неприводимому представлению

группы  $G_0$ , связанному с одной из точек выделенной симметрии в зоне Бриллюэна<sup>3</sup>.

При рассмотрении нелинейных колебаний кристаллической решетки, мы также имеем дело с понижением симметрии от  $G_0$  в состоянии равновесия до  $G_j$  в колебательном состоянии  $(G_0 \rightarrow G_j)$ . В связи с этим, анализируя нелинейные колебания в кристалле, мы также рассматриваем только те колебательные состояния, которые описываются НП, соответствующими точкам выделенной симметрии в зоне Бриллюэна, поскольку им должны отвечать устойчивые состояния равновесия. Как следствие, примитивная ячейка такого колебательного состояния (как уже говорилось, мы называем ее расширенная элементарная ячейка – РЕЯ) оказывается в целое число раз больше, чем примитивная ячейка графена в состоянии равновесия.

Как уже отмечалось, неприводимые представления пространственных групп определяются двумя индексами [115]: волновым вектором в зоне Бриллюэна и номером НП группы симметрии этого вектора. В зоне Бриллюэна пространственной группы P6mm [115] имеются три точки выделенной симметрии. Они определяются волновыми векторами  $k_{16}=(0,0),\,k_{12}=(1/2,0)$  и  $k_{13}=(1/3,1/3).$  Вектору  $k_{16}$  соответствуют четыре одномерных и два двумерных НП, вектору  $k_{12}$  - четыре трехмерных НП, вектору  $k_{13}$  – два двумерных и одного четырехмерное НП.

С помощью указанных выше теоретико-групповых методов в настоящей диссертационной работе было установлено, что для структуры графена существуют 4 одномерных, 12 двумерных, 1 трехмерный и 6 четырехмерных бушей мод, соответствующих точкам выделенной симметрии в зоне Бриллюэна.

На Рис. 4.2 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. 4.2 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 (4.1), 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.

 $<sup>^{3}</sup>$ НП, связанные с линиями и плоскостями симметрии в зоне Бриллюэна, порождают несоразмерные структуры.

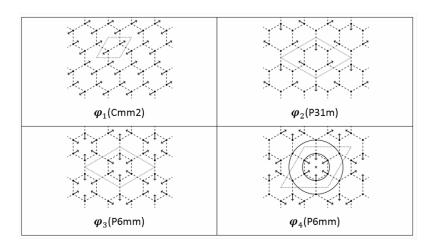


Рисунок 4.2 — Картины атомных смещений для ННМ  $\psi_1 - \psi_4$ . Для каждой моды указана соответствующая ей группа симметрии.

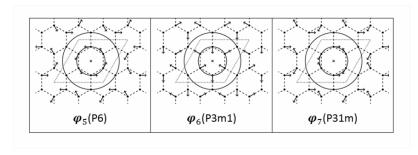


Рисунок 4.3 — Картины атомных смещений для ННМ  $\psi_5 - \psi_7$ . Для каждой моды указана соответствующая ей группа симметрии.

# 4.2 Динамика бушей ННМ в монослое графена

В настоящей диссертационной работе исследование динамики бушей ННМ в монослое графена проводилось с помощью программного пакета Quantum Espresso [15; 16], в котором реализована методика расчета, описанная в Разделе 1.4., с использованием тех же приближений, что и в предыдущей главе.

Рассмотрим буш  $B_3(t)$  с группой симметрии  $G_3=P6mm$ . В уравнении (4.1) ему соответствует только одно слагаемое,  $c_{31}(t) \varphi_{31}$ . Стрелки на рис. 4.2 показывают величины и направления смещений атомов в некоторый фиксированный момент времени. Временная эволюция этих смещений определяется только одной функцией,  $c_{31}(t)$ . Здесь  $\varphi_{31}$  является 12-мерным вектором, так как РЭЯ этого буша содержит 6 атомов, колебания каждого из которых в плоскости описывается двумя степенями свободы. Компоненты вектора  $\varphi_{31}$  определяют направления атомных колебаний всех атомов в РЭЯ, а временная эволюция определяется единственной функцией  $c_{31}(t)$ . Поэтому одномерный буш  $B_3(t)$  описывает синхронные колебания всех атомов графена. Если функция  $c_{31}(t)$  равна нулю в некоторый момент времени, то все атомы проходят через свои положения равновесия, а дальнейшая эволюция приводит к изменению направлений смещений атомов на противоположные.

Одномерный буш описывает однопараметрический динамический режим, поскольку положения всех атомов графена определяются в любой момент времени t только одним параметром  $c_{31}(t)$ . В заключение отметим, что все стрелки для буша  $B_3(t)$  на рис. 4.2 (как и на всех аналогичных рисунках), будучи различными по направлениям, равны по длине. Это можно объяснить тем, что вектор  $\phi_{31}$  является базисным вектором некоторого одномерного НП группы симметрии графена.

Стоит отметить, что в данной и следующей главах настоящей диссертационной работы все ННМ нормированы так, чтобы амплитуда моды была равна амплитуде смещения атома из положения равновесия.

Рассмотрим свойства нелинейных колебаний, описываемых зависящей от времени функцией  $c_{31}(t)$ . Прежде всего, возникает технический вопрос: «Как можно понять, что после выбора определенных начальных смещений всех атомов углерода в РЭЯ конкретный одномерный буш возникает в компьютерном эксперименте?» Если определенный одномерный буш возникает в результате вышеупомянутого выбора начальных условий для компьютерного моделирования, временная эволюция всех атомов в РЭЯ должна быть одинаковой, в противном же случае временная эволюция разных атомов будет различной.

На Рис. 4.4 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. 4.5 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

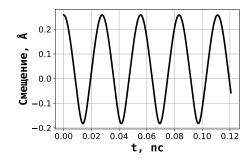
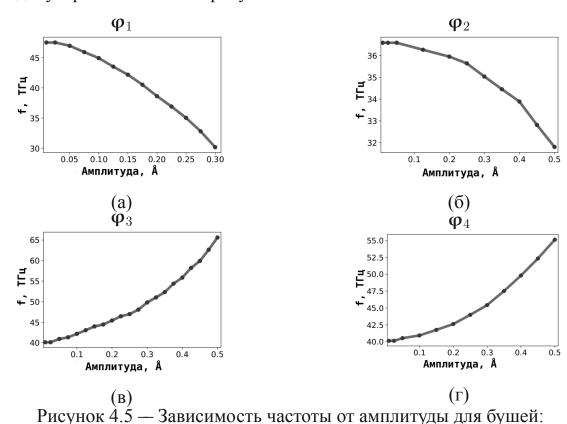


Рисунок 4.4 — Колебания одного атома углерода, соответствующие бушу  $B_3(t)$ .

увеличением амплитуды), а для бушей  $B_3(t)$  и  $B_4(t)$  – жесткий тип нелинейности (частота увеличивается с увеличением амплитуды).

Интересно отметить, что в режимах, соответствующих бушам  $B_1(t)$  и  $B_3(t)$ , колеблются все атомы графена, а в режимах, соответствующих бушам  $B_2(t)$  и  $B_4(t)$ , некоторые атомы неподвижны (см. Рис. 4.2). Эти атомы фиксированы в положениях, соответствующих точкам, через которые проходят оси симметрии, перпендикулярные плоскости рисунков.



Нами также было проведено моделирование динамики двумерных бушей  $B_5(t)$ – $B_7(t)$ , результаты которого приведены на Рис. 4.6. В начальный момент времени возбуждалась только корневая мода соответствующего буша ( $\psi_5$  для буша  $B_5(t)$ ,  $\psi_6$  – для  $B_6(t)$  и  $\psi_7$  для буша  $B_7(t)$ ). Из рисунков видно, что вторичная мода,

(a)  $B_1$ , (б)  $B_2$ , (в)  $B_3$ , (г)  $B_4$ .

 $\psi_4$ , 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.

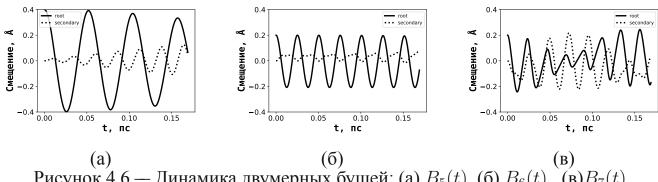


Рисунок 4.6 — Динамика двумерных бушей: (а)  $B_5(t)$ , (б)  $B_6(t)$ , (в)  $B_7(t)$ . Корневой моде соответствует сплошная линия, а вторичной - пунктирная.

## 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.

## Глава 5. Нелинейные нормальные моды в алмазе

## 5.1 Группа симметрии алмаза и ее неприводимые представления

Группа пространственной симметрии структуры алмаза в равновесном состоянии суть  $Fd\bar{3}m$  в международных обозначениях или  $O_h^7$  в обозначениях Шенфлиса. Примитивная ячейка содержит два атома углерода, а ее ребра определяются векторами  ${\bf a}_1=(a,a,0), {\bf a}_2=(a,0,a), {\bf a}_3=(0,a,a).$  Здесь приведены декартовы координаты этих векторов, a=1.79 Å. Так как группе  $Fd\bar{3}m$  соответствует гранецентрированная решетка Браве, то эти вектора направлены из угла ячейки Бравэ к центрам трех смежных граней, пересекающихся в этом углу.

В примитивной ячейке находятся два атома углерода и, следовательно, 8 атомов в ячейке Бравэ. Эти атомы расположены в узлах решетки и в четырех дополнительных точках внутри ячейки, декартовы координаты которых суть  $(\frac{1}{4},\frac{1}{4},\frac{1}{4}), (\frac{3}{4},\frac{3}{4},\frac{1}{4}), (\frac{3}{4},\frac{1}{4},\frac{3}{4}), (\frac{1}{4},\frac{3}{4},\frac{3}{4})$  для кубической ячейки с единичными ребрами.

Когда атомы углерода начинают колебаться вблизи равновесных положений структуры алмаза, симметрия  $(G_j)$  колебательного состояния становится ниже симметрии  $(G_0 = Fd\bar{3}m)$  этого кристалла в равновесном состоянии. Ниже будут подробно обсуждены колебательные режимы, соответствующие двум ННМ, связанным с неприводимыми представлениями 11-7 и 10-3 алмазной пространственной группы  $Fd\bar{3}m$ . Используя теоретико-групповые методы [3], было обнаружили, что пространственные группы  $G_j$  этих мод суть  $R\bar{3}m$  и  $P4_132$  (в обозначениях Шенфлиса  $D_{3d}^5$  и  $O^7$  соответственно), которые являются подгруппами группы  $Fd\bar{3}m$ .

Неприводимые представления пространственной группы Fd3m соответствуют следующим волновым векторам  $\mathbf{k}$ , которые определяют точки выделенной симметрии в зоне Бриллюэна:  $\mathbf{k}_{11}=0$ ,  $\mathbf{k}_{10}=\frac{1}{2}(\mathbf{b}_1+\mathbf{b}_2)$ ,  $\mathbf{k}_9=\frac{1}{2}(\mathbf{b}_1+\mathbf{b}_2+\mathbf{b}_3)$  и  $\mathbf{k}_8=\frac{1}{4}\mathbf{b}_1-\frac{1}{4}\mathbf{b}_2+\frac{1}{2}\mathbf{b}_3$ . Вектору  $\mathbf{k}_{11}$  отвечают десять НП (четыре одномерных, два двумерных и четыре трехмерных), вектору  $\mathbf{k}_{10}$  – четыре шестимерных, вектору  $\mathbf{k}_9$  – шесть (четыре четырехмерных и два восьмимерных), вектору  $\mathbf{k}_8$  – два двенадцатимерных. В настоящей работе будут рассмотрены только НП векторов  $\mathbf{k}_{10}$  и  $\mathbf{k}_{11}$  с целью нахождения нелинейных нормальных мод, принадлежащих этим НП.

Два атома углерода алмазной структуры расположены в позиции Вайкоффа 2a примитивной ячейки. Декартовы координаты восьми атомов углерода в кубической ячейке Браве с единичными гранями, которая в четыре раза больше, чем примитивная ячейка, следующие: (0,0,0),  $(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0)$ ,  $(\frac{1}{2},0,\frac{1}{2})$ ,  $(0,\frac{1}{2},\frac{1}{2})$ ,  $(\frac{1}{4},\frac{1}{4},\frac{1}{4})$ ,  $(\frac{3}{4},\frac{3}{4},\frac{1}{4})$ ,  $(\frac{3}{4},\frac{1}{4},\frac{3}{4})$ ,  $(\frac{1}{4},\frac{3}{4},\frac{3}{4})$ .

Из вышеперечисленных 22 НП волновых векторов  $\mathbf{k}_{10}$  и  $\mathbf{k}_{11}$  только следующие представления входят в механическое представление, построенное на атомных смещениях (будем их называть "допустимыми НП"):  $\Gamma_{11-7}$ ,  $\Gamma_{11-10}$ ,  $\Gamma_{10-1}$ ,  $\Gamma_{10-3}$ ,  $\Gamma_{10-4}$ . Для этих НП могут существовать только пять нелинейных нормальных мод. В настоящей работе изучаются две из них. Они относятся к трехмерному НП  $\Gamma_{11-7}$  (мода 1) и к шестимерному НП  $\Gamma_{10-3}$  (мода 2) соответственно. Рассмотрим эти нелинейные нормальные моды более подробно.

### 5.2 HHM 1

Как уже упоминалось, размер примитивной ячейки (и ячейки Бравэ) в равновесном и колебательном состояниях в общем случае не совпадают друг с другом. Размер и форма ячейки в колебательном состоянии кристалла определяются звездой волнового вектора рассматриваемого неприводимого представления.

НП Г11—7 отвечает однолучевой звезде вектора  $\mathbf{k}_{11}=0$ . Это означает, что размер колебательной ячейки равен размеру равновесной ячейки алмаза. Трехмерная картина атомных смещений, соответствующая рассматриваемой моде, представлена на Рис. 5.2 в виде набора плоских сечений, перпендикулярных оси Z. Смещения атомов углерода в плоскости XY обозначены стрелками, а z-смещения обозначаются, как это принято в кристаллографии, окружностями с точкой (направление вдоль оси Z) и с крестом (направление, противоположное оси Z). Важно отметить, что значения всех смещений вдоль направлений X, Y и Z — одинаковые. Атомные смещения для атомов в одной примитивной ячейке представлены в Таблице 4.

Все атомные смещения на Рис. 5.1 изображены в некоторый момент времени  $t_0$ . На этом рисунке можно увидеть несколько атомных слоев (плоских сеток), расположенных на разных расстояниях друг от друга вдоль оси Z. Смещения всех

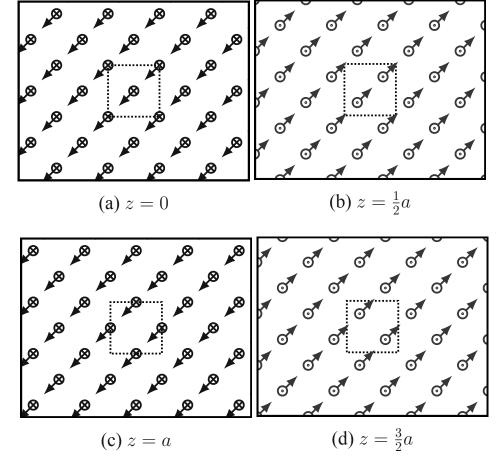


Рисунок 5.1 — Трехмерная картина атомных смещений, соответствующая моде 1, как набор плоских двумерных сечений, перпендикулярных оси Z. Координаты даны в единицах постоянной решетки  $a=1.79~{\rm \AA}.$ 

Таблица 4 — Атомные смещения, соответствующие моде 1, для атомов в одной примитивной ячейке. Здесь a — постоянная решетки, равная 1.79 Å. Амплитуда моды равна  $\sqrt{3}\Delta$ .

No. атома	Позиция атома	[x,y,z]					
		смещения					
1	[0, 0, 0]	$[-\Delta, -\Delta, -\Delta]$					
2	$\left[\frac{1}{2}a, \frac{1}{2}a, \frac{1}{2}a\right]$	$[ \Delta,  \Delta,  \Delta]$					

атомов в каждом слое udenmuuhu. Отметим, что при переходе от одного слоя к другому наблюдается чередование z-компонент смещений всех атомов.

Описанный характер смещений атомов, принадлежащих каждому заданному слою, позволяет говорить о смещении всего слоя как единого целого.

Динамический режим, описываемый рассматриваемой ННМ, может быть получен путем домножения заданной картины атомных смещений на некоторую временную периодическую функцию. Таким образом, смежные атомные слои осциллируют в противофазе по отношению друг к другу, и эти колебания происходят одновременно вдоль осей X, Y и Z.

В горизонтальной плоскости (см. Рис. 5.1) все атомы движутся вдоль диагонального направления XY ячейки Браве. Тем не менее, можно рассмотреть эквивалентное направление  $X\overline{Y}^1$ , соответствующее другой диагонали. Нет никаких физических причин, которые могли бы выделить из этих двух направлений какое-то одно (они симметрийно эквивалентны). Это означает, что должен существовать близнец моды, изображенной на Рис. 5.2. В динамическом режиме, соответствующем этому близнецу, атомы смещаются вдоль направления  $X\overline{Y}$ . Все динамические свойства таких мод-близнецов идентичны. В теории бушей нелинейных нормальных мод такие моды (или их буши) называются "динамическими доменами" по аналогии с соответствующим понятием теории структурных фазовых переходов. Эти объекты обладают одинаковыми динамическими свойствами и преобразуются друг в друга под действием элементов симметрии, которые исчезают при переходе от родительской группы симметрии  $G_0$  к ее подгруппе  $G_i$ . В общем случае существуют n динамических доменов, и это число равно индексу подгруппы  $G_i$  в группе  $G_0$ , т. е.  $N = \|G_0\|/\|G_i\|$  где  $\|G_0\|$  и  $\|G_i\|$  – порядки соответствующих групп. Заметим, что в данном случае  $G_0 = Fd\bar{3}m, G_i = R\bar{3}m$ и n=4. Как следствие, симметрия такого колебательного состояния алмаза в четыре раза ниже, чем у равновесного состояния, потому что вращения на  $180^\circ$ градусов вокруг осей X, Y и Z исчезают при переходе от родительской группы  $G_0$  к ее подгруппе  $G_i$ . Поэтому для структуры алмаза должны существовать три динамических домена в дополнение к домену, показанному на Рис. 5.1.

### 5.3 HHM 2

Нелинейная нормальная мода 2 принадлежит НП  $\Gamma_{10-3}$ , которое соответствует звезде волнового вектора  ${\bf k}_{10}$ . Лучами этой звезды являются векторы  $(\frac{1}{2}{\bf b}_1+$ 

 $<sup>\</sup>overline{\phantom{a}}^{1}$ Здесь  $X\overline{Y}$  обозначает смещение в положительном направлении вдоль оси X и отрицательном вдоль оси Y.

 $\frac{1}{2}$ **b**<sub>2</sub>),  $(\frac{1}{2}$ **b**<sub>1</sub> +  $\frac{1}{2}$ **b**<sub>3</sub>) и  $(\frac{1}{2}$ **b**<sub>2</sub> +  $\frac{1}{2}$ **b**<sub>3</sub>), которые могут быть получены действием на вектор  $\mathbf{k}_{10}$  всех элементов родительской группы  $Fd\bar{3}m$ . Такая форма звезды диктует *удвоение* ребер  $\mathbf{a}_1$ ,  $\mathbf{a}_2$ ,  $\mathbf{a}_3$  примитивной ячейки и, следовательно, удвоение ребер ячейки Бравэ при переходе от равновесного состояния алмазной структуры к колебательному состоянию. Тем не менее, для картины атомных смещений обсуждаемой ННМ сохраняются трансляционные векторы исходной ячейки Браве  $[\mathbf{a}'_1 = -\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2 + \mathbf{a}_3 = (2a, 0, 0)$  и т. д.], которые можно рассматривать как векторы решетки *расширенной элементарной ячейки*, соответствующей моде 1.

Рассмотрим трехмерную картину атомных смещений, представленную на Рис. 5.2. Здесь использованы те же обозначения атомных смещений, как и на Рис. 5.1. Абсолютные значения смещений вдоль осей X, Y и Z равны друг другу.

Из Рис. 5.2 видно, что, в отличие от моды 1, в плоских картинах смещений есть *две* подрешетки (атомные смещения для каждого атома в данном ряду или столбце одинаковы). Иными словами, расстояния между эквивалентными (в смысле их смещений) атомами для плоских картин атомных смещений моды 2 в 2 раза *больше*, чем те, которые соответствуют равновесному состоянию решетки алмаза. Атомные смещения всех атомов в одной ячейке Бравэ представлены в таблице 5.

Таблица 5 — Атомные смещения, соответствующие моде 2, для всех атомов в ячейке Браве. Здесь a — постоянная решетки, равная 1.79 Å. Амплитуда моды равна  $\sqrt{3}\Delta$ .

No. атома	Позиция атома	[x,y,z]
		смещения
1	[0, 0, 0]	$[-\Delta, -\Delta, -\Delta]$
2	$[\tfrac{1}{2}a, \tfrac{1}{2}a, \tfrac{1}{2}a]$	$[ \Delta, \Delta, \Delta]$
3	[0, a, a]	$[ \Delta, -\Delta,  \Delta]$
4	$[\tfrac{1}{2}a, \tfrac{3}{2}a, \tfrac{3}{2}a]$	$[-\Delta, -\Delta, \Delta]$
5	[a, 0, a]	$ \begin{bmatrix} \Delta, \Delta, -\Delta \end{bmatrix} $
6	$[\tfrac32 a, \tfrac12 a, \tfrac32 a]$	$\begin{bmatrix} \Delta, -\Delta, -\Delta \end{bmatrix}$
7	[a, a, 0]	$[-\Delta, \Delta, \Delta]$
8	$\left[\frac{3}{2}a, \frac{3}{2}a, \frac{1}{2}a\right]$	$ [-\Delta, \ \Delta, -\Delta] $

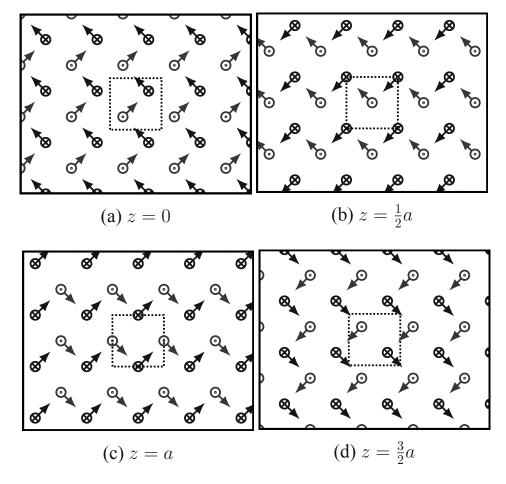


Рисунок 5.2 — Трехмерная картина атомных смещений, соответствующая моде 2, как набор плоских двумерных сечений, перпендикулярных оси Z. Координаты даны в единицах постоянной решетки  $a=1.79~{\rm \AA}$ .

# 5.4 Динамика решетки алмаза, соответствующая нелинейным нормальным модам

Если в качестве начальных условий для решения нелинейных динамических уравнений рассматриваемой гамильтоновой системы выбрать *произвольную* картину атомных смещений, то мы увидим быстрое ее разрушение в процессе временной эволюции. Если же такая картина соответствует некоторой нелинейной нормальной моде, то следует ожидать, что он будет сохраняться бесконечно долго, так как любая ННМ является точным решением этих уравнений. Поэтому численное интегрирование системы уравнений с определенными начальными условиями можно рассматривать как некоторую проверку корректности найденных картин атомных смещений.

В настоящей 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; 16] с использованием тех же приближений, что и в предыдущей главе.

На Рис. 5.3 представлены колебания одного из атомов углерода решетки алмаза для моды 1 при двух значения ее амплитуды. Колебания всех остальных атомов кристалла будут точно такими же.

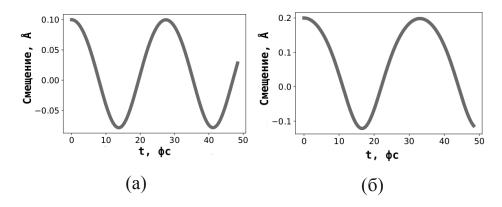


Рисунок 5.3 — Атомные колебания, соответствующие HHM 1 для двух амплитуд: (a) 0.1 Å и (б) 0.2 Å.

На Рис. 5.4а представлена 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 Å до 0.5 Å. На Рис. 5.4б 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 Å до 0.5 Å.

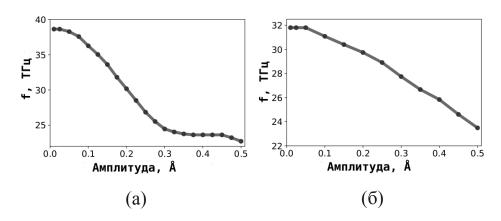


Рисунок 5.4 — Зависимость частоты от амплитуды для (а) моды 1 и (б) моды 2.

Итак, в данной главе было показано сохранение в процессе временной эволюции картин атомных смещений, соответствующих найденым двум 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.

#### Заключение

Таким образом, в настоящей диссертационной работе получены следующие основные результаты:

- 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 симметрийно-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 симметрийно-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.* Симметрийные 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.
- 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.
- 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. *Ziman*, *J*. Electronics and Phonons: The Theory of Transport Phenomena in Solids / J. Ziman. Oxford Classic Texts in the Physical Sciences, 2001.
- 19. *Fermi*, *E*. Studies of nonlinear problems / E. Fermi, J. Pasta, S. Ulam // Los Alamos Scientific Laborstory Report LA-1940. 1955.
- 20. *Tuck*, *J*. The superperiod of nonlinear weighted string (FPU) problem / J. Tuck, M. Menzel // Advances in mathematics. 1972. Vol. 9, no. 3. P. 339—407.
- 21. *Ford*, *J.* Equipartition of Energy for Nonlinear Systems / J. Ford // Journal of Mathematical Physics. 1961. Vol. 2, no. 3. P. 387—393.
- 22. *Колмогоров*, *А. Н.* О сохранении условнопериодических движений при малом изменении функции Гамильтона / А. Н. Колмогоров // Доклады Академии наук СССР. 1954. Т. 98, № 4. С. 527.
- 23. *Moser*, *J.* On invariant curves of area-preversing mappings on an annulus / J. Moser // Nachr. Akad. Wiss. Göttingen Math. Phys. K1. 1962.
- 24. *Арнольд*, *В*. Малые знаменатели и проблема устойчивости движения в классической и небесной механике / В. Арнольд // Успехи математических наук. 1963. Т. 18, № 6. С. 85.

- 25. Чириков, Б. Статистические свойства нелинейной струны / Б. Чириков, Ф. Израилев // Доклады Академии наук СССР. 1966. Т. 166, № 1. С. 57—59.
- 26. *Livi*, *R*. Equipartition threshold in nonlinear large Hamiltonian systems: The Fermi-Pasta-Ulam model / R. Livi, M. Pettini, M. Sparpaglione, A. Vulpiani // Physical Review A. 1985. Vol. 31, no. 2. P. 1039—1045.
- 27. *Zabusky*, *N*. Interactions of "Solitons" in a collisionless plasma and the recurrence of initial states / N. Zabusky, M. Kruskal // Physical Review Letters. 1965. Vol. 15, no. 6. P. 240—243.
- 28. *Dauxois*, *T.* Physics of Solitons / T. Dauxois, M. Peyrard. Cambridge University Press, 2005.
- 29. *Korteweg*, *D*. On the Change of Form of Long Waves Advancing in a Rectangular Canal, and on a New type of Long Stationary Waves / D. Korteweg, G. de Vries // Philosophical Magazine. 1895. Vol. 39. P. 422—443.
- 30. *Hirooka*, *H*. Long-time behavior of the vibration in one-dimensional harmonic lattice / H. Hirooka, N. Saito // Journal of the physical society of Japan. 1967. Vol. 23, no. 2. P. 157—166.
- 31. *Hirooka*, *H*. Computer studies of ergodicity in coupled oscillators with anharmonic interaction / H. Hirooka, N. Saito // Journal of the physical society of Japan. 1967. Vol. 23, no. 2. P. 167—171.
- 32. *Hirooka*, *H*. Computer studies on the approacj to thermal equilibrium in coupled anharmonic oscillators. I. Two Dimensional case / H. Hirooka, N. Saito // Journal of the physical society of Japan. 1969. Vol. 26, no. 3. P. 624—630.
- 33. *Ooyama*, *N*. Computer studies on the approacj to thermal equilibrium in coupled anharmonic oscillators. II. One Dimensional case / N. Ooyama, H. Hirooka, N. Saito // Journal of the physical society of Japan. 1969. Vol. 27, no. 4. P. 815—824.
- 34. *Saito*, *N.* Computer experiments on ergodic problems in anharmonic lattice vibrations / N. Saito, N. Ooyama, Y. Aizava, H. Hirooka // Supplement of the progress of theoretical physics. 1970. Vol. 45. P. 209—230.
- 35. *Toda*, *M*. Vibrations of a chain with nonlinear interaction / M. Toda // Journal of the physical society of Japan. 1967. Vol. 22, no. 2. P. 431—436.

- 36. Тода, М. Теория нелинейных решеток / М. Тода. Москва: Мир, 1984.
- 37. *Benettin*, *G*. The Fermi-Pasta-Ulam problem and its underlying dynamics / G. Benettin, H. Christodoulidi, A. Ponno // Journal of Statistical Physics. 2013. Vol. 152, no. 2. P. 195—212.
- Onorato, M. Route to thermalization in the alpha-Fermi-Pasta-Ulam system / M. Onorato, L. Vozella, D. Proment, V. Lvov // Proceedings of the National Academy of Sciences of the United states of America. 2015. Vol. 112, no. 14. P. 4208—4213.
- 39. *Иванченко*, *М*. Q-бризеры: от парадокса Ферми-Пасты-Улама до аномальной теплопроводности / М. Иванченко // Известия вузов "Прикладная нелинейная динамика". 2011. Т. 19, № 1. С. 73—85.
- 40. *Lorenz*, *E*. Deterministic nonperiodic flow / E. Lorenz // Journal of atmospheric sciences. 1963. Vol. 20, no. 2. P. 130—141.
- 41. *Haken*, *H*. Analogy between higher instabilities in fluids and lasers / H. Haken // Physical Letters A. 1975. Vol. 53, no. 1. P. 77—78.
- 42. *Ораевский*, *А*. Мазеры, лазеры и старнные аттракторы / А. Ораевский // Квантовая электроника. 1981. Т. 8, № 1. С. 130—142.
- 43. *Rubenfeld*, *L*. Nonlinear dynamic theory for a double-diffusive convection model / L. Rubenfeld, W. Siegman // SIAM journal of applied mathematics. 1977. Vol. 32. P. 871.
- 44. *Неймарк*, *Ю*. Стохастические и хаотические колебания / Ю. Неймарк, П. Ланда. Москва : Наука, 1987. 424 с.
- 45. *Lorenz*, *E*. Predictability: does the flap of a butterfly's wings in Brazil set off a tornado in Texas? / E. Lorenz // Paper presented at: American Association for the Advancement of Science. 1972.
- 46. *Li*, *T.-Y*. Period three implies chaos / T.-Y. Li, J. Yorke // The American Mathematical Monthly. 1975. Vol. 82, no. 10. P. 985—992.
- 47. *Ruelle*, *D*. On the nature of turbulence / D. Ruelle, F. Takens // Communication in Mathematical Physics. 1971. Vol. 20, no. 3. P. 167—192.

- 48. *Ruelle*, *D*. Thermodynamic formalism: The mathematical structures of classical equilibrium statistical mechanics / D. Ruelle // In: Rota GC, ed. Encyclopedia of Mathematics and its Applications. Vol. 5. Menlo Park, Calif: Addison-Wesley. 1978.
- 49. *Rössler*, O. An equation for continuous chaos / O. Rössler // Physics Letters A. 1976. Vol. 57, no. 5. P. 397—398.
- 50. *Chechin*, *G. M.* Three-dimensional chaotic flows with discrete symmetries / G. M. Chechin, D. S. Ryabov // Physical Review E. 2004. Vol. 69, no. 3. P. 036202.
- 51. *Пригожин*, *И*. От существующего к возникающему / И. Пригожин. М.: Наука, 1985.
- 52. *Овчинников*, *А*. Локализованные долгоживущие колебательные состояния в молекулярных кристаллах / А. Овчинников // Журнал экспериментальной и технической физики. 1969. Т. 51, № 1. С. 263—270.
- 53. Долгов, А. Локализация колебаний в нелинейной кристаллической структуре / А. Долгов // Физика твердого тела. 1986. Т. 28, № 6. С. 1641—1644.
- 54. *Sievers*, *A*. Intrinsic localized modes in anharmonic crystals / A. Sievers, S. Takeno // Physical Review Letters. 1988. Vol. 61, no. 8. P. 970—973.
- 55. *MacKay*, *R*. Proof of Existence of Breathers for Time Reversible or Hamiltonian Networks of Weakly Coupled Oscillators / R. MacKay, S. Aubry // Nonlinearity. 1994. Vol. 6, no. 7. P. 1623—1643.
- 56. *Page*, *J. B.* Asymptotic solutions for localized vibrational modes in strongly anharmonic periodic systems / J. B. Page // Physical Review B. 1990. Vol. 41, no. 11. P. 7835—7838.
- 57. *Trias*, *E*. Discrete breathers in nonlinear lattices: Experimental detection in a Josephson array / E. Trias, J. Mazo, T. P. Orlando // Physical Review Letters. 2000. Vol. 84, no. 4. P. 741—744.
- 58. *Morandotti*, *R*. Dynamics of discrete solitons in optical waveguide arrays / R. Morandotti, U. Peschel, J. Aitchison, H. Eisenberg, Y. Silberberg // Physical Review Letters. 1999. Vol. 83, no. 14. P. 2726—2729.

- 59. *Sato*, *M*. Nonlinear energy localization and its manipulation in micromechanical oscillator arrays / M. Sato, B. Hubbard, A. Sievers // Review Modern Physics. 2006. Vol. 78, no. 1. P. 137—157.
- 60. *Wiersig*, *J*. Discrete breathers in ac-driven nanoelectromechanical shuttle arrays / J. Wiersig, S. Flach, K.-H. Ahn // Applied Physics Letters. 2008. Vol. 93, no. 22. P. 222110.
- 61. *Sato*, *M*. Experimental Observation of the Bifurcation Dynamics of an Intrinsic Localized Mode in a Driven 1D Nonlinear Lattice / M. Sato, S. Imai, N. Fujita, S. Nishimura, Y. Takao, Y. Sada, B. E. Hubbard, B. Ilic, A. J. Sievers // Physical Review Letters. 2011. Vol. 107, no. 23. P. 234101.
- 62. *Palmero*, *F.* Discrete breathers in a nonlinear electric line: Modeling, computation, and experiment / F. Palmero, L. Q. English, J. Cuevas, R. Carretero-Gonzalez, P. G. Kevrekidis // Physical Review E. 2011. Vol. 84, no. 2. P. 026605.
- 63. *English*, *L. Q.* Generation of Localized Modes in an Electrical Lattice Using Subharmonic Driving / L. Q. English, F. Palmero, P. Candiani, J. Cuevas, R. Carretero-Gonzalez, P. G. Kevrekidis, A. J. Sievers // Physical Review Letters. 2012. Vol. 108, no. 8. P. 084101.
- 64. *Eiermann*, *B*. Bright Bose-Einstein Gap Solitons of Atoms with Repulsive Interaction / B. Eiermann, T. Anker, M. Albiez, M. Taglieber, P. Treutlein, K.-P. Marzlin, M. K. Oberthaler // Physical Review Letters. 2004. Vol. 92, no. 23. P. 230401.
- 65. Asano, T. Elementary Excitations in Quantum Antiferromagnetic Chains: Dyons, Spinons and Breathers / T. Asano, Y. Nojiri H. Inagaki, Y. Ajiro, L. Regnault, J. Boucher // Molecular Crystals and Liquid Crystals. 2002. Vol. 379, no. 1. P. 121—130.
- 66. *Boechler*, *N.* Discrete breathers in one-dimensional diatomic granular crystals / N. Boechler, G. Theocharis, S. Job, P. Kevrekidis, M. Porter, C. Daraio // Physical Review Letters. 2010. Vol. 104, no. 24. P. 244302—244304.
- 67. *Kiselev*, *S. A.* Generation of intrinsic vibrational gap modes in three-dimensional ionic crystals / S. A. Kiselev, A. J. Sievers // Physical Review B. 1997. Vol. 55, no. 9. P. 5755—5758.

- 68. *Khadeeva*, *L. Z.* Discrete breathers in crystals with NaCl structure / L. Z. Khadeeva, S. V. Dmitriev // Physical Review B. 2010. Vol. 81, no. 21. P. 214306.
- 69. *Кистанов*, *А*. Молекулярно-динамическое исследование щелевого дискретного бризера поляризации [111] в кристалле со структурой NaCl / А. Кистанов, Ю. Баимова, С. Дмитриев // Письма в журнал технической физики. 2012. Т. 38, № 14. С. 72.
- 70. *Voulgarakis*, *N. K.* Computational investigation of intrinsic localization in crystalline Si / N. K. Voulgarakis, G. Hadjisavvas, P. C. Kelires, G. P. Tsironis // Physical Review B. 2004. Vol. 69, no. 11. P. 113201.
- 71. Захаров,  $\Pi$ . Моделирование взаимодействия дскретных бризеров различного типа в нановолокие кристалла Pt3Al /  $\Pi$ . Захаров, М. Старостенков, С. Дмитриев, Н. Медведев, Е. А.М. // Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики. 2015. Т. 148, № 2. С. 252.
- 72. *Медведев*, *Н*. Возбуждение двух типов дискретных бризеров в компьютерной 3D-модели Pt3Al / Н. Медведев, М. Старостенков, П. Захаров, С. Дмитриев // Письма в журнал технической физики. 2015. Т. 41,  $N \ge 20$ . С. 50.
- 73. *Liu*, *B*. Discrete breathers in hydrogenated graphene / B. Liu, J. Baimova, S. Dmitriev, X. Wang, H. Zhu, K. Zhou // Journal of Physics D: Applied Physics. 2013. Vol. 46, no. 30. P. 305302.
- 74. *Баимова*, *Ю*. Дискретные бризеры в графане: влияние температуры / Ю. Баимова, Р. Мурзаев, С. Дмитриев, К. Zhou // Журнал экспериментальной и технической физики. 2016. Т. 149, № 5. С. 1005.
- 75. *Haas*, *M*. Prediction of high-frequency intrinsic localized modes in Ni and Nb / M. Haas, V. Hizhnyakov, A. Shelkan, M. Klopov, A. J. Sievers // Physical Review B. 2011. Vol. 84, no. 14. P. 144303.
- 76. *Hizhnyakov*, *V.* Theory and molecular dynamics simulations of intrinsic localized modes and defect formation in solids / V. Hizhnyakov, M. Haas, A. Shelkan, M. Klopov // Physica Scripta. 2014. Vol. 89, no. 4. P. 044003.
- 77. *Murzaev*, *R*. Moving discrete breathers in bcc metals V, Fe and W / R. Murzaev, A. Kistanov, V. Dubinko, D. Terentyev, S. Dmitriev // Computational Materials Science. 2015. Vol. 98. P. 88—92.

- 78. *Dmitriev*, *S. V.* Discrete breathers in 2D and 3D crystals / S. V. Dmitriev, A. P. Chetverikov, M. G. Velarde // physica status solidi (b). 2015. Vol. 252, no. 7. P. 1682—1686.
- 79. *Hizhnyakov*, *V.* Modeling of self-localized vibrations and defect formation in solids / V. Hizhnyakov, M. Haas, A. Pishtshev, A. Shelkan, M. Klopov // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. 2013. Vol. 303. P. 91—94.
- 80. *Manley*, *M. E.* Intrinsic nature of thermally activated dynamical modes in alpha-U: Nonequilibrium mode creation by x-ray and neutron scattering / M. E. Manley, A. Alatas, F. Trouw, B. M. Leu, J. W. Lynn, Y. Chen, W. L. Hults // Physical Review B. 2008. Vol. 77, no. 21. P. 214305.
- 81. *Chetverikov*, *A. P.* On the temperature dependence of fast electron transport in crystal lattices / A. P. Chetverikov, W. Ebeling, M. G. Velarde // The European Physical Journal B. 2015. Vol. 88, no. 8. P. 202.
- 82. *Dmitriev*, S. Discrete breathers in crystals / S. Dmitriev, E. Korznikova, Y. Baimova, M. Velarde // UFN. 2016. Vol. 186, no. 5. P. 471—488.
- 83. *Bezuglova G.S. G. M. Chechin*, *P. P. G.* Discrete breathers on symmetry-determined invariant manifolds for scalar models on the plane square lattice / P. P. G. Bezuglova G.S. G. M. Chechin // Physical Review E. 2011. Vol. 84, no. 3. P. 036606.
- 84. *Сахненко*, *В. П.* Кусты мод и нормальные моды для нелинейных динамических систем с дискретной симметрией / В. П. Сахненко, Г. М. Чечин // Доклады Академии Наук. 1994. Т. 338. С. 42—45.
- 85. *Budinsky*, *N.* Stability of nonlinear models and chaotic properties of 1D Fermi-Pasta-Ulam lattices / N. Budinsky, T. Bountis // Physica D. 1983. Vol. 8, no. 3. P. 445.
- 86. *Sandusky*, *K*. Interaction between the stability of extended normal modes and the existence of intrinsic localized modes in nonlinear lattices with realistic potentials / K. Sandusky, J. Page // Physical Review B. 1994. Vol. 50, no. 2. P. 866—887.
- 87. *Flach*, *S.* Tangent bifurcation of band edge plane waves, dynamical symmetry breaking and vibrational localization / S. Flach // Physica D. 1996. Vol. 91, no. 3. P. 223—243.

- 88. *Yoshimura*, *K*. Modulational instability of zone boundary mode in nonlinear lattices / K. Yoshimura // Physical Review E. 2004. Vol. 70, no. 1. P. 016611.
- 89. *Dauxois*, *T.* Modulational estimate for the maximal Lyapunov exponent in Fermi-Pasta-Ulam chains / T. Dauxois, S. Ruffo, A. Torcini // Physical Review B. 1997. Vol. 56, no. 6. R6229—R6232.
- 90. *Dauxois*, *T.* The anti-FPU problem / T. Dauxois, R. Khomeriki, S. Ruffo // Chaos. 2005. Vol. 15. P. 015116.
- 91. *Born*, *M.* Dynamical Theory of Crystal Lattices / M. Born, K. Huang. New York: Clarendon Press, Oxford, 1998.
- 92. *Chechin*, *G*. Properties of discrete breathers in graphane from ab initio simulations / G. Chechin, S. Dmitriev, I. Lobzenko, D. Ryabov // Physical Review B. 2014. Vol. 90. P. 045432—6.
- 93. *Chechin*, *G*. Ab initio refining of quasibreathers in graphane / G. Chechin, I. Lobzenko // Letters on Materials. 2014. Vol. 4, no. 4. P. 226—229.
- 94. *Park*, *C. S.* Dual metal gate process by metal substitution of dopant-free polysilicon on high-K dielectric / C. S. Park, B. J. Cho, W. Hwang, W. Y. Loh, L. Tang, D. L. Kwong // Digest of Technical Papers, 2005 Symposium on VLSI Technology and Circuits, Japan: Kyoto. 2005.
- 95. *Park*, *D. G.* Robust ternary metal gate electrodes for dual gate CMOS devices / D. G. Park, T. H. Cho, K. Y. Lim, H. J. Cho, T. K. Kim, S. A. I. I. Jang // Electron Devices Meeting Technical Digest (IEDM'01), Washington, DC. 2001.
- 96. *Shimada*, *Y.* Temperature-dependent current-voltage characteristics of fully processed Ba0:7Sr0:3TiO3 capacitors integrated in a silicon device / Y. Shimada, A. Inoue, T. Nasu, K. Arita, Y. Nagano, A. Matsuda // Japan Journal of Applied Physics. 1996. Vol. 35, 1A. P. 140.
- 97. *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.
- 98. *Vakakis*, *A*. Normal Modes and Localization in Nonlinear Systems / A. Vakakis, L. Manevich, Y. V. Mikhlin, V. N. Pilipchuk, A. Zevin. New York: Wiley, 1996.
- 99. *Rink*, *B*. Symmetry and resonance in periodic FPU chains / B. Rink // Physica D. 2001. Vol. 218, no. 3. P. 665—685.

- 100. *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.
- 101. *Elliot*, *J.* Symmetry in physics / J. Elliot, P. Dawber. USA: Oxford University Press, 1985.
- 102. *Zwillinger*, *D*. Handbook of Differential Equations / D. Zwillinger. 3rd. Boston: Academic Press, 1997.
- 103. *Abramowitz*, *M*. Handbook of Mathematical Functions / M. Abramowitz, A. Stegun. Dover, 1965.
- 104. *Chechin*, *G*. Stability of nonlinear normal modes in the Fermi-Pasta-Ulam chain in the thermodynamic limit / G. Chechin, D. Ryabov // Physical Review E. 2011. Vol. 85, no. 5. P. 056601.
- 105. *Landau*, *L.* Course of Theoretical Physics: Volume 1, Mechanics / L. Landau, E. Lifshitz. Butterworth-Heinemann, 1976.
- 106. *Itikawa*, *Y.* / Y. Itikawa // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical. 2004. Vol. R1, no. 37.
- 107. *Hohenberg*, *P.* Inhomogeneous Electron Gas / P. Hohenberg, W. Kohn // Physical Review B. 1964. Vol. 136, 3B. B864—B871.
- 108. *Kohn, W.* Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects / W. Kohn, L. Sham // Physical Review. 1965. Vol. 140, 4A. A1133—A1138.
- 109. *Liu*, *B*. Discrete breathers in hydrogenated graphene / B. Liu, J. Baimova, S. Dmitriev, X. Wang, H. Zhu, K. Zhou // Journal of Physics D: Applied Physics. 2013. Vol. 46, no. 30. P. 305302.
- 110. *Brenner*, *D*. Empirical potential for hydrocarbons for use in simulating the chemical vapor deposition of diamond films / D. Brenner // Physical Review B. 1990. Vol. 42, no. 15. P. 9548.
- 111. *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.
- 112. *Tang*, *R*. Electronic structure of SF6 / R. Tang, J. Callaway // The Journal of Chemical Physics. 1986. Vol. 84, no. 12. P. 6854—6860.

- 113. *Bruska*, *M*. Density functional study of sulphur hexafluoride (SF6) and its hydrogen derivatives / M. Bruska, J. Piechotab // Molecular Simulation. 2008. Vol. 34, no. 10—15. P. 1041.
- 114. *Chechin*, *G*. Symmetry methods and space group representations in the theory of phase transitions / G. Chechin, V. Sakhnenko // Computers and Mathematics with Applications. 1988. Vol. 16, no. 5—8. P. 453.
- 115. *Kovalev*, *O.* Representations of the Crystallographic Space Groups: Irreducible Representations, Induced Representations, and Corepresentations / O. Kovalev. 2nd. Gordon, Breach Science Publishers, 1993.

## 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.
- 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.