

ИНСТИТУТ ФИЗИКИ МОЛЕКУЛ И КРИСТАЛЛОВ - ОБОСОБЛЕННОЕ
СТРУКТУРНОЕ ПОДРАЗДЕЛЕНИЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО
ГОСУДАРСТВЕННОГО БЮДЖЕТНОГО НАУЧНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ
УФИМСКОГО ФЕДЕРАЛЬНОГО ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОГО ЦЕНТРА
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК

На правах рукописи



Абдуллина Дина Ураловна

**ЛИНЕЙНАЯ И НЕЛИНЕЙНАЯ ДИНАМИКА
КРИСТАЛЛОВ СО СТРУКТУРОЙ В₂ (CsCl)**

Специальность 1.3.8. — Физика конденсированного состояния

Диссертация на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:
д.ф.-м.н., профессор
Дмитриев Сергей Владимирович

Нальчик - 2026

Оглавление

	Стр.
Введение	5
Глава 1. Нелинейная динамика кристаллической решетки	11
1.1 Сплавы на основе В2 в науке и технике	11
1.2 Роль и применение материалов с кристаллической структурой В2 в актуальных разработках материаловедения	14
1.2.1 Высокотемпературные сплавы со структурой В2 с памятью формы	14
1.2.2 Исследование структурных несовершенств и термодинамических характеристик соединений со структурой В2	15
1.2.3 Устойчивость фазы В2: фононы и электронная структура как ключевые факторы	17
1.2.4 Механизмы пластической деформации соединений со структурой В2	18
1.2.5 В2-упрочненные стали для автомобильной промышленности	20
1.3 Характеристика химических, физических и механических свойств различных кристаллов со структурой В2 (CsCl)	21
1.4 Фононные спектры кристаллов	24
1.5 Делокализованные нелинейные колебательные моды в кристаллах	26
1.6 Дискретные бризеры	28
1.7 Явление супратрансмиссии	29
1.8 Выводы по главе 1	31
Глава 2. Фононный спектр и щелевые дискретные бризеры в структуре В2 (CsCl)	33
2.1 Описание модели кристалла и методов моделирования	33
2.2 Делокализованные нелинейные колебательные моды	41
2.3 Плотность фононных состояний и амплитудно-частотные характеристики ДНКМ	43

2.4	Условия существования дискретных бризеров с частотами в щели фононного спектра	46
2.5	Щелевые дискретные бризеры	51
2.5.1	Дискретные бризеры в решетке с жесткой нелинейностью	52
2.5.2	Дискретные бризеры в решетке с мягкой нелинейностью	53
2.6	Супратрансмиссия при периодическом внешнем воздействии на поверхность кристалла	55
2.6.1	Постановка задачи	55
2.6.2	Накачка кристалла энергией в зависимости от частоты и амплитуды внешнего воздействия	56
2.6.3	Механизм передачи энергии кристаллу	58
2.6.4	Свойства излучаемых дискретных бризеров	62
2.7	Выводы по главе 2	64
Глава 3. Щелевые движущиеся дискретные бризеры в биатомном кристалле		
3.1	Описание модели и методов моделирования	66
3.2	Метод возбуждения ДБ	67
3.2.1	Делокализованная нелинейная колебательная мода $G1a$	67
3.2.2	Плотность фононных состояний	68
3.2.3	Функции локализации для стационарных и движущихся дискретных бризеров	69
3.3	Стационарные, осциллирующие и движущиеся щелевые дискретные бризеры	71
3.4	Выводы по главе 3	75
Глава 4. Нелинейная динамика кристаллов CsCl, LiPb и NiTi		
4.1	Детали молекулярно-динамического моделирования	77
4.2	Амплитудно-частотные характеристики ДНКМ в кристалле CsCl	78
4.3	Амплитудно-частотные характеристики ДНКМ в кристалле LiPb	81
4.4	Амплитудно-частотные характеристики ДНКМ в кристалле NiTi	84
4.5	Сравнительный анализ АЧХ для кристаллов CsCl, LiPb и NiTi	86
4.6	Дискретные бризеры в кристалле LiPb	88
4.7	Выводы по главе 4	93
Заключение		95

Список сокращений и условных обозначений	98
Список литературы	99
Список рисунков	120
Список таблиц	127

Введение

Актуальность работы. Теория фононов, разработанная Максом Борном и Хуаном Кунем, описывает колебания кристаллической решетки в линейном режиме, который реализуется, например, при невысоких температурах [1]. Динамика кристаллической решетки существенно усложняется в нелинейном случае, для которого нет строгой теории и появляются новые физические эффекты, отсутствующие в линейном приближении.

В 1986 году Долгов, рассмотрев цепочку частиц, взаимодействующих посредством потенциала с кубической нелинейностью, показал возможность существования долгоживущих колебаний большой амплитуды, экспоненциально локализованных в пространстве [2]. Частота локализованных колебаний лежала выше фононного спектра цепочки, тем самым, они не резонировали с фононными модами и не затрачивали свою энергию на их возбуждение. Двумя годами позже Сиверс и Такено независимо получили аналогичный результат [3], и их работа заинтересовала научную общественность, породив лавину теоретических изысканий [4; 5]. Основной целью пионерских работ было строгое доказательство существования локализованных колебаний, которые получили название внутренних колебательных мод (intrinsic localized modes) или дискретных бризеров (ДБ) (discrete breathers). Данные работы подытожены в обзорах [6; 7].

Прямых наблюдений ДБ в кристаллах на сегодняшний день нет, поскольку отсутствуют методы, позволяющие фиксировать колебания малых групп атомов на временных интервалах 0,1-10 пс, что соответствует времени жизни ДБ продолжительностью от 10 до 1000 периодов атомных колебаний. Однако существуют косвенные методы, позволяющие судить о вкладе ДБ в колебания решетки, используя рассеяние рентгеновских лучей или нейтронов [8]. Данные методы, основанные на измерении колебательных спектров кристаллов, показали возбуждение ДБ при достаточно высоких температурах в ионном кристалле NaI [9] и α -уране [10]. Отсутствие прямых методов наблюдения ДБ в кристаллах побуждает искать макроскопические свойства кристаллов, зависящие от концентрации ДБ. Первым шагом на этом пути является описание всех возможных ДБ, поддерживаемых кристаллом.

При малых амплитудах различные колебательные моды не взаимодействуют друг с другом, но с ростом амплитуды происходит обмен энергией между ними. Однако некоторые высокосимметричные колебательные моды, в отсутствие возмущений, не возбуждают других мод даже при больших амплитудах колебаний. Теоретические подходы к нахождению таких мод в молекулах и кристаллах были разработаны Чечиным и Сахненко [11]. Авторы назвали их бушами нелинейных нормальных мод (БННМ). В более поздних работах БННМ в кристаллах именовались делокализованными нелинейными колебательными модами (ДНКМ). На основе ДНКМ был разработан подход к нахождению множества различных ДБ в кристаллах [12]. Для этого следует рассчитать амплитудно-частотные характеристики (АЧХ) ДНКМ с волновыми векторами на границе первой зоны Бриллюэна. ДБ могут быть получены путем наложения функции локализации на ДНКМ с частотами вне фононного спектра.

Учитывая сложности экспериментального обнаружения ДБ в кристаллах наиболее продуктивным методом их исследования на сегодняшний день является атомистическое моделирование. В то же время, для обширного семейства кристаллов со структурой В2, важных для практических приложений, отсутствует систематическое описание условий существования и свойств ДБ, что сдерживает как фундаментальное понимание их физики, так и поиск корреляций с макроскопическими свойствами. Таким образом, молекулярно-динамическое изучение свойств ДНКМ и ДБ в кристаллах системы В2 является *актуальной и важной задачей*.

Степень разработанности темы исследования. Чечин и Сахненко [11] внесли существенный вклад в теорию нелинейных колебаний, разработав теоретико-групповой метод нахождения бушей нелинейных нормальных мод для молекул и кристаллов. Одновременно, Манли с соавторами [8–10] экспериментально подтвердили значимость ДБ для физических свойств кристаллов. ДНКМ и ДБ изучались для многих кристаллов, включая алмаз [13], металлы [14] и упорядоченные сплавы [15]. Было показано влияние ДНКМ и ДБ на некоторые макроскопические свойства модельных решеток и кристаллов, например, теплоемкость, теплопроводность, тепловое расширение. Показана тесная взаимосвязь между ДНКМ и ДБ, в частности, спонтанное зарождение ДБ при потере устойчивости ДНКМ с частотой вне фононного спектра. Однако, несмотря на накопленный опыт, систематического анализа влияния атомных

масс и жесткостей связей на нелинейную динамику важных для многих приложений кристаллов со структурой В2 до сих пор проведено не было. Данная диссертационная работа нацелена на полный анализ свойств ДНКМ и ДБ в кристаллах В2 в зависимости от атомных масс компонент и коэффициентов жесткости межатомных связей, с учетом дальнего действия. Такие сведения позволят для различных кристаллов данного семейства предсказать существование различных типов ДБ, что является первым необходимым шагом к определению влияния ДБ на свойства кристаллов.

Целью работы является установление закономерностей формирования фононных спектров, а также определение условий существования и свойств делокализованных и локализованных нелинейных колебательных мод (ДНКМ и ДБ) в бинарных кристаллах со структурой В2 в зависимости от соотношения масс компонент и параметров межатомных связей с учетом дальнего действия.

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

1. Вывод и анализ дисперсионного соотношения для кристалла со сверхструктурой В2 с учетом взаимодействия атомов в первых четырех координационных сферах;
2. Анализ свойств ДНКМ: определение волнового вектора, вывод частоты в гармоническом приближении, численное определение амплитудно-частотных характеристик;
3. Нахождение ДБ в кристалле В2 с потенциалом β -ФПУЦ (Ферми-Паста-Улама-Цингоу) с жестким и мягким типом нелинейности;
4. Изучение свойств ДНКМ и ДБ в кристаллах CsCl, LiPb и NiTi с использованием метода молекулярной динамики.

Научная новизна:

1. Впервые рассчитан и проанализирован фононный спектр биатомного кристалла со структурой В2 (типа CsCl) в модели парных межатомных взаимодействий, при этом учтены связи вплоть до четвертых соседей, что важно, например, для интерметаллидных соединений и ионных кристаллов с дальнедействующими взаимодействиями.
2. Аналитически определены границы щели в фононном спектре кристалла со структурой В2, что позволило установить критерии (соотношения атомных масс и жесткостей связей), при которых становятся возможными щелевые ДБ. Получены аналитические выражения, определяющие

границы щели в фононном спектре кристалла со структурой В2, тем самым, описаны условия существования щелевых ДБ.

3. Выявлены закономерности влияния атомных масс и жесткостей межатомных связей на амплитудно-частотные характеристики ДНКМ, на основе которых предсказаны разные типы ДБ (с жесткой или мягкой нелинейностью, щелевые или с частотами выше фононного спектра), реализуемые в кристаллах данного семейства.
4. Доказано, что учет дальнедействующих взаимодействий в кристаллах со структурой В2 приводит к возможности существования новых типов ДБ, которые не могут быть реализованы при учете взаимодействий только между ближайшими и вторыми соседями.
5. Методом молекулярной динамики рассчитаны амплитудно-частотные характеристики ДНКМ в кристаллах CsCl, LiPb и NiTi с непарными взаимодействиями, что позволило описать возможные типы ДБ в этих кристаллах. Впервые описаны ДБ в кристалле LiPb.

Теоретическая и практическая значимость работы заключается в том, что полученные аналитические и численные данные о частотных диапазонах существования ДБ могут быть использованы при интерпретации экспериментов по неупругому рассеянию нейтронов или рентгеновских лучей в кристаллах типа В2 (CsCl, LiPb, NiTi и др.). Выявленные условия существования движущихся ДБ описывают новый, безызлучательный канал транспорта колебательной энергии, что важно для понимания процессов теплопереноса и формирования дефектов в материалах при высокоэнергетических внешних воздействиях. Установлено влияние атомных масс компонент и коэффициентов жесткости межатомных связей на свойств ДНКМ и ДБ в кристаллах со структурой В2, причем, анализ учитывает дальнедействие до четвертой координационной сферы, что важно для кристаллов с металлической или ионной связью.

Методология и методы исследования. Для вывода дисперсионных соотношений кристаллов со структурой В2 применялись стандартные методы поиска нормальных колебательных мод системы дискретных линеаризованных уравнений движения атомов. Расчет АЧХ ДНКМ в кристаллах с дальнедействием до четвертой координационной сферы выполнялся в рамках модели с потенциалом β -ФПУЦ. Для этих целей использовалась оригинальная программа численного интегрирования уравнений движения, написанная на языке C++.

Расчет АЧХ ДНКМ и свойств ДБ в кристаллах CsCl, LiPb и NiTi проводился методом молекулярной динамики с использованием пакета LAMMPS с применением многочастичных межатомных потенциалов, построенных в рамках метода погруженного атома (EAM). Результаты моделирования визуализировались с помощью программного комплекса OVITO.

Положения, выносимые на защиту:

1. Установлено, что в кристаллах со структурой B2 с жестким типом нелинейности, наложением локализирующих функций на ДНКМ G1a, могут быть возбуждены долгоживущие стационарные и движущиеся щелевые дискретные бризеры.
2. При достаточно большой разнице атомных масс компонент в кристаллах со структурой B2 появляется щель в фононном спектре, что делает возможным существование щелевых ДБ. Однако слишком большая разница атомных масс может приводить к попаданию частоты второй гармоники ДБ в оптическую часть спектра, что приведет к уменьшению времени жизни ДБ.
3. Молекулярно-динамические расчеты предсказывают существование долгоживущих щелевых ДБ в кристалле LiPb.

Апробация работы. Результаты исследований представлены на российских и международных конференциях, таких как: Международная школа-семинар «Эволюция дефектных структур в конденсированных средах» (г. Барнаул, 2018 г.); Открытая школа-конференция стран СНГ «Ультрамелкозернистые и наноструктурные материалы» (г. Уфа, 2018, 2022 гг.); 18-й Российский симпозиум Фундаментальные основы атомистического многомасштабного моделирования (г. Новый Афон, 2022 г.); 15-ая Всероссийская зимняя школа-семинар аспирантов и молодых ученых «Актуальные проблемы науки и техники» (г. Уфа, 2022 г.); I Всероссийская молодежная конференция «Современные физика, математика, цифровые и нанотехнологии в науке и образовании (ФМНЦ-2022) посвященной 100-летию со дня рождения А. Д. Сахарова» (г. Уфа, 2022 г.); VI Международная молодежная конференция «Magnitogorsk Rolling Practice 2022» (г. Магнитогорск, 2022 г.); XVI Всероссийская молодежная научная конференция «Мавлютовские чтения» (г. Уфа, 2022 г.); Международный симпозиум «Перспективные материалы и технологии» (г. Минск, 2023 г.); Международная научно-техническая конференция «Актуальные проблемы автоматизации,

разработки и оптимизации технологических процессов и производств» (г. Карши, Узбекистан, 2025 г.).

Личный вклад автора работы. Диссертационная работа выполнена автором в значительной степени самостоятельно. Она самостоятельно проанализировала и обобщила обширный массив научной литературы, применила метод молекулярной динамики для проведения исследований, а также активно участвовала в осмыслении и интерпретации полученных данных, формулировке выводов и подготовке публикаций (статей и тезисов докладов). В опубликованных с соавторами работах основные результаты, касающиеся поиска целевых ДБ в структуре В2, в том числе, движущихся, были получены именно соискателем. Автор также играл активную роль в определении направлений исследований и методов решения поставленных задач.

Публикации. По материалам диссертационной работы опубликовано 11 статей в журналах, из них 3 работы в рецензируемых журналах, входящих в перечень ВАК РФ, 8 работ входят в международные базы цитирования Web of Science и/или Scopus.

Финансирование работы. Работа поддержана грантами Российского научного фонда (РНФ) № 21-12-00229, № 24-22-00092 и № 24-11-00139.

Объем и структура работы. Диссертация состоит из введения, четырех глав и заключения. Полный объем диссертации составляет 127 страниц с 42 рисунками и 4 таблицами. Список литературы содержит 209 наименований.

Глава 1. Нелинейная динамика кристаллической решетки

В данной главе будет изложена история исследований кристаллов, имеющих структуру В2, от фундаментального описания их свойств к целенаправленному поиску практических применений. В настоящее время исследования активно сочетают эксперименты с передовым компьютерным моделированием. Ключевые направления исследований включают: углубленное изучение двухкомпонентных сплавов, применение аддитивных технологий, использование машинного обучения для прогнозирования свойств и разработку функциональных материалов, таких как материалы с памятью формы.

1.1 Сплавы на основе В2 в науке и технике

Структура В2, также известная как структура типа CsCl, представляет собой один из типов фундаментального упорядоченного расположения атомов в кристаллической решетке интерметаллидных соединений [16] и кристаллов с другим типом химических связей, например ионные кристаллы CsCl и RbCl [17]. Структура CsCl относится к кубической сингонии и характеризуется простой упорядоченностью, атомы одного элемента (тип А) расположены в вершинах элементарной кубической ячейки, а атомы другого элемента (тип В) занимают ее центр, или наоборот. Расположение такого рода атомов создает две вложенные простые кубические подрешетки [18].

Впервые о структурах В2 упоминается в работах [19; 20]. Исследования в этот период носили фундаментальный характер и были направлены на определение кристаллической структуры и физических свойств подобных соединений. Особое внимание уделялось таким соединениям как алюминиды переходных металлов NiAl, FeAl и CoAl, благодаря сочетанию таких свойств, как низкая плотность, высокая температура плавления, коррозионная стойкость, прочность и жаропрочность [21]. Исследования последующих десятилетий были связаны с тем, что материалы со структурой В2 являются перспективными для аэрокосмической отрасли. Развитие газотурбинных двигателей, для которых требова-

лись материалы с улучшенной жаропрочностью, послужило катализатором роста интереса к их изучению [22]. В 1980-е годы главной задачей исследований стало избавление от хрупкости, которая проявлялась при комнатной температуре. Работы [23; 24] стали отправной точкой для изучения деформационных механизмов в материалах на основе NiAl. Десятилетие с 1990 по 2000-е годы ознаменовалось активными исследованиями, направленными на улучшение их пластичности путем введение легирующих добавок таких как Mo, Fe, Ga, Zr [25], а для упрочнения и улучшения жаропрочности вводились такие легирующие добавки, как Hf, Ta, Re, W [26]. Разработка композитных структур на основе NiAl с добавлением Mo (армирование волокнами или пластинами молибдена), при этом, армирующая фаза воспринимает нагрузку и тормозит распространение трещин [27]. Была отработана технология выращивания монокристаллов NiAl [28].

Развитие компьютерного моделирования [29] позволило добиться существенных успехов в осмыслении роли легирующих элементов на атомарном уровне. Период с 2010-х годов по настоящее время отмечен значительными инновациями: исследователи перешли к изучению многокомпонентных и высокоэнтропийных систем типа AlCoCrFeNi [30], а также начали активно применять аддитивные технологии для создания изделий с уникальной геометрией [31]. Современные исследования представляют собой комплексный подход, сочетающий экспериментальные методы с передовым компьютерным моделированием, включая применение машинного обучения для прогнозирования свойств материалов [32]. Важным направлением является разработка интеллектуальных материалов TiNi с функцией памяти формы, основанных на B2-фазах [33].

Фундаментальная научная значимость исследований структуры B2 является исключительной и охватывает несколько ключевых аспектов. Для изучения закономерностей упорядочения в твердых телах, в частности в интерметаллидных соединениях, B2-структура представляет собой идеальную модель. Благодаря своей простой кристаллической решетке, она позволяет выполнять высокоточные теоретические расчеты, которые успешно верифицируются экспериментальными данными [18]. Исследования фазовых переходов порядок-беспорядок в B2-соединениях сыграли ключевую роль в развитии теории фазовых превращений в твердых телах [34]. Изучение B2-интерметаллидов предоставляет уникальный инструмент для количественного понимания того, как электрон-

ная структура и химическая связь влияют на макроскопические свойства [29]. Результаты этих исследований сыграли ключевую роль в совершенствовании современных вычислительных методов материаловедения, включая теорию функционала плотности (DFT) [35].

Новые типы дислокаций и механизмы их взаимодействия, обнаруженные при изучении В2-соединений, играют ключевую роль в понимании пластической деформации упорядоченных кристаллических структур [36]. Исследование дислокационных процессов в этих материалах открывает новые перспективы в изучении их механических свойств. Исследования В2-фаз стали катализатором для совершенствования методов электронной микроскопии высокого разрешения (HRTEM) и атомно-зондовой томографии (APT), открыв новые возможности для изучения упорядоченных структур [37]. В рамках этих исследований были разработаны специфические методики, предназначенные для анализа антифазных границ и точечных дефектов. Из-за трудностей в точном описании межатомных взаимодействий в В2-соединениях были разработаны передовые вычислительные методы [32]. Среди них: молекулярная динамика с применением многочастичных потенциалов, методы Монте-Карло, предназначенные для моделирования упорядочения, *ab initio* методы для расчета электронной структуры.

Исследования В2-интерметаллидов значительно продвинули теорию химической связи в интерметаллидных соединениях [38], установив корреляцию между ковалентностью связи и механическими свойствами. Теоретические основы изучения дефектов в упорядоченных структурах были заложены в результате исследования точечных дефектов в В2-соединениях [39]. Данное исследование позволило идентифицировать новые типы дефектов, характерные исключительно для упорядоченных фаз. В области моделирования механических свойств, на основе анализа В2-фаз были разработаны теоретические модели, коррелирующие электронную структуру с механическими свойствами материалов [40]. Эти модели нашли практическое применение для прогнозирования свойств других классов материалов.

1.2 Роль и применение материалов с кристаллической структурой В2 в актуальных разработках материаловедения

Среди упорядоченных фаз, встречающихся на диаграммах состояния бинарных систем, интерметаллиды со структурой В2 (например, ионный кристалл CsCl) занимают значимое место [41]. По сути, В2-структура — это упорядоченная форма объемно-центрированной кубической решетки, где атомы двух разных элементов занимают две взаимопроникающие простые кубические подрешетки. Их ценность обусловлена уникальным сочетанием таких характеристик, как высокая прочность при повышенных температурах, специфические дефектные структуры, многообразие механизмов пластической деформации и полезные функциональные свойства. В результате, В2-соединения являются предметом пристального внимания в физическом материаловедении и активно применяются в создании инновационных материалов — от высокотемпературных сплавов с эффектом памяти формы до жаропрочных конструкционных материалов и дисперсно-упрочняемых сталей.

1.2.1 Высокотемпературные сплавы со структурой В2 с памятью формы

Создание высокотемпературных сплавов с памятью формы представляет собой ключевое направление для применения соединений со структурой В2. Их способность к проявлению функциональных свойств обусловлена уникальным обратимым термоупругим мартенситным превращением, позволяющим материалу переходить из высокотемпературной В2-фазы в различные низкотемпературные модификации (орторомбическую В19, тетрагональную L1₀ или моноклинную), что открывает широкие возможности для инновационных инженерных решений [42]. Для сплава NiTi, также широко известного под названием нитинол, температуры мартенситных превращений близки к комнатным, а изменение объема при фазовом переходе минимально, поэтому этот сплав находит широкое применение в медицине [43—45] и он выдерживает очень большое

число циклов прямого и обратного мартенситного перехода из-за отсутствия значительных внутренних напряжений.

Соединения на основе платиновых металлов представляют значительный исследовательский интерес. В частности, в бинарной системе PtTi мартенситное превращение инициируется при температуре порядка 1000°C. Введение иридия в тройные соединения типа (Pt,Ir)Ti позволяет повысить температуру этого превращения до 1200°C [46]. Исследования, направленные на выяснение роли платины в индукции мартенситного превращения в стабильной фазе B2 TiRu, показали, что замещение рутения платиной в концентрациях, превышающих 15-18.75 ат.%, приводит к нарушению механической стабильности (условие $C_{11} < C_{12}$) [42]. Это открывает путь к реализации эффекта памяти формы в указанных системах. Результаты расчетов, выполненных методом *ab initio*, подтверждают термодинамическую, упругую, электронную и динамическую обоснованность мартенситного превращения в системах Ti50Ru50-xPt_x при замещении рутения платиной [42].

При охлаждении высокотемпературной фазы B2 в сплавах на основе циркония, например, в системе ZrCu, ниже температуры мартенситного превращения, электронная структура остается практически неизменной. Это типичное поведение для соединений этого типа [46]. Формирующаяся при этом тонкая двойниковая микроструктура является ключевым фактором для проявления эффекта памяти формы в данных материалах.

1.2.2 Исследование структурных несовершенств и термодинамических характеристик соединений со структурой B2

Соединения со структурой B2, включающие элементы из VIII и IIIA групп Периодической системы (например, CoAl, CoGa, NiAl), характеризуются своеобразным механизмом разупорядочения. При нагревании в них происходит существенное накопление как структурных вакансий, так и сверхструктурных дефектов [41; 47].

Авторы работы [48] обсуждают выбор системы скольжения в интерметаллидах со структурой B2, таких как NiAl, FeAl и CoTi. Сочетая первоприн-

ципные и молекулярно-динамические расчеты они исследуют атомистические механизмы, контролирующие скольжение дислокаций. Полученные результаты показывают, что выбор системы скольжения определяется конкуренцией между энергией ядра дислокации и критическим разрешенным касательным напряжением. Системы скольжения в ОЦК металлах и В2 интерметаллидах также обсуждались в работах [49–52].

Модель тройных дефектов, разработанная Нейманном, Чангом и Ли [47], представляет собой теоретическую основу для понимания дефектной структуры. Она не только предсказывает, как концентрация влияет на термодинамические свойства интерметаллидных фаз В2, но и позволяет количественно оценить активность компонентов и концентрацию вакансий. Ключевым параметром здесь является α — концентрация вакансий в стехиометрическом соединении. Сравнивая CoAl ($\alpha \approx 1,3 \times 10^{-4}$) и CoGa ($\alpha \approx 4 \times 10^{-2}$), и видно, что их дефектные структуры кардинально отличаются [41].

