

На правах рукописи



Корзникова Елена Александровна

**АТОМИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
АНГАРМОНИЧЕСКИХ ВОЗБУЖДЕНИЙ В КРИСТАЛЛАХ**

Специальность: 01.04.07 — физика конденсированного состояния

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

Уфа – 2017

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

Научный консультант: **Дмитриев Сергей Владимирович**,
доктор физико-математических наук, профессор, ФГБУН
Институт проблем сверхпластичности металлов РАН,
заведующий лабораторией Нелинейная физика и механика
материалов

Официальные оппоненты: **Кривцов Антон Мирославович**,
член-корреспондент РАН, доктор физико-математических
наук, заведующий кафедрой Теоретическая механика
ФГАОУ ВО Санкт-Петербургский политехнический
университет Петра Великого

Беленков Евгений Анатольевич,
доктор физико-математических наук, профессор,
профессор кафедры физики конденсированного состояния
ФГБОУ ВО Челябинский государственный университет

Екомасов Евгений Григорьевич,
доктор физико-математических наук, профессор,
профессор кафедры теоретической физики, ФГБОУ ВО
Башкирский государственный университет

Ведущая организация: ФГБОУ ВО Алтайский государственный технический
университет им. И.И. Ползунова, г. Барнаул

Защита состоится «5» октября 2017 г. в 14 00 часов на заседании диссертационного
совета Д 002.080.03 при Федеральном государственном бюджетном учреждении
науки Институте проблем сверхпластичности металлов Российской академии наук,
расположенном по адресу: 450001, Уфа, ул. Ст. Халтурина, 39.

Отзывы на автореферат в 2-х экземплярах, заверенные печатью, просим высылать
по адресу: 450001, Республика Башкортостан, г. Уфа, ул. Ст. Халтурина, 39,
ученому секретарю диссертационного совета. Факс: +7 (347) 282-37-59. С
диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на официальном сайте ИПСМ
РАН по адресу: <http://www.imsp.ru/>

Автореферат разослан «_»_____2017 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета, доктор
физико-математических наук



Имаев Марсель Фаниевич

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность работы. Физика нелинейных явлений активно развивается примерно с середины прошлого века, когда возникло понятие солитона, то есть уединенной волны, способной двигаться в нелинейной среде практически не рассеивая свою энергию и сохраняя свою индивидуальность при столкновении с другими солитонами [1,2]. Солитоны устойчивы по отношению к малым возмущениям и могут переносить энергию на значительные расстояния благодаря тому, что нелинейность среды компенсирует явление дисперсии, ответственное за распывание волновых пакетов. Классические солитоны движутся в непрерывной среде и описываются нелинейными дифференциальными уравнениями в частных производных, такими как уравнение Кортевега-де-Фриза, Клейн-Гордона, нелинейное уравнение Шредингера и другие.

Долгое время считалось, что в дискретных средах (нелинейных решетках), где трансляционная инвариантность отсутствует, невозможно распространение волн солитонного типа с длиной волны близкой к шагу решетки. Поворотной стала работа Тоды [3], где была представлена полностью интегрируемая нелинейная цепочка, описываемая системой обыкновенных дифференциальных уравнений и поддерживающая **дискретные** солитоны. Тода показал, что в континуальном пределе его цепочка переходит в уравнение Кортевега-де-Фриза. Вскоре была открыта и интегрируемая цепочка Абловица-Ладика [4], в пределе длинных волн переходящая в нелинейное уравнение Шредингера. Эти работы показали, что дискретность среды не является препятствием для существования нелинейных пространственно локализованных возбуждений, однако число полностью интегрируемых дискретных нелинейных систем было весьма ограниченным. Тридцать лет назад Долгов показал возможность пространственной локализации колебательной энергии в **неинтегрируемой** дискретной нелинейной цепочке [5]. Двумя годами позже Сиверс и Такено независимо пришли к тому же заключению [6], и начался бум исследований в данном направлении [7,8]. В целом ряде математических работ было доказано, что локализованные колебательные моды могут быть точными и устойчивыми решениями нелинейных дискретных уравнений [7-9]. Такие решения были названы дискретными бризерами (ДБ). Спустя десятилетие после открытия ДБ как явления, появилась первая работа, где ДБ был описан методом молекулярной динамики в щелочно-галогидном кристалле NaI [10]. Еще через тринадцать лет,

в 2009г., появились первые экспериментальные свидетельства их существования [11].

Важно подчеркнуть, что ДБ является пространственно локализованной колебательной модой в **бездефектной** нелинейной решетке. Кристаллические твердые тела характеризуются упорядоченным расположением атомов, но этот порядок неидеален. Разнообразные дефекты во многом определяют физические и механические свойства кристаллов. Помимо дефектов весьма важную роль играют тепловые колебания атомов, которые приводят к эволюции дефектов, их зарождению, движению, аннигиляции. Все процессы трансформации дефектов происходят посредством преодоления потенциальных барьеров, для чего требуется определенная локализация энергии в кристалле. Механизмы локализации энергии и передачи ее по кристаллу в концентрированной форме до конца не ясны. Экспериментальных методов, способных напрямую показать движение отдельных атомов, на сегодняшний день не существует. Поэтому трудно переоценить роль методов компьютерного моделирования при изучении динамики кристаллической решетки.

ДБ дополнили перечень ранее известных нелинейных локализованных возбуждений в кристаллах, таких как нелинейные колебательные моды, локализованные на дефектах, краудионы, дислокации, доменные стенки и др. В 1998г. была разработана теория делокализованных нелинейных мод (ДНМ), иначе называемых бушами нормальных мод [12]. Эти моды также оказались в сфере внимания специалистов в области нелинейной динамики, при этом важно понять какова взаимосвязь между различными нелинейными возбуждениями кристаллической решетки. Можно заключить, что атомистическое моделирование ангармонических возбуждений в кристаллах с целью установления их роли в формировании свойств кристаллов является **актуальной и важной задачей**. Настоящая диссертационная работа призвана внести вклад в решение этой задачи.

В работе помимо модельных двумерных и трехмерных кристаллов с простыми межатомными взаимодействиями большое внимание уделяется графену – двумерному кристаллу, представляющему собой гексагональную решетку атомов углерода. Интерес к графену со стороны широкой научной общественности обусловлен его уникальными свойствами, которые находят применение в развитии новых нанотехнологий [13-16].

Таким образом, целью диссертационной работы являлось возбуждение различных нелинейных мод движения в молекулярно-динамических моделях кристаллов, анализ свойств этих мод и взаимосвязи между ними, с перспективой установления их роли в формировании свойств кристаллов.

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

1. разработка молекулярно-динамических моделей для изучения нелинейной динамики кристаллических решеток;
2. поиск способов задания начальных условий, приводящих к возбуждению требуемых нелинейных мод движения атомов;
3. анализ свойств нелинейных мод движения кристаллической решетки, таких как делокализованные нелинейные моды (ДНМ), дискретные бризеры (ДБ), краудионы, топологические солитоны;
4. изучение распространения энергии по кристаллу графена при периодическом внешнем воздействии;
5. описание равновесных морщин и устойчивых статических и динамических ринклонов в графене;
6. анализ вторичных структур на основе графена, обусловленных действием ван-дер-ваальсовых сил, и нелинейных колебаний данных структур;
7. создание теоретического фундамента для определения возможной роли нелинейных мод движения атомов в кристаллах в формировании их механических и физических свойств.

Научная новизна:

1. Впервые исследовано влияние ДНМ на упругие характеристики двумерной решетки. Установлен новый механизм появления ауксетических свойств решетки за счет возбуждения в ней ДНМ совместно с приложением однородного растяжения.

2. Впервые предложены начальные условия для возбуждения ДБ в монокристаллах двумерных и трехмерных кристаллах Морзе. Установлено, что ДБ с жестким типом нелинейности в данных кристаллах существуют потому, что, в отличие от одномерного кристалла Морзе, в них удается повысить вклад жесткого ядра потенциала в динамику решетки.

3. Впервые в молекулярно-динамических моделях кристаллов Морзе и графена ДБ были возбуждены путем наложения локализирующих функций на ДНМ, частота которой в нелинейном режиме выходит из фононного спектра малоамплитудных колебаний кристалла. Данный метод позволил получить ДБ нового типа в двумерном и трехмерном кристаллах Морзе и в графене.

4. Впервые показана возможность существования щелевого ДБ на краю растянутой графеновой наноленты и установлено, что его свойства существенно отличаются от свойств щелевых ДБ внутри листа однородно деформированного графена.

5. Исследовано явление супратрансмиссии в графене, однородно деформированном так, что в спектре его фононных колебаний открывается щель и появляется возможность существования щелевых ДБ. Впервые показана возможность наблюдения супратрансмиссии даже при **малых** амплитудах внешнего периодического воздействия за счет резонансной накачки ДБ с переменной во времени амплитудой. Данный ДБ излучает фонон на частоте модуляции амплитуды.

6. Понятие сверхзвукового краудиона обобщено до n -краудиона, в котором с большой скоростью движется не один, а $n > 1$ атомов плотноупакованного ряда кристалла. Длина пробега у n -краудиона выше, чем у классического краудиона, поскольку при той же максимальной скорости движения атомов n -краудион имеет более высокую энергию, а самофокусирующееся движение краудиона возможно, только если максимальная скорость движения атомов не превышает порогового значения.

7. Предложена модель цепи, движущейся в плоскости, для анализа нелинейной динамики графеновых нанолент с учетом их продольной и изгибной жесткости, а также сил Ван-дер-Ваальса. Применение модели к изучению рулонов графеновых нанолент при повышенных температурах показало их аномально высокий коэффициент радиального теплового расширения, который на два порядка выше, чем у алмаза.

Научная и практическая ценность.

1. Показана возможность существования ДБ с жестким типом нелинейности в **моноатомных** двумерных и трехмерных кристаллах Морзе, что развеяло существовавшее долгое время предположение о том, что в кристаллах с реалистичными межатомными взаимодействиями ДБ с частотами выше фононного спектра существовать не могут. Данное предположение строилось на математически обоснованном факте, что в одномерных кристаллах Морзе такие ДБ действительно не существуют. Следовательно, в диссертации наглядно продемонстрировано нетривиальное значение размерности кристаллической решетки в вопросах существования и изучения свойств ДБ. Настоящая работа стимулирует постановку экспериментальных исследований по обнаружению ДБ с жестким типом нелинейности в кристаллах с простой структурой, не имеющих щели в фононном спектре, например, в чистых металлах.

2. Установление нового механизма появления ауксетических свойств у нелинейной решетки за счет возбуждения ДНМ совместно с приложением однородного растяжения представляет научный интерес. Установленный факт взаимосвязи между нелинейными колебаниями решетки и ее аномальными

упругими свойствами может иметь прикладное значение, поскольку в руках инженеров появляется новый канал управления упругими свойствами материала или конструкции.

3. В работе описаны n -краудионы, имеющие длину пробега вдоль плотноупакованных атомных рядов на порядок больше, чем классические краудионы. Поскольку n -краудионы переносят массу, то можно говорить о том, что открыт новый эффективный механизм массопереноса в кристаллах. Эти результаты имеют большое значение для анализа накопления радиационных дефектов в материалах.

4. Исследование нелинейных тепловых колебаний рулонов графеновых нанолент выявило, что они имеют коэффициент радиального теплового расширения на два порядка больше, чем у алмаза. Следовательно, на основе графеновых рулонов могут быть созданы чувствительные сенсоры температуры, работающие в широком диапазоне температур.

5. Возбуждение щелевого ДБ на краю растянутой графеновой наноленты открывает новое направление в изучении ДБ на поверхности кристаллов. Такие исследования важны, поскольку ДБ на поверхности могут оказаться более удобными для экспериментального изучения, чем ДБ в объеме кристаллов.

Достоверность результатов диссертации гарантируется использованием стандартных, хорошо апробированных алгоритмов метода молекулярной динамики для решения новых задач о нелинейной динамике кристаллических решеток различного типа и размерности. Использовались как простейшие парные потенциалы: полиномиальный с ангармонизмом четвертой степени (для анализа динамики гексагональной решетки), потенциал Морзе (для двумерной треугольной и для ГЦК решеток), потенциал Леннарда-Джонса (для описания сил Ван-дер-Ваальса при анализе вторичных структур на основе графена), так и непарные потенциалы AIREBO и Савина (для описания ковалентной связи графена). Простейшие потенциалы использовались для изучения новых физических эффектов. Для описания поведения реального материала, графена, использовались сложные потенциалы. Получаемые результаты всесторонне тестировались на сходимость при увеличении размеров расчетной ячейки и уменьшении шага численного интегрирования уравнений движения атомов. Сопоставлялись результаты, полученные с использованием схем численного интегрирования различной точности, контроль точности вычислений осуществлялся, в том числе, по точности сохранения полной энергии системы в задачах для NVE ансамблей. Показана непротиворечивость численных результатов базовым физическим законам и известным результатам по изучению нелинейной динамики модельных и реальных кристаллов.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. В отличие от одномерных монокристаллов, в двумерных и трехмерных кристаллах Морзе возможно существование ДБ с жестким типом нелинейности с частотами выше бесщелевого фононного спектра. Их существование обеспечивается тем, что в кристаллах размерности выше единицы повышается вклад жесткого ядра потенциала Морзе в динамику атомов, по сравнению с его мягким хвостом.

2. Эффективным способом возбуждения ДБ в кристаллах является наложение колоколообразной функции с правильно выбранными параметрами (степень локализации при заданной амплитуде и положение центра функции по отношению к узлам решетки) на ДНМ, частота которой в режиме больших амплитуд колебаний выходит из фононного спектра кристалла.

3. Возбуждение ДНМ достаточно большой амплитуды совместно с однородным растяжением двумерной решетки с кубической нелинейностью может приводить к ее трансформации в ауксетик.

4. В результате модуляционной неустойчивости тех ДНМ, частота которых лежит вне спектра фононных колебаний, возможна самопроизвольная пространственная локализация энергии в виде ДБ.

5. Для наблюдения явления супратрансмиссии амплитуда внешнего периодического воздействия не обязательно должна быть большой.

6. n -краудионы более эффективно переносят массу, чем классические краудионы.

Работа велась при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант РФФ № 16-12-10175 "Локализованные колебания и волны в нелинейных решетках и ансамблях консервативных и активных частиц: дискретные бризеры, диссипативные солитоны, химеры", грант РФФ № 14-13-00982 "Управление механическими, физическими и функциональными свойствами графена путем его упругой и неупругой деформации"); Российского фонда фундаментальных исследований (грант РФФИ 14-02-97029р_поволжье_а "Моделирование структуры, механических и физических свойств объемных наноматериалов из скотированного графена", грант РФФИ 16-42-220002 р_а "Физическая природа дискретных бризеров в наноразмерных ГЦК металлах и сплавах"); Совета по грантам Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых (грант МК-5283.2015.2 "Анализ динамики объемных sp^2 углеродных наноматериалов с учетом ван-дер-ваальсовых взаимодействий для разработки новых наноустройств на их основе").

Автор выражает признательность **проф. А.В. Савину** за плодотворное сотрудничество в ходе выполнения работы.

Апробация работы.

Основные результаты работы были представлены на следующих научных конференциях: II, III и IV Открытая школа - конференция стран СНГ "Ультрамелкозернистые и наноструктурные материалы" Уфа, (2012, 2014, 2016); X, XII, XIV школа семинар "Эволюция дефектных структур в конденсированных средах" Барнаул, (2012, 2014, 2016); Всероссийская научно-практическая конференция "Современное состояние и проблемы естественных наук" Юрга (2014); Международная конференция "Фазовые переходы, критические и нелинейные явления в конденсированных средах" Челябинск (2015); International Workshop "Discrete Breathers in Crystals", Уфа (2015); International Workshop on Nonlinear Energy Localization in Crystals and Related Media, Япония, Киото (2015, 2016); Всероссийская молодежная научная конференция «Мавлютовские чтения» Уфа (2015, 2016); Всероссийская конференция "Актуальные проблемы прочности", Севастополь (2016); Nolineal 2016 Севилья, Испания (2016); International Symposium: «The soliton concept and its inter-, trans- and pluri-disciplinary ubiquity. Truth and Consequences. From the Macro- to the Nano-World». Испания, Мадрид (2016); Международная конференция "Nonlinear Waves -- Theory and Applications" Китай, Пекин (2016); International Symposium on Nonlinear Theory and Its Applications (NOLTA-2016) Югавара, Япония, (2016); XVI Всероссийская школа-семинар «Физика и применение микроволн» имени А.П. Сухорукова, Москва (2017); Международная конференция «Актуальные проблемы механики», Санкт – Петербург (2017).

Публикации. Основное содержание диссертационной работы изложено в 43 научных публикациях в рецензируемых журналах, включенных в перечень изданий, рекомендованных ВАК РФ, 29 из которых индексируются в Scopus и/или Web of Science.

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, восьми глав, заключения и списка литературы из 373 наименований. Работа изложена на 300 страницах машинописного текста, содержит 119 рисунков и 2 таблицы.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении описан круг изучаемых нелинейных явлений в модельных кристаллах и в графене, даны основные определения, обоснована актуальность темы диссертационного исследования, определены цель и задачи работы, сформулированы научная новизна, практическая ценность и основные защищаемые положения. Кратко описано содержание глав диссертации.

Глава 1. Обзор литературы по нелинейной динамике решетки

В обзоре представлены краугольные работы, внесшие фундаментальный вклад в формирование современных представлений о нелинейной динамике модельных решеток и реальных кристаллов. Отметим, что первая глава во многом основана на недавно опубликованном обзоре [17].

Прежде всего, говорится об открытии ДБ в работах Долгова [5] и Сиверса и Такено [6].

Затем анализируется работа Киселева и др. [18], где на примере одномерной модели монокристалла было показано, что классические потенциалы, такие как Тоды, Борна-Майера, Леннарда-Джонса и Морзе не позволяют получить ДБ. Причиной была названа мягкость этих потенциалов, что не позволило получить ДБ с частотой выше бесщелевого фононного спектра. В работе был сделан вывод о том, что поиск ДБ следует сосредоточить на кристаллах, имеющих щель в фононном спектре, что и было сделано в работе [10]. Однако модели более высокой размерности в [18] проанализированы не были, и вопрос о возможности существования ДБ в монокристаллах большей размерности остался открытым. В настоящей работе на этот вопрос будет дан положительный ответ.

Открытие модуляционной неустойчивости [19] установило нетривиальную связь между ДБ [5] и ДНМ [12]. Оказалось, что ДНМ при не слишком малых амплитудах колебаний модуляционно неустойчивы, и что развитие неустойчивости может приводить к самопроизвольной локализации энергии в форме долгоживущих ДБ [19]. В представленной диссертационной работе это интересное явление изучается на примере двумерной гексагональной решетки.

Явление супратрансмиссии, впервые описанное в работе [20], состоит в том, что энергия может передаваться кристаллу от источника, осциллирующего на частоте вне спектра малоамплитудных колебаний, при условии, что амплитуда внешнего воздействия достаточно велика. Энергию в данном случае переносят не фононы, а ДБ, имеющие частоту вне спектра. В представленной диссертации изучается супратрансмиссия в однородно деформированном графене, который поддерживает щелевые ДБ.

Краудион – это точечный дефект кристаллической структуры, представляющий собой лишний атом, внедренный в плотноупакованный атомный ряд кристалла [21,22]. Движение краудиона связано с переносом массы. Было показано, что краудионы играют большую роль, например, при нейтронном облучении и накоплении повреждений в материалах ядерных

реакторов. В представленной диссертации делается обобщение понятия краудиона до n -краудиона.

Дано определение ауксетика – материала с отрицательным коэффициентом Пуассона и названы основные работы по изучению ауксетиков, поскольку в диссертации они тоже рассматриваются.

Описаны основные свойства графена, изучению нелинейной динамики которого посвящено несколько глав в данной работе.

Обзор литературы позволил сформулировать открытые вопросы в изучении нелинейной динамики кристаллической решетки и нацелиться на более глубокое рассмотрение некоторых из них.

Глава 2. Молекулярно-динамические модели, используемые в данной работе

Метод молекулярной динамики является одним из наиболее разработанных численных методов. Он состоит в численном интегрировании уравнений движения системы материальных точек (атомов). Для интегрирования дифференциальных уравнений второго порядка необходимо сформулировать начальные условия, задав начальные положения и начальные скорости всех атомов. Кроме того, следует задать граничные условия. Периодические граничные условия являются наиболее часто используемыми в методе молекулярной динамики, но могут рассматриваться и свободные границы и другие виды граничных условий.

К достоинствам метода относятся: его разработанность, наличие готовых программных продуктов, возможность отслеживания траекторий всех атомов. Недостатком метода является то, что он позволяет рассматривать лишь малые объемы вещества и на коротких временах. Однако задачи, решаемые в данной диссертации, очень удобны для применения метода молекулярной динамики, поскольку ДБ сильно локализованы в пространстве и для их изучения достаточно рассматривать небольшие расчетные ячейки. Период колебания ДБ порядка 10^{-13} с, и даже тысяча периодов составляет всего лишь 100 пикосекунд, что немного для современных компьютеров, если рассматривается не очень большое число атомов. При моделировании ДНМ достаточно рассмотреть одну трансляционную ячейку с периодическими граничными условиями. При изучении динамики краудионов в данной работе используется тот факт, что они движутся быстрее звука. Это позволяет передвигать расчетную ячейку небольшого размера вслед за движущимся краудионом.

В данной работе рассматриваются двумерные гексагональная и треугольная решетки, а также ГЦК решетка. Для изучения новых физических эффектов используются простейшие парные потенциалы (полиномиальный с

кубической нелинейностью и потенциал Морзе), а для моделирования графена – более сложные многочастичные потенциалы (AIREBO и потенциал Савина). Парный потенциал Леннарда-Джонса, согласно теории, хорошо описывает силы Ван-дер-Ваальса, он применялся при анализе вторичных структур на основе графена.

Глава 3. ДНМ в гексагональной решетке: влияние на упругие характеристики и модуляционная неустойчивость

На рисунке 1(а) представлена двумерная гексагональная решетка взаимодействующих частиц единичной массы, исследуемая в данной главе. Имеется два типа связей: 1 – между ближайшими и 2 – между третьими соседями, и те и другие описываются связями с кубической нелинейностью, потенциальная энергия которых определяется выражением

$$\varphi(r)=(k/2)(r-L)^2+(\beta/4)(r-L)^4, \quad (1)$$

где r – текущая длина связи, L – равновесная длина связи, k – коэффициент линейной жесткости пружины, β – коэффициент при кубическом слагаемом (в выражении для межатомной силы $F(r)=-d\varphi/dr$). Параметры потенциалов: $L_1=1$, $L_2=2$; $k_1=k_2=1$; рассмотрены два случая: линейные связи: $\beta_1=\beta_2=0$; нелинейные связи: $\beta_1=\beta_2=10$.

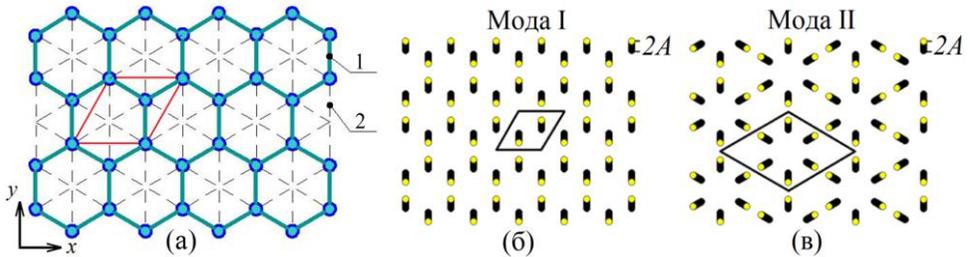


Рисунок 1 – (а) Двумерная гексагональная решетка и (б,в) две ДНМ, возбуждаемые в данной решетке при исследовании их влияния на упругие свойства решетки

В решетке запускалась одна из двух ДНМ, I или II с амплитудой A [см. рисунок 1(б,в)]. Заметим, что первая мода делает решетку анизотропной, а вторая мода сохраняет изотропию решетки. В ходе колебания моды вычислялись средние за период значения напряжений $\langle \sigma \rangle$. Далее, прикладывая к решетке малые однокомпонентные деформации и используя закон Гука, вычислялись константы упругости (коэффициенты Пуассона ν_{xy} , ν_{yx} и модули

Юнга E_x, E_y). Кроме того, находилась частота моды ω и средняя за период энергия на атом $\langle e \rangle$. Все эти характеристики находились для различных значений амплитуд колебательных мод A .

На рисунке 2 представлены результаты расчетов для случая нелинейных связей, $\beta_1=\beta_2=10$. С ростом амплитуды мод решетка становится более жесткой, поскольку модули Юнга растут. С другой стороны, коэффициенты Пуассона падают с ростом A . Частота мод заметно возрастает с амплитудой в случае нелинейных связей. Полная энергия системы растет с амплитудой квадратично, $\langle e \rangle \sim A^2$. Отметим, что решетка с возбужденной в ней ДНМ испытывает положительные (сжимающие) напряжения.

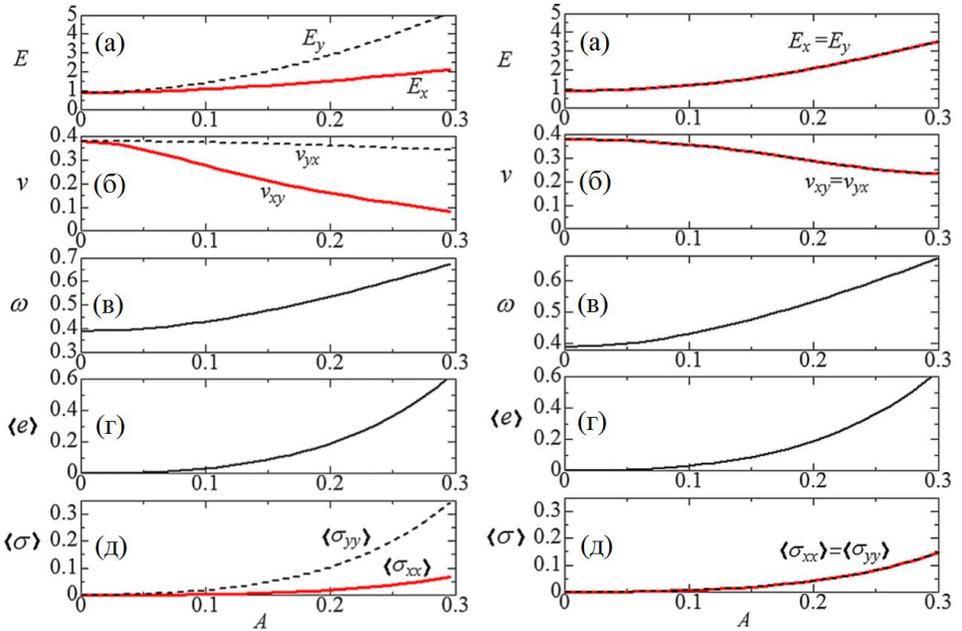


Рисунок 2 – Результаты для ДНМ I (слева) и II (справа) в случае нелинейных связей, $\beta_1=\beta_2=10$. Как функции амплитуды моды A показаны: (а) модули Юнга E_x, E_y ; (б) коэффициенты Пуассона ν_{xy}, ν_{yx} ; (в) частота моды; (г) осредненная за период полная (кинетическая плюс потенциальная) энергия в расчете на частицу; (д) осредненные за период напряжения $\langle \sigma_{xx} \rangle, \langle \sigma_{yy} \rangle$ ($\sigma_{xy}=0$)

Войцеховским было доказано, что отрицательное гидростатическое давление достаточной величины превращает любое изотропное упругое тело в ауксетик в пределах области его термодинамической устойчивости [21].

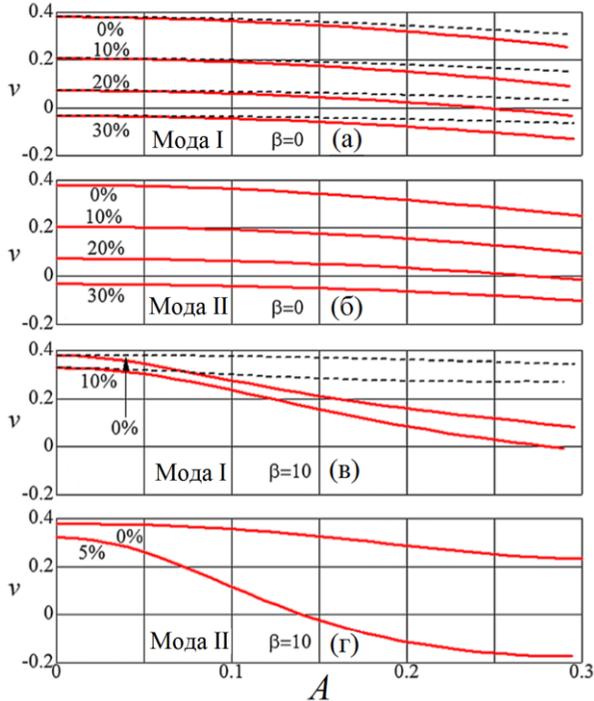


Рисунок 3 – Комбинированный эффект ДНМ амплитуды A и равноосного растяжения решетки $\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy}$ на коэффициенты Пуассона (величина деформации указана для каждой кривой). (а) Мода I, $\beta=0$, (б) мода II, $\beta=0$, (в) мода I, $\beta=10$, и (г) мода II, $\beta=10$. На (а) и (в) сплошные (пунктирные) кривые показывают ν_{xy} (ν_{yx}). На (б) и (г) $\nu_{xy} = \nu_{yx}$

Как отмечалось, с ростом амплитуд ДНМ наблюдается снижение значений коэффициентов Пуассона (см. рисунок 2), но они не достигают отрицательных значений в пределах исследованных амплитуд $A < 0,3$. Представляется интересным изучить совместный эффект влияния ДНМ и всестороннего растяжения решетки на коэффициенты Пуассона. Результаты таких вычислений приведены на рисунке 3. Величина равноосной деформации

растяжения $\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy}$ указана в процентах для каждой кривой. (а) Мода I, $\beta=0$, (б) мода II, $\beta=0$, (в) мода I, $\beta=10$, и (г) мода II, $\beta=10$. На (а) и (в) сплошные (пунктирные) кривые показывают ν_{xy} (ν_{yx}). На (б) и (г) изотропия решетки сохраняется и $\nu_{xy} = \nu_{yx}$. Отметим, что на всех четырех панелях рисунка 3 видны отрицательные значения коэффициентов Пуассона для достаточно больших A и достаточно большой равноосной растягивающей деформации. Можно заключить, что одновременное действие ДНМ и равноосной растягивающей деформации может превратить рассматриваемую решетку в ауксетик.

Далее изучается модуляционная неустойчивость ДНМ. Этот эффект неоднократно наблюдался в нелинейных решетках [17,19]. Для полноты изложения следует заметить, что помимо двух ДНМ, представленных на рисунке 1(б,в), в гексагональной решетке существуют еще две ДНМ [12]. Они также проявляют модуляционную неустойчивость при не слишком малых амплитудах, но при этом не происходит пространственной локализации энергии в виде ДБ. Поэтому далее сосредоточимся на анализе мод, показанных на рисунке 1(б,в), которые при разрушении приводят к появлению ДБ.

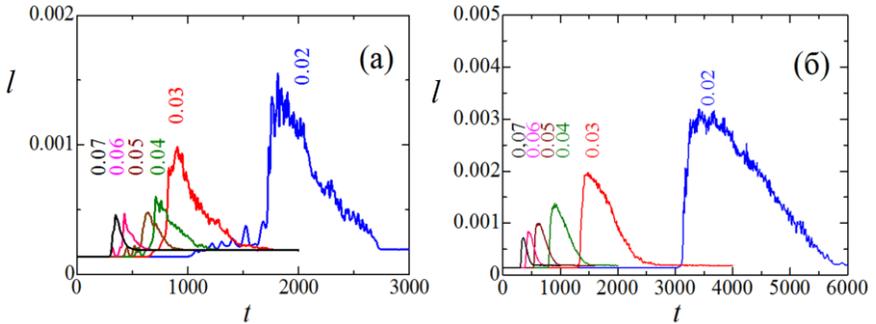


Рисунок 4 – Параметр локализации (2) как функция времени для мод (а) I и (б) II, для различных начальных амплитуд, указанных для каждой кривой

Для изучения временной эволюции колебательных мод I и II будем следить за изменением параметра локализации,

$$l = \frac{\sum_{n=1}^N e_n^2}{\left(\sum_{n=1}^N e_n\right)^2}, \quad (2)$$

где e_n – это полная энергия одной частицы, осредненная за период колебания ДНМ и суммирование ведется по всем N частицам в расчетной ячейке.

Отметим, что если вся энергия локализована на одной частице, то имеем $l=1$. При равном распределении энергии по всем частицам имеем $l=1/N$, что при больших N близко к нулю.

На рисунке 4 показана эволюция во времени параметра локализации (2) для мод (а) I и (б) II. Результаты получены для различных начальных амплитуд мод, как указано для каждой кривой. Видно, что с уменьшением A увеличивается время развития модуляционной неустойчивости, когда величина l остается малой. Затем происходит резкий рост l , что свидетельствует о пространственной локализации энергии в системе. Анализ показал, что энергия локализуется на ДБ. Далее ДБ медленно излучают энергию, и параметр локализации уменьшается со временем примерно по линейному закону. В итоге система приходит к тепловому равновесию со статистически однородным распределением энергии по расчетной ячейке. С уменьшением A наблюдается рост максимального значения l , а также рост времени жизни ДБ.

Таким образом, установлено, что две из четырех ДНМ, существующих в гексагональной решетке, приводят к пространственной локализации энергии в виде ДБ. Оказалось, что модуляционная неустойчивость приводит к появлению ДБ только для тех мод, частота которых лежит выше спектра малоамплитудных колебаний решетки.

Глава 4. Дискретные бризеры в кристаллах Морзе

Самым мягким из упомянутых потенциалов, рассмотренных в [18], был потенциал Морзе. Поэтому если показать возможность существования ДБ в кристаллах Морзе, то они тем более будут существовать в кристаллах Тоды, Борна-Майера и Леннарда-Джонса.

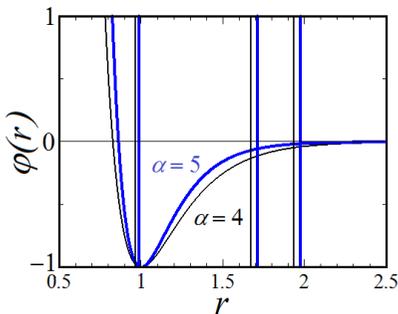


Рисунок 5 – Потенциал Морзе (3), построенный для значений параметров $D = r_m = 1$ и $\alpha = 4$ (черная кривая), $\alpha = 5$ (синяя кривая)

Классический парный потенциал Морзе имеет вид

$$\varphi(r) = D(e^{-2\alpha(r-r_m)} - 2e^{-\alpha(r-r_m)}), \quad (3)$$

где φ – энергия взаимодействия пары атомов, расположенных на расстоянии r друг от друга и D, r_m, α – параметры потенциала, определяющие энергию разрыва связи, равновесное межатомное расстояние и жесткость связи соответственно (см. рисунок 5). Особо отметим существование точки перегиба у потенциала Морзе, правее которой потенциал демонстрирует мягкий, а левее – жесткий тип нелинейности. Данное свойство является общим для всех без исключения реалистичных межатомных потенциалов, отражая природу межатомных взаимодействий, определяемых преимущественно вкладом электронов на больших расстояниях и взаимодействием ядер на малых.

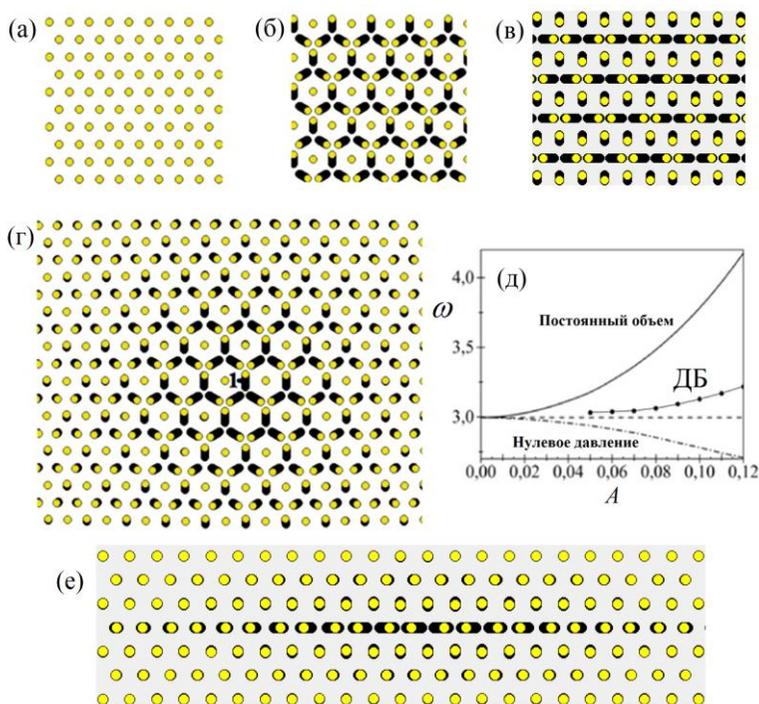


Рисунок 6 – (а) Двумерная треугольная решетка. (б,в) Две ДНМ, существующие в треугольной решетке. (г,е) ДБ, полученные наложением локализирующих функции на ДНМ, представленные на (б,в), соответственно. (д) Зависимости частоты от амплитуды для ДБ, показанного на (е) и для ДНМ, показанной на (в) в случаях постоянного объема и нулевого давления. Горизонтальная штриховая линия показывает верхнюю границу фононного спектра

Основной результат данной главы состоит в том, чтобы показать возможность существования и определить основные свойства ДБ в монокристаллах Морзе размерности 2 и 3. Оказалось, что они могут поддерживать более чем один тип ДБ.

Для запуска ДБ систематически использовался подход, основанный на анализе зависимости частот ДНМ от их амплитуд, которая появляется за счет нелинейности потенциала Морзе. Если частота моды с ростом амплитуды выходит из фононного спектра, то можно пытаться, наложив на нее колоколообразную функцию, получить пространственно локализованную колебательную моду, то есть ДБ.

На рисунке 6 изображены: (а) двумерный кристалл, атомы которого занимают положения треугольной решетки; (б,в) две ДНМ, поддерживаемые треугольной решеткой; (г,е) ДБ, полученные наложением локализирующих функций на ДНМ, представленные на (б,в) соответственно. На (д) даны зависимости частоты от амплитуды для ДБ, показанного на (е), и для ДНМ, показанной на (в), в случаях постоянного объема и нулевого давления. Горизонтальная штриховая прямая показывает верхнюю границу бесщелевого фононного спектра. Параметры потенциала (3): $D=1$, $r_m=1$, $\alpha=5$. Масса атома, без потери общности, взята равной единице. Видно, что ДНМ показывает мягкий либо жесткий тип нелинейности в зависимости от граничных условий. Если кристалл имеет возможность свободно расширяться при нулевом внешнем давлении, то больший вклад в динамику решетки дает мягкий хвост потенциала Морзе, и частота ДНМ падает с амплитудой, отщепляясь от верхней границы фононного спектра. Если же размер ячейки не изменяется, то с увеличением амплитуды колебания атомов растет вклад жесткого ядра потенциала, и частота моды растет. ДБ является пространственно локализованной колебательной модой. Поэтому в ядре ДБ имеем локальное увеличение межатомных расстояний, которое до определенной степени сдерживается окружающей частью кристалла. Ввиду этого частота ДБ лежит между частотами ДНМ в двух рассмотренных режимах. Как оказалось, сдерживающего давления, действующего на ядро ДБ со стороны его окружения, достаточно для того, чтобы частота ДБ росла с амплитудой и оказалась выше фононного спектра.

Аналогично две ДНМ были исследованы и в ГЦК кристалле Морзе. И в трехмерном случае частота ДНМ росла с амплитудой при постоянном объеме и падала при нулевом давлении. Использование локализирующей функции со сферической симметрией позволило получить несколько типов ДБ в зависимости от используемой ДНМ и от положения центра локализирующей функции по отношению к узлам решетки.

Таким образом, показано, что в двумерном и трехмерном моноатомных кристаллах Морзе, в отличие от одномерного, возможно создание условий, в которых жесткое ядро потенциала вносит больший вклад в динамику решетки, чем мягкий хвост, что и обеспечивает существование ДБ за счет выхода их частоты выше фононного спектра.

Глава 5. Дискретные бризеры в графене. Явление супратрансмиссии

В работе [22] было показано, что при использовании межатомного потенциала AIREBO [23] в **недеформированном** графене возможно существование ДБ с колебаниями атомов перпендикулярно листу графена.

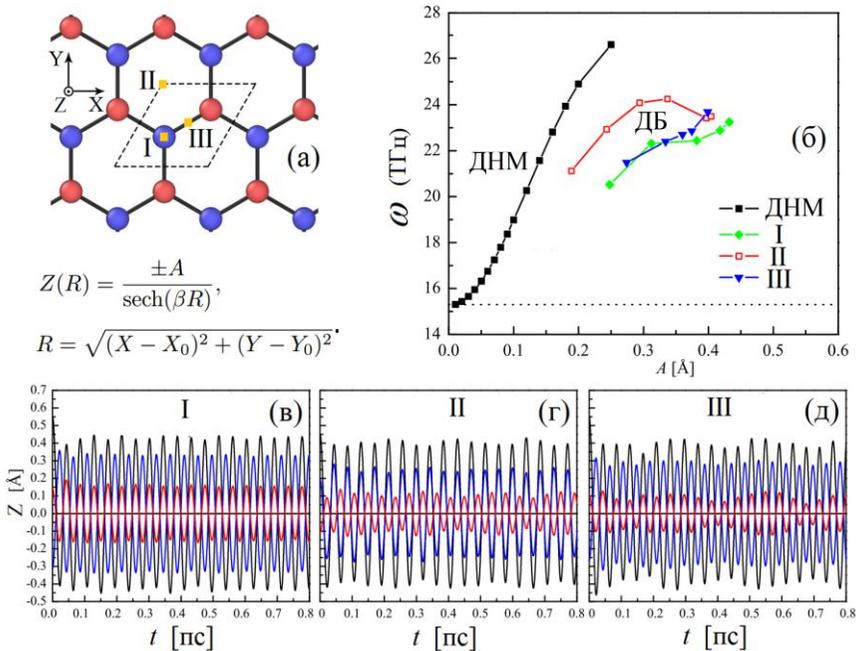


Рисунок 7 – (а) Структура графена. Атомы разбиты на две подрешетки – красную и синюю. Точки I, II и III показывают три положения центра локализирующей функции, накладываемой на ДНМ. (б) Зависимость частоты от амплитуды для ДНМ и для трех типов ДБ. Горизонтальная пунктирная линия показывает верхний край спектра Z-фононов. (в-д) Z-перемещения атомов как функции времени для трех ДБ, центрированных в точках I, II и III, соответственно

Частота ДБ, найденного в [22], лежит внутри фононного спектра графена. Однако если спектр разложить на составляющие в плоскости XY и перпендикулярно плоскости листа (в направлении Z), то окажется, что ДБ имеет частоты выше спектра Z -фононов, а с XY -фононами он взаимодействует очень слабо, что и обеспечивает его большое время жизни. ДБ возбуждался в [22] путем отклонения шести атомов одного гексагона по три (через один) в разные стороны, перпендикулярно листу графена. В диссертационной работе применялся более общий метод возбуждения ДБ, отталкивающийся от анализа ДНМ, в которой атомы движутся по нормали к листу графена. Атомы на рисунке 7(а) разбиты на две подрешетки, красную и синюю. В рассматриваемой ДНМ эти подрешетки колеблются в противофазе в направлении Z . Оказалось, что частота данной моды растет с амплитудой, отрываясь от края фононного спектра Z -фононов (горизонтальная пунктирная линия), как показано черными квадратами на рисунке 7(б). Далее на ДНМ накладывалась локализирующая функция $Z(R)$, записанная на рисунке 7 ниже панели (а). Здесь A – амплитуда функции, β определяет степень ее пространственной локализации, а R – расстояние от центра функции. Координаты центра (X_0, Y_0) можно разместить либо на атоме, либо в центре гексагона, либо на середине валентной связи, эти точки занумерованы римскими цифрами на рисунке 7(а). Находя методом проб и ошибок величину параметра β для заданной амплитуды A , удалось получить все три типа ДБ. На рисунке 7(б) показаны зависимости частоты от амплитуды для трех ДБ. На (в-д) представлены зависимости Z -перемещений атомов в ядре ДБ для атомов, имеющих максимальную (черная кривая), вторую по величине (синяя кривая) и третью по величине (красная кривая) амплитуду колебаний. В работе [22] был получен только ДБ типа II. Итак, в данном исследовании в очередной раз была показана плодотворность подхода для запуска ДБ, основанного на анализе ДНМ.

Край наноленты графена можно рассматривать как одномерную цепочку атомов. Оказалось, что если к наноленте с краем параллельным ориентации кресло приложить растягивающую деформацию, то в фононном спектре открывается щель и появляется возможность существования щелевого ДБ на краю наноленты, показанного на рисунке 8(а). При моделировании использовался межатомный потенциал Савина [24]. Были рассчитаны энергии таких ДБ в зависимости от амплитуды при различных значениях деформации наноленты [см. рисунок 8(б)]. Видно, что с ростом деформации энергия ДБ несколько снижается, поскольку уменьшается жесткость межатомных связей. Найденная максимальная энергия ДБ составляет 1 эВ. Данная работа открывает новое направление в изучении ДБ на поверхности кристаллов, ведь край

графена это по сути «поверхность» двумерного листа. Щелевой ДБ внутри деформированного листа графена, описанный ранее [25], и представленный здесь ДБ на краю листа имеют очень разную структуру. Это легко объяснимо, ведь атомы на краю лишены части соседей и находятся совершенно в иных условиях, чем атомы внутри листа. Поиск ДБ на поверхности кристаллов важен, поскольку их проще наблюдать экспериментально, чем ДБ в объеме кристалла.

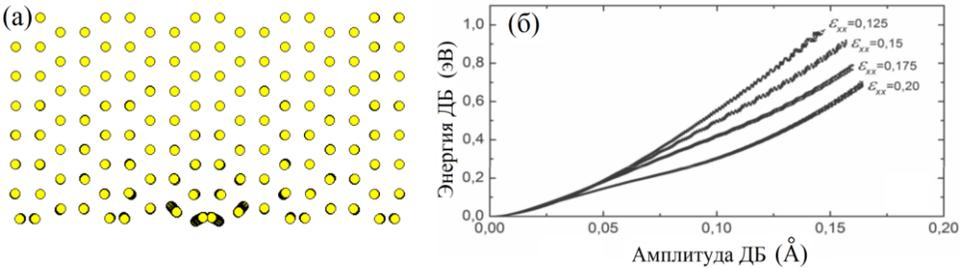
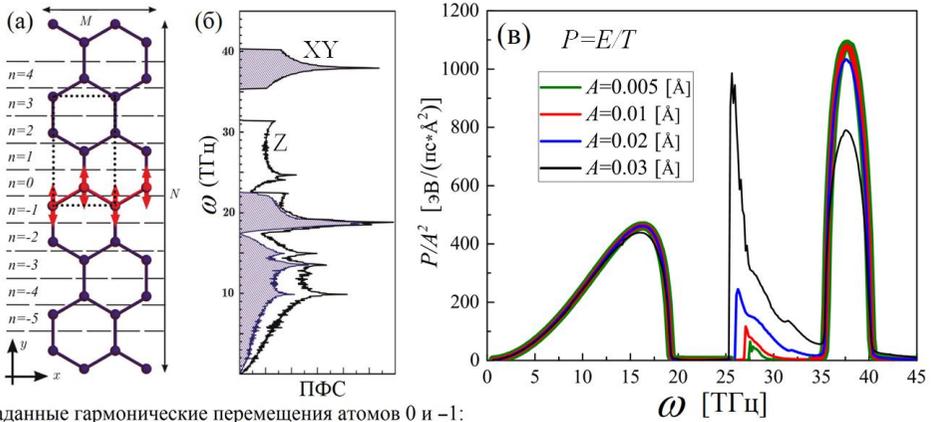


Рисунок 8 – (а) ДБ на краю наноленты графена, растянутой на 20% вдоль направления кресло. На нижнем свободном крае расчетной ячейки видны четыре атома, колеблющиеся с большой амплитудой (перемещения увеличены в 4 раза для наглядности). (б) Энергия ДБ на краю графеновой наноленты в зависимости от амплитуды ДБ для разных значений деформации наноленты

Перейдем к описанию результатов по исследованию явления супратрансмиссии в однородно деформированном графене ($\epsilon_{xx}=0,35$, $\epsilon_{yy}=-0,1$), который, как было ранее показано, поддерживает щелевые дискретные бризеры [25]. Здесь использовался межатомный потенциал Савина [24]. На рисунке 9(а) показана постановка компьютерного эксперимента. Задача решалась в квазиодномерной постановке, для чего одна зигзаг цепочка графена двигалась в направлении оси Y по гармоническому закону с амплитудой A и частотой ω . Плотность фононных состояний показана на рисунке 9(б) для составляющих XY - (серый цвет) и Z -фононов (белый цвет). В XY -спектре видна широкая щель, в этом диапазоне частот существуют щелевые ДБ [25]. Ряд атомов, который движется принудительно, можно считать источником энергии, которая может передаваться, а может и не передаваться кристаллу. Суть эксперимента состояла в подсчете мощности P источника, которая определялась как энергия листа графена E в конце численного эксперимента, поделенная на время эксперимента T . Время эксперимента определялось так, чтобы возмущение от

источника успевало дойти до края расчетной ячейки, но не отразилось от него и не повлияло на работу источника. Размер расчетной ячейки $M=1$, $N=400$. Такой расчет был проделан для диапазона частот от 0 до 45 ТГц и для разных значений амплитуд возбуждения.



Заданные гармонические перемещения атомов 0 и -1:

$$\Delta y_0(t) = \Delta y_{-1}(t) = A \sin(2\pi\omega t)$$

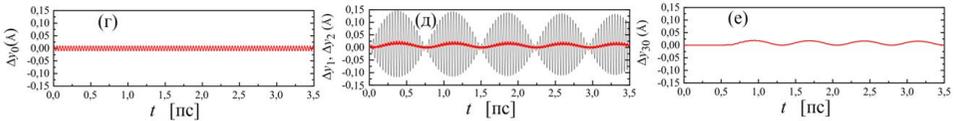


Рисунок 9 – (а) Структура графена с нумерацией атомных рядов. (б) Плотность фонных состояний однородно деформированного графена ($\epsilon_{xx}=0,35$, $\epsilon_{yy}=-0,1$), разложенная на составляющие XY (в плоскости листа) и Z (по нормали к плоскости). (в) Нормированная мощность источника P в зависимости от его частоты ω и разных значений амплитуды A . (г-е) Зависимости от времени Y-компонент перемещения атомных рядов с номерами (г) $n=0$, (д) $n=1,2$ и (е) $n=30$

Результаты приведены на рисунке 9(в) для четырех значений амплитуд, причем мощность нормирована на квадрат амплитуды. Видно, что мощность ненулевая в акустической и в оптической областях фонного спектра, что и ожидалось, поскольку при возбуждении на частотах в пределах фонного спектра источник испускает соответствующий фотон, который бежит по листу графена, передавая ему энергию. Выше фонного спектра, при частотах более 40 ТГц, мощность нулевая, поскольку фононов с такими частотами графен не

поддерживает. Особого внимания заслуживает область частот в щели фононного спектра, ведь таких фононов тоже нет, но мы видим здесь области с ненулевой мощностью. Каким же образом энергия передается кристаллу на этих частотах возбуждения? Для ответа на этот вопрос проанализируем перемещения атомов как функции времени для случая $A=0.01\text{\AA}$ и частоты 27 ТГц, где наблюдается ненулевая мощность. На рисунке 9(г) показан атом $n=0$, который движется по заданному гармоническому закону с амплитудой 0.01\AA . Соседний с ним атом $n=1$ движется с переменной амплитудой, которая то возрастает до значения $0,15\text{\AA}$, то падает до нуля [см. рисунок 9(д)]. Следующий атом $n=2$ имеет малую амплитуду колебаний [см. рисунок 9(д)]. Таким образом, на атоме $n=1$ возникает ДБ с переменной во времени амплитудой. Когда амплитуда ДБ максимальна, он вызывает локальное растяжение решетки, а когда минимальна – растяжение пропадает. При этом возбуждается фонon с частотой модуляции амплитуды ДБ, это низкочастотный фонon. Его хорошо видно на достаточном удалении от ДБ: на рисунке 9(е) показано перемещение атома $n=30$. Можно сделать вывод, что перенос энергии по кристаллу в случае внешнего воздействия на частоте в щели фононного спектра осуществляется за счет возбуждения стоячего ДБ с переменной во времени амплитудой, который испускает фонon на частоте огибающей амплитуды. Принципиально важным результатом данной работы является то, что ненулевая мощность на частотах в щели спектра наблюдается даже при малых амплитудах. Принято считать, что супратрансмиссия является существенно нелинейным эффектом и проявляется **только** при достаточно больших амплитудах внешнего воздействия. Здесь же мы видим, что при амплитудах 0.005 и 0.01 мощность в пределах фононных полос нормируется на квадрат амплитуды, как предсказывает линейная теория, но даже при столь малых амплитудах в щели фононного спектра имеется область с заметной ненулевой мощностью.

Глава 6. n-Краудионы

Моделирование краудионов проводилось в двумерном кристалле с треугольной решеткой. Межатомные взаимодействия описывались парным потенциалом Морзе (3) с параметрами $D=1$, $r_m=1$, $\alpha=5$, масса атома равна единице. В работах по анализу каскадов атомных столкновений, вызванных облучением медленными нейтронами или бомбардировкой ионами, у межатомных потенциалов модифицируют отталкивательную часть (ядро потенциала). В данной работе необходимости в модификации потенциала не возникло, поскольку максимальное сближение атомов контролировалось на

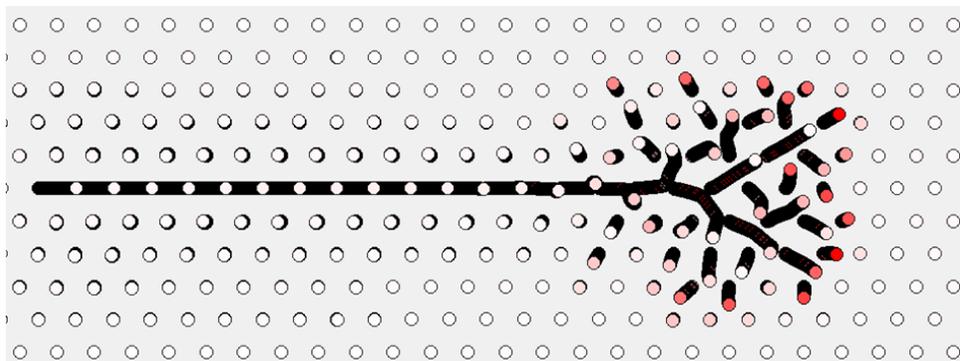


Рисунок 10 – Пример движения классического краудиона, для которого не выполнено условие самофокусировки

уровне примерно 0,5 от равновесного межатомного расстояния, а проблемы при моделировании ядра потенциала возникают при большем сближении атомов.

Классический краудион инициировался приданием начальной скорости одному атому вдоль плотноупакованного ряда с небольшим отклонением (на угол $\theta=10^{-6}$) от плотноупакованного направления (см. рисунок 10). Температура кристалла равна нулю. Для цепочки **твердых шаров** диаметра d , расположенных на расстоянии s друг от друга, известно точное условие самофокусировки столкновений, $s < d$, которое не зависит от скорости шаров [26]. При выполнении этого условия угол θ будет уменьшаться от столкновения к столкновению, а при нарушении - увеличиваться. Эффективный размер **атомов**, которые не являются твердыми шарами, при соударении равен максимальному сближению центров атомов, поэтому он зависит от скорости соударения, а именно, он тем меньше, чем выше скорость соударения. Основываясь на точном результате для твердых шаров, можно получить приближенное условие самофокусировки **атомов** диаметра d , которые в равновесном кристалле располагаются плотно друг к другу, то есть, $s=0$. Столкновения атомов будут самофокусирующимися, если скорость столкновения такова, что расстояние между центрами атомов не оказываются меньше, чем $d/2$. На рисунке 10 условие самофокусировки не выполнено, потому, что начальная скорость атома была слишком велика ($V_0=28$ усл. ед.). Это хорошо видно на рисунке 11, где для атома, имеющего максимальную скорость, представлены как функции времени (а) угол расфокусировки θ , (б) максимальная скорость и (в) минимальное расстояние до соседнего атома. На

(а) видно, что угол расфокусировки экспоненциально растет, из (б) следует, что максимальная скорость монотонно падает, поскольку краудион при своем движении постоянно излучает часть своей энергии, на (в) видно, что минимальное сближение атомов происходит на величину меньше $d/2$, то есть условие самофокусировки не выполнено.

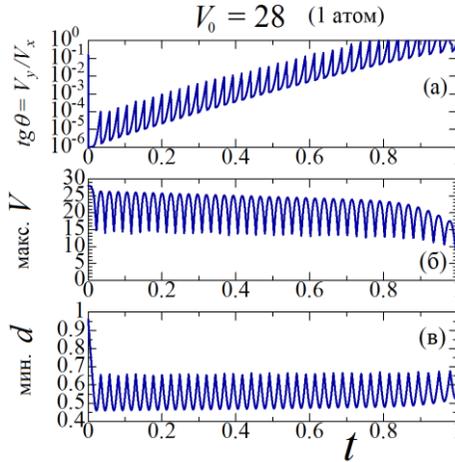


Рисунок 11 – Движение неустойчивого классического краудиона: для атома, имеющего максимальную скорость, представлены зависимости от времени (а) угла расфокусировки θ , (б) максимальной скорости и (в) минимального расстояния до соседнего атома

Таким образом, длина пробега классического краудиона ограничена по двум причинам: слишком большая начальная скорость атома приводит к дефокусировке атомных столкновений, а уменьшение начальной скорости означает уменьшение начальной энергии краудиона. Можно ли повысить начальную энергию краудиона не повышая начальную скорость атомов? Оказывается, можно, если начальную скорость задать не одному, а n соседним атомам. Такое начальное возбуждение естественно назвать n -краудионом. На рисунке 12 охарактеризовано движение 2-краудиона, полученного заданием начальной скорости $V_0=17$ усл. ед. двум соседним атомам плотноупакованного ряда. На (а) видно, что угол расфокусировки не растет, из (б) следует, что максимальная скорость монотонно падает, поскольку краудион постоянно излучает энергию, на (в) видно, что атомы не сближаются на расстояние менее $d/2$, то есть условие самофокусировки выполнено.

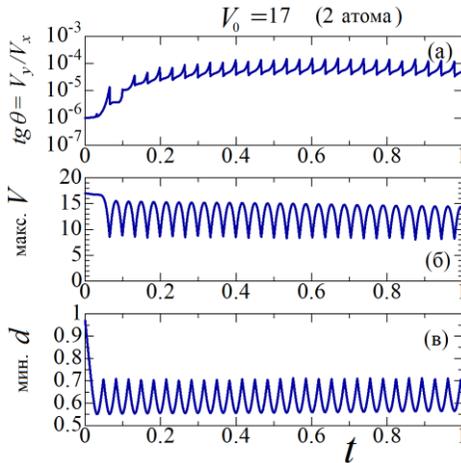


Рисунок 12 – Движение устойчивого 2-краудиона: для атома, имеющего максимальную скорость, представлены зависимости от времени (а) угла расфокусировки θ , (б) максимальной скорости и (в) минимального расстояния до соседнего атома

В таблице 1 дана зависимость пути, пройденного n -краудионом до остановки, от числа n ближайших атомов, получивших начальную скорость V_0 вдоль плотноупакованного атомного ряда. При получении результатов, приведенных в таблице 1, начальное возмущение в угол θ не вводилось, то есть он равнялся погрешности арифметических операций, выполняемых компьютером, что составило величину порядка $\theta=10^{-16}$. Для каждого значения n выделено значение V_0 , давшее максимальный пробег n -краудиона. Отметим, что классический краудион ($n=1$) показал максимальную длину пробега 118 межатомных расстояний, при $V_0=26$, при этом его динамика была неустойчивой, то есть при увеличении начального возмущения θ длина пробега заметно сокращалась. 2-краудион пробежал в три раза дальше при начальной скорости $V_0=22$, показав движение устойчивое по отношению к начальным возмущениям. 4-краудион пробежал в шесть раз дальше классического краудиона при начальной скорости $V_0=17$, обеспечившей его устойчивое движение.

Краудионы переносят массу, поэтому в качестве вывода можно сказать, что в данной работе показан новый механизм массопереноса n -краудионами,

более эффективный, чем массоперенос, осуществляемый классическими краудионами.

Таблица 1 – Зависимость пути, пройденного n -краудионом (измеряемого числом межатомных расстояний), от числа n ближайших атомов, получивших начальную скорость V_0 вдоль плотноупакованного атомного ряда

| V_0 | 1 атом | 2 атома | 3 атома | 4 атома | 5 атомов | 6 атомов | 7 атомов | 8 атомов | 10 атомов |
|-------|--------|---------|---------|---------|----------|----------|----------|----------|-----------|
| 12 | | | 110 | 279 | 291 | 285 | 308 | 314 | 401 |
| 13 | | | | | | 394 | 415 | 407 | 482 |
| 14 | | | 171 | 449 | 478 | 493 | 511 | 512 | 534 |
| 15 | | 154 | | 582 | 616 | 597 | 606 | 610 | 536 |
| 16 | | 178 | 246 | 624 | 687 | 703 | 702 | 706 | 379 |
| 17 | | 203 | 288 | 675 | 688 | 762 | 719 | 677 | 364 |
| 18 | 53 | 230 | 334 | 377 | 391 | 399 | 403 | 391 | 367 |
| 19 | 58 | 256 | 380 | | | | 353 | | |
| 20 | 67 | 285 | 374 | 357 | 352 | | | | |
| 21 | 75 | 323 | 358 | | | | | | |
| 22 | 83 | 336 | 287 | 242 | | | | | |
| 23 | 92 | 261 | | | | | | | |
| 24 | 102 | 164 | | | | | | | |
| 25 | 112 | | | | | | | | |
| 26 | 118 | | | | | | | | |
| 27 | 98 | | | | | | | | |
| 28 | 82 | | | | | | | | |

Глава 7. Морщины и ринклоны в графене

Графен обладает колоссальной жесткостью при растяжении и весьма малой изгибной жесткостью, поэтому он легко теряет свою плоскую форму под действием приложенных усилий или тепловых колебаний. Ринклон – это локальная область, где сходится разное число морщин. С физической точки зрения ринклон – это топологический солитон. В целом ряде экспериментальных работ было показано, что одномерные и двумерные морщины в графене могут значительно изменить локальные химические потенциалы для атомов, производят магнитные поля и влияют на электронные свойства графена. Таким образом, управляя геометрией морщин, можно влиять на свойства графена, добиваясь их улучшения. В связи с этим, в диссертации, с использованием потенциала Савина исследовались морщины и ринклоны в графене.

В частности, была решена такая задача (см. рисунок 13): верхний край длинной полосы графена был закреплен, а по боковым краям полосы наложены периодические граничные условия. Полоска сжата в своей плоскости

вдоль оси x , поэтому в ней выгодно образование морщин, ориентированных вдоль оси y . Использовались два вида начальных конфигураций – переход одной морщины в две (а) и в три (б). Заметим, что серые и черные области на рисунке 13 показывают атомы графена, имеющие положительные и отрицательные отклонения от плоской формы графена. Такие структуры релаксировались до достижения системой некоторого равновесного состояния, соответствующего локальному или глобальному минимуму потенциальной энергии. Первый вопрос, на который был получен ответ – приведут ли разные начальные состояния к разным равновесным конфигурациям? Оказалось, что да, из (а) было получено (в), а из (б) (г).

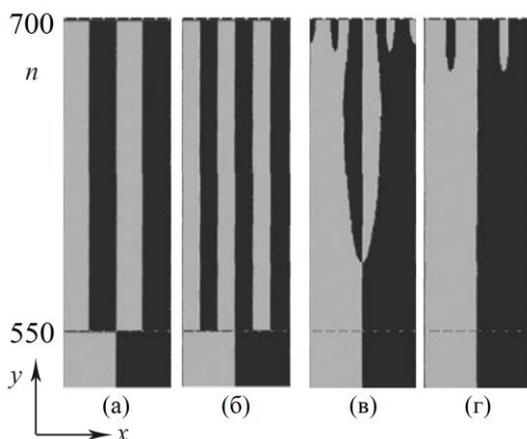


Рисунок 13 – Движение устойчивого 2-краудиона: для атома, имеющего максимальную скорость, представлены зависимости от времени (а) угла расфокусировки θ , (б) максимальной скорости и (в) минимального расстояния до соседнего атома

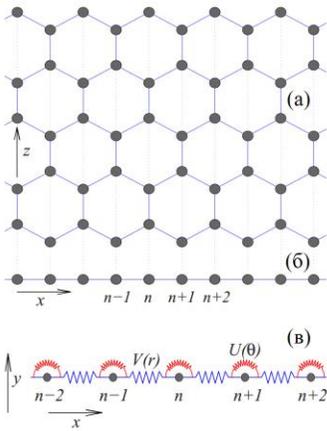
Далее сравнивались энергии и профили полученных структур. Оказалось, что несмотря на значительную разницу в форме морщин и ринклонов, их потенциальные энергии очень близки. Этим и объясняется вариабельность формы морщин и их значительная трансформация под действием малых внешних сил.

Кроме того, была решена динамическая задача, в которой рассматривался движущийся ринклон, соединяющий морщины с длиной волны λ и $\lambda/2$. Морщина с длиной волны λ имеет меньшую плотность потенциальной энергии,

поэтому ринклон движется, превращая конфигурацию с длиной волны $\lambda/2$ в конфигурацию с длиной волны λ . С точки зрения физики нелинейных явлений, ринклон в графене – это топологический солитон, движущийся в бистабильной среде, черпающий энергию для своего движения за счет перевода среды из одного устойчивого состояния в другое, но с меньшей энергией.

Глава 8. Вторичные структуры на основе графена, возникающие за счет действия сил Ван-дер-Ваальса

Относительно слабые силы Ван-дер-Ваальса играют важную роль в формировании вторичных структур из sp^2 графеновых структур, таких как графен, фуллерен, углеродные нанотрубки. Для моделирования возможных конформаций графеновых нанолент нами была разработана модель цепи для описания продольной и изгибной жесткости наноленты, а также сил Ван-дер-Ваальса.



Гамильтониан цепной модели:

$$H = \sum_{n=1}^N \frac{1}{2} M (\dot{x}_n^2 + \dot{y}_n^2) + \sum_{n=1}^{N-1} V(r_n) + \sum_{n=2}^{N-1} U(\theta_n) + \sum_{n=1}^{N-4} \sum_{k=n+4}^N W_i(r_{nk}).$$

Устойчивые конфигурации цепи $N=400$ и их энергии:

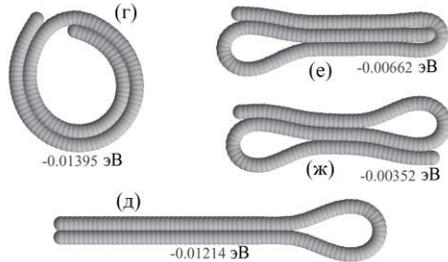


Рисунок 14 – Движение устойчивого 2-краудина: для атома, имеющего максимальную скорость, представлены зависимости от времени (а) угла расфокусировки θ , (б) максимальной скорости и (в) минимального расстояния до соседнего атома

На рисунке 14 (а) показана нанолента графена, на (б) представлена цепочка частиц, занумерованных индексом n , при этом каждая частица представляет цепочку атомов углерода в направлении z (кресло). На рисунке 14(в) представлены жесткости, учитываемые в модели цепи, а именно, жесткости связей между ближайшими узлами и жесткости, связанные с

изменением углов между соседними связями. На рисунке 14 представлен Гамильтониан модели, включающий четыре слагаемых: кинетическую энергию, энергию связей между ближайшими частицами, энергию, связанную с изменением углов между соседними связями и, наконец, энергию ван-дер-ваальсовых взаимодействий. Ниже показаны возможные равновесные конформации наноленты, состоящей из $N=400$ узлов. Это, в порядке возрастания энергии структур, (г) рулон, (д) двойная складка, (е) схлопнутый рулон и (ж) тройная складка.

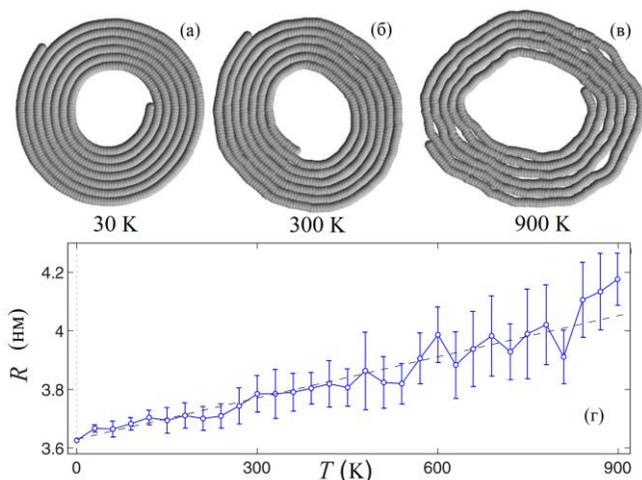


Рисунок 15 – Рулон при температурах (а) 30 К, (б) 300 К и (в) 900 К. На (г) показана зависимость внутреннего радиуса рулона от температуры

Были изучены не только равновесные вторичные структуры, но и их поведение с ростом температуры. На рисунке 15 показан рулон при температурах (а) 30 К, (б) 300 К и (в) 900 К. На рисунке 15(г) показана зависимость внутреннего радиуса рулона от температуры, откуда был оценен коэффициент радиального теплового расширения. Он оказался аномально высоким, на два порядка выше, чем у алмаза. Для объяснения данного эффекта были рассчитаны собственные частоты колебаний рулона и изучены его нелинейные колебания. Оказалось, что самую низкую частоту имеет мода скручивание-раскручивание наноленты, ее частота порядка 0,01 ТГц. Эта мода приводит к колебанию радиуса наноленты, и именно столь низкая частота этой моды объясняет колоссальный коэффициент радиального теплового

расширения. Дело в том, что в тепловом равновесии энергия поровну поделена между всеми колебательными модами. Энергия колебательной моды, как известно, равна произведению ее квадрата частоты на квадрат амплитуды. Следовательно, моды с очень низкой частотой имеют очень большие амплитуды колебаний.

Таким образом, цепная модель позволила исследовать равновесные конфигурации графеновых нанолент и показать аномально высокий коэффициент радиального теплового расширения рулонов нанолент.

Основные результаты и выводы:

1. Установлено, что моноатомные двумерные и трехмерные кристаллы с межатомными взаимодействиями, описываемыми парными потенциалами Морзе, в отличие от одномерного кристалла, допускают существование ДБ с частотами выше бесщелевого фононного спектра. Существование ДБ с жестким типом нелинейности в моноатомных кристаллах Морзе размерности выше единицы обусловлено тем, что в них удастся обеспечить больший вклад жесткого ядра потенциала Морзе в динамику колебательной моды, чем мягкого хвоста.
2. Как в двумерном, так и в трехмерном моноатомных кристаллах Морзе существуют ДБ различных типов. Эффективным способом их возбуждения является наложение локализующей функции на ДНМ, частоты которых при больших амплитудах лежат вне спектра фононных колебаний. Этот же метод задания начальных условий позволил найти новые типы ДБ в недеформированном графене, описываемом при помощи многочастичного потенциала AIREBO, и доказать отсутствие таких ДБ при использовании многочастичного потенциала Савина.
3. Найден новый механизм появления ауксетических свойств у двумерной нелинейной гексагональной решетки за счет возбуждения в ней ДНМ совместно с приложением к решетке однородного растяжения.
4. Перенос энергии по кристаллу однородно деформированного графена, в случае внешнего локального воздействия на частоте в щели фононного спектра, осуществляется за счет возбуждения стоячего ДБ с переменной во времени амплитудой, который испускает фонon на частоте огибающей амплитуды. Вопреки устоявшемуся мнению, супратрансмиссия наблюдается даже при малых амплитудах осциллирующего внешнего воздействия.
5. Предложена концепция сверхзвукового n -краудиона, обобщающая классический 1-краудион, состоящая в том, что вдоль плотноупакованного ряда кристалла движется с большой скоростью не один, а n атомов.

Методом молекулярной динамики изучено движение n -краудионов в двумерном кристалле с межатомными взаимодействиями, описываемыми парным потенциалом Морзе. Для запуска n -краудиона предложены начальные условия, состоящие в задании начальной скорости n соседним атомам одного плотноупакованного ряда вдоль этого ряда. Показано, что условием самофокусирующихся атомных столкновений является то, что скорость столкновения не должна превышать такого значения, при котором центры атомов сходятся ближе, чем на половину равновесного межатомного расстояния.

6. Расчет потенциальной энергии морщин и ринклонов в графеновых нанолентах, полученных в результате релаксации различных начальных конфигураций, показал, что несмотря на значительную разницу в форме равновесных морщин и ринклонов, их потенциальные энергии очень близки. Этим объясняется вариабельность форм морщин и их значительная трансформация под действием малых внешних сил.
7. Рулоны графеновых нанолент имеют коэффициент радиального теплового расширения на два порядка больше, чем алмаз. Для объяснения данного эффекта были рассчитаны собственные частоты колебаний рулона и изучены его нелинейные колебания. Оказалось, что самую низкую частоту (порядка одной сотой терагерца) имеет мода скручивание-раскручивание наноленты, которая приводит к колебанию радиуса наноленты. Столь низкая частота этой моды объясняет колоссальный коэффициент радиального теплового расширения, поскольку в тепловом равновесии энергия поровну поделена между всеми колебательными модами, и мода с очень низкой частотой ω имеет очень большую амплитуду A , так как плотность энергии моды пропорциональна $\omega^2 A^2$.

Цитированная литература

1. Drazin, P. G. Solitons: An Introduction / P. G. Drazin, R. S. Johnson. Cambridge University Press. – 1989. – 226 p. – ISBN 0521433655.
2. Kivshar, Y. S. Optical Solitons: From Fibers to Photonic Crystals / Y. S. Kivshar, G. P. Agrawal. Academic Press, San Diego.– 2003.– ISBN 0124105904.
3. Toda, M. Wave Propagation in Anharmonic Lattices/ M. Toda // J. Phys. Soc. Jpn.– 1967. – V. 23 – P. 501-506.
4. Ablowitz, M. J. Nonlinear differential-difference equations and Fourier analysis/ M. J. Ablowitz, J. F. Ladik // J. Math. Phys. – 1976.– V.17. – P. 1011–1018.

5. Dolgov, A. S. The localization of vibrations in a nonlinear crystalline structure/ A. S. Dolgov // *Sov. Phys. Solid State.* – 1986.– V.28. – P.907–909.
6. Sievers, A. J. Intrinsic localized modes in anharmonic crystals / A. J. Sievers, S. Takeno // *Phys. Rev. Lett.* – 1988. – V. 61. – P. 970.
7. Flach, S. Discrete breathers / S. Flach, C. R. Willis // *Phys Rep.* – 1998. – Vol. 295. – P. 181.
8. Flach, S. Discrete breathers - advances in theory and applications / S. Flach, A. V. Gorbach // *Phys. Rep.* – 2008. – V. 467. – P. 1.
9. MacKay, R. S. Proof of existence of breathers for time-reversible or Hamiltonian networks of weakly coupled oscillators/ R. S. MacKay, S. Aubry. // *Nonlinearity.* – 1994. – Vol. 7. – P. 1623-1643.
10. Kiselev, S. A. Generation of intrinsic vibrational gap modes in three-dimensional ionic crystals/ S. A. Kiselev, A. J. Sievers // *Phys. Rev. B.* – 1997. – Vol. 55.– P. 5755.
11. Manley, M. E. Intrinsic localized modes observed in the high-temperature vibrational spectrum of NaI / M. E. Manley, A. J. Sievers, J. W. Lynn, S. A. Kiselev, N. I. Agladze, Y. Chen, A. Llobet, A. Alatas // *Phys. Rev. B.* – 2009. – Vol. 79.– P. 134304.
12. 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. – P. 43.
13. Bo, X. Electrochemical sensors and biosensors based on less aggregated graphene / X. Bo, M. Zhou, L. Guo // *Biosensors and Bioelectronics.* – 2017. – Vol. 89. – P. 167.
14. Molina, J. Graphene-based materials for the electrochemical determination of hazardous ions / J. Molina, F. Cases, L. M. Moretto // *Analytica Chimica Acta.* – 2016. – Vol. 946. – P. 9.
15. Jiang, Y. A review of recent developments in graphene-enabled membranes for water treatment / Y. Jiang, P. Biswas, J. D. Fortner // *Environmental Science: Water Research and Technology.* – 2016. – Vol. 2. – P. 915.
16. Tang, P. Graphene-based metal-free catalysts for catalytic reactions in the liquid phase / P. Tang, G. Hu, M. Li, D. Ma // *ACS Catalysis.* – 2016. – Vol. 6. – P. 6948.
17. Дмитриев, С. В. Дискретные бризеры в кристаллах / С. В. Дмитриев, Е. А. Корзникова, Ю. А. Баймова, М. Г. Веларде // *УФН.* – 2016. – V.186. – P. 471.

18. Kiselev, S. A. Anharmonic gap modes in a perfect one-dimensional diatomic lattice for standard two-body nearest-neighbor potentials / S. A. Kiselev, S. R. Bickham, A. J. Sievers. // *Phys. Rev. B.* – 1993. – Vol. 48. – P. 13508.
19. Burlakov, V. M. Localized excitations of uniform anharmonic lattices / Burlakov V. M., Kiselev S. A., Rupasov V. I. // *JETP Lett.* – 1990. – Vol. 51. – P. 544.
20. Geniet, F. Energy transmission in the forbidden band gap of a nonlinear chain / F. Geniet, J. Leon // *Phys. Rev. Lett.* – 2002. – Vol. 89. – P. 134102.
21. Wojciechowski, K. W. Negative Poisson ratios at negative pressures / K. W. Wojciechowski // *Mol. Phys. Rep.* – 1995. – Vol. 10. – P. 129.
22. Hizhnyakov, V. Transverse intrinsic localized modes in monatomic chain and in graphene / V. Hizhnyakov, M. Klopov, A. Shelkan // *Physics Letters A.* – 2016. – Vol. 380. – P. 1075.
23. Stuart, S. J. A reactive potential for hydrocarbons with intermolecular interactions / S. J. Stuart, A. B. Tutein, J. A. Harrison // *J. Chem. Phys.* – 2000. – Vol. 112. – P. 6472.
24. Savin, A. V. Suppression of thermal conductivity in graphene nanoribbons with rough edges / A. V. Savin, Yu. S. Kivshar, B. Hu // *Phys. Rev. B.* – 2010. – Vol. 82. – P. 195422.
25. Хадеева Л. З. Дискретные бризеры в деформированном графене / Л. З. Хадеева, С. В. Дмитриев, Ю. С. Кившарь // *Письма в ЖЭТФ.* – 2011. – Т. 94. – С. 580.
26. Гарбер, Р. И. Фокусировка атомных столкновений в кристаллах / Р. И. Гарбер, А. И. Федоренко // *УФН.* – 1964. – Т. 83. – С. 385.

Список публикаций автора по теме диссертации в изданиях, рекомендованных ВАК РФ:

Публикации в журналах, индексируемых в Scopus и/или Web of Science:

1. Корзникова, Е. А. Дискретный бризер на краю листа графена ориентации "кресло" / Е. А. Корзникова, А. В. Савин, Ю. А. Баймова, С. В. Дмитриев, Р. Р. Мулюков // *Письма в ЖЭТФ.* – 2012. – Т. 96. – N3-4. – С.238-242.
2. Korznikova, E. A. Effect of strain on gap discrete breathers at the edge of armchair graphene nanoribbons / E. A. Korznikova, J. A. Baimova, S. V. Dmitriev // *Europhysics Letters.* – 2013. – V. 102. – N 6. – P.60004.
3. Korznikova, E. A. Moving wrinkle in graphene nanoribbons / E. A. Korznikova, S. V. Dmitriev // *Journal of Physics D: Applied Physics.* – 2014. – V.47. – N 34. – P.345307.

4. Корзникова, Е. А. Влияние конфигурации ринклона на распределение энергии и упругой деформации в наноленте графена / Е. А. Корзникова, С. В. Дмитриев // Письма в ЖЭТФ.– 2014.– Т.100.– N 3-4.– С. 201-206.
5. Vaimova, J. A. Review on crumpled graphene: unique mechanical properties / J. A. Vaimova, E. A. Korznikova, S. V. Dmitriev, B. Liu, K. Zhou // Reviews on Advanced Materials Science.–2014.– V. 39.– N 1.– P. 69-83.
6. Корзникова, Е. А. Топология ринклонов в графеновых нанолентах вблизи закрепленного края / Е. А. Корзникова, Ю. А. Баимова, С. В. Дмитриев // Известия высших учебных заведений. Физика.– 2015.– Т.58.– N6.– С.61-66.
7. Корзникова, Е. А. Коробление и морщины тонких пленок и мембран / Е. А. Корзникова, Ю. А. Баимова, С. В. Дмитриев, А. И. Потекаев, Е. А. Мельникова // Известия высших учебных заведений. Физика.– 2015.– Т.58.– N 8.– С.24-28.
8. Савин, А. В. Моделирование складчатых и рулонных упаковок углеродных нанолент / А. В. Савин, Е. А. Корзникова, С. В. Дмитриев // Физика твердого тела.– 2015.– Т. 57.– N 11.– С.2278-2285.
9. Vaimova, J. A. Discrete breathers in carbon and hydrocarbon nanostructures / J. A. Vaimova, E. A. Korznikova, S. V. Dmitriev, I. P. Lobzenko // Reviews on Advanced Materials Science.– 2015.– V.42.– N 1.– P.68-82.
10. Savin, A. V. Scroll configurations of carbon nanoribbons / A. V. Savin, E. A. Korznikova, S. V. Dmitriev // Physical Review B.– 2015.– V. 92.– N 3.– P.035412.
11. Murzaev, R. T. Discrete breathers in alpha-uranium / R. T. Murzaev, E. A. Korznikova, S. V. Dmitriev, R. I. Babicheva, K. Zhou, S. Y. Fomin, V. I. Dubinko // The European Physical Journal B.– 2016.– V.89.– N.7– P. 168.
12. Дмитриев, С. В. Дискретные бризеры в кристаллах / С. В. Дмитриев, Е. А. Корзникова, Ю. А. Баимова, М. Г. Веларде // Успехи физических наук.– 2016.– Т.186.– N.5.– С.471-488.
13. Корзникова, Е. А. Высокосимметричный дискретный бризер в двумерном кристалле Морзе / Е. А. Корзникова, С. Ю. Фомин, Э. Г. Соболева, С. В. Дмитриев // Письма в ЖЭТФ.– 2016.– Т.103.– V.4.– С. 303-308.
14. Савин, А. В. Симметричные рулонные упаковки многослойных углеродных нанолент / А. В. Савин, Е. А. Корзникова, И. П. Лобзенко, Ю. А. Баимова, С. В. Дмитриев // Физика твердого тела.– 2016.– Т.58.– N.6.– С.1236-1242.

15. Лобзенко, И. П. Ab initio моделирование щелевых дискретных бризеров в деформированном графене / И. П. Лобзенко, Г. М. Чечин, Г. С. Безуглова, Ю. А. Баимова, Е. А. Корзникова, С. В. Дмитриев // Физика твердого тела.– 2016.– Т.58.– N.3.– С.616-622.
16. Korznikova, E. A. Effect of the Morse potential stiffness on the properties of discrete breathers in 2D close packed crystal / E. A. Korznikova, S. V. Dmitriev, S. Y. Fomin // Materials Science Forum.– 2016.– V.845.– P.211-214.
17. Dmitriev, S. V. Auxeticity from nonlinear vibrational modes / S. V. Dmitriev, E. A. Korznikova, D. I. Bokij, K. Zhou // Physica Status Solidi (B).– 2016.– V.253.– N.7– P.1310-1317.
18. Vaimova, J. A. Wrinkles and wrinkles in graphene and graphene nanoribbons under strain / J. A. Vaimova, E. A. Korznikova, S. V. Dmitriev, B. Liu, K. Zhou // Current Nanoscience.– 2016.– Т.12.– N.2 – С.184-191.
19. Корзникова, Е. А. Почему существуют дискретные бризеры в двумерных и трехмерных монокристаллах Морзе? / Е. А. Корзникова, А. А. Кистанов, К. С. Сергеев, И. А. Шепелев, А. Р. Давлетшин, Д. И. Бокий, С. В. Дмитриев // Письма о материалах.– 2016.– Т.6.– V.3– N23.– С.221-226.
20. Fomin, S. Yu. Discrete breathers of different symmetry in monoatomic 2D Morse crystal / S. Yu. Fomin, E. A. Korznikova // Письма о материалах.– 2016.– Т.6.– V.1.– N21.– С.57-60.
21. Savin, A. V. Low frequency vibrations of carbon nanoscrolls / A. V. Savin, E. A. Korznikova, S. V. Dmitriev // Письма о материалах.– 2016.– Т.6.– V.1.– N21.– P.77-81.
22. Bai, L. Wear and friction between smooth or rough diamond-like carbon films and diamond tips / L. Bai, N. Srikanth, E. A. Korznikova, J. A. Vaimova, S. V. Dmitriev, K. Zhou // Wear.– 2017.– V.372–373.– P.12–20.
23. Захаров, П. В. Возбуждение щелевых дискретных бризеров в кристалле состава АЗВ потоком частиц / П. В. Захаров, М. Д. Старостенков, А. М. Ерёмин, Е. А. Корзникова, С. В. Дмитриев // Физика твердого тела.– 2017.– Т.59.–N2.– С.217-222.
24. Korznikova, E. A. Instability of vibrational modes in hexagonal lattice/ E. A. Korznikova, D. V. Bachurin, S. V. Dmitriev, S. Y. Fomin // The European Physical Journal B. –2017. – V. 90. – P. 23
25. Evazzade, I. Energy transfer in strained graphene assisted by discrete breathers excited by external ac driving / I. Evazzade, I. P. Lobzenko, E. A. Korznikova, I. A. Ovid'ko, M. R. Roknabadi, S. V. Dmitriev // Phys. Rev. B.– 2017.– Phys. Rev. B.– V. 95.– P. 035423.

26. Murzaev R. T. Localized vibrational modes in diamond / R. T. Murzaev, D. V. Bachurin, E. A. Korznikova, S. V. Dmitriev // *Physics Letters A.* – V. 381.–P 1003–1008
27. Barani, E. Transverse discrete breathers in unstrained graphene / E. Barani, I. P. Lobzenko, E. A. Korznikova, E. G. Soboleva, S. V. Dmitriev, K. Zhou, A. M. Marjaneh // *Eur. Phys. J. B.*- 2017.- V. 90. – P. 38.
28. Savin, A. V., Graphene nanoribbon winding around carbon nanotube // A. V. Savin, E. A. Korznikova, S. V. Dmitirev, E. G. Soboleva // *Computational material science.*V. 135. - 2017. - P. 99-108.

Публикации в прочих рецензируемых изданиях, рекомендованных ВАК РФ:

29. Корзникова, Е. А. Дискретный бризер на краю листа графена ориентации кресло / Е. А. Корзникова, Ю. А. Баймова, С. В. Дмитриев // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения.*– 2012. – Т.4-2.– С. 617-623.
30. Корзникова, Е. А. Морщины в упруго деформированных графеновых нанолентах / Е. А. Корзникова // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения.*– 2014.– Т. 11.– N 1. – С.22-25.
31. Кистанов, А. А. Локализация дискретных бризеров в зависимости от размерности модельного кристалла / А. А. Кистанов, Е. А. Корзникова, С. Ю. Фомин, К. Жоу, С. В. Дмитриев // *Письма о материалах.*– 2014.– Т.4.– N4.– С.315-318.
32. Кистанов, А. А. Зависимость степени локализация дискретных бризеров в двумерном кристалле от степени приложенной деформации / А. А. Кистанов, К. Жоу, Е. А. Корзникова, С. Ю. Фомин, С. В. Дмитриев // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения.*– 2015.– Т. 12.– N 1. – С. 103-107.
33. Корзникова, Е. А. Молекулярно-динамическое изучение дискретных бризеров с жестким типом нелинейности в моноатомной двумерной решетке с морзевским взаимодействием / Е. А. Корзникова, Д. И. Бокий, С. Ю. Фомин, С. В. Дмитриев // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения.*– 2015.– Т. 12.– N 3.– С.311-315.
34. Мурзаев, Р. Т. Свойства неподвижных дискретных бризеров в альфа-уране / Р. Т. Мурзаев, Е. А. Корзникова, Д. И. Бокий, С. Ю. Фомин, С. В. Дмитриев // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения.*– 2015.– Т. 12.– N 3.– С.324-329.

35. Бокий, Д. И. Дискретные бризеры в двумерной решетке с кубической нелинейностью / Д. И. Бокий, Е. А. Корзникова, С. В. Дмитриев // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения.*– 2015.– Т. 12.– N 4.– С. 403-407.
36. Семенов, А. С. Дискретные бризеры с жестким и мягким типом нелинейности в одномерной цепочке с дальнедействующим морзевским взаимодействием / А. С. Семенов, Е. А. Корзникова, С. В. Дмитриев // *Письма о материалах.*– 2015.– Т. 5.– V.1.– N 17.– С.11-14.
37. Korznikova, E. A. Effect of the interatomic potential stiffness on the properties of gap discrete breathers in 2D biatomic Morse crystal / E. A. Korznikova, S. Yu. Fomin, S. V. Ustiuzhanina, S. V. Dmitriev // *Письма о материалах.*– 2015.– Т. 5.– V.4.– N 20.– С.364-367.
38. Кистанов, А. А. Дискретные бризеры в ГЦК кристалле Морзе / А. А. Кистанов, Е. А. Корзникова, Н. Н. Медведев, С. В. Дмитриев // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения.*– 2016.– Т. 13.– N 3.– С.321-325.
39. Корзникова, Е. А. Модуляционная неустойчивость и дискретные бризеры в двумерной решетке с кубической нелинейностью / Е. А. Корзникова, Д. В. Бачурин, Д. И. Бокий, С. Ю. Фомин, А. П. Четвериков, С. В. Дмитриев // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения.*– 2016.– Т. 13.– N 3.– С. 387-396.
40. Фомин, С. Ю. Сравнение свойств различных видов дискретных бризеров в двумерном кристалле Морзе / С. Ю. Фомин, Е. А. Корзникова, С. В. Дмитриев // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения.*– 2016.– Т. 13.– N 1.– С. 54-59.
41. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2016610362 от 11.01.2016. Программа для исследования нелинейных локализованных колебаний в ауксетических материалах / Borland C++/ Е. А. Корзникова, Д. И. Бокий, С. В. Дмитриев, С. Ю. Фомин
42. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2016610364 от 11.01.2016. Программа «Цепная модель углеродной наноленты» / Borland C++/ А. В. Савин, Е. А. Корзникова, С. В. Дмитриев
43. Медведев, Н. Н. Многочастичные краудсионные столкновения. / Н. Н. Медведев, М. Д. Старостенков, Е. А. Корзникова, С. В. Дмитриев // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения.*– 2017.– Т. 14.– N 1.– С. 108-112.