Используя модель взаимодействия ближайших соседей в приближении Брэгга-Вильямса, можно вычислить концентрацию точечных дефектов. Эта модель приводит к трем фундаментальным уравнениям, позволяющим определять концентрации дефектов и термодинамические активности компонентов в зависимости от состава и температуры [41]. Экспериментальные исследования систем CoGa и CoAl подтверждают справедливость этих теоретических подходов. Изучение экспериментальных данных (параметры решетки, плотность, активности, энтальпии) для примерно 30 фаз со структурой В2 показывает, что эти характеристики могут быть успешно описаны с помощью ограниченного числа простых модельных параметров [47].

В упорядоченных сплавах, в том числе, имеющих сверхструктуру В2, возможен особый тип дефектов, которых не бывает в чистых металлах или в разупорядоченных фазах. Речь идет о так называемых сверхструктурных дефектах, когда базовая кристаллическая решетка сохраняется, а дефектом является сбой в расположении атомов двух сортов по сравнению с их идеальным расположением в упорядоченном сплаве [45; 53; 54]. Один из важных сверхструктурных дефектов является планарный дефект, называемый антифазной границей. Это плоскость, разделяющая области (домены) с разным сдвигом сверхструктуры, который может произойти, например, в результате скольжения частичной дислокации [55–57]. Помимо сдвиговых антифазных границ существуют термиче-

ские. Термические антифазные границы образуются при упорядочении сплава ниже температуры Кюри (температуры фазового перехода порядок-беспорядок) из-за встречи доменов, зарождающихся одновременно в разных местах, но с разной фазой сверхструктуры [58–60]. При росте эти домены не совпадают в кристаллической решетке, создавая границы, где нарушен правильный порядок чередования атомов. Эти границы являются термическими, так как их плотность зависит от температуры и скорости охлаждения, определяющих количество зародышей. Они метастабильны и стремятся уменьшить свою площадь при отжиге. Интересно также и то, что сдвиговые антифазные границы не приводят к локальному нарушению стехиометрии, а термические приводят.

Аномальное поведение предела текучести в упорядоченных сплавах (например, Ni_3Al , FePd , Cu_3Pd) проявляется в его росте при повышении температуры, в то время как у большинства металлов он падает. Это связано с торможением сверхдислокаций, переходящих с плоскостей легкого скольжения на плоскости с высоким сопротивлением (механизм Кернса-Фриделя) [59; 61–63]. Такая аномалия невозможна в чистых металлах или в разупорядоченных сплавах и является прямым следствием упорядоченного расположения атомов в сплаве.

1.2.3 Устойчивость фазы В2: фононы и электронная структура как ключевые факторы

В исследовании Оно и Кобаяши [41] были всесторонне изучены фундаментальные аспекты стабильности соединений, обладающих структурой В2. Авторы, проанализировав 416 соединений из базы данных Materials Project с применением методов теории функционала плотности (DFT) и теории функционала плотности возмущений (DFPT), установили, что динамическая стабильность фазы В2 напрямую коррелирует со знаком частоты низкоэнергетических фононов в М-точке зоны Бриллюэна [64].

Исследование 416 соединений типа В2 выявило, что 266 из них обладают динамической стабильностью. Ключевым фактором для стабилизации фононных мод в точке М стало включение межатомных взаимодействий до четвертых

соседей (4NN). Этот результат устанавливает минимальный радиус обрезания, необходимый при построении межатомных потенциалов для бинарных систем. В свете этого результата, в данной работе исследуется кристалл со сверхструктурой B2 с учетом взаимодействий между атомами вплоть до четвертых соседей. Соединения, включающие элементы IVB (Ti, Zr, Hf) и VIIB (Ru, Rh, Ir, Pt) групп, часто проявляют динамическую стабильность, что хорошо согласуется с их экспериментальной доступностью. В частности, соединения FeRh в структуре B2 были признаны динамически стабильными, что соответствует результатам экспериментов [64].

Анализ электронной структуры и природы химических связей в тугоплавких соединениях со структурой B2 выявил ключевую роль псевдощели в электронной плотности состояний на уровне Ферми для их стабильности. Эта псевдощель формируется благодаря гибридизации атомных орбиталей, что приводит к образованию прочных ковалентных связей в наиболее устойчивых кристаллических структурах. Именно этот механизм объясняет ограниченность формирования B2-фазы элементами IV-VIII и V-VII групп среди тугоплавких металлов [65].

1.2.4 Механизмы пластической деформации соединений со структурой B2

Способность интерметаллидов со структурой B2 к деформации (их пластичность) зависит от того, как движутся дислокации, особенно от того, какие системы скольжения активируются. Долгое время считалось, что большинство B2-соединений, таких как NiAl, деформируются в основном за счет скольжения по плоскостям 110 в направлении $\langle 001 \rangle$. Это ограничивает их способность к пластической деформации, как предсказывает критерий фон Мизеса [66]. В соединениях со структурой B2 атомы расположены упорядоченно, и направление $\langle 001 \rangle$ является самым коротким путем между атомами в плотноупакованных плоскостях 110. В отличие от этого, в неупорядоченной ОЦК-решетке плотноупакованное направление $\langle 111 \rangle$ соответствует векторам Бюргерса $1/2\langle 111 \rangle$.

Некоторые соединения со структурой B2, такие как CuZn, YAg, YCu, TiFe, HfRu и CeAg, отличаются необычайно высокой пластичностью. Эксперименты с дифракцией нейтронов *in situ*, дополненные моделированием упругопластического самосогласованного (EPSC) поведения, выявили, что у CeAg развиваются внутренние напряжения, очень похожие на те, что наблюдаются у NiAl. Это свидетельствует о схожем первичном механизме пластической деформации – скольжении по плоскостям $\langle 100 \rangle 011$. Такая ситуация ставит серьезный вопрос: ведь кубическое скольжение обычно не обеспечивает достаточного числа независимых систем для равномерной деформации поликристаллов в больших масштабах, но при этом CeAg демонстрирует пластичность, сопоставимую с β -латунью (CuZn).

Ниобий-алюминий-титановые системы являются перспективной основой для разработки высокотемпературных сплавов. Введение титана в интерметаллид Nb₃Al способствует стабилизации его B2-структуры. Сплавы Nb-15Al-10Ti и Nb-15Al-40Ti демонстрируют сохранение высокой прочности вплоть до температур 900°C. Важным преимуществом этих материалов является их пластичность при комнатной температуре [67].

Применение метода ALCHEMI (атомная локализация путем анализа характеристического излучения, индуцированного электронами) позволило качественно охарактеризовать распределение атомов по двум подрешеткам, характерным для B2-соединений. Было установлено, что в составе сплава Nb-15Al-40Ti титан и алюминий занимают разные подрешетки. В случае сплава Nb-15Al-10Ti, термическая обработка при температуре 1100°C приводит к выделению фазы Al₁₅ в пределах B2-матрицы. Короткий отжиг при 900°C способствует образованию ω -фазы. При более продолжительном отжиге сплава 1 при 700°C наблюдается присутствие орторомбической фазы. Эта же орторомбическая фаза была идентифицирована в сплаве 2 в диапазоне температур от 800 до 1000°C. Между основной фазой и образующимися включениями были выявлены определенные закономерности в их взаимной ориентации.

Пластическая деформация в данных материалах обусловлена работой систем скольжения $\langle 111 \rangle 110$, $\langle 111 \rangle 112$ и $\langle 111 \rangle 123$. В процессе деформации дислокации расщепляются на частичные дислокации (с вектором Бюргерса $1/2\langle 111 \rangle$), между которыми возникает антифазная граница (АФГ). Наблюдается, что увеличение концентрации титана приводит к снижению энергии АФГ.

Эта энергия АПГ является фундаментальным фактором, который регулирует степень расщепления дислокаций и, таким образом, определяет пластичность материала.

В ходе экспериментов по сжатию при различных температурах были установлены пределы текучести исследованных сплавов. Примечательно, что сплав Nb-15Al-10Ti оказался прочнее суперсплава IN 718 вплоть до 950°C. Оба сплава обладают значительной пластичностью, что подтверждается наблюдаемыми системами скольжения и впечатляющим 20% удлинением до разрушения, зафиксированным при комнатной температуре. Была выявлена корреляция: предел текучести при растяжении возрастает с увеличением размера антифазных доменов. Однако механизм этого упрочнения остается неясным, поскольку не было обнаружено взаимодействия между дислокациями и антифазными границами.

1.2.5 В2-упрочненные стали для автомобильной промышленности

В автомобильной промышленности активно развивается новая область применения фаз со структурой В2: разработка облегченных сталей, упрочненных В2-частицами. За последние пять лет особый интерес вызвали стали Fe-Mn-Al-Ni-C, демонстрирующие уникальное сочетание высокой удельной прочности и значительного деформационного упрочнения. Снижение плотности этих материалов достигается за счет добавления алюминия, а их высокая вязкость и способность к упрочнению при деформации объясняются формированием неперерезаемых В2-частиц. Эти частицы препятствуют образованию карбидов $(\text{Fe}, \text{Mn})_3\text{AlC}$. Исследования, например, стали Fe-28,6Mn-10,2Al-1,1C-3,2Ni-3,9Cr (мас.%), показали, что никель играет ключевую роль в контроле формирования В2-фазы (интерметаллида типа NiAl), что значительно улучшает как прочность, так и деформационное упрочнение [68].

В сталях типа Fe-Mn-Al-C-Ni фаза В2 проявляется в разнообразных формах: вытянутые полосы (1–5 мкм) вдоль направления прокатки, полигональные включения на границах зерен (400 нм – 2 мкм) и мелкие частицы внутри аустенитных зерен (50–500 нм). Частицы фазы В2 эффективно блокируют движение дислокаций, способствуя упрочнению при деформации. Однако крупные поло-

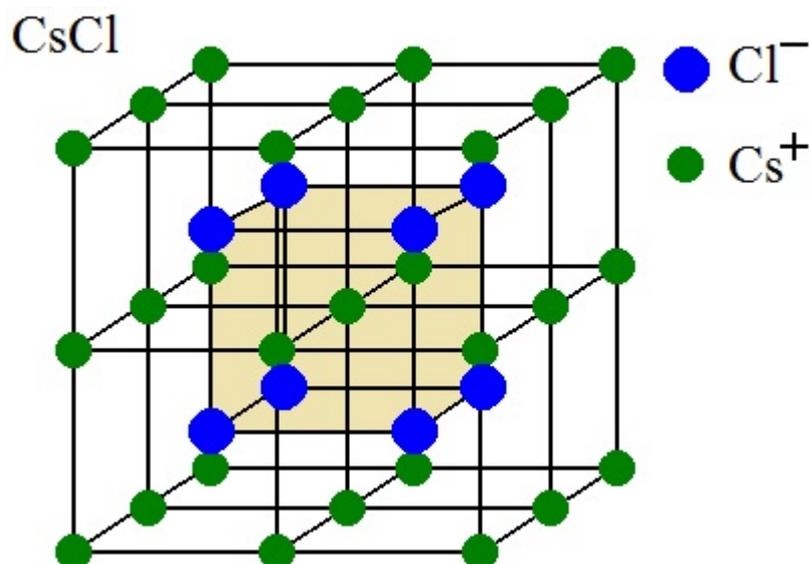


Рисунок 1.1 — Структура ионного кристалла CsCl. Желтым выделена примитивная кубическая трансляционная ячейка, содержащая один атом Cl и один Cs.

совидные частицы В2 могут стать источником пор и микротрещин на границах раздела фаз, снижая пластичность. Современные исследования фокусируются на том, как форма и расположение В2-выделений влияют на упрочнение этих сталей. Комбинированное наноструктурное упрочнение (В2-фаза и карбиды) позволило достичь очень высокой прочности на растяжение (1,6–1,7 ГПа) при сохранении приемлемой пластичности (13–39,3%). Для оптимизации микроструктуры и достижения наилучших механических свойств критически важно получать как структурные, так и химические данные об упорядоченных В2-выделениях с помощью корреляционной микроскопии.

1.3 Характеристика химических, физических и механических свойств различных кристаллов со структурой В2 (CsCl)

Элементарная ячейка структуры В2 имеет форму куба в вершинах которого находятся атомы одного компонента, а в центре куба располагается один атом другого компонента, иными словами, эта структура представляет собой две вложенные простые кубические подрешетки [24], см. рисунок 1.1. Упорядочение по типу В2 наблюдается в системах с умеренной разницей в атомных радиусах ком-

понентов (не более 15%) [69]. Основные и наиболее изученные представители В2 интерметаллидов являются: NiAl [70], FeAl [71], NiTi [33], FeCo [72].

Параметр решетки В2-соединений определяется их химическим составом и температурными условиями. Повышение температуры вызывает тепловое расширение решетки, что количественно описывается коэффициентом теплового расширения [73]. Структуры В2 характеризуются высокими значениями упругих модулей, включая модуль Юнга, модуль сдвига и модуль всестороннего сжатия. В монокристаллическом состоянии эти свойства проявляют существенную анизотропию, демонстрируя зависимость от кристаллографических направлений. Упругие постоянные второго порядка являются отражением специфики межатомных связей в этих соединениях [74]. В2-соединения обладают высокими пределом прочности и твердостью, однако их пластичность при комнатной температуре ограничена. Монокристаллическое состояние обеспечивает значительное улучшение механических свойств по сравнению с поликристаллическим. Влияние различных факторов на механические свойства В2-интерметаллидов было детально исследовано в работе [23].

В2-соединения отличаются значительной термической устойчивостью, что проявляется в их высоких температурах плавления, свидетельствующих о сильных межатомных связях. Коэффициент термического расширения этих материалов демонстрирует как анизотропию, так и зависимость от температуры, причем эти параметры варьируются в зависимости от кристаллографического направления. Теплопроводность В2-соединений находится на высоком уровне и в основном обеспечивается электронным переносом тепла [75]. Термическая стабильность В2-фаз обусловлена высокой энергией их образования и температурой, при которой происходит переход от упорядоченного к неупорядоченному состоянию (температура или точка Курнакова). Теплоемкость этих соединений соответствует общепринятым закономерностям, демонстрируя характерные изменения при различных температурных режимах. Важно отметить, что термические свойства В2-соединений подвержены влиянию их стехиометрии и наличия структурных дефектов [70]. Удельное электрическое сопротивление В2-соединений растет с температурой. Изменение стехиометрии, то есть отклонение от идеального состава, приводит к увеличению сопротивления. Остаточное сопротивление является индикатором наличия структурных дефектов. Методы исследования электронного транспорта [76] позволили установить, что

некоторые В2-соединения проявляют свойства полупроводников, обладая соответствующими энергетическими щелями. Концентрация и подвижность носителей заряда в этих материалах варьируются в зависимости от состава и температуры. Эффекты Холла и магнитосопротивления служат инструментами для изучения структуры В2-кристаллов [77].

Наименьшая скорость ползучести наблюдается при стехиометрическом соотношении компонентов, и этот процесс в основном определяется дислокационными механизмами. Длительная прочность при высоких температурах коррелирует со временем, предшествующим разрушению. Важно отметить, что микроструктурные особенности оказывают значительное влияние на механические свойства материалов в условиях высоких температур [78]. Легирование различными элементами позволяет целенаправленно изменять эти высокотемпературные характеристики. В частности, дисперсионное упрочнение способствует улучшению сопротивления ползучести и повышению длительной прочности. Оптимизация химического состава материала позволяет достичь желаемого баланса между различными его свойствами [79].

Высокая химическая стабильность соединений со структурой В2 обусловлена их значительной отрицательной энергией образования. Это приводит к широким диапазонам гомогенности и устойчивости к термическому распаду. Такие термодинамические характеристики делают эти материалы привлекательными для применения в условиях агрессивных сред [80]. Прочность химических связей в В2-соединениях проявляется в их высоких температурах плавления, что также гарантирует термическую стабильность. Следовательно, эти материалы обладают высокой устойчивостью к нагреву и могут сохранять свою структуру даже при повышенных температурах, что делает их ценными для высокотемпературных применений [81]. В В2-интерметаллидах химическая связь многогранна, сочетая в себе черты металлической, ионной и ковалентной. Металлическая природа отвечает за электропроводность, а ковалентная – за высокую прочность и твердость. Ионный характер связи обусловлен разницей в электроотрицательности составляющих элементов [82]. Электронная структура этих соединений отличается гибридными состояниями, а особенности плотности электронных состояний вблизи уровня Ферми, присущие упорядоченным интерметаллидам, формируют их химические и физические свойства [83]. Высокая стойкость В2-интерметаллидов к окислению обусловлена их способностью

формировать плотные, защитные оксидные пленки. Тип образующихся оксидов напрямую связан с химическим составом интерметаллидного соединения, причем присутствие определенных элементов способствует образованию особенно стабильных оксидных слоев. Эти защитные покрытия служат эффективным барьером, предотвращающим дальнейшее окисление [84]. Сам процесс окисления включает последовательные стадии: адсорбцию кислорода на поверхности, образование первичных оксидных центров, рост сплошной оксидной пленки и последующий диффузионный транспорт через нее. Ключевым фактором, определяющим скорость окисления, является диффузия ионов через сформированный оксидный слой [85].

1.4 Фононные спектры кристаллов

Приведем примеры фононных спектров различных кристаллов со структурой В2. В работе [86], используя метод функционала плотности, был рассчитан фононный спектр кристалла CuBe, см. рисунок 1.2. Поскольку компоненты кристалла имеют значительную разницу атомных масс, $m_{\text{Cu}}/m_{\text{Be}} = 7,05$, в спектре наблюдается широкая запрещенная зона в интервале частот от 6 до 11,7 ТГц. Следовательно, такой кристалл может поддерживать ДБ с частотами как выше фононного спектра, так и с частотам в запрещенной зоне. Глядя на частичные ПФС можно отметить, что высокочастотные колебания совершают легкие атомы бериллия (красная кривая), а низкочастотная часть спектра формируется колебаниями тяжелых атомов меди (черная кривая).

В работе [87] методом эффективного потенциала, зависящего от температуры, был рассчитан фононный спектр для AuZn с использованием силовых констант третьего порядка [88], см. рисунок 1.3. Разница атомных масс составляет $m_{\text{Au}}/m_{\text{Zn}} = 3,01$. В спектре наблюдается запрещенная зона в интервале частот от 3,1 до 3,6 ТГц. Значит в таком кристалле могут существовать ДБ, как в запрещенной зоне, так и выше фононного спектра.

Еще один пример был взят из работы [89]. Авторы, используя метод функционала плотности, рассчитали фононный спектр для кристалла CsCl, см. рисунок 1.4. Разница атомных масс составляет $m_{\text{Cs}}/m_{\text{Cl}} = 3,75$. Ширина

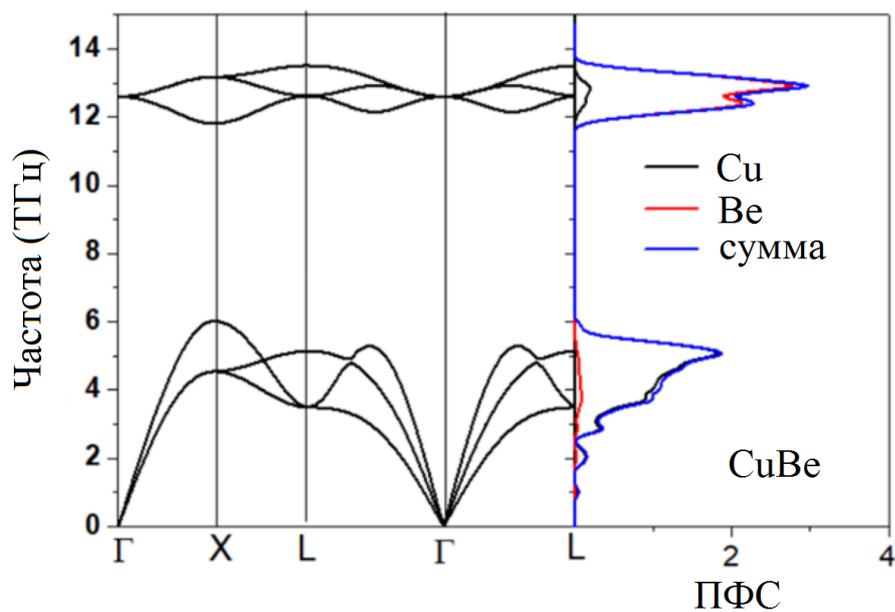


Рисунок 1.2 — Дисперсионные кривые (слева) и плотность фоновых состояний (справа) кристалла CuBe согласно работе [86].

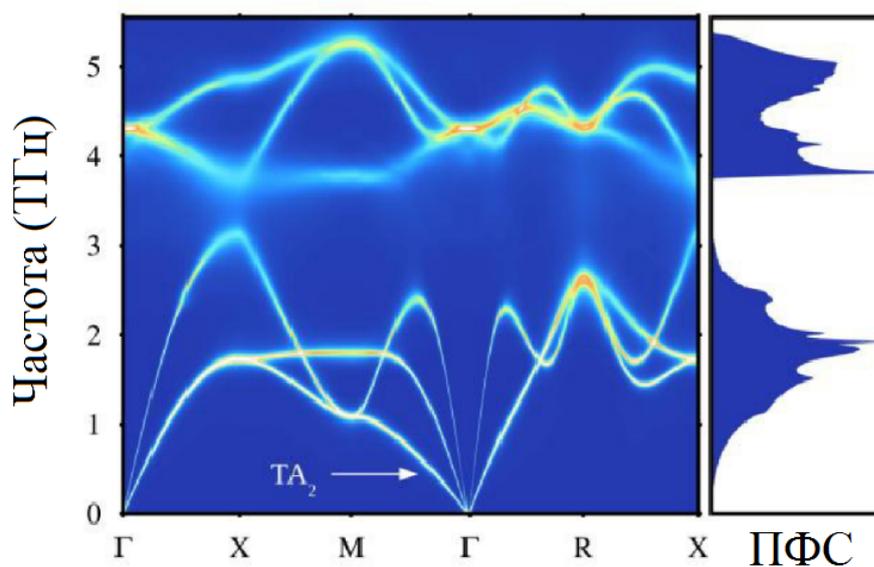


Рисунок 1.3 — Дисперсионные кривые и плотность фоновых состояний кристалла AuZn согласно работе [87].

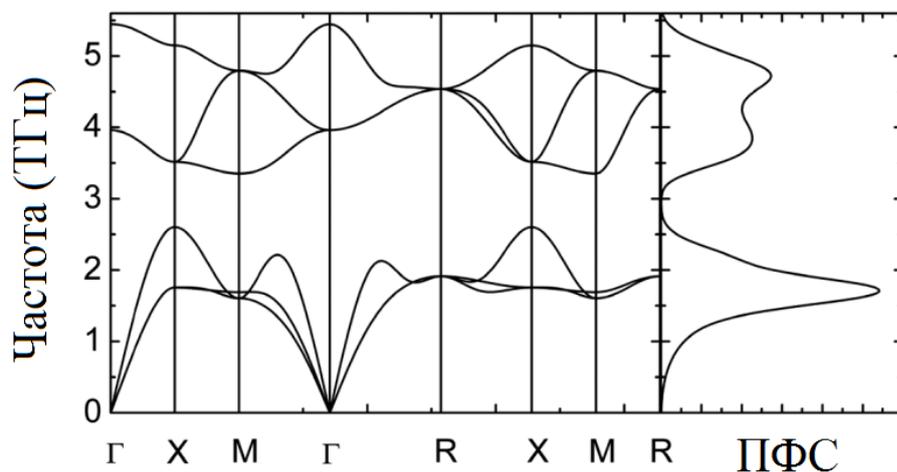


Рисунок 1.4 — Дисперсионные кривые и плотность фононных состояний кристалла CsCl согласно работе [89].

запрещенной зона находится в интервале частот от 2,7 до 3,1 ТГц. Можно предположить, что в таком кристалле будут существовать ДБ с частотами как выше фононного спектра, так и в щели. Заметим, что кристаллы с небольшой разницей атомных масс компонент не имеют щели в фононном спектре и, следовательно, могут поддерживать только ДБ с частотами выше спектра.

1.5 Делокализованные нелинейные колебательные моды в кристаллах

В работе Розенберга 1962 года была высказана идея, что симметрия решетки может определять некоторые точные динамические решения, описывающие колебания атомов [90]. Позднее Чечин и Сахненко развили эту идею [11; 91; 92], разработав теоретико-групповой метод для поиска таких решений, которые они назвали бушами нелинейных нормальных мод, сокращенно БННМ. Этот подход, основанный исключительно на знании симметрии решетки, применим к решеткам любой размерности и сложности, а также к молекулам, и гарантирует существование решений независимо от природы взаимодействия между атомами.

В последующих исследованиях БННМ в решетках, были переименованы в делокализованные нелинейные колебательные моды, сокращенно ДНКМ [93—95]. Стоит отметить, что понимание делокализованных колебаний в нелиней-

ных решетках отстает от изучения ДБ. ДНКМ могут быть многокомпонентными, то есть представлять собой комбинацию нескольких колебательных мод, в этом случае их колебания апериодичны, поскольку представляют собой суперпозицию колебаний с разными, вообще говоря, несоизмеримыми частотами. Иными словами, m -компонентные ДНКМ обладают m степенями свободы и, как правило, имеют m несоизмеримых частот. Однокомпонентные ДНКМ характеризуются пространственно-временной периодичностью и одной частотой колебаний.

Как было отмечено ранее, построение БННМ для молекул основывается на их точечной симметрии, в то время как для нелинейных решеток используется как их точечная, так и пространственная симметрии. Примерами таких колебательных мод являются одно- и двухкомпонентные ДНКМ в нелинейных цепочках [96—98] и в молекуле SF₆ [99].

Несмотря на кажущееся отсутствие сходства между пространственно локализованными ДБ и ДНКМ, они оказываются тесно связанными между собой. ДНКМ, полученные для одномерной цепочки и двумерной треугольной решетки, стали ключевым инструментом для построения одномерных и двумерных ДБ в ГЦК-металлах [100—102]. Благодаря ДНКМ были обнаружены ранее неизвестные типы ДБ в треугольной решетке с потенциалом Морзе [103; 104], металлах с ОЦК структурой [105] и треугольной β -ФПУЦ решетке [106]. Изучение ДНКМ гексагональной решетки [13] было направлено на понимание свойств двумерных материалов [107], включая нитрид бора [108] и графен [94; 109; 110]. Важно отметить, что потеря устойчивости ДНКМ является причиной возникновения хаотических ДБ в решетках [111—116]. В свою очередь, двумерные нелинейные решетки использовались для исследования нелинейных возбуждений в таких материалах, как слюда [117—119] и двумерные наноматериалы [120—124].

ДНКМ, охватывающие всю решетку, а также локализованные на небольших группах атомов ДБ, оказывают влияние на макроскопические характеристики кристаллических решеток. Изучение одно- и двухкомпонентных ДНКМ в графене выявило такие феномены, как генерация второй гармоники и возникновение отрицательного давления в плоскости листа. Последнее обусловлено вращательными степенями свободы шестиугольных кластеров атомов углерода [125].

1.6 Дискретные бризеры

Нелинейность в дискретных периодических структурах порождает эффект пространственной локализации колебаний высокой амплитуды; такие колебания называются ДБ или внутренними локализованными модами [2–4; 6; 7; 93]. В то время как локализация колебаний на дефектах возможна и в линейных системах, ДБ могут существовать в бездефектных кристаллах, исключительно благодаря нелинейным эффектам. Фундаментальными условиями для возникновения ДБ являются дискретность среды и нелинейность взаимодействия между частицами решетки. Дискретность среды приводит к ограниченности спектра малоамплитудных колебаний решетки, тогда как нелинейность обеспечивает возможность выхода частоты колебаний ДБ за пределы спектра фононных колебаний. Колебания ДБ на частоте, лежащей вне спектра малоамплитудных колебаний, исключают передачу энергии на возбуждение последних, что, в отсутствие возмущений, теоретически обеспечивает их перманентное существование [6; 7].

Для полноты картины следует упомянуть, что первооткрывателем ДБ был советский физик Долгов [2]. Однако его работа не получила должного признания в научном сообществе, и спустя два года ДБ были заново открыты американским ученым Сиверсом и японским математиком Такено [3].

ДБ изучались в различных нелинейных решетках, однако наш фокус направлен на их изучение в кристаллах. Эта тема получила детальное освещение в работе Манли [126], где, опираясь на известные результаты экспериментов для α -урана, предлагалось обсудить влияние ДБ на его теплоемкость, механические свойства и тепловое расширение.

ДБ в кристаллах способны концентрировать энергию в пределах нескольких электронвольт [127] и перемещать ее по кристаллической решетке [128–131]. Такой энергии достаточно для изменения структуры дефектов [132], облегчения их перемещения [133; 134] или снижения энергетических затрат на испарение атомов с поверхности [135]. Важно отметить, что ДБ также способны транспортировать электрические заряды, что является ключом к пониманию электрической проводимости кристаллов, где плотность свободных зарядов мала или они вовсе отсутствуют [136–139].

Влияние ДБ на теплопроводность кристаллов заключается в ее снижении, особенно при повышенных температурах. Это происходит потому, что ДБ эффективно рассеивают фононы [140; 141]. При достижении определенного температурного уровня, когда плотность ДБ становится значительной, наблюдается переход от баллистического типа теплопроводности к диффузионному [141]. Также было установлено [115; 142], что хаотические ДБ, порожденные модуляционной неустойчивостью ДНКМ, модифицируют тепловое расширение, теплоемкость и упругие свойства нелинейных решеток.

В природе существуют семейства кристаллов с одинаковой структурой и, следовательно, с одинаковой симметрией. Важным примером являются кристаллы семейства CsCl, описанные в разделах 1.1 и 1.3. Для кристаллов данной симметрии ДНКМ и ДБ ранее не изучались и данный пробел будет восполнен в настоящем диссертационном исследовании.

1.7 Явление супратрансмиссии

Исследования нелинейных цепочек привели к открытию супратрансмиссии – механизма передачи энергии от внешнего источника на частотах за пределами фононного спектра [143–145]. Первые работы по этой теме выявили два важных аспекта: во-первых, супратрансмиссия возникает только при достаточно большой амплитуде вынужденных колебаний, превышающей определенный порог; во-вторых, на начальных этапах процесса перенос энергии осуществляют ДБ, формирующиеся из-за неустойчивости затухающей волны, а затем к ним могут присоединяться и другие нелинейные возбуждения. Кроме того, было обнаружено, что при одних и тех же условиях возбуждения (частота и амплитуда) система может демонстрировать либо изолирующее, либо проводящее поведение, что является проявлением бистабильности.

Супратрансмиссия открывает значительные возможности для инноваций в инженерии. В частности, в параллельных матрицах, состоящих из джозефсоновских сверхпроводящих контактов, этот эффект может быть использован для разработки чрезвычайно чувствительных детекторов или мощных усилителей сигналов [146; 147]. В контексте дискретных цепочек связанных генераторов, су-

пратрансмиссия может использоваться как высокоэффективный механизм для передачи двоичной информации [148; 149]. Также стоит отметить, что супратрансмиссия способна вызывать однонаправленный поток энергии в LC -линиях передачи [150].

Работы [151—155] посвящены изучению того, как локальные потенциалы и дальнедействующие взаимодействия влияют на супратрансмиссию в нелинейных решетках. Было продемонстрировано, что в оригами-структуре Креслинга можно достичь интенсивной и контролируемой супратрансмиссии [156; 157]. Также были представлены новые механизмы супратрансмиссии, обнаруженные в виброударной цепочке [158] и в крестовой решетке с нелинейностью [159].

В последнее время исследователи успешно смоделировали явление супратрансмиссии в различных типах нелинейных дискретных систем. Среди этих систем можно выделить такие примеры, как обобщенные цепочки β -ФПУЦ, ферромагнитные спиновые цепочки, массивы генераторов с гистерезисом [160], кристаллы пылевой плазмы, модели гранулированных сред [161], длинные джозефсоновские переходы [162; 163], а также различные виды нелинейных метаструктур (пьезоэлектрических, модульных) [164] и цепочек (хиральных молекулярных, связанных частиц) [165—168]. Также моделирование проводилось в системах, описываемых уравнениями синуса-Гордона [169] и Шредингера [170], и в дискретных нелинейных линиях электропередачи [171; 172].

До сих пор большинство исследований супратрансмиссии проводилось в рамках одномерных моделей, в то время как двумерные (2D) [173; 174] и трехмерные (3D) [175] решетки изучены лишь ограниченно. В работе [176] было продемонстрировано, что для нелинейной линии передачи с дисперсией и периодическим возбуждением на границе, порог супратрансмиссии может быть уменьшен благодаря взаимодействию волны в запрещенной зоне с возмущающей волной в фононном диапазоне. Оценка критической амплитуды для передачи энергии как предельной амплитуды возбуждения была проведена в исследованиях [177—179]. Отдельное внимание было уделено изучению супратрансмиссии в цепочке связанных ротаторов [180].

Фононы играют ключевую роль в передаче тепла во многих кристаллах. В настоящее время наблюдается стремительный рост интереса к фононике, новой дисциплине в физике конденсированного состояния, которая открывает широкие возможности для практического применения [181—185]. Это связано с тем,

что при увеличении интенсивности атомных колебаний усиливаются нелинейные взаимодействия между атомами, что порождает новые физические эффекты, имеющие потенциальную ценность для технологий, среди которых супратрансмиссия занимает важное место [185].

1.8 Выводы по главе 1

Представленная обзорная глава систематизирует фундаментальные вехи в исследовании кристаллической решетки упорядоченной по типу В2; такое упорядоченное расположение атомов двух сортов характерно для широкого ряда интерметаллидов и некоторых ионных кристаллов. Структура, принадлежащая кубической сингонии, образована двумя вложенными примитивными кубическими подрешетками. Атомы первого типа располагаются в узлах вершин куба, а атомы второго типа — в центре куба. Научные изыскания трансформировались от теоретического описания структуры к разработке конкретных прикладных решений. Развитие материаловедения в этой области было обусловлено, прежде всего, необходимостью создания материалов, способных выдерживать экстремальные температуры в газотурбинных двигателях. Это привело к последовательному изменению фокуса исследований: от изучения фундаментальных свойств материалов до решения проблемы хрупкости, затем к разработке методов легирования для повышения пластичности и прочности, и, наконец, к созданию передовых жаропрочных поликристаллических материалов и монокристаллов.

Соединениям на основе структуры В2 характерны такие черты как высокая механическая прочность и твердость, а также способность выдерживать значительный нагрев (высокая температура плавления). Однако при комнатной температуре они проявляют низкую пластичность, то есть склонны к хрупкому разрушению под нагрузкой. Важно отметить, что их физические свойства не одинаковы во всех направлениях кристалла: они анизотропны. Материалы обладают хорошей термостабильностью и эффективно передают тепло (высокая теплопроводность). С увеличением температуры их электрическое сопротивление возрастает, а некоторые из них демонстрируют свойства полупроводников.

B_2 -соединения выделяются своей превосходной устойчивостью к ползучести (медленной деформации под нагрузкой) и окислению при высоких температурах. Это достигается за счет сильных химических связей с ковалентной составляющей и способности образовывать на поверхности защитные слои оксидов. Уникальность этих соединений обусловлена гибридным типом химической связи, сочетающим в себе металлическую, ионную и ковалентную составляющие, а также высокой энергией их образования, что гарантирует их структурную и химическую целостность.

Фононные спектры кристаллов семейства CsCl могут иметь щель в фононном спектре, при условии, что составляющие его компоненты имеют значительную разницу атомных масс. Для таких кристаллов возможны щелевые ДБ с мягким и жестким типом нелинейности, а также ДБ с жестким типом нелинейности и частотой выше фононного спектра.

Несмотря на широкое использование в технике кристаллов симметрии B_2 , нелинейная динамика их решетки изучена слабо, в частности, отсутствуют сведения о свойствах ДНКМ и ДБ. Настоящая диссертация посвящена восполнению данного пробела.

Глава 2. Фононный спектр и щелевые дискретные бризеры в структуре В2 (CsCl)

В данной главе будет рассмотрен кристалл со структурой В2, где атомы двух сортов имеют атомные массы m_1 и m_2 , при этом связи между атомами разных масс для простоты описываются одинаковыми потенциальными функциями: потенциалами β -ФПУЦ с положительными и отрицательными значениями параметра нелинейности β . Фононный спектр структуры В2 анализируется с учетом взаимодействий вплоть до четвертых соседей. Ширина щели в фононном спектре аналитически выражена в терминах соотношения атомных масс $\rho = m_2/m_1$ и жесткостей межатомных связей c_l , где $l = 1, \dots, 4$ - номер координационной оболочки. Условие существования долгоживущих ДБ также дано в явном виде. У долгоживущих ДБ основная частота и все высшие гармоники находятся вне фононного спектра, а у короткоживущих ДБ основная колебательная частота находится в щели фононной полосы, а вторая гармоника попадает в оптическую полосу спектра. Определены ДНКМ с частотами в щели фононного спектра и приведены примеры щелевых ДБ, полученных путем применения функции локализации к этим ДНКМ, как для мягкого, так и для жесткого типов ангармоничности. В разделе 2.7 приведены примеры кристаллов В2, у которых различие в атомных массах компонент достаточно велика для появления щели в фононном спектре и, следовательно, ожидается, что они могут поддерживать щелевые ДБ.

2.1 Описание модели кристалла и методов моделирования

Структура В2, которую представляет кристалл CsCl, основана на объемно-центрированной кубической (ОЦК) решетке, см. рисунок 2.1(а). Кубическая трансляционная ячейка имеет параметр решетки, равный a , и содержит два атома с массами m_1 и m_2 . ОЦК решетка может рассматриваться как объединение двух простых кубических подрешеток. Атомы одной из них показаны синим цветом, а атомы другой – красным. Первая зона Бриллюэна ОЦК решетки показана на рисунке 2.1(б).

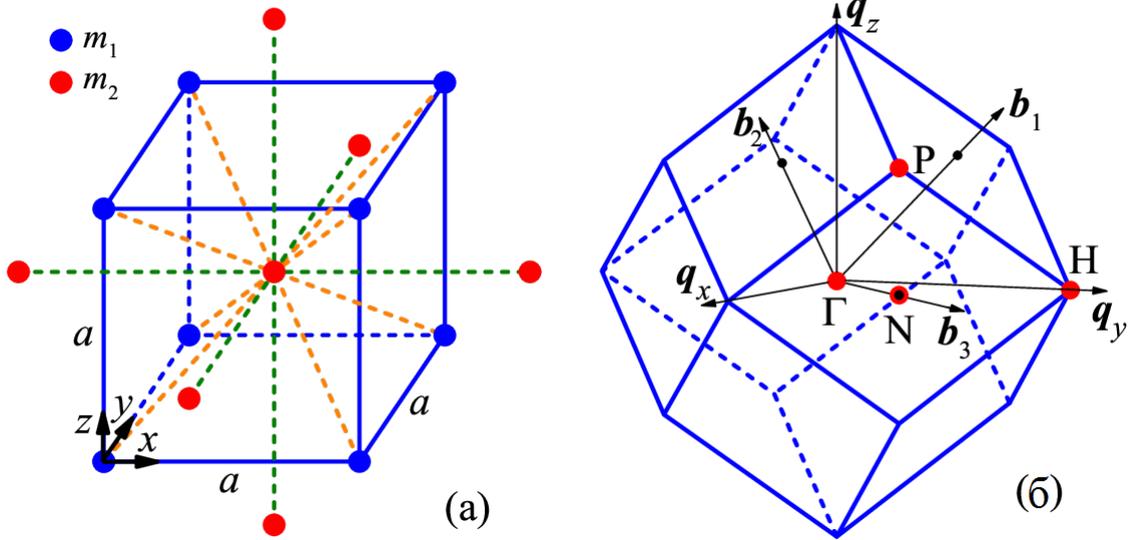


Рисунок 2.1 — (а) Структура В2 (CsCl) на основе ОЦК решетки состоит из двух простых кубических подрешеток с параметром решетки a . Подрешетки заполнены атомами с массой m_1 (синий) и m_2 (красный). Связи между ближайшими и вторыми соседями показаны оранжевым и зеленым цветом, соответственно. Связи между третьими и четвертыми соседями также учитываются, но они не показаны. (б) Координатные оси и точки высокой симметрии (показаны красным) в первой зоне Бриллюэна ОЦК решетки.

Классическая молекулярная динамика используется для отслеживания движения N атомов в вычислительной ячейке. Уравнения движения атомов имеют вид

$$m_n \frac{d^2 \mathbf{r}_n}{dt^2} = \mathbf{F}_n, \quad \mathbf{F}_n = -\frac{dV}{d\mathbf{r}_n}, \quad n = 1, \dots, N, \quad (2.1)$$

где \mathbf{r}_n — радиус-вектор n -го атома, m_n — его масса, \mathbf{F}_n — сила, действующая на атом, V — потенциальная энергия системы, которая представляет собой сумму потенциальных энергий парных межатомных связей в четырех координационных оболочках. Рассматривается следующий межатомный потенциал, называемый потенциалом β -Ферми-Паста-Улама-Цингу

$$\varphi_l(r) = \frac{c_l}{2}(r - \zeta_l)^2 + \frac{\beta_l}{4}(r - \zeta_l)^4, \quad l = 1, \dots, 4, \quad (2.2)$$

где l — номер координационной оболочки, r — расстояние между двумя атомами, радиусы координационных оболочек ОЦК-решетки $\zeta_1 = a\sqrt{3}/2$, $\zeta_2 = a$, $\zeta_3 =$

$a\sqrt{2}$ и $\zeta_4 = a\sqrt{11}/2$; c_l и β_l – гармонический и ангармонический коэффициенты жесткости.

Интересно, что долгое время потенциал (2.2) назывался короче, поскольку последняя фамилия в его названии опускалась. В 2008 году французский физик Тьерри Доксуа предложил добавить к названию потенциала имя Мэри Цингу (Mary Tsingou), тем самым должным образом признав ее вклад в науку.

Обсудим выбор параметров модели кристалла В2. Мы принимаем $a = 1$ и $c_1 = 1$, выбирая единицы измерения расстояния и энергии, соответственно. В моделировании используются следующие параметры

$$\begin{aligned} c_1 &= 1,0, & c_2 &= 0,7, & c_3 &= 0,4, & c_4 &= 0,1, \\ \beta_l &= \pm 10,0c_l, & l &= 1, \dots, 4. \end{aligned} \quad (2.3)$$

Выбор параметров c_l и β_l отражает тот факт, что в кристаллах жесткость межатомной связи обычно уменьшается с расстоянием между атомами. Положительные (отрицательные) значения β_l соответствуют жесткому (мягкому) ангармонизму. Что касается атомных масс двух компонент, то при правильном выборе единицы времени, без потери общности, можно принять либо $m_1 = 1$, либо $m_2 = 1$. Чтобы уменьшить число параметров модели, для описания связей между атомами любых типов используются одинаковые межатомные потенциалы.

Уравнения движения (2.1) решаются с помощью симплектического метода Штормера шестого порядка [186]. Начальные условия описаны ниже. При исследовании ДНКМ расчетная ячейка содержит $2 \times 2 \times 2$ примитивных трансляционных ячеек структуры В2, подчиняющихся периодическим граничным условиям. Каждая примитивная ячейка содержит один атом с массой m_1 и один с массой m_2 . Общее число атомов в расчетной ячейке равно 16; их координаты показаны на рисунке 2.2. При исследовании ДБ расчетная ячейка содержит $20 \times 20 \times 20$ примитивных трансляционных ячеек и $1,6 \times 10^4$ атомов. Во всех случаях используется микроканонический ансамбль NVE.

В случае малых отклонений атомов от решеточных положений, $|u_{ij}|, |v_{ij}|, |w_{ij}| \ll a$, уравнения движения (2.1) можно линеаризовать путем отбрасывания нелинейных членов в разложении правых частей в ряды Тейлора по перемещениям. Для записи линеаризованных уравнений удобно ввести сле-

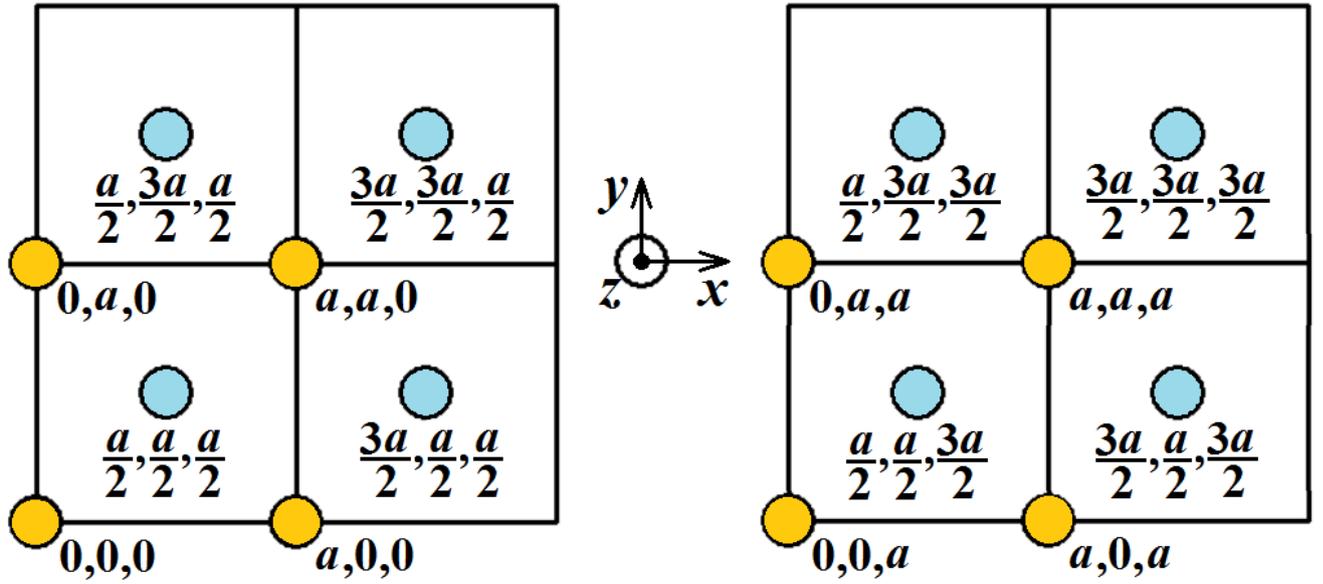


Рисунок 2.2 — Координаты атомов внутри вычислительной ячейки, включающей 8 атомов с массой m_1 (желтый) и 8 с массой m_2 (синий).

дующие обозначения:

$$\begin{aligned}
 \Delta_2 u_{i+a,j+b,k+c} &= u_{i+a,j+b,k+c} - 2u_{i,j,k} + u_{i-a,j-b,k-c}, \\
 \Delta_2 v_{i+a,j+b,k+c} &= v_{i+a,j+b,k+c} - 2v_{i,j,k} + v_{i-a,j-b,k-c}, \\
 \Delta_2 w_{i+a,j+b,k+c} &= w_{i+a,j+b,k+c} - 2w_{i,j,k} + w_{i-a,j-b,k-c}.
 \end{aligned} \tag{2.4}$$

Линейные уравнения движения запишутся в виде:

$$\begin{aligned}
m_{1,2}\ddot{u}_{i,j,k} &= \frac{c_1}{3}\Delta_2 u_{i,j,k-1} + \frac{c_1}{3}\Delta_2 v_{i,j,k-1} + \frac{c_1}{3}\Delta_2 w_{i,j,k-1} + \frac{c_1}{3}\Delta_2 u_{i+1,j,k-1} \\
&- \frac{c_1}{3}\Delta_2 v_{i+1,j,k-1} - \frac{c_1}{3}\Delta_2 w_{i+1,j,k-1} + \frac{c_1}{3}\Delta_2 u_{i+1,j+1,k-1} \\
&+ \frac{c_1}{3}\Delta_2 v_{i+1,j+1,k-1} - \frac{c_1}{3}\Delta_2 w_{i+1,j+1,k-1} + \frac{c_1}{3}\Delta_2 u_{i,j+1,k-1} \\
&- \frac{c_1}{3}\Delta_2 v_{i,j+1,k-1} + \frac{c_1}{3}\Delta_2 w_{i,j+1,k-1} + c_2\Delta_2 u_{i-1,j,k} \\
&+ \frac{c_3}{2}\Delta_2 u_{i-1,j-1,k} + \frac{c_3}{2}\Delta_2 v_{i-1,j-1,k} + \frac{c_3}{2}\Delta_2 u_{i+1,j-1,k} \\
&- \frac{c_3}{2}\Delta_2 v_{i+1,j-1,k} + \frac{c_3}{2}\Delta_2 u_{i,j+1,k-2} + \frac{c_3}{2}\Delta_2 w_{i,j+1,k-2} \\
&+ \frac{c_3}{2}\Delta_2 u_{i+2,j+1,k-2} - \frac{c_3}{2}\Delta_2 w_{i+2,j+1,k-2} + \frac{9c_4}{11}\Delta_2 u_{i+1,j,k+1} \\
&+ \frac{3c_4}{11}\Delta_2 v_{i+1,j,k+1} + \frac{3c_4}{11}\Delta_2 w_{i+1,j,k+1} + \frac{9c_4}{11}\Delta_2 u_{i+1,j-1,k+1} \\
&- \frac{3c_4}{11}\Delta_2 v_{i+1,j-1,k+1} + \frac{3c_4}{11}\Delta_2 w_{i+1,j-1,k+1} + \frac{9c_4}{11}\Delta_2 u_{i+2,j,k-1} \\
&- \frac{3c_4}{11}\Delta_2 v_{i+2,j,k-1} - \frac{3c_4}{11}\Delta_2 w_{i+2,j,k-1} + \frac{9c_4}{11}\Delta_2 u_{i+2,j+1,k-1} \\
&+ \frac{3c_4}{11}\Delta_2 v_{i+2,j+1,k-1} - \frac{3c_4}{11}\Delta_2 w_{i+2,j+1,k-1} + \frac{c_4}{11}\Delta_2 u_{i-1,j-1,k+3} \\
&+ \frac{c_4}{11}\Delta_2 v_{i-1,j-1,k+3} + \frac{3c_4}{11}\Delta_2 w_{i-1,j-1,k+3} + \frac{c_4}{11}\Delta_2 u_{i-2,j-1,k+3} \\
&- \frac{c_4}{11}\Delta_2 v_{i-2,j-1,k+3} - \frac{3c_4}{11}\Delta_2 w_{i-2,j-1,k+3} + \frac{c_4}{11}\Delta_2 u_{i-1,j-2,k+3} \\
&- \frac{c_4}{11}\Delta_2 v_{i-1,j-2,k+3} + \frac{3c_4}{11}\Delta_2 w_{i-1,j-2,k+3} + \frac{c_4}{11}\Delta_2 u_{i-2,j-2,k+3} \\
&+ \frac{c_4}{11}\Delta_2 v_{i-2,j-2,k+3} - \frac{3c_4}{11}\Delta_2 w_{i-2,j-2,k+3} + \frac{c_4}{11}\Delta_2 u_{i,j+1,k+1} \\
&+ \frac{3c_4}{11}\Delta_2 v_{i,j+1,k+1} + \frac{c_4}{11}\Delta_2 w_{i,j+1,k+1} + \frac{c_4}{11}\Delta_2 u_{i-1,j+1,k+1} \\
&- \frac{3c_4}{11}\Delta_2 v_{i-1,j+1,k+1} - \frac{c_4}{11}\Delta_2 w_{i-1,j+1,k+1} + \frac{c_4}{11}\Delta_2 u_{i+1,j+2,k-1} \\
&+ \frac{3c_4}{11}\Delta_2 v_{i+1,j+2,k-1} - \frac{c_4}{11}\Delta_2 w_{i+1,j+2,k-1} + \frac{c_4}{11}\Delta_2 u_{i,j+2,k-1} \\
&- \frac{3c_4}{11}\Delta_2 v_{i,j+2,k-1} + \frac{c_4}{11}\Delta_2 w_{i,j+2,k-1}, \tag{2.5}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
m_{1,2}\ddot{v}_{i,j,k} = & \frac{c_1}{3}\Delta_2 u_{i,j,k-1} + \frac{c_1}{3}\Delta_2 v_{i,j,k-1} + \frac{c_1}{3}\Delta_2 w_{i,j,k-1} - \frac{c_1}{3}\Delta_2 u_{i+1,j,k-1} \\
& + \frac{c_1}{3}\Delta_2 v_{i+1,j,k-1} + \frac{c_1}{3}\Delta_2 w_{i+1,j,k-1} + \frac{c_1}{3}\Delta_2 u_{i+1,j+1,k-1} \\
& + \frac{c_1}{3}\Delta_2 v_{i+1,j+1,k-1} - \frac{c_1}{3}\Delta_2 w_{i+1,j+1,k-1} - \frac{c_1}{3}\Delta_2 u_{i,j+1,k-1} \\
& + \frac{c_1}{3}\Delta_2 v_{i,j+1,k-1} - \frac{c_1}{3}\Delta_2 w_{i,j+1,k-1} + c_2\Delta_2 v_{i,j-1,k} \\
& + \frac{c_3}{2}\Delta_2 u_{i-1,j-1,k} + \frac{c_3}{2}\Delta_2 v_{i-1,j-1,k} - \frac{c_3}{2}\Delta_2 u_{i+1,j-1,k} \\
& + \frac{c_3}{2}\Delta_2 v_{i+1,j-1,k} + \frac{c_3}{2}\Delta_2 v_{i+1,j,k-2} + \frac{c_3}{2}\Delta_2 w_{i+1,j,k-2} \\
& + \frac{c_3}{2}\Delta_2 v_{i+1,j+2,k-2} - \frac{c_3}{2}\Delta_2 w_{i+1,j+2,k-2} + \frac{3c_4}{11}\Delta_2 u_{i+1,j,k+1} \\
& + \frac{c_4}{11}\Delta_2 v_{i+1,j,k+1} + \frac{c_4}{11}\Delta_2 w_{i+1,j,k+1} - \frac{3c_4}{11}\Delta_2 u_{i+1,j-1,k+1} \\
& + \frac{c_4}{11}\Delta_2 v_{i+1,j-1,k+1} - \frac{c_4}{11}\Delta_2 w_{i+1,j-1,k+1} - \frac{3c_4}{11}\Delta_2 u_{i+2,j,k-1} \\
& + \frac{c_4}{11}\Delta_2 v_{i+2,j,k-1} + \frac{c_4}{11}\Delta_2 w_{i+2,j,k-1} + \frac{3c_4}{11}\Delta_2 u_{i+2,j+1,k-1} \\
& + \frac{c_4}{11}\Delta_2 v_{i+2,j+1,k-1} - \frac{c_4}{11}\Delta_2 w_{i+2,j+1,k-1} + \frac{c_4}{11}\Delta_2 u_{i-1,j-1,k+3} \\
& + \frac{c_4}{11}\Delta_2 v_{i-1,j-1,k+3} + \frac{3c_4}{11}\Delta_2 w_{i-1,j-1,k+3} - \frac{c_4}{11}\Delta_2 u_{i-2,j-1,k+3} \\
& + \frac{c_4}{11}\Delta_2 v_{i-2,j-1,k+3} + \frac{3c_4}{11}\Delta_2 w_{i-2,j-1,k+3} - \frac{c_4}{11}\Delta_2 u_{i-1,j-2,k+3} \\
& + \frac{c_4}{11}\Delta_2 v_{i-1,j-2,k+3} - \frac{3c_4}{11}\Delta_2 w_{i-1,j-2,k+3} + \frac{c_4}{11}\Delta_2 u_{i-2,j-2,k+3} \\
& + \frac{c_4}{11}\Delta_2 v_{i-2,j-2,k+3} - \frac{3c_4}{11}\Delta_2 w_{i-2,j-2,k+3} + \frac{3c_4}{11}\Delta_2 u_{i,j+1,k+1} \\
& + \frac{9c_4}{11}\Delta_2 v_{i,j+1,k+1} + \frac{3c_4}{11}\Delta_2 w_{i,j+1,k+1} - \frac{3c_4}{11}\Delta_2 u_{i-1,j+1,k+1} \\
& + \frac{9c_4}{11}\Delta_2 v_{i-1,j+1,k+1} + \frac{3c_4}{11}\Delta_2 w_{i-1,j+1,k+1} + \frac{3c_4}{11}\Delta_2 u_{i+1,j+2,k-1} \\
& + \frac{9c_4}{11}\Delta_2 v_{i+1,j+2,k-1} - \frac{3c_4}{11}\Delta_2 w_{i+1,j+2,k-1} - \frac{3c_4}{11}\Delta_2 u_{i,j+2,k-1} \\
& + \frac{9c_4}{11}\Delta_2 v_{i,j+2,k-1} - \frac{3c_4}{11}\Delta_2 w_{i,j+2,k-1}, \tag{2.6}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
m_{1,2}\ddot{w}_{i,j,k} = & \frac{c_1}{3}\Delta_2 u_{i,j,k-1} + \frac{c_1}{3}\Delta_2 v_{i,j,k-1} + \frac{c_1}{3}\Delta_2 w_{i,j,k-1} - \frac{c_1}{3}\Delta_2 u_{i+1,j,k-1} \\
& + \frac{c_1}{3}\Delta_2 v_{i+1,j,k-1} + \frac{c_1}{3}\Delta_2 w_{i+1,j,k-1} - \frac{c_1}{3}\Delta_2 u_{i+1,j+1,k-1} \\
& - \frac{c_1}{3}\Delta_2 v_{i+1,j+1,k-1} + \frac{c_1}{3}\Delta_2 w_{i+1,j+1,k-1} + \frac{c_1}{3}\Delta_2 u_{i,j+1,k-1} \\
& - \frac{c_1}{3}\Delta_2 v_{i,j+1,k-1} + \frac{c_1}{3}\Delta_2 w_{i,j+1,k-1} + c_2\Delta_2 w_{i+1,j+1,k-2} \\
& + \frac{c_3}{2}\Delta_2 v_{i+1,j,k-2} + \frac{c_3}{2}\Delta_2 w_{i+1,j,k-2} - \frac{c_3}{2}\Delta_2 v_{i+1,j+2,k-2} \\
& + \frac{c_3}{2}\Delta_2 w_{i+1,j+2,k-2} + \frac{c_3}{2}\Delta_2 u_{i,j+1,k-2} + \frac{c_3}{2}\Delta_2 w_{i,j+1,k-2} \\
& - \frac{c_3}{2}\Delta_2 u_{i+2,j+1,k-2} + \frac{c_3}{2}\Delta_2 w_{i+2,j+1,k-2} + \frac{3c_4}{11}\Delta_2 u_{i+1,j,k+1} \\
& + \frac{c_4}{11}\Delta_2 v_{i+1,j,k+1} + \frac{c_4}{11}\Delta_2 w_{i+1,j,k+1} + \frac{3c_4}{11}\Delta_2 u_{i+1,j-1,k+1} \\
& - \frac{c_4}{11}\Delta_2 v_{i+1,j-1,k+1} + \frac{c_4}{11}\Delta_2 w_{i+1,j-1,k+1} - \frac{3c_4}{11}\Delta_2 u_{i+2,j,k-1} \\
& + \frac{c_4}{11}\Delta_2 v_{i+2,j,k-1} + \frac{c_4}{11}\Delta_2 w_{i+2,j,k-1} - \frac{3c_4}{11}\Delta_2 u_{i+2,j+1,k-1} \\
& - \frac{c_4}{11}\Delta_2 v_{i+2,j+1,k-1} + \frac{c_4}{11}\Delta_2 w_{i+2,j+1,k-1} + \frac{3c_4}{11}\Delta_2 u_{i-1,j-1,k+3} \\
& + \frac{3c_4}{11}\Delta_2 v_{i-1,j-1,k+3} + \frac{9c_4}{11}\Delta_2 w_{i-1,j-1,k+3} - \frac{3c_4}{11}\Delta_2 u_{i-2,j-1,k+3} \\
& + \frac{3c_4}{11}\Delta_2 v_{i-2,j-1,k+3} + \frac{9c_4}{11}\Delta_2 w_{i-2,j-1,k+3} + \frac{3c_4}{11}\Delta_2 u_{i-1,j-2,k+3} \\
& - \frac{3c_4}{11}\Delta_2 v_{i-1,j-2,k+3} + \frac{9c_4}{11}\Delta_2 w_{i-1,j-2,k+3} - \frac{3c_4}{11}\Delta_2 u_{i-2,j-2,k+3} \\
& - \frac{3c_4}{11}\Delta_2 v_{i-2,j-2,k+3} + \frac{9c_4}{11}\Delta_2 w_{i-2,j-2,k+3} + \frac{c_4}{11}\Delta_2 u_{i,j+1,k+1} \\
& + \frac{3c_4}{11}\Delta_2 v_{i,j+1,k+1} + \frac{c_4}{11}\Delta_2 w_{i,j+1,k+1} - \frac{c_4}{11}\Delta_2 u_{i-1,j+1,k+1} \\
& + \frac{3c_4}{11}\Delta_2 v_{i-1,j+1,k+1} + \frac{c_4}{11}\Delta_2 w_{i-1,j+1,k+1} - \frac{c_4}{11}\Delta_2 u_{i+1,j+2,k-1} \\
& - \frac{3c_4}{11}\Delta_2 v_{i+1,j+2,k-1} + \frac{c_4}{11}\Delta_2 w_{i+1,j+2,k-1} + \frac{c_4}{11}\Delta_2 u_{i,j+2,k-1} \\
& - \frac{3c_4}{11}\Delta_2 v_{i,j+2,k-1} + \frac{c_4}{11}\Delta_2 w_{i,j+2,k-1}. \tag{2.7}
\end{aligned}$$

В уравнениях (2.5)-(2.7) масса атома обозначена как $m_{1,2}$, имея в виду, что она равна либо m_1 , либо m_2 , в зависимости от того, движение какого атома рассматривается.

Дисперсионные кривые фононов и плотность состояний фононов рассчитываются путем решения задачи на собственные значения для матрицы Гес-

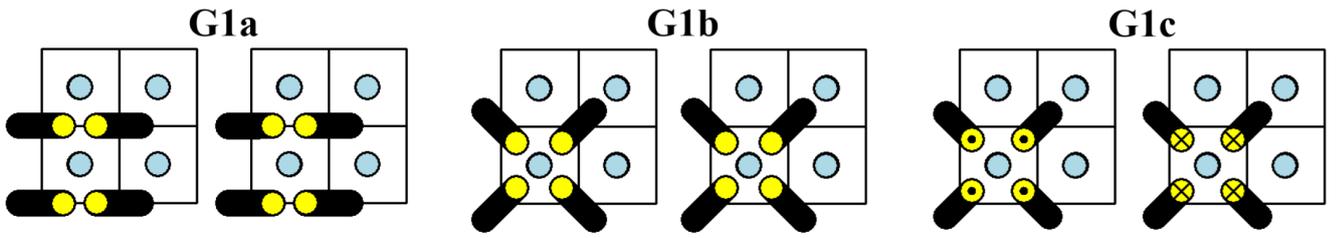


Рисунок 2.3 — ДНКМ группы G1. Траектории колеблющихся атомов показаны черным цветом. Атомы с положительной (отрицательной) z -компонентой смещения отмечены точкой (крестиком).

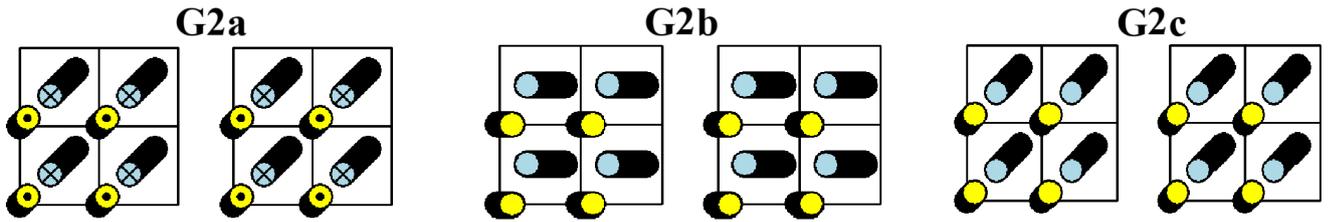


Рисунок 2.4 — ДНКМ группы G2.

се, полученной для линеаризованных уравнений движения (2.5)-(2.7). Шесть ветвей дисперсионных кривых рассчитываются вдоль трех линий: $q_x \neq 0, q_y = q_z = 0$; $q_x = q_y \neq 0, q_z = 0$; $q_x = q_y = q_z \neq 0$. Плотность фоновых состояний вычисляется путем нахождения частот фононов в 5×10^5 случайно выбранных точках первой зоны Бриллюэна.

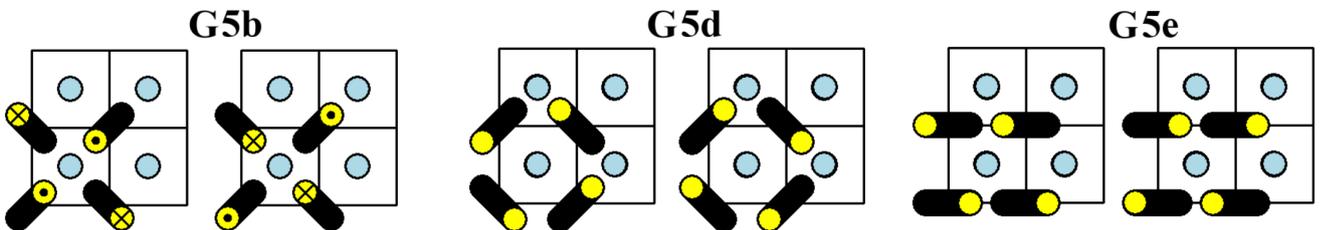


Рисунок 2.5 — ДНКМ группы G5.

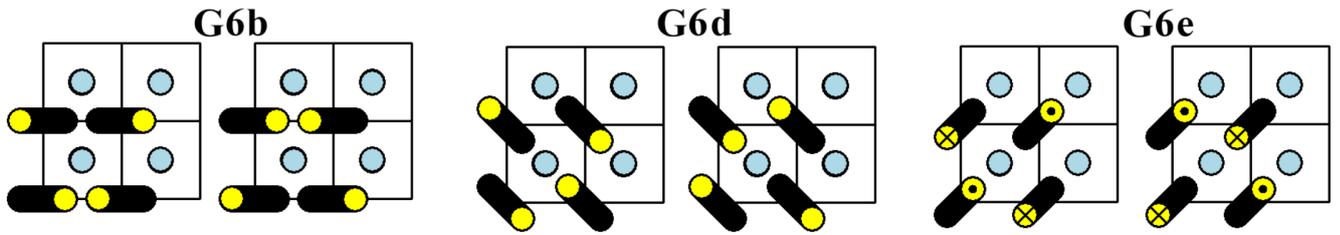


Рисунок 2.6 — ДНКМ группы G6.

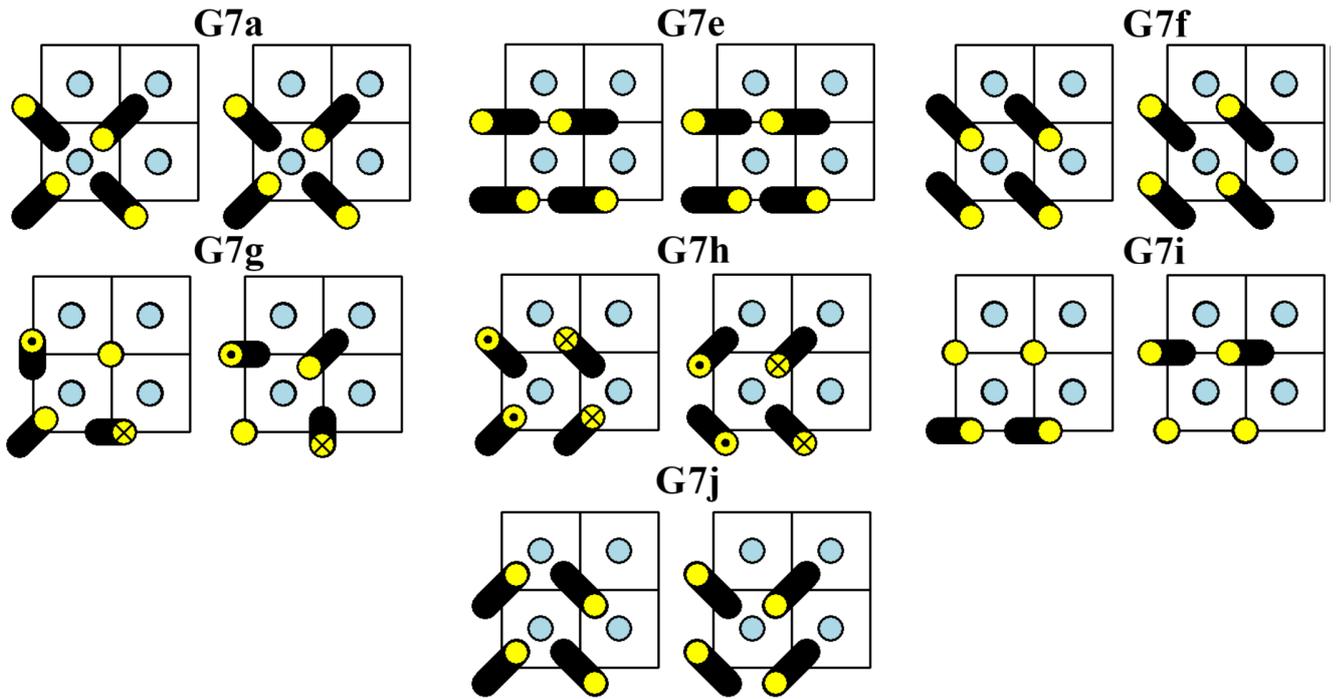


Рисунок 2.7 — ДНКМ группы G7.

2.2 Делокализованные нелинейные колебательные моды

Структура B2 поддерживает точные нелинейные колебательные решения с одной степенью свободы. Эти решения были описаны в [187]. Они могут быть найдены с учетом только симметрии ОЦК решетки и, таким образом, существуют для любой большой амплитуды колебаний и для любого типа межатомных связей. Как говорилось во Введении, такие решения называются ДНКМ или БННМ [11; 188; 189]. ДНКМ можно возбудить, приложив начальные смещения атомов согласно картинкам, изображенным на рисунках с 2.3 по 2.7, при этом начальные скорости всех атомов нулевые.

Таблица 1 — Частоты ДНКМ различных групп в малоамплитудном пределе, рассчитанные для $m_1 = 1$, $m_2 = 9$, и их волновые векторы в первой зоне Бриллюэна (в скобках указана кратность корня).

Группа	Частота	Волновой вектор (q_x, q_y, q_z)
G1	$\omega_{G1,1}=3,077, \omega_{G1,2}=1,026$	$(0,0, \pm \pi/2), (0, \pm \pi, \pm \pi/2),$ $(\pm \pi, 0, \pm \pi/2)$, точка F (1)
G2	$\omega_{G2}=1,963$	$(0,0, \pm \pi)$, точка P (3)
G5	$\omega_{G5,1}=2,582, \omega_{G5,2}=0,861$	$(0, \pm \pi, 0), (\pm \pi, 0, 0),$ $(0, \pm \pi, \pm \pi), (\pm \pi, 0, \pm \pi),$ $(\pm \pi, \pm \pi, 0), (\pm \pi, \pm \pi, \pm \pi),$ точка N (1)
G6	$\omega_{G6,1}=2,503, \omega_{G6,2}=0,834$	$(\pm \pi, \pm \pi, \pm \pi/2)$, точка H (3)
G7	$\omega_{G7,1}=2,251, \omega_{G7,2}=0,750$	$(0,0, \pm \pi/2), (0, \pm \pi, \pm \pi/2),$ $(\pm \pi, 0, \pm \pi/2)$, точка F (2)

ДНКМ делятся на группы от G1 до G7; в каждой группе, как будет показано далее, ДНКМ имеют одну и ту же частоту в пределе малых амплитуд колебаний. ДНКМ групп G3 и G4 существуют как точные решения только в моноатомной ОЦК решетке, но не в структуре B2, поэтому здесь они не рассматриваются. ДНКМ с малой амплитудой колебаний на самом деле являются зонно-граничными фононными модами, волновые векторы которых лежат на границе первой зоны Бриллюэна, как указано в таблице 1.

Следует отметить, что ДНКМ группы G2 качественно отличаются от ДНКМ всех остальных групп. В ДНКМ группы G2 обе кубические подрешетки колеблются относительно друг друга как жесткие тела, в то время как в других ДНКМ колеблются атомы только одной подрешетки, а атомы другой подрешетки остаются в покое. Таким образом, все ДНКМ групп G1, G5, G6 и G7 имеют две частоты, соответствующие колебаниям кубических решеток с атомами массой m_1 и m_2 . Обозначим эти частоты как ω_1 и ω_2 , они связаны между собой соотношением

$$\omega_2 = \sqrt{m_1/m_2} \omega_1. \quad (2.8)$$

Учитывая закономерности колебаний атомов в различных ДНКМ, можно вывести линеаризованное уравнение движения для одной степени свободы и получить частоту колебаний ДНКМ с малой амплитудой.

ДНКМ группы G1 в малоамплитудном пределе имеют частоту

$$\omega_{G1,1}^2 = \frac{1}{m_1} \left(\frac{8}{3}c_1 + 4c_2 + 8c_3 + 8c_4 \right), \quad \omega_{G1,2}^2 = \frac{m_1}{m_2} \omega_{G1,1}^2. \quad (2.9)$$

Первая (вторая) частота соответствует случаю, когда колеблются атомы с массой m_1 (m_2).

ДНКМ группы G2 в малоамплитудном пределе имеют только одну частоту

$$\omega_{G2}^2 = \frac{m_1 + m_2}{2m_1m_2} \left(\frac{16}{3}c_1 + 16c_4 \right). \quad (2.10)$$

Поскольку кубические решетки в ДНКМ группы G2 колеблются как жесткие тела, частота (2.10) не зависит от жесткостей c_2 и c_3 , так как эти связи соединяют атомы внутри кубических решеток.

ДНКМ группы G5 имеют следующие частоты малоамплитудных колебаний:

$$\omega_{G5,1}^2 = \frac{1}{m_1} \left(\frac{8}{3}c_1 + 8c_3 + 8c_4 \right), \quad \omega_{G5,2}^2 = \frac{m_1}{m_2} \omega_{G5,1}^2, \quad (2.11)$$

для колеблющихся атомов с массой m_1 или m_2 , соответственно.

Аналогичный результат для ДНКМ группы G6

$$\omega_{G6,1}^2 = \frac{1}{m_1} \left(\frac{8}{3}c_1 + 4c_2 + 8c_4 \right), \quad \omega_{G6,2}^2 = \frac{m_1}{m_2} \omega_{G6,1}^2. \quad (2.12)$$

ДНКМ группы G7 в малоамплитудном пределе имеют частоты

$$\omega_{G7,1}^2 = \frac{1}{m_1} \left(\frac{8}{3}c_1 + 4c_3 + 8c_4 \right), \quad \omega_{G7,2}^2 = \frac{m_1}{m_2} \omega_{G7,1}^2. \quad (2.13)$$

2.3 Плотность фононных состояний и амплитудно-частотные характеристики ДНКМ

Интересно сравнить дисперсионные кривые моноатомной ОЦК решетки ($m_1 = m_2 = 1$) с дисперсионными кривыми кристалла В2 с большой разницей масс компонент ($m_1 = 1, m_2 = 9$). Результаты для первого случая представлены на рисунке 2.8(а) вдоль трех высокосимметричных линий первой зоны Бриллюэна.

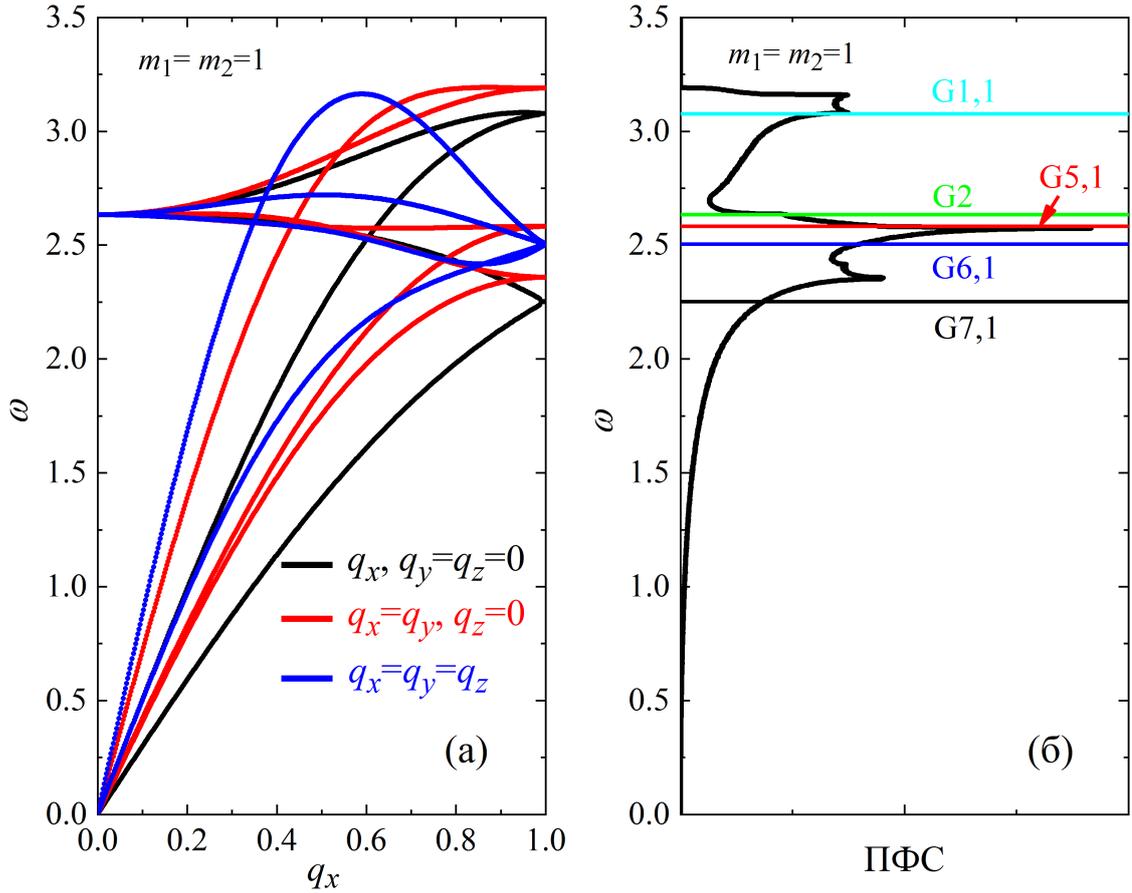


Рисунок 2.8 — (а) Дисперсионные кривые и (б) плотность фоновых состояний для моноатомной ОЦК решетки ($m_1 = m_2 = 1$). Горизонтальными линиями на (б) показаны частоты ДНКМ в малоамплитудном пределе.

люэна. Плотность фоновых состояний для моноатомной ОЦК решетки дана на рисунке 2.8(б), где горизонтальными линиями также отмечены частоты малоамплитудных колебаний ДНКМ. Наблюдается сплошной спектр фоновых колебаний.

Для биатомного кристалла с $m_1 = 1, m_2 = 9$ дисперсионные кривые вдоль трех высокосимметричных линий первой зоны Бриллюэна представлены на рисунке 2.9(а). На панели (б) этого рисунка представлены соответствующие плотности фоновых состояний и частоты малоамплитудных колебаний ДНКМ (горизонтальные линии). Отметим появление в фоновом спектре достаточно широкой запрещенной зоны. Нижняя граница запрещенной зоны определяется частотой ДНКМ группы G1, когда колебания осуществляют тяжелые атомы (отмечено как G_{1,2}). Верхняя граница щели совпадает с частотой ДНКМ группы G2.

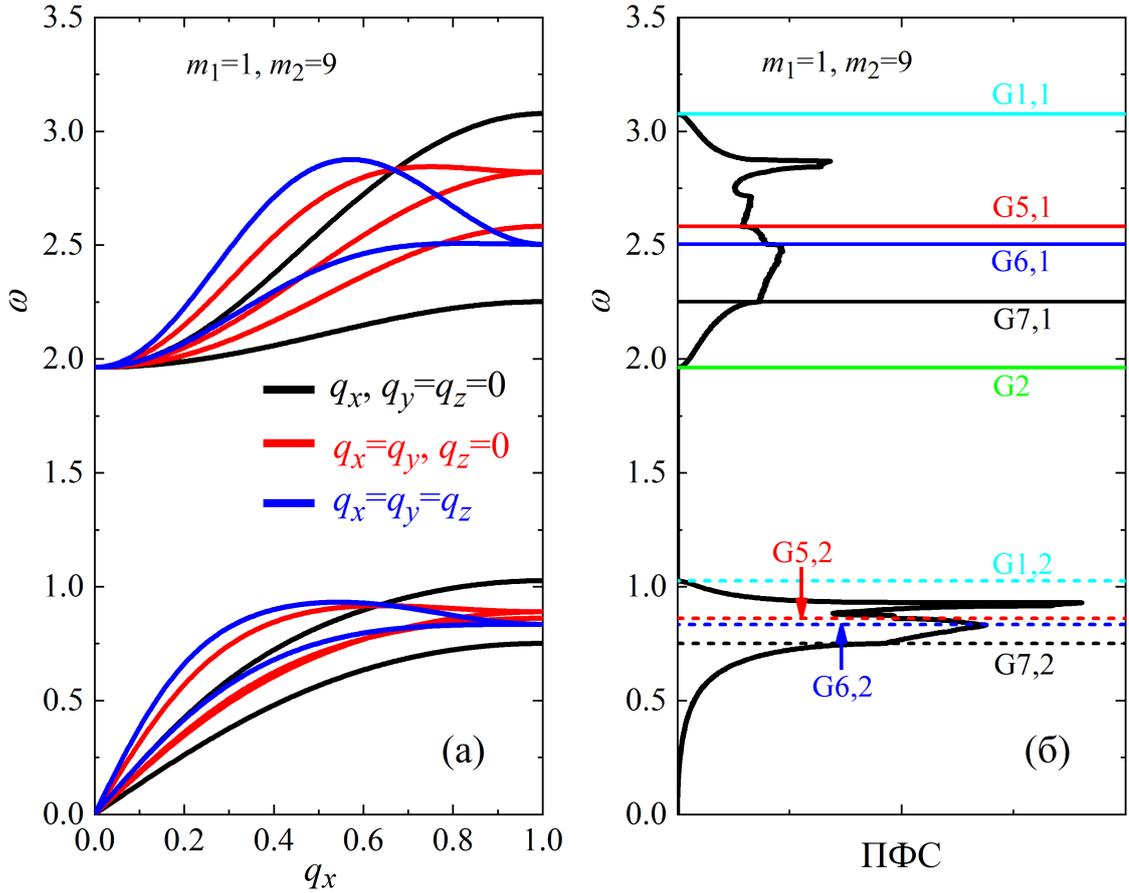


Рисунок 2.9 — (а) Дисперсионные кривые и (б) плотность фоновых состояний для биатомного кристалла В2 ($m_1 = 1$, $m_2 = 9$ или наоборот). Горизонтальные линии на (б) отмечают частоты малоамплитудных колебаний ДНКМ. Все ДНКМ, за исключением тех, что относятся к группе G2, обладают двумя частотами в зависимости от массы колеблющихся атомов. Эти частоты связаны соотношением (2.8).

Амплитудно-частотные характеристики ДНКМ показаны на рисунках 2.10 и 2.11 для жесткой и мягкой нелинейности, соответственно, т. е. для положительных и отрицательных значений β_l , $l = 1, \dots, 4$. В первом случае частота увеличивается, а во втором - уменьшается с ростом амплитуды. Как уже говорилось выше, ДНКМ одной группы имеют одинаковую частоту при малых A . Влияние атомной массы компонентов можно увидеть, сравнив частотные характеристики на панелях (а) $m_1 = m_2 = 1$, (б) $m_1 = 1$, $m_2 = 9$ и (в) $m_1 = 9$, $m_2 = 1$. Для моноатомной решетки, т. е. на (а), ДНКМ имеют одну частоту, в то время как для биатомных решеток на (б) и (в) существуют две частоты для всех ДНКМ, кроме ДНКМ группы G2. Эти две частоты существуют потому, что ДНКМ могут возбуждаться как на легкой, так и на тяжелой подрешетке.

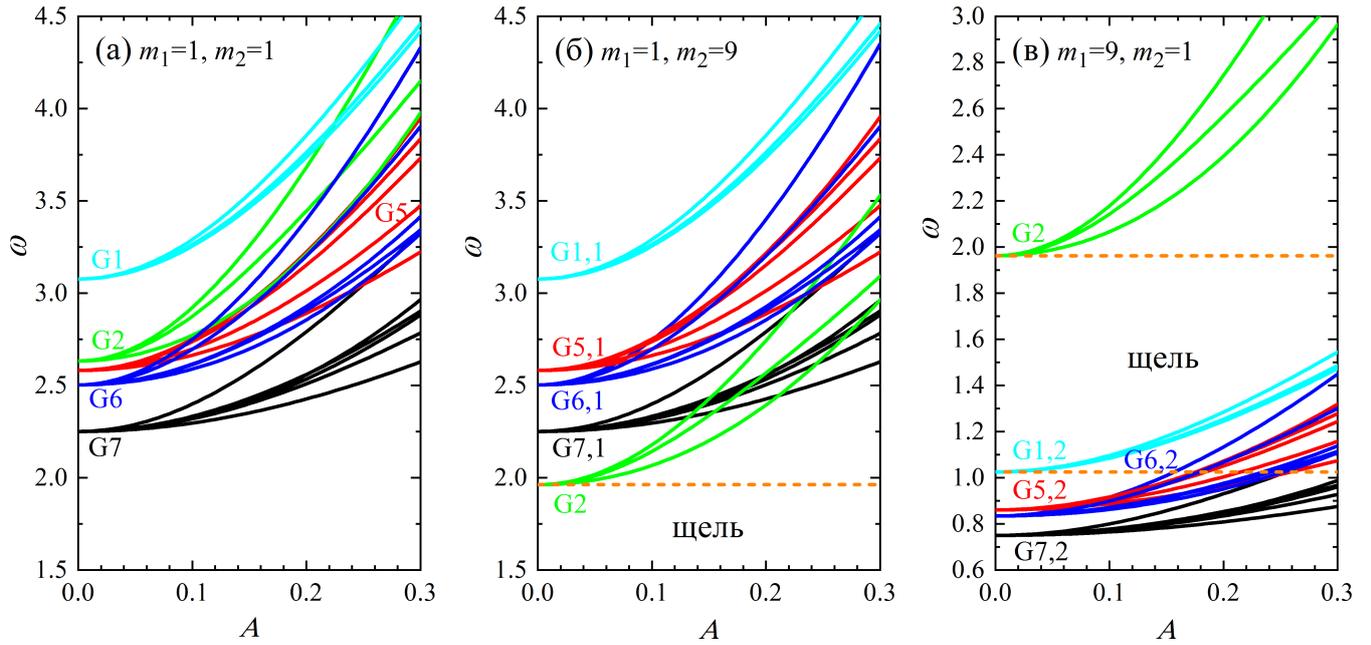


Рисунок 2.10 — Частотная характеристика ДНКМ для жесткой ангармонической решетки $\beta_l > 0, l = 1, \dots, 4$: (а) моноатомная решетка с $m_1 = m_2 = 1$, (б) биатомная решетка с $m_1 = 1, m_2 = 9$, и (в) биатомная решетка с $m_1 = 9, m_2 = 1$. В (б) и (в) границы разрыва в фононном спектре обозначены горизонтальными пунктирными линиями.

ДНКМ группы G2 имеют одну частоту, поскольку и тяжелая, и легкая подрешетки колеблются как жесткие тела относительно центра тяжести. В рассматриваемых биатомных решетках существует щель в фононном спектре, границы которой обозначены горизонтальными пунктирными линиями на панелях (б) и (в) рисунках 2.10 и 2.11.

2.4 Условия существования дискретных бризеров с частотами в щели фононного спектра

Необходимым условием существования щелевых ДБ является наличие щели в фононном спектре. Далее анализируется фононный спектр структуры В2 с параметрами модели уравнения (2.3) для различных масс m_1 и m_2 и получается аналитическое выражение для ширины щели в фононном спектре, тем самым

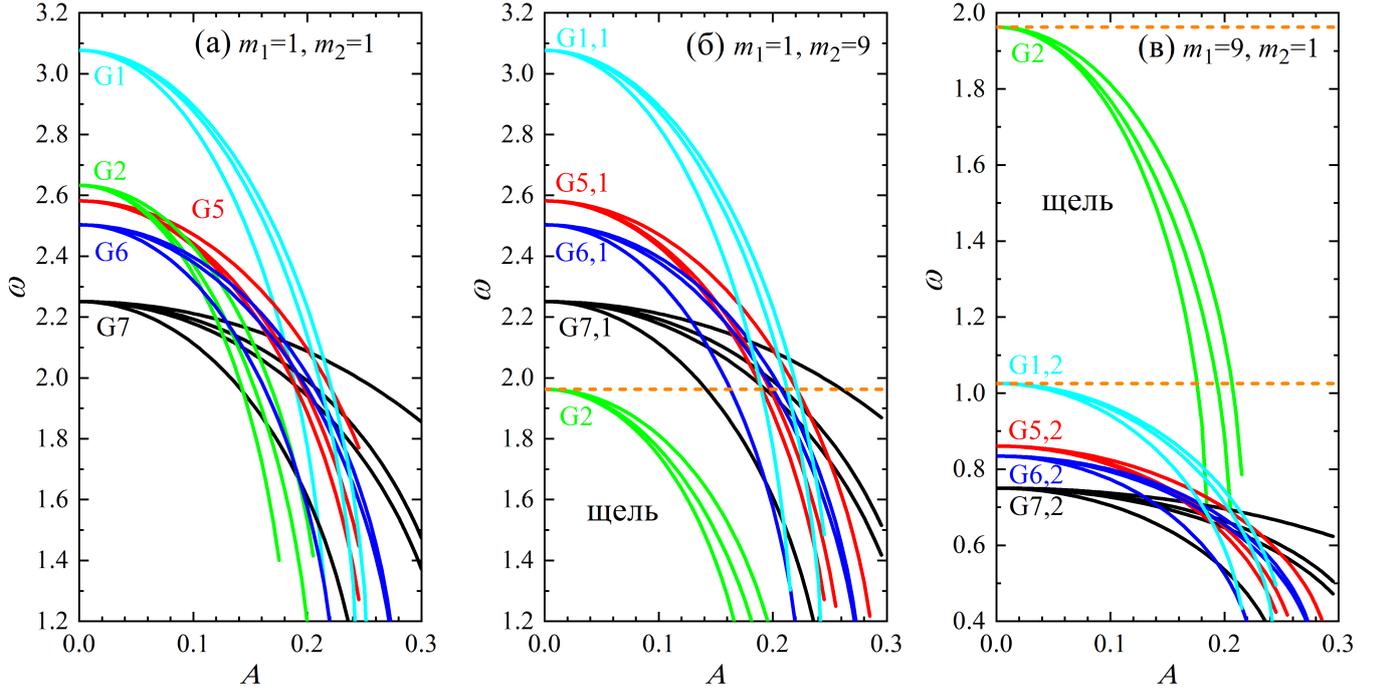


Рисунок 2.11 — Частотная характеристика ДНКМ для ангармонической решетки мягкого типа $\beta_l < 0$, $l = 1, \dots, 4$: (а) моноатомная решетка с $m_1 = m_2 = 1$, (б) биатомная решетка с $m_1 = 1$, $m_2 = 9$, и (в) биатомная решетка с $m_1 = 9$, $m_2 = 1$. В (б) и (в) границы разрыва в фононном спектре обозначены горизонтальными пунктирными линиями.

устанавливаются условия на параметры модели, для которых возможны щелевые ДБ. Затем получены условия на параметры модели, которые гарантируют, что основная частота щелевых ДБ и все высшие гармоники лежат вне фононного спектра. Ожидается, что такие ДБ будут иметь большое время жизни по сравнению с щелевыми ДБ, у которых высшие гармоники лежат в оптической полосе фононного спектра.

Частоты ДНКМ как функции отношения масс компонент m_2/m_1 для фиксированного $m_1 = 1$ представлены на рисунке 2.12(а), а на (б) показано изменение ширины щели в фононном спектре. Изменение плотности состояний фононов с изменением массового отношения m_2/m_1 для $m_1 = 1$ показано на рисунке 2.13. Щель открывается, когда частота $\omega_{G1,2}$ становится меньше $\omega_{G7,1}$ и это происходит при

$$\frac{m_2}{m_1} = \frac{\frac{2}{3}c_1 + c_2 + 2c_3 + 2c_4}{\frac{2}{3}c_1 + c_3 + 2c_4} = 1,868 \equiv \rho_1. \quad (2.14)$$

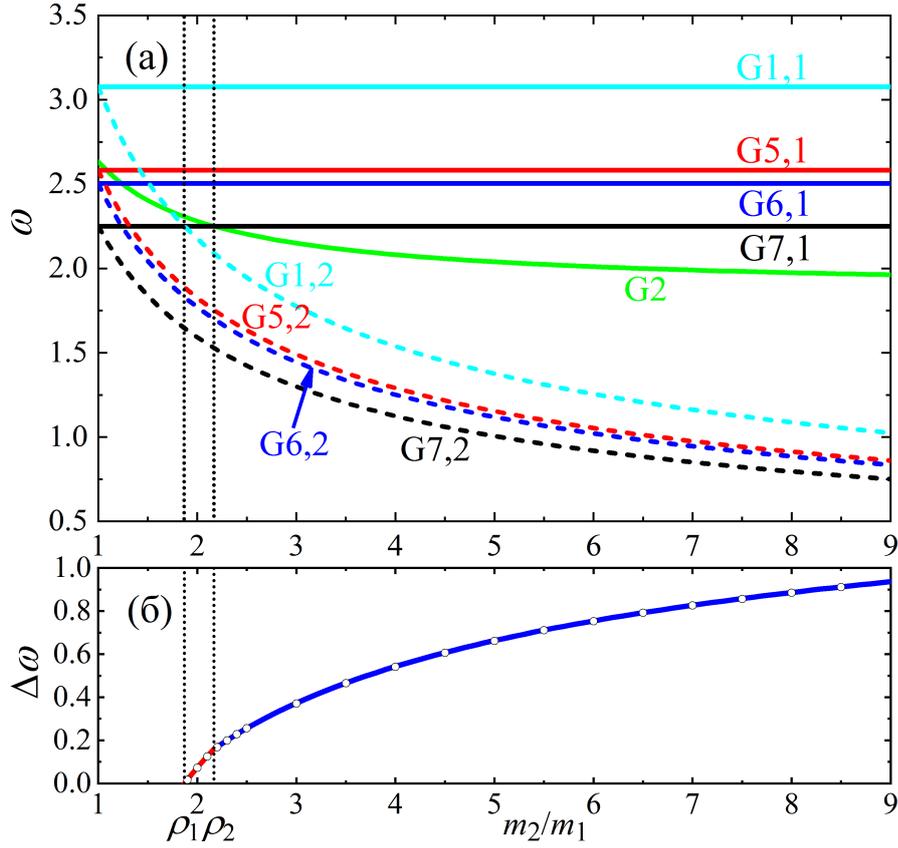


Рисунок 2.12 — (а) Частота ДНКМ и (б) ширина щели в фононном спектре как функции отношения масс компонентов, m_2/m_1 , для фиксированного $m_1 = 1$. Значения ρ_1 и ρ_2 , определяемые уравнением (2.14) и уравнением (2.15), соответственно, обозначены пунктирными вертикальными линиями. Ширина зазора $\Delta\omega$ была рассчитана с помощью уравнения (2.16) (линии) и численно из ПФС (символы).

Частота ω_{G2} становится меньше, чем $\omega_{G7,1}$ при

$$\frac{m_2}{m_1} = \frac{\frac{2}{3}c_1 + 2c_4}{c_3} = 2,167 \equiv \rho_2. \quad (2.15)$$

Ширина щели составляет

$$\begin{aligned} \Delta\omega &= \omega_{G7,1} - \omega_{G1,2}, & \rho_1 < \frac{m_2}{m_1} < \rho_2, \\ \Delta\omega &= \omega_{G2} - \omega_{G1,2}, & \frac{m_2}{m_1} \geq \rho_2, \end{aligned} \quad (2.16)$$

где частоты $\omega_{G1,2}$, ω_{G2} и $\omega_{G7,1}$ определяются уравнениями (2.9), (2.10) и (2.13), соответственно.

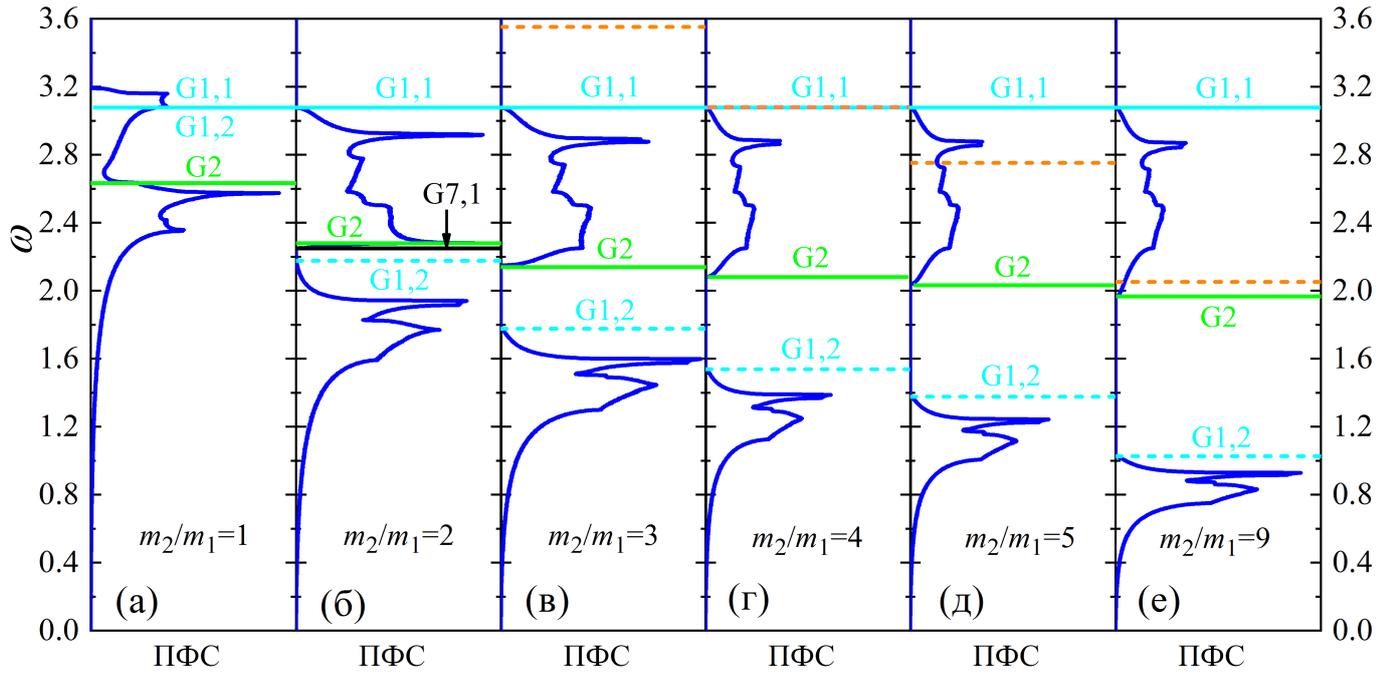


Рисунок 2.13 — Плотность фоновых состояний для различных соотношений атомных масс, как указано на каждой панели ($m_1 = 1$). Горизонтальными линиями показаны частоты малоамплитудных колебаний ДНКМ групп G1 и G2. На (б) частота малоамплитудных колебаний группы G7 показана черной линией, так как здесь именно она соответствует верхнему краю щели в фоновом спектре. Оранжевые пунктирные линии показывают удвоенную частоту нижнего края щели в фоновом спектре.

Важно найти условие существования долгоживущих щелевых ДБ, для которых не только основная частота, но и все ее высшие гармоники находятся за пределами фонованого спектра. Верхний край полосы оптических фононов находится на частоте $\omega_{G1,1}$, а верхний край полосы акустических фононов на частоте $\omega_{G1,2}$. Долгоживущий щелевой ДБ с жестким ангармонизмом существует, когда его вторая гармоника находится выше фонованой полосы, т. е. когда $2\omega_{G1,2} > \omega_{G1,1}$. В соответствии с уравнением (2.9), это происходит, когда

$$\frac{m_2}{m_1} < 4. \quad (2.17)$$

Заметим, что это условие не зависит от жесткости межатомных связей. Если условие уравнения (2.17) нарушается, см. рисунок 2.13(г), то щелевые ДБ с ангармонизмом жесткого типа будут иметь не столь большое время жизни, поскольку вторая гармоника такого ДБ будет резонировать с фононами в оптической полосе спектра.

Для очень большой разницы в атомных массах компонент щель в фононном спектре может быть очень большой, и вторая гармоника основной частоты щелевого ДБ может попасть в щель. Нижний край щели располагается на частоте $\omega_{G1,2}$, а для большой разницы атомных масс верхний край - на частоте ω_{G2} . Долгоживущие ДБ ожидаются, если $2\omega_{G1,2} < \omega_{G2}$. Таким образом, условие существования долгоживущих щелевых ДБ имеет вид

$$\frac{m_2}{m_1} > \frac{c_1 + 2c_2 + 4c_3 + 3c_4}{c_1/3 + c_4} = 9,923. \quad (2.18)$$

Это условие вряд ли имеет практическое значение, поскольку нам не известен ни один кристалл В2 с такой большой разницей в атомных массах составляющих его элементов.

Как было отмечено выше в связи с рисунком 2.11(в), частоты ДНКМ группы G2 ответвляются от верхнего края щели и лежат в щели. Это происходит, когда $m_2/m_1 \geq \rho_2$ или $m_1/m_2 \geq \rho_2$, но для

$$\rho_1 < \frac{m_1}{m_2} < \rho_2, \quad (2.19)$$

это справедливо и для ДНКМ группы G7, как видно из рисунка 2.12. Таким образом, в этом диапазоне соотношений атомных масс ДБ с мягким ангармонизмом могут быть основаны на ДНКМ группы G7, а не G2. У таких ДБ основная частота и все высшие гармоники находятся вне фононного спектра. Вывод таков: в кристалле с ангармонизмом мягкого типа, при условии определенном уравнением (2.19), возможны долгоживущие щелевые ДБ на основе ДНКМ группы G7.

2.5 Щелевые дискретные бризеры

ДНКМ с частотами в щели, которые ответвляются от границы щели, могут создавать щелевые ДБ. В данном разделе, функции локализации применяются к ДНКМ с частотами в щели фононного спектра для получения щелевых ДБ [190]. Для удобства читателя ниже приводится функция локализации, представленная в работе [191]. Параметры функции локализации выбраны таким образом, чтобы минимизировать излучение энергии ДБ.

ДБ локализуется в точке пересечения трех плоскостей,

$$L_1x + L_2y + L_3z + L_4 = 0, \quad (2.20)$$

$$M_1x + M_2y + M_3z + M_4 = 0, \quad (2.21)$$

$$N_1x + N_2y + N_3z + N_4 = 0. \quad (2.22)$$

Эти плоскости ортогональны при условии

$$L_1M_1 + L_2M_2 + L_3M_3 = 0, \quad (2.23)$$

$$L_1N_1 + L_2N_2 + L_3N_3 = 0, \quad (2.24)$$

$$M_1N_1 + M_2N_2 + M_3N_3 = 0. \quad (2.25)$$

Функция локализации берется в виде

$$a_{xyz} = \frac{A}{\cosh(\delta_1 d_{xyz}) \cosh(\delta_2 f_{xyz}) \cosh(\delta_3 g_{xyz})}, \quad (2.26)$$

где a_{xyz} – длина вектора начального смещения атома в узле решетки с координатами (x, y, z) согласно паттерну атомных смещений рассматриваемой ДНКМ; A – амплитуда ДНКМ; δ_i , $i = 1, 2, 3$, – параметры локализации;

$$d_{xyz} = \frac{|L_1x + L_2y + L_3z + L_4|}{\sqrt{L_1^2 + L_2^2 + L_3^2}}, \quad (2.27)$$

$$f_{xyz} = \frac{|M_1x + M_2y + M_3z + M_4|}{\sqrt{M_1^2 + M_2^2 + M_3^2}}, \quad (2.28)$$

$$g_{xyz} = \frac{|N_1x + N_2y + N_3z + N_4|}{\sqrt{N_1^2 + N_2^2 + N_3^2}}, \quad (2.29)$$

- это расстояния от рассматриваемого атома до плоскостей, заданных уравнениями (2.20)-(2.22). При $t = 0$ атомы имеют скорость равную нулю.

В простейшем случае, когда три ортогональные плоскости параллельны координатным плоскостям, имеем $L_1 = M_2 = N_3 = 1$, $L_4 = -x_0$, $M_4 = -y_0$, $N_4 = -z_0$, и $L_2 = L_3 = M_1 = M_3 = N_1 = N_2 = 0$, и функция локализации сводится к виду

$$a_{xyz} = \frac{A}{\cosh[\delta_1(x - x_0)] \cosh[\delta_2(y - y_0)] \cosh[\delta_3(z - z_0)]}, \quad (2.30)$$

где x_0 , y_0 и z_0 определяют центр функции локализации.

2.5.1 Дискретные бризеры в решетке с жесткой нелинейностью

Как было показано в разделе 2.3, долгоживущие щелевые ДБ возможны в кристалле с жестким ангармонизмом на основе ДНКМ группы G1 при условии

$$\rho_1 < \frac{m_2}{m_1} < 4. \quad (2.31)$$

При $m_2/m_1 > \rho_1 = 1,868$ открывается щель в фононной полосе, а при условии $m_2/m_1 < 4$ вторая гармоника основной частоты щелевого ДБ находится выше оптической полосы фононного спектра, см. рисунок 2.13(г).

На рисунке 2.14(а-в) показаны щелевые ДБ на основе ДНКМ G1a, G1b и G1c, полученные для атомных масс $m_1 = 1$, $m_2 = 3$. Тяжелые атомы колеблются с большими амплитудами, а легкие - с гораздо меньшими. ДБ, показанные на (а) и (в), получены с помощью функции локализации уравнения (2.30) с $x_0 = y_0 = z_0 = 0$ и $\delta_1 = 1,2$, $\delta_2 = \delta_3 = 1,7$ для первого ДБ и $\delta_1 = \delta_2 = \delta_3 = 1,2$ для второго ДБ. ДБ на (б) возбуждается с помощью функции локализации уравнения (2.26) с параметрами $L_1 = 1,0$, $L_2 = -1,0$, $L_3 = L_4 = 0,0$, $M_1 = M_2 = 1,0$, $M_3 = M_4 = 0,0$, $N_1 = N_2 = 0,0$, $N_3 = 1,0$, $N_4 = 0,0$, $\delta_1 = \delta_3 = 1,6$, $\delta_2 = 0,85$. Во всех трех случаях $A = 0,25$.

ДБ, показанный на рисунке 2.14(а), стабилен, но ДБ на (б) и (в) превращаются в ДБ, изображенный на (а), через несколько десятков периодов колебаний. Пример такой трансформации показан на рисунке 2.15, где x и y компоненты

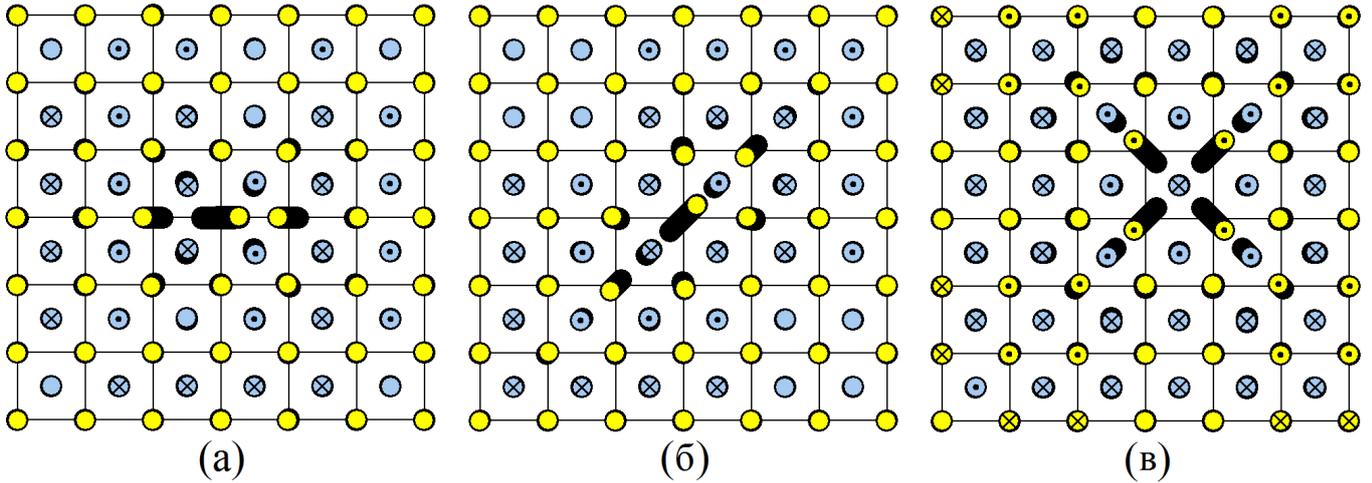


Рисунок 2.14 — Щелевые ДБ на основе ДНКМ (а) G1a, (б) G1b и (в) G1c в кристалле с ангармонизмом жесткого типа. Параметры модели: $m_1 = 1$, $m_2 = 3$, $\beta_l > 0$, $l = 1, \dots, 4$. Параметры уравнения (2.26) приведены в тексте.

амплитуд колебаний центрального атома ДБ, показанного на рисунке 2.14(б), построены как функции времени, нормированного на период колебаний ДБ. Видно, что в течение примерно 80 периодов колебаний ДБ сохраняет начальную симметрию с $A_x = A_y$, но затем спонтанно трансформируется в ДБ, показанный на рисунке 2.14(а), с почти нулевым A_y . После этой трансформации ДБ имеет очень большое время жизни, осциллируя в течение многих тысяч периодов с очень медленным излучением энергии.

2.5.2 Дискретные бризеры в решетке с мягкой нелинейностью

Согласно результатам, представленным в разделе 2.3, в кристалле с ангармонизмом мягкого типа возможны долгоживущие щелевые ДБ при условии уравнения (2.19). При выполнении этого условия в фононном спектре возникает щель, а частота ДНКМ группы G7 ответвляется от верхнего края щели в фононном спектре. Моделирование проведено для $m_1 = 1$, $m_2 = 2,1$, удовлетворяющих уравнению (2.19).

ДБ в кристалле с ангармонизмом мягкого типа на основе ДНКМ группы G7 имеют относительно короткое время жизни (около 10^2 периодов колебаний), несмотря на то, что основная частота и все высшие гармоники ДБ на-

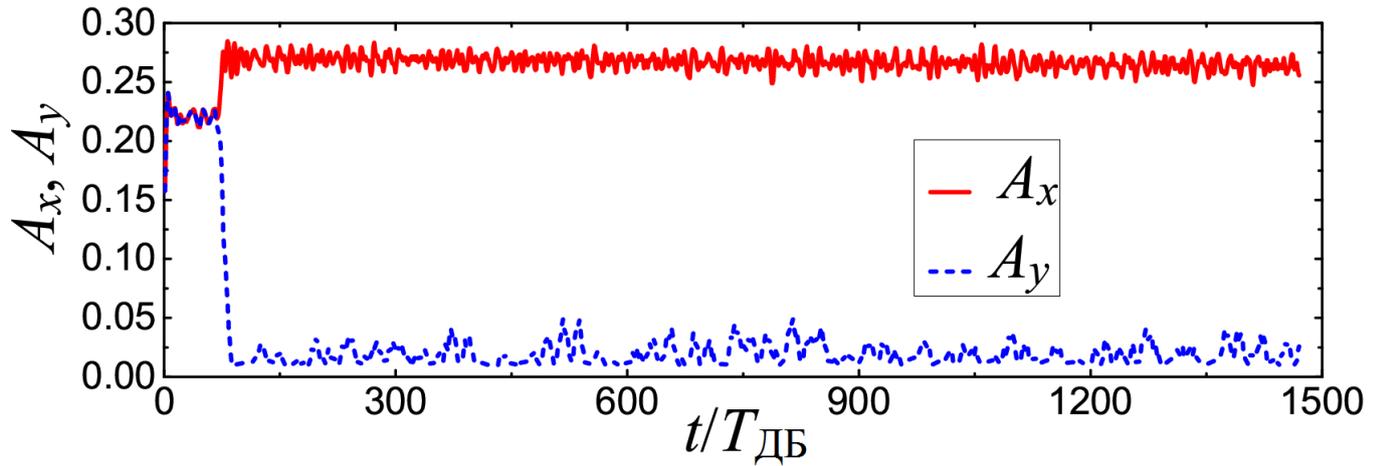


Рисунок 2.15 — Неустойчивый ДБ на основе ДНКМ G1b, см. рисунок 2.14(б). Показаны амплитуды колебаний центрального атома ДБ по координатам x и y как функции времени, нормированного на период колебаний ДБ. $A_z = 0$ в течение всего времени моделирования.

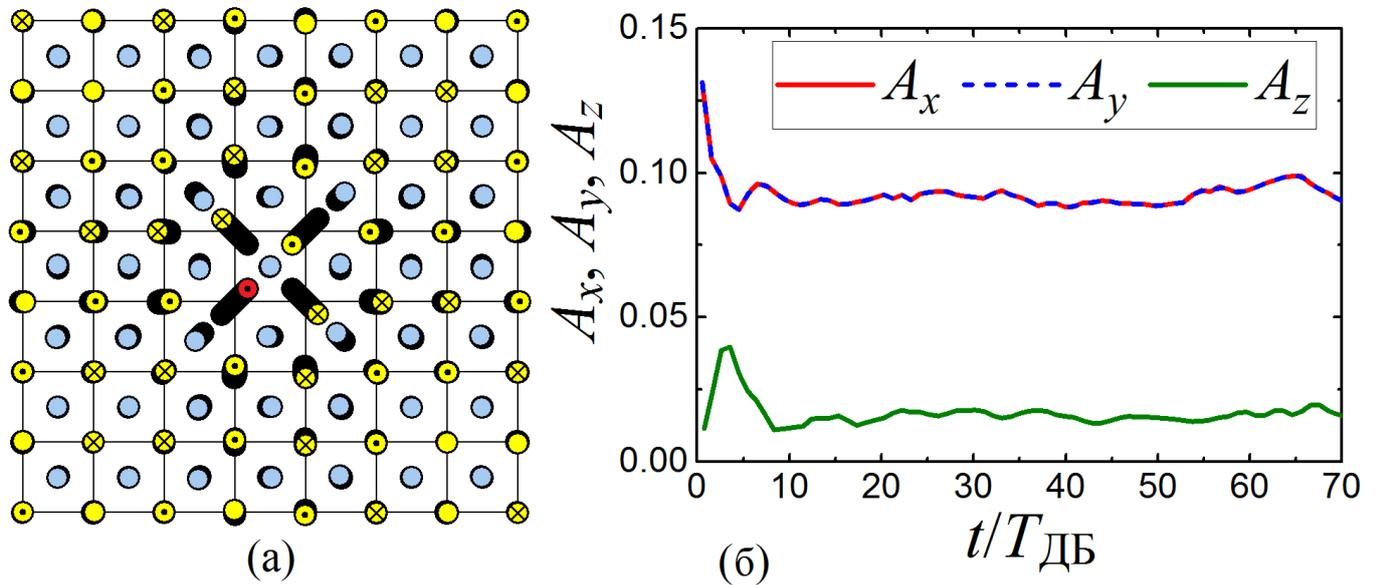


Рисунок 2.16 — (а) Щелевой ДБ на основе ДНКМ G7a в кристалле с ангармонизмом мягкого типа. Параметры модели: $m_1 = 1$, $m_2 = 2,1$, $\beta_l < 0$, $l = 1, \dots, 4$. Параметры уравнения (2.26) приведены в тексте. (б) Компоненты амплитуд колебаний атома, окрашенного в красный цвет на (а), как функции времени, нормированного на период колебаний ДБ.

ходятся вне фононной полосы. Это можно объяснить неустойчивостью ДБ и довольно узкой щелью в фононном спектре для рассматриваемого в моделировании отношения атомных масс $m_2/m_1 = 2,1$. Пример ДБ на основе ДНКМ G7a показан на рисунке 2.16. Он был возбужден с помощью уравнения (2.30) с параметрами $x_0 = y_0 = z_0 = h/2$, $\delta_1 = \delta_2 = \delta_3 = 1,3$, $A = 0,35$. Обратим внимание, что в ДНКМ G7a все атомы колеблются в плоскости xy с нулевой компонентой z , а в полученном ДБ центральные атомы имеют небольшую компоненту A_z . Несмотря на появление дополнительных малых компонент перемещений атомов, ДБ может существовать, пусть и не столь долгое время, как в случае ДБ с жестким типом нелинейности.

2.6 Супратрансмиссия при периодическом внешнем воздействии на поверхность кристалла

2.6.1 Постановка задачи

Постановка задачи изображена на рисунке 2.17, где показан полукристалл со структурой B2, поверхность которого перпендикулярна оси x . Предполагается, что поверхность облучается лазером с настраиваемой частотой и мощностью. Воздействие лазерного излучения моделируется жестким движением пары приповерхностных атомных плоскостей вдоль оси x по гармоническому закону $x = A \sin(\omega t)$. Изучается передача энергии внешнего воздействия полукристаллу в зависимости от частоты ω и амплитуды A вынужденных колебаний пары плоскостей.

Расчеты проведем для жесткого типа нелинейности, то есть возьмем положительные значения параметров β_l в выражении (2.3). Для атомных масс компонент положим $m_1 = 1$, $m_2 = 3$. В качестве начальных условий используются нулевые отклонения от решеточных положений и нулевые начальные скорости для всех атомов расчетной ячейки. В момент времени $t = 0$ на поверхность кристалла начинает действовать описанное выше внешнее периодическое воздействие. Используются периодические граничные условия вдоль направле-

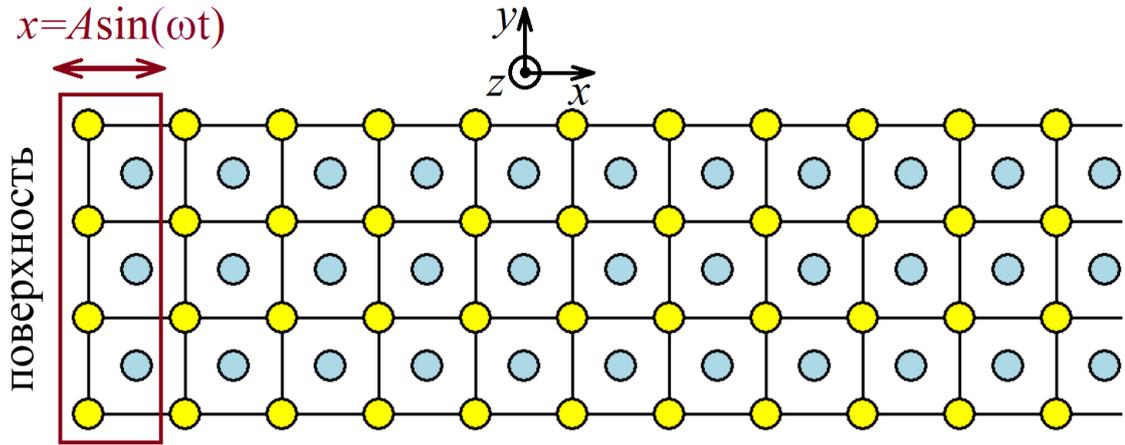


Рисунок 2.17 — Полукристалл с поверхностью перпендикулярной оси x , на которую воздействует внешняя сила таким образом, что две атомные плоскости совершают гармонические колебания с амплитудой A и частотой ω в направлении оси x . Изучается передача энергии внешнего воздействия полукристаллу в зависимости от частоты и амплитуды вынужденных колебаний пары плоскостей. Рассматривается кристалл с жестким типом нелинейности ($\beta_l > 0$) и атомными массами компонент $m_1 = 1$, $m_2 = 3$. Лёгкие (тяжелые) атомы показаны желтым (голубым) цветом.

ний y и z , а границы расчетной области перпендикулярные оси x являются свободными, при этом левый край подвергается периодическому внешнему воздействию. Рассматриваемая задача является квази-одномерной, поэтому расчетная область включала $1000 \times 2 \times 2$ кубических ячеек структуры В2 вдоль осей x , y и z , соответственно.

2.6.2 Накачка кристалла энергией в зависимости от частоты и амплитуды внешнего воздействия

На рисунке 2.18(а) показана зависимость энергии кристалла в момент времени $t = 100$ от частоты внешнего воздействия для четырех различных амплитуд воздействия: $A = 10^{-4}$ (черная кривая), $A = 0,02$ (красная кривая), $A = 0,04$ (синяя кривая), $A = 0,06$ (зеленая кривая). Энергия кристалла нормирована на максимальную энергию, которая достигалась примерно при $\omega = 2,6$. На (б) и (в) показано то же самое для узких областей частоты внешнего воздей-

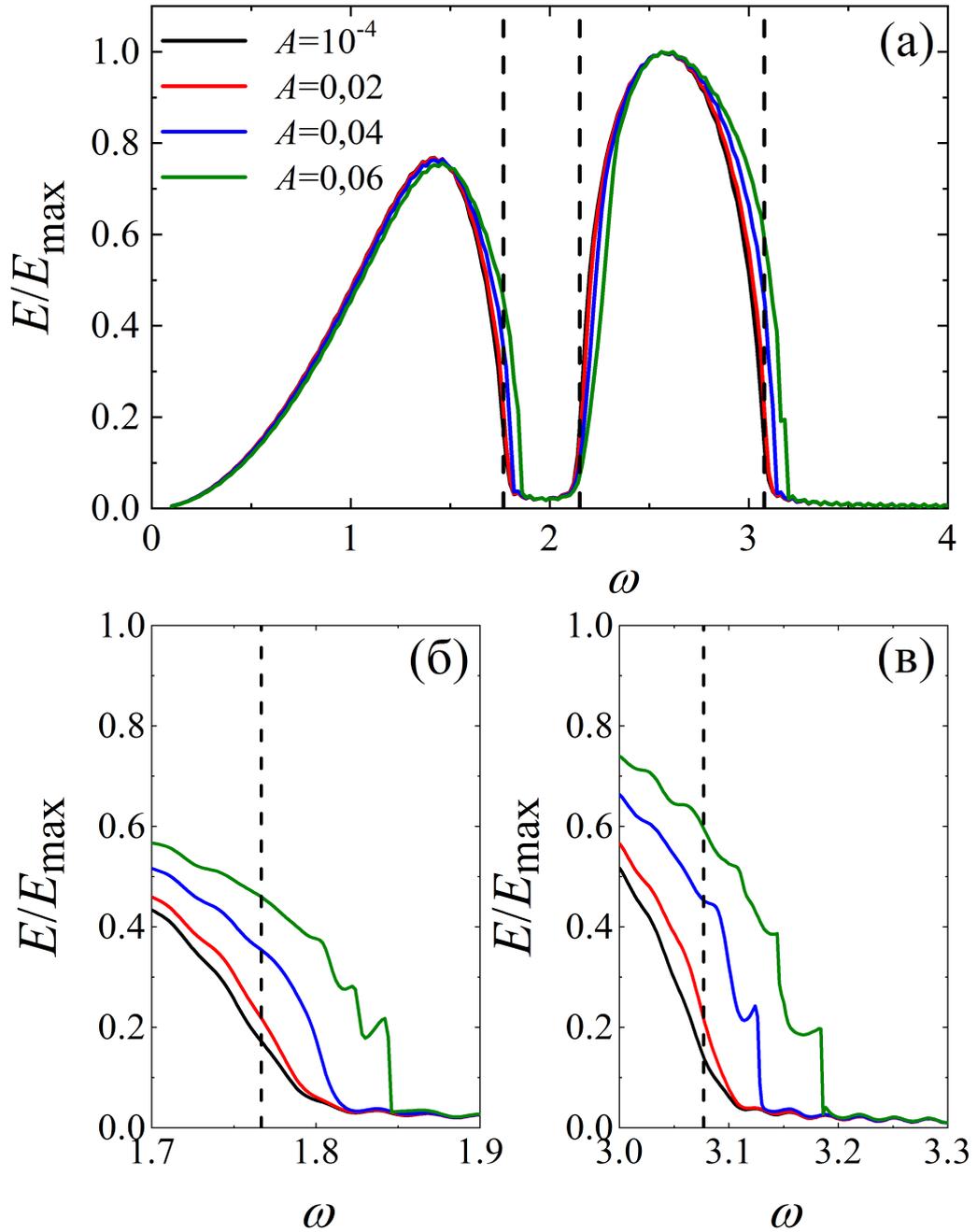


Рисунок 2.18 — (а) Зависимость энергии кристалла в момент времени $t = 100$ от частоты внешнего воздействия для четырех различных амплитуд воздействия, как указано в легенде. Энергия кристалла нормирована на максимальную энергию, которая достигалась примерно при $\omega = 2,6$. На (б) и (в) показано то же самое для узких областей частоты внешнего воздействия. Вертикальные линии показывают границы акустической и оптической зон фононного спектра. Щель в спектре находится в интервале частот $1,7667 < \omega < 2,1499$, а верхний край фононного спектра находится на отметке $\omega = 3,0768$.

ствия. Вертикальные линии показывают границы акустической и оптической зон фононного спектра.

Как видно из рисунка 2.18(а), кристалл получает энергию от внешнего источника только если частота воздействия лежит в пределах фононного спектра или недалеко от его границ. Чем меньше амплитуда вынужденных колебаний, тем точнее частотный диапазон, в котором происходит накачка кристалла энергией, совпадает с фононным спектром кристалла. Однако с ростом амплитуды внешнего воздействия расширяется частотная область накачки кристалла энергией, как вблизи нижней границы щели фононного спектра (рисунок 2.18(б)), так и вблизи верхнего края спектра (рисунок 2.18(в)). Вблизи верхнего края щели расширения частотной области передачи энергии кристаллу не наблюдается. Передача энергии кристаллу на частотах внешнего воздействия вне спектра малоамплитудных собственных колебаний кристалла как раз и называется явлением супратрансмиссии, и оно, как видим, наблюдается лишь в нелинейном режиме, при достаточно больших амплитудах внешнего воздействия.

2.6.3 Механизм передачи энергии кристаллу

Покажем как происходит накачка энергии кристалла во времени и как распределена по кристаллу энергия, переданная ему от внешнего источника. Для различных частот внешнего воздействия, при амплитуде $A = 0,06$, данная информация представлена на рисунках 2.19, 2.20 и 2.21.

Для начала рассмотрим случай, когда частота внешнего воздействия лежит в акустической полосе фононного спектра, положив $\omega = 1,2$. Из рисунка 2.19(а) видно, что энергия кристалла растет со временем по линейному закону. Распределение энергии по кристаллу представлено на рисунке 2.19(б) зависимостью энергии на атом e от координаты x , нормированной на параметр решетки a . Видно, что после некоторого переходного периода устанавливается стационарное излучение волны, распространяющейся от поверхности вглубь кристалла.

Качественно иная картина передачи энергии кристаллу наблюдается в режиме супратрансмиссии, то есть когда частота внешнего воздействия лежит

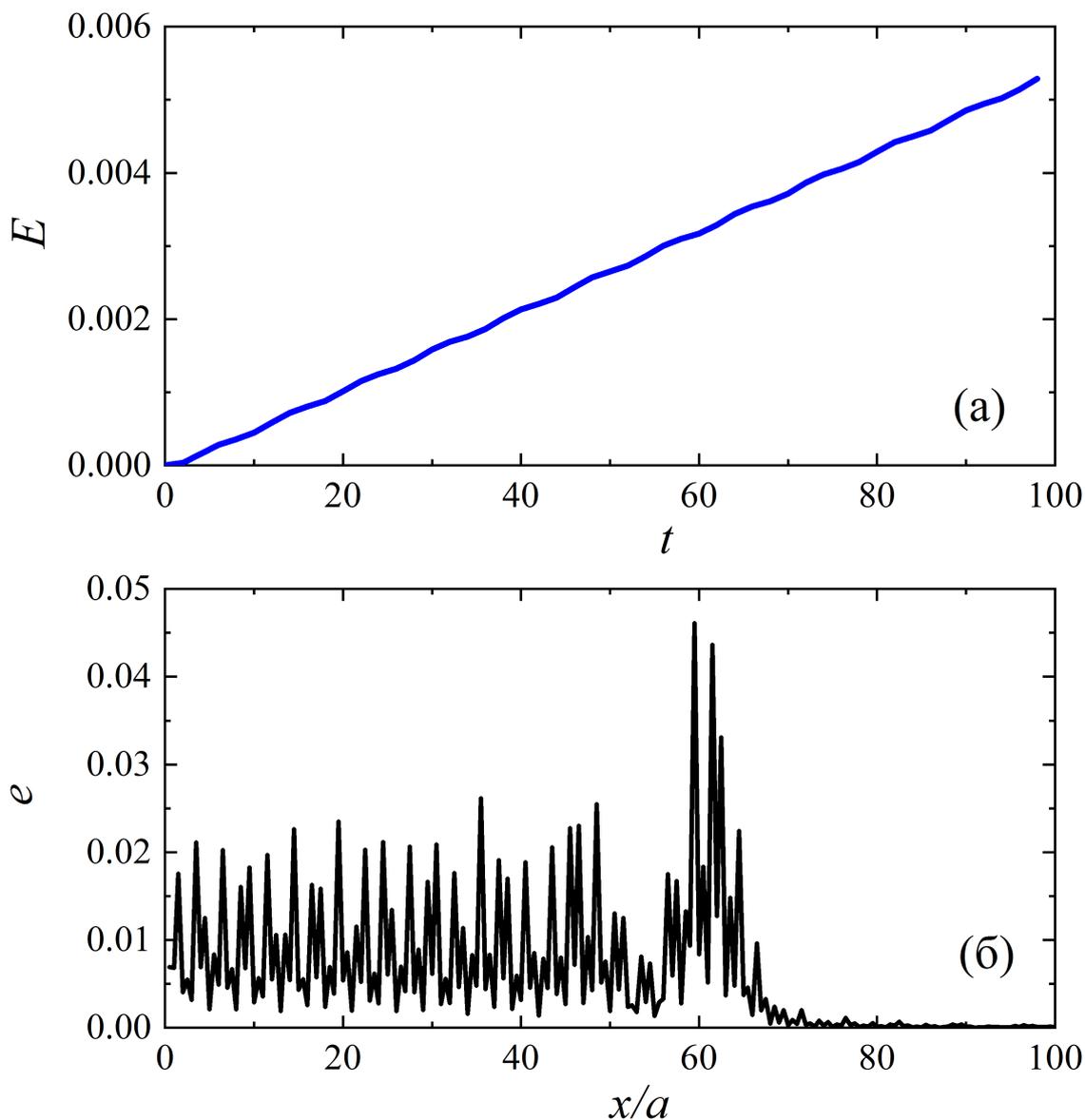


Рисунок 2.19 — (а) Зависимость энергии кристалла от времени для внешнего воздействия на частоте $\omega = 1,2$ (в акустической полосе фоновго спектра) и амплитуде $A = 0,06$. (б) Распределение энергии кристалла вдоль оси x в момент времени $t = 100$.

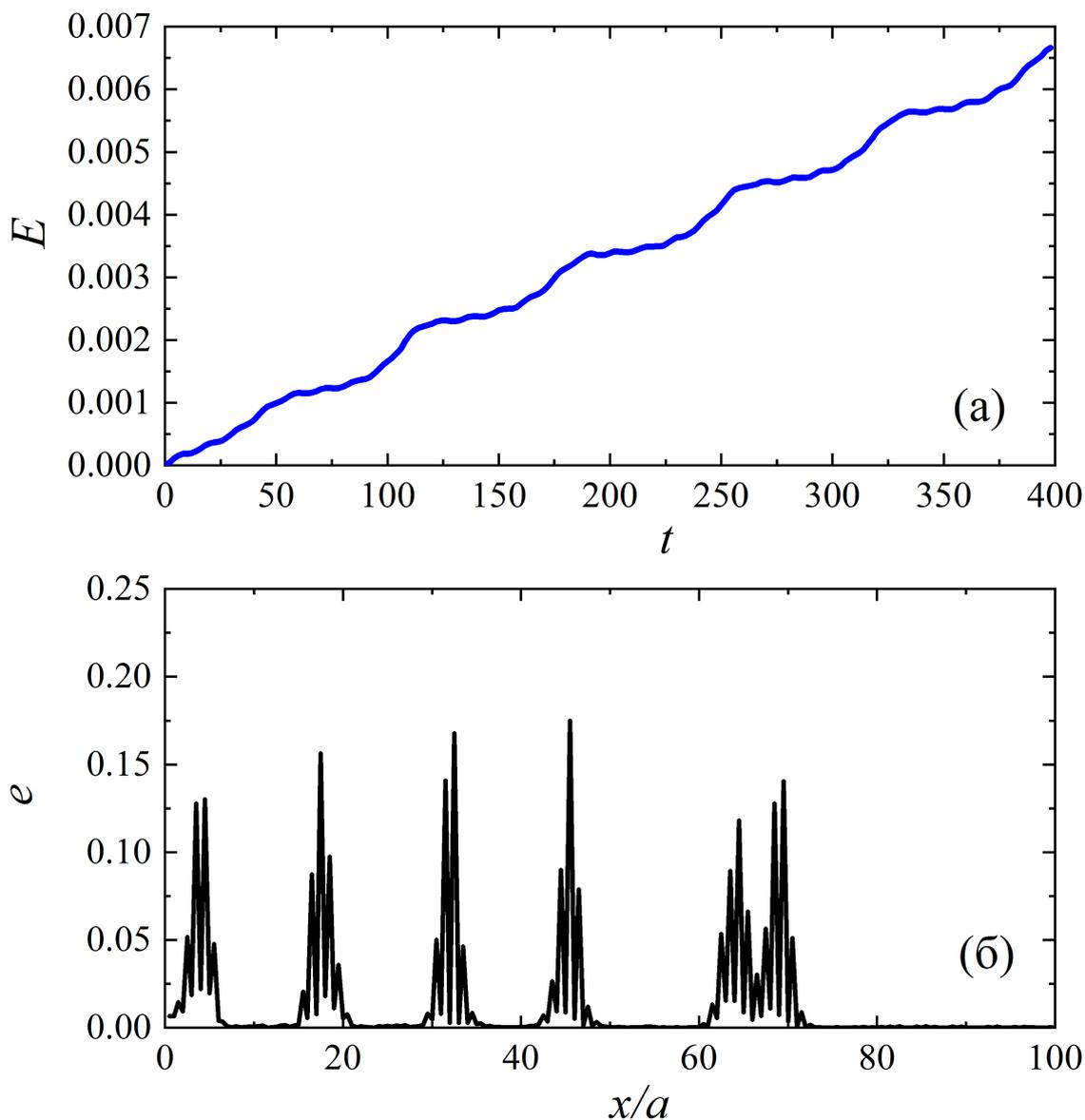


Рисунок 2.20 — (а) Зависимость энергии кристалла от времени для внешнего воздействия на частоте $\omega = 1,81$ (в щели фононного спектра, у её нижнего края) и амплитуде $A = 0,06$. (б) Распределение энергии кристалла вдоль оси x в момент времени $t = 400$.

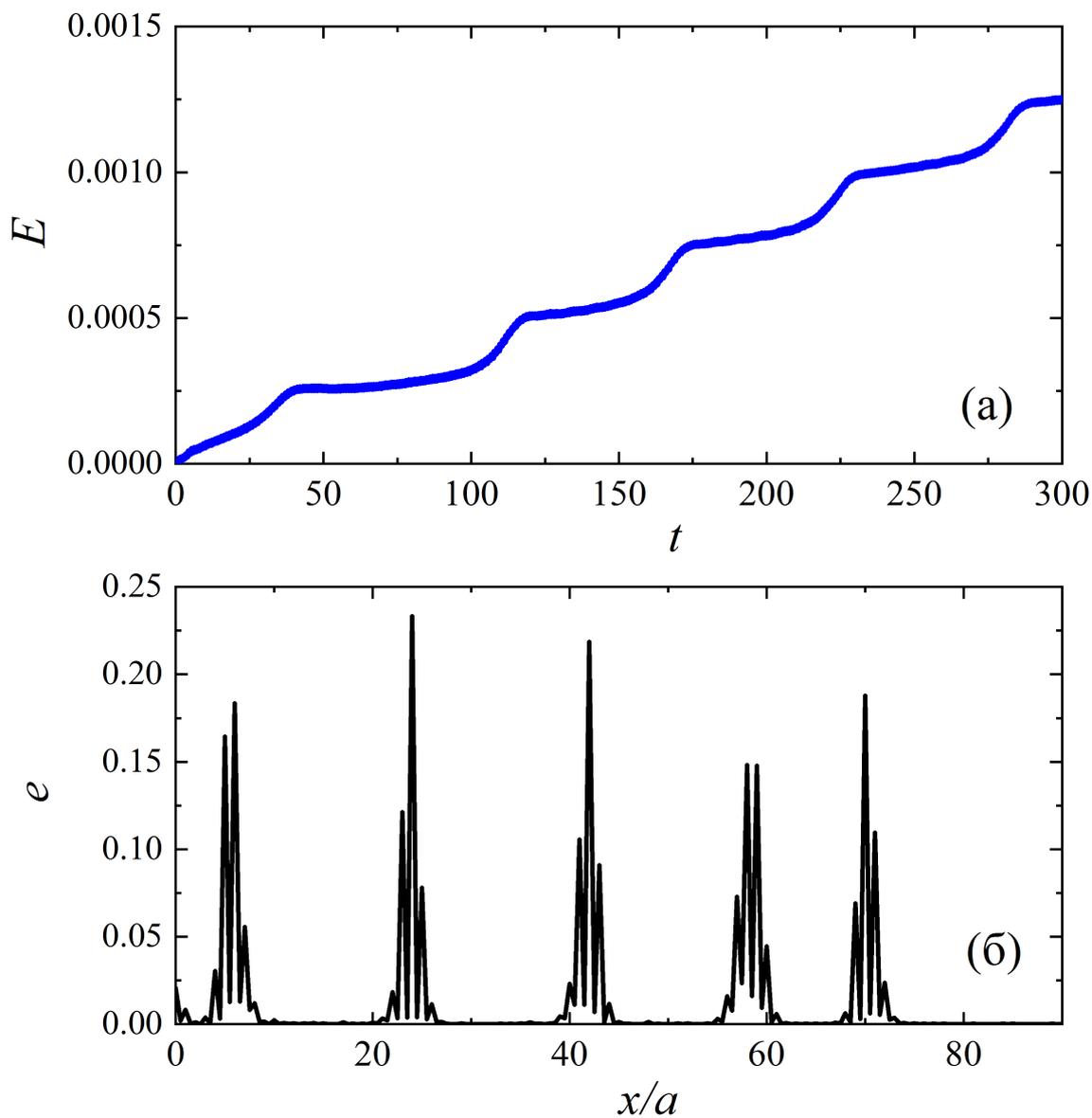


Рисунок 2.21 — (а) Зависимость энергии кристалла от времени для внешнего воздействия на частоте $\omega = 3,16$ (выше фононного спектра) и амплитуде $A = 0,06$. (б) Распределение энергии кристалла вдоль оси x в момент времени $t = 300$.

вне фононного спектра, а амплитуда достаточно высока, чтобы энергия начала передаваться кристаллу. На рисунке 2.20 выбрана частота внешнего воздействия $\omega = 1,81$, лежащая в щели фононного спектра, у её нижнего края, см. рисунок 2.18(б). Из рисунка 2.20(а) следует, что энергия передается кристаллу немонотонно во времени, наблюдаются промежутки ускоренной и замедленной передачи энергии. Причина этому видна на рисунке 2.20(б), из которого следует, что транспорт энергии по кристаллу осуществляют теперь не фононные волны, а локализованные в пространстве ДБ. Каждый подъем энергии кристалла связан с излучением ДБ. После некоторого переходного процесса устанавливается квазипериодическое излучение ДБ, движущихся вглубь кристалла с примерно одинаковой скоростью, в то время как первые два ДБ, как видно, имеют различные скорости движения.

Обращаясь к рисунку 2.21, замечаем, что такое же квазипериодическое излучение ДБ от поверхности кристалла и их движение вглубь кристалла наблюдается на частоте внешнего воздействия $\omega = 3,16$, которая находится выше фононного спектра, см. рисунок 2.18(б). Здесь также первая пара ДБ имеет несколько иные энергии и скорости движения, а последующие испускаются квазипериодически и имеют примерно одинаковые свойства.

2.6.4 Свойства излучаемых дискретных бризеров

Проанализируем свойства ДБ, излучаемых в процессе супратрансмиссии. На рисунке 2.22 показаны примеры ДБ, полученных при внешнем воздействии на частоте $\omega = 1,81$, то есть в щели фононного спектра. На рисунке 2.23 видим ДБ, полученные при внешнем воздействии на частоте $\omega = 3,16$, то есть выше фононного спектра. Лёгкие (тяжелые) атомы показаны желтым (голубым) цветом. Принципиальным отличием является то, что щелевые ДБ бегут по атомам тяжелой подрешетки, оставляя легкую подрешетку слабо возмущенной, а ДБ с частотами выше спектра, наоборот, бегут по атомам легкой подрешетки, а атомы тяжелой подрешетки имеют низкую энергию. И те и другие ДБ имеют в своей основе ДНКМ $G1a$, см. рисунок 2.3, только для щелевых ДБ возбуждена

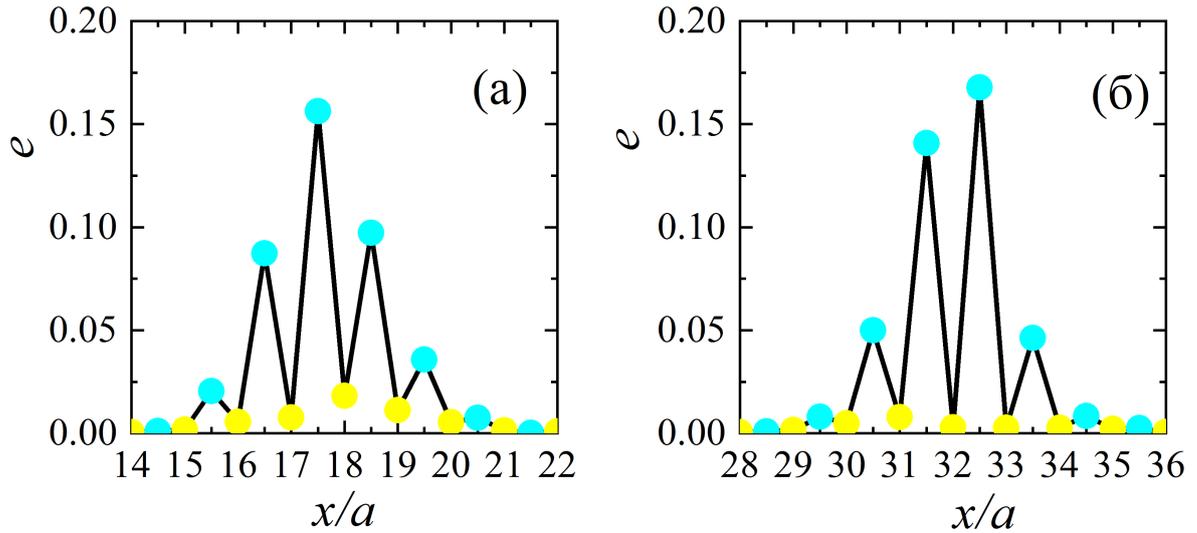


Рисунок 2.22 — Профили энергий двух ДБ в момент времени $t = 400$, испущенных левой поверхностью кристалла, совершающей вынужденные колебания. На (а) показан второй слева, а на (б) третий слева ДБ, см. рисунок 2.20(б). Параметры внешнего воздействия: $\omega = 1,81$, $A = 0,06$. Лёгкие (тяжелые) атомы показаны желтым (голубым) цветом.

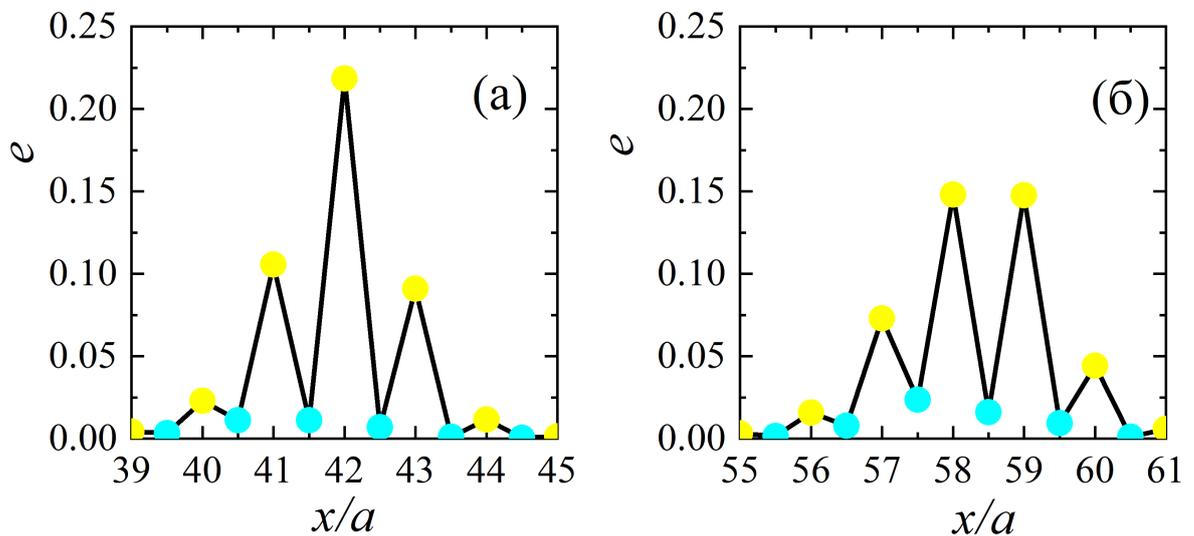


Рисунок 2.23 — Профили энергий двух ДБ в момент времени $t = 300$, испущенных левой поверхностью кристалла, совершающей вынужденные колебания. На (а) показан третий слева, а на (б) четвертый слева ДБ, см. рисунок 2.21(б). Параметры внешнего воздействия: $\omega = 3,16$, $A = 0,06$. Лёгкие (тяжелые) атомы показаны желтым (голубым) цветом.

подрешетка тяжелых атомов, а для ДБ с частотами выше фононного спектра - подрешетка легких атомов.

Оценим теперь скорость с которой ДБ перемещаются от источника энергии вглубь кристалла. Щелевые ДБ, изображенные на рисунке 2.20(б) бегут со скоростью примерно $0,18a$ за единицу времени. Круговая частота щелевых ДБ равна примерно 1,8, то есть период их колебаний равен 3,5 единиц времени. За один период колебаний ДБ проходит расстояние равное $0,63a$.

ДБ, изображенные на рисунке 2.21(б), перемещаются со скоростью $0,24a$ за единицу времени. Круговая частота таких ДБ равна примерно 3,1, то есть период их колебаний равен 2,0 единиц времени. За один период колебаний ДБ проходит расстояние равное $0,48a$.

2.7 Выводы по главе 2

Проанализирована линейная и нелинейная динамика кристалла В2 с учетом взаимодействий до четвертого соседа, описываемых потенциалом β -ФПУЦ с положительными и отрицательными коэффициентами β , что соответствует ангармонизмам жесткого и мягкого типа, соответственно. Установлено, что щель существует в фононной полосе для $m_2/m_1 > \rho_1$, см. уравнение (2.14), что является необходимым условием для существования щелевых ДБ. Ширина щели как функция параметров модели дается уравнением (2.16). В решетке с $\beta > 0$ ДБ имеют основную частоту и все высшие гармоники вне фононной полосы при условии уравнения (2.31); то же самое справедливо для $\beta < 0$ при условии уравнения (2.19).

В кристалле с $\beta > 0$ на основе ДНКМ G1a может быть возбужден очень долгоживущий и устойчивый щелевой ДБ с временем жизни в тысячи периодов колебаний; такой ДБ показан на рисунке 2.14(а). ДБ на основе ДНКМ G1b и G1c, см. рисунок 2.14(б,в), неустойчивы и превращаются в устойчивый ДБ через несколько десятков периодов колебаний; пример такого превращения показан на рисунке 2.15. ДБ в решетке с $\beta < 0$ имеют меньшее время жизни, обычно в пределах 10^2 периодов колебаний. Пример ДБ на основе ДНКМ G7a

представлен на рисунке 2.16. Отметим, что ранее щелевые ДБ были описаны в ионном кристалле NaI [192] и интерметаллиде Pt₃Al [193; 194].

В природе существует достаточно много кристаллов со структурой В2 с достаточно большой разницей в атомных массах компонентов, в которых присутствует щель в фононном спектре и, таким образом, выполняется необходимое условие существования щелевых ДБ. Например, кристаллы CuBe [86] с $m_2/m_1 = 7,05$, AuZn [87; 195] с $m_2/m_1 = 3,01$, CsCl [89; 196] с $m_2/m_1 = 3,75$, SrS [197; 198] с $m_2/m_1 = 2,73$, AgMg [199; 200] с $m_2/m_1 = 4,44$. Можно ожидать, что в этих кристаллах можно будет наблюдать щелевые ДБ известными экспериментальными методами [8; 9; 201; 202].

В разделе 2.6 установлено, что вынужденное внешнее воздействие на поверхность кристалла со структурой В2 на частотах в щели и выше фононного спектра, при достаточно большой амплитуде внешнего воздействия, приводит к квазипериодической во времени генерации ДБ, которые движутся от поверхности вглубь кристалла, то есть, реализуется явление супратрансмиссии.

Учитывая, что точность межатомных потенциалов, используемых в молекулярно-динамическом моделировании, не всегда удовлетворительна [14], перед проведением экспериментов целесообразно провести первопринципное моделирование для определения ширины щели в фононном спектре, частот ДНКМ и типа их ангармоничности. Существование ДНКМ с частотами, ответвляющимися от края щели и входящими в щель, скорее всего, будет означать возможность существования щелевых ДБ. Результаты, представленные в данном исследовании, дают теоретическое обоснование для обнаружения щелевых ДБ в кристаллах В2 с компонентами, разница в атомных массах которых достаточно велика, чтобы открыть щель в фононном спектре.

Глава 3. Щелевые движущиеся дискретные бризеры в биатомном кристалле

В этой главе будет рассматриваться биатомный кристалл со структурой CsCl с межатомными взаимодействиями, описываемыми потенциалом β -ФПУЦ. Анализируется случай большой разницы в атомных массах компонентов, когда в фононном спектре кристалла возникает щель. Пространственно локализованная колебательная мода с большой амплитудой, называемая дискретным бризером (ДБ), найдена путем применения функции локализации к ДНКМ G1a, см. рисунок 2.3. ДНКМ и, следовательно, ДБ имеют частоты в щели фононного спектра.

3.1 Описание модели и методов моделирования

Структура CsCl показана на рисунке 1.1 и для удобства читателя воспроизведена на рисунке 3.1(a). Параметр решетки равен a , а атомы двух сортов имеют массы m_1 и m_2 .

Движение N атомов в вычислительной ячейке определяется численным интегрированием системы уравнений вида (2.1). Независимо от типа взаимодействующих атомов, для описания их взаимодействия с четырьмя ближайшими соседями используются потенциалы β -ФПУЦ (2.2). Параметры потенциалов задаются уравнением (2.3). Параметры выбраны таким образом, чтобы более длинные связи были менее жесткими. Атомные массы компонент составляют $m_1 = 3$ и $m_2 = 1$, причем последняя всегда может быть задана путем нормализации единицы времени. При данном выборе масс компонент в фононном спектре существует запрещенная зона, что является необходимым условием существования щелевых ДБ. Ширина запрещенной зоны может быть вычислена по второй формуле уравнения (2.16).

В моделировании используются периодические граничные условия и термодинамический ансамбль NVE. Начальные условия, используемые для возбуждения движущихся ДБ, будут описаны ниже.

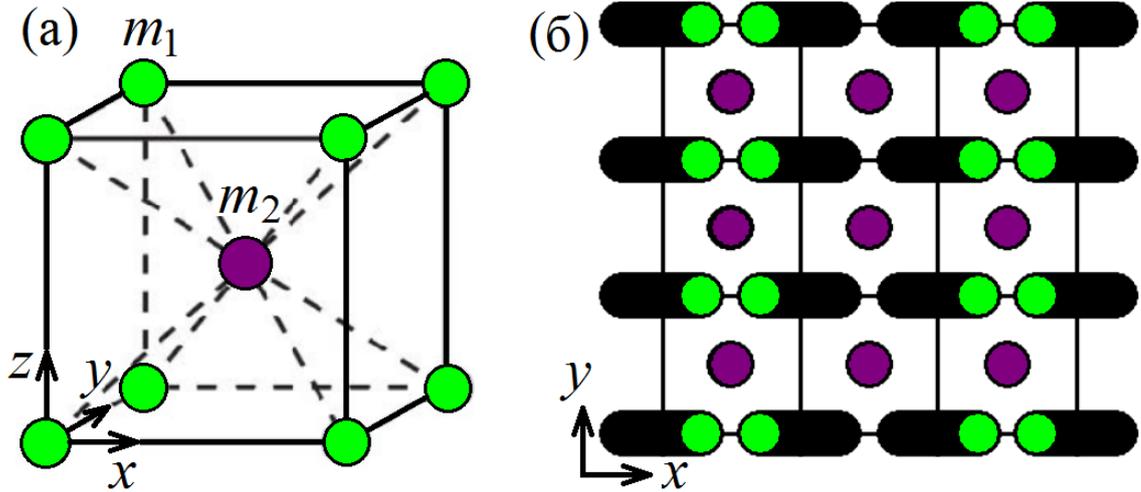


Рисунок 3.1 — (а) Кристалл со структурой CsCl с атомами двух типов, которые отличаются только массами, а межатомные взаимодействия одинаковы и описываются потенциалом β -ФПУЦ, уравнение (2.2). Параметр решетки равен a . (б) Делокализованная нелинейная колебательная мода G1a (см. рисунок 2.3) с атомными плоскостями ориентации (100), колеблющимися параллельно оси x в противофазе с соседними плоскостями. Колеблются атомы только одной подрешетки, в то время как атомы другой подрешетки находятся в состоянии покоя.

3.2 Метод возбуждения ДБ

3.2.1 Делокализованная нелинейная колебательная мода G1a

В рассматриваемом кристалле может быть возбуждена ДНКМ G1a, показанная на рисунке 3.1(б). В этой моде атомные плоскости ориентации (100) одной из подрешеток колеблются вдоль оси x в противофазе с ближайшими плоскостями, а атомы другой подрешетки находятся в состоянии покоя. Эта мода представляет собой колебательную систему с одной степенью свободы, и, учитывая ее симметрию, можно записать соответствующее уравнение движения, которое в гармоническом приближении дает частоту колебаний, определенную уравнением (2.9). Эта частота равна $\omega_1 = 1,776$ для случая, когда мода возбуждается на тяжелых атомах с массой m_1 , а когда колеблются легкие атомы с массой m_2 , то частота колебаний составляет $\omega_2 = 3,077$. Соотношение этих

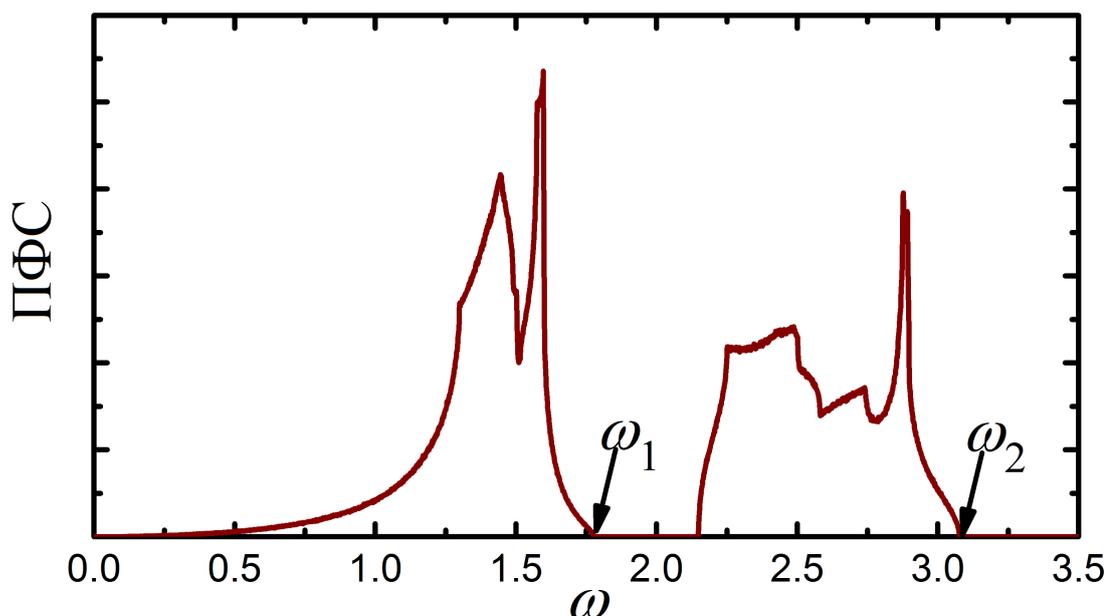


Рисунок 3.2 — Плотность фононных состояний рассматриваемого двухкомпонентного кристалла. В фононном спектре имеется щель с нижней границей на частоте $\omega_1 = 1,776$ и верхней границей на частоте $\omega_3 = 2,150$. Максимальная частота фононов равна $\omega_2 = 3,077$, см. уравнение (2.9).

частот подчиняется уравнению (2.8). Верхняя граница щели фононного спектра располагается на частоте $\omega_3 = 2,150$.

3.2.2 Плотность фононных состояний

Решив задачу на собственные значения для линеаризованных уравнений движения для рассматриваемой решетки, можно найти для каждой точки первой зоны Бриллюэна шесть частот, соответствующих различным ветвям дисперсионных кривых. Частоты, рассчитанные для 10^5 случайно выбранных точек первой зоны Бриллюэна, объединены в гистограмму плотности фононных состояний, показанную на рисунке 3.2. Этот результат был представлен ранее на рисунке 2.13(в), и здесь он воспроизводится для удобства читателя. Разница между массами m_1 и m_2 , рассматриваемыми в данной работе, достаточно велика, чтобы открылась щель в фононном спектре. Частота ω_1 является ниж-

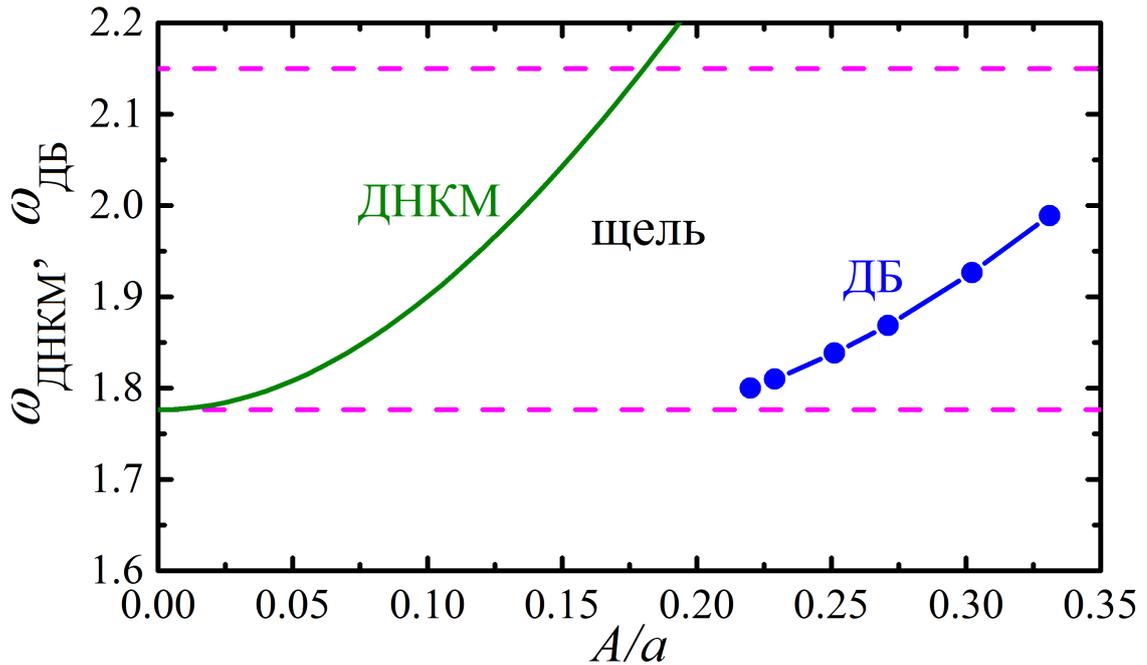


Рисунок 3.3 — Частотная характеристика ДНКМ, показанного на рисунке 3.1(б) (зеленая сплошная линия), и частотная характеристика стационарного ДБ (синие точки и линия). Амплитуда A нормирована на параметр решетки a . Горизонтальными пунктирными линиями показаны края щели в фоновом спектре.

ним краем щели, а частота ω_2 - верхним краем фоновом спектра, см. уравнение (2.9).

Амплитудно-частотная характеристика ДНКМ G1a, которая изображена на рисунке 3.1(б), представлена зеленой сплошной линией на рисунке 3.3. Частота ДНКМ ответвляется от нижнего края щели в фоновом спектре и увеличивается с ростом амплитуды.

3.2.3 Функции локализации для стационарных и движущихся дискретных бризеров

Дискретные бризеры в двухкомпонентном кристалле будут получены здесь с помощью подхода, примененного ранее к моноатомным кристаллам [191; 203]. Стационарный ДБ получается путем применения не зависящей от времени

функции локализации

$$u_{xyz}^0 = \frac{(-1)^n A}{\cosh[\gamma(x - x_0)] \cosh(\delta y) \cosh(\delta z)}, \quad (3.1)$$

где u_{xyz}^0 – начальное смещение атома вдоль оси x , принадлежащего узлу решетки с координатами x, y, z ; A – амплитуда делокализованной нелинейной колебательной моды, показанной на рисунке 3.1(б); γ и δ – параметры локализации вдоль направления x и направлений y и z , соответственно. Целочисленный показатель $n = x/a$ нумерует атомы одного ряда, в котором локализован ДБ. Параметр x_0 смещает центр функции локализации вдоль направления x , и для $x_0 = 0$ она центрирована на атоме в начале координат, а для $x_0 = a/2$ – между двумя ближайшими атомами с одинаковой массой. В первом случае мы имеем ДБ Сиверса-Такено [3], а во втором случае – межсайтовый ДБ Пейджа [4]. При использовании уравнения (3.1), только тяжелым атомам с массой m_1 задаются начальные смещения. Кроме того, все атомы в расчетной ячейке имеют нулевые начальные скорости.

Для выбранной амплитуды ДБ A параметры локализации γ и δ находятся методом проб и ошибок так, чтобы минимизировать излучение энергии. При больших A ДБ становится более локализованным, и параметры локализации увеличиваются. После того как γ и δ найдены, численно определяется частота ДБ $\omega_{\text{ДБ}}$.

Для возбуждения движущихся ДБ используется следующая функция локализации, зависящая от времени

$$u_{xyz}(t) = \frac{(-1)^n A \cos[\omega_{\text{ДБ}} t + \theta(x - x_0)]}{\cosh[\gamma(x - x_0)] \cosh(\delta y) \cosh(\delta z)}, \quad (3.2)$$

которая также применяется только к тяжелым атомам. В этом анзаце $\omega_{\text{ДБ}}$ – это частота ДБ, найденная для стационарного ДБ амплитуды A . Параметры локализации γ и δ также берутся для стационарного ДБ. Сдвиг фазы θ заставляет ДБ двигаться; для $\theta = 0$ ДБ неподвижен (стационарен).

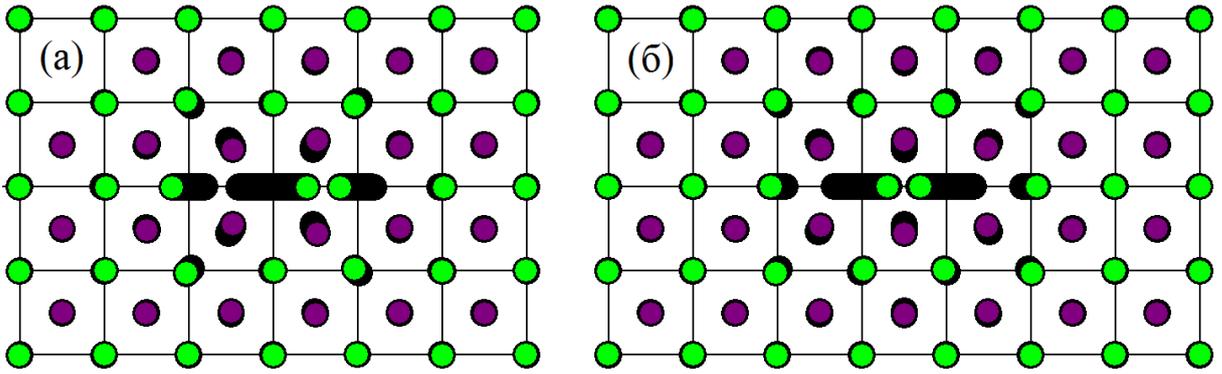


Рисунок 3.4 — Движения атомов в ДБ, расположенных (а) на тяжелом атоме и (б) между двумя тяжелыми атомами. Смещения атомов увеличены для наглядности в два раза.

3.3 Стационарные, осциллирующие и движущиеся щелевые дискретные бризеры

Примеры стационарных щелевых ДБ, центрированных (а) на тяжелом атоме и (б) между двумя тяжелыми атомами, показаны на рисунке 3.4. Они были возбуждены с помощью уравнения (3.1) с параметрами $A = 0,38$, $\gamma = 1,4$, $\delta = 2,2$, и (а) $x_0 = 0$, (б) $x_0 = a/2$. Смещения атомов увеличены в два раза, чтобы лучше видеть картину колебаний. Обратим внимание, что атомы тяжелой подрешетки движутся с гораздо большими амплитудами, чем легкие атомы.

Могут быть получены ДБ с различными амплитудами. Частота ДБ с разными амплитудами была найдена численно и представлена на рисунке 3.3 синими точками и линией. Частота ДБ находится в щели фононного спектра и увеличивается с ростом амплитуды. Также видно, что ДБ с амплитудой $A < 0,2a$ не существует, так как частота малоамплитудных ДБ входит в акустическую полосу фононного спектра.

На рисунке 3.5(а) показано движение атомов в центре стационарного ДБ, показанного на рисунке 3.4(а). Черной кривой показано x -смещение центрального атома ДБ как функция времени, а смещения двух соседних атомов показаны синей и красной кривыми (они равны, поэтому кривые накладываются друг на друга). На панелях (б) - (е) рисунка 3.5 центр функции локализации смещен из положения высокой симметрии $x_0 = 0$ на величину, указанную в подрисуноч-

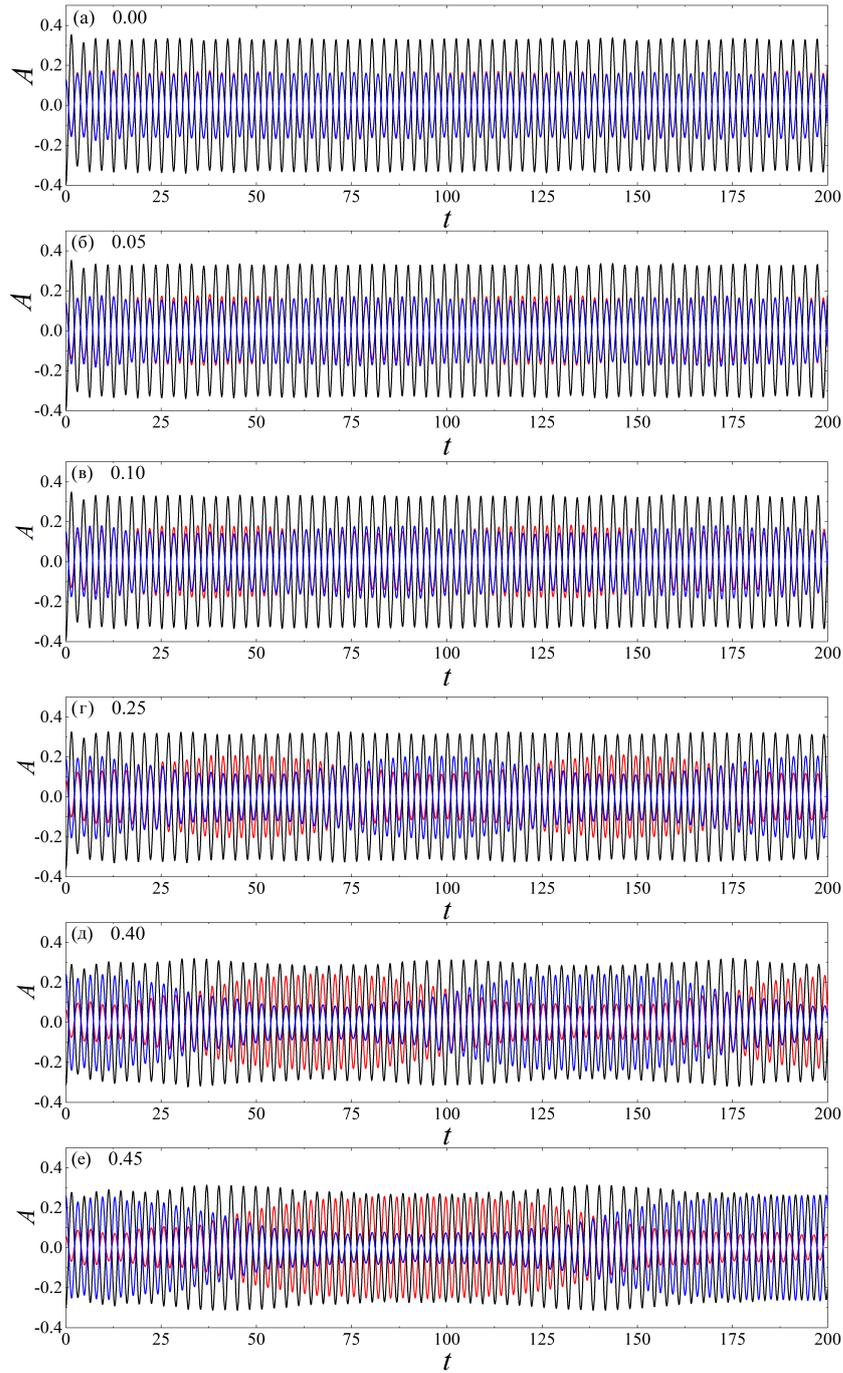


Рисунок 3.5 — (а) Стационарный ДБ расположенный на атоме и (б-е) ДБ, осциллирующие вокруг этой конфигурации. Показаны временные зависимости смещений u_n вдоль оси x для трех центральных атомов ДБ. Параметры уравнения (3.1), используемого для возбуждения ДБ, следующие: $A = 0,38$, $\beta = 1,4$, $\gamma = 2,2$, и (а) $x_0 = 0$, (б) $x_0 = 0,05a$, (в) $x_0 = 0,1a$, (г) $x_0 = 0,25a$, (д) $x_0 = 0,4a$ и (е) $x_0 = 0,45a$. На (а) представлен результат для ДБ, показанного на рисунке 3.4(а).

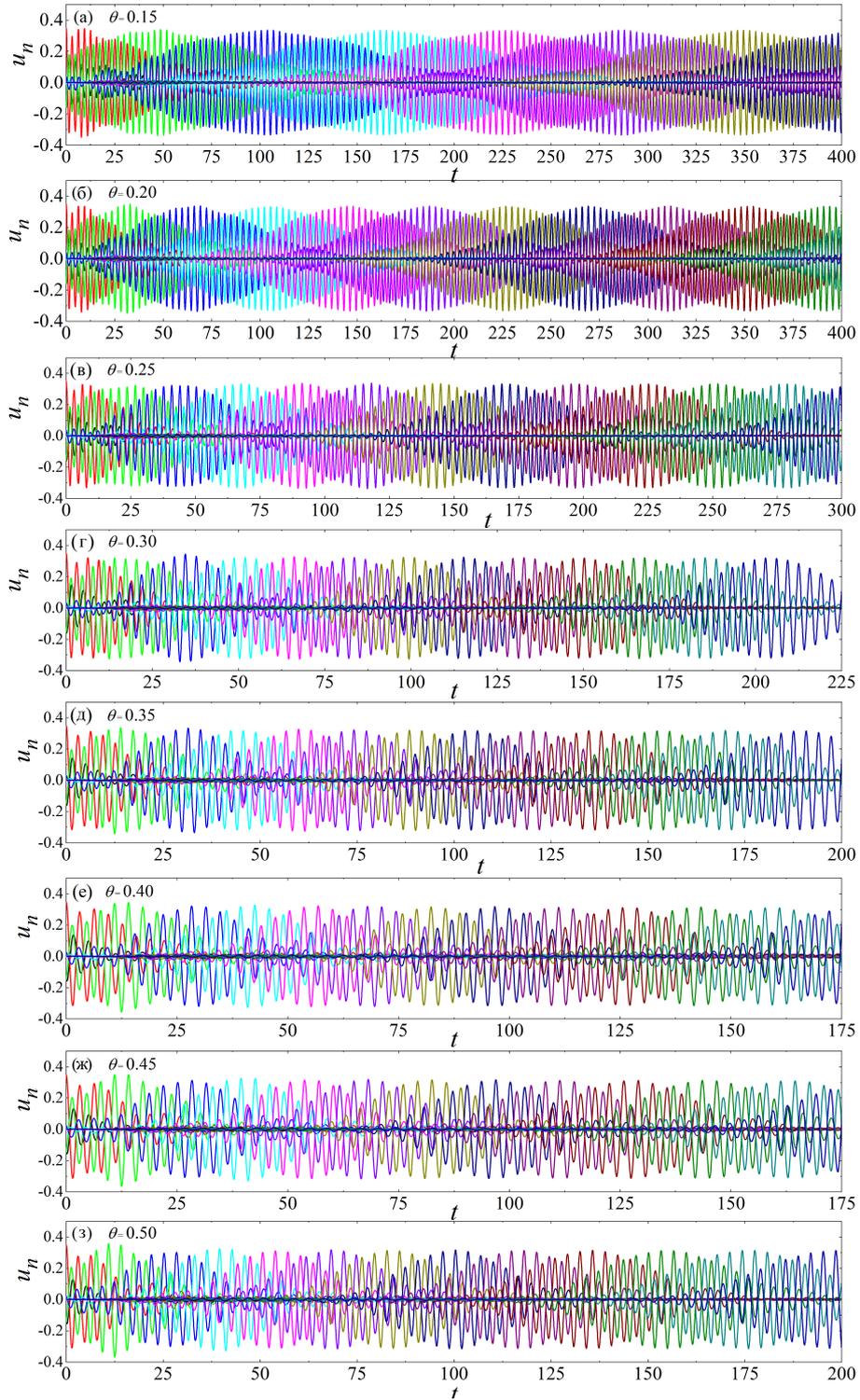


Рисунок 3.6 — Движущиеся ДБ, представленные временными зависимостями смещений u_n вдоль оси x для атомов в атомном ряду, вдоль которого движется ДБ. Параметры уравнения (3.1), используемого для возбуждения ДБ, следующие: $A = 0,38$, $\beta = 1,40$, $\gamma = 2,20$, $x_0 = 0,5a$, и (а) $\theta = 0,15$, (б) $\theta = 0,20$, (в) $\theta = 0,25$, (г) $\theta = 0,30$, (д) $\theta = 0,35$, (е) $\theta = 0,40$, (ж) $\theta = 0,45$ и (з) $\theta = 0,50$.

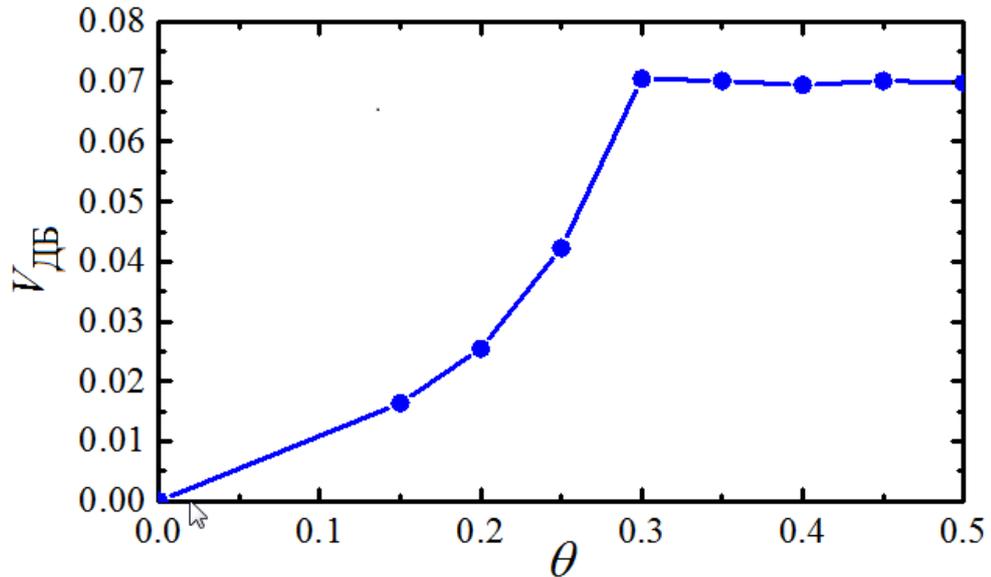


Рисунок 3.7 — Скорость ДБ как функция параметра θ . Остальные параметры уравнения (3.2), используемые для возбуждения ДБ, следующие: $A = 0,38$, $\beta = 1,4$, $\gamma = 2,2$, и $x_0 = 0,5a$.

ной подписи. В этих случаях ДБ осциллируют вблизи высокосимметричного положения, причем, период этих колебаний растет с ростом x_0 . Например, на (г) период колебаний составляет около 100 единиц времени, а на (е) - около 190 единиц времени. Из этого можно сделать вывод, что ДБ, центрированный на атоме устойчив, а межсайтовый ДБ неустойчив. Как видно из рисунка 3.5(а), уравнение (3.1) дает очень хорошие начальные условия для стационарных ДБ, поскольку они достигают стационарного колебательного режима всего через несколько периодов колебаний.

Примеры движущихся ДБ, полученных с помощью уравнения (3.2), представлены на рисунке 3.6, где смещения атомов в атомном ряду, где движется ДБ, отображены как функции времени. Параметры анзаца (3.2) следующие: $A = 0,38$, $\omega = 1,99$, $\beta = 1,4$, $\gamma = 2,2$, $x_0 = 0,5a$, а значения сдвига фазы θ даны для каждой панели рисунка в подрисуночной подписи. Атомы в ряду, по которому движется ДБ, поочередно раскачиваются, амплитуда их колебаний достигает максимума, и затем падает практически до нуля, когда ДБ проходит далее по цепочке. Видно, что уравнение (3.2) является лишь приближённым решением для движущегося ДБ, поскольку для формирования ДБ, движущегося с чётко определённой скоростью, требуется несколько десятков периодов коле-

баний. Также видно, что скорость ДБ растет с увеличением параметра сдвига фазы θ .

Скорость ДБ как функция сдвига фазы θ представлена на рисунке 3.7. Скорость ДБ увеличивается с θ и достигает насыщения при значении 0,07. Такая зависимость скорости ДБ от параметра θ связана с тем, что при больших θ должны учитываться поправки на частоту и параметры локализации ДБ, в то время как в анзаце (3.2) используются значения этих величин для стационарного ДБ. Из рисунка 3.6(з) видно, что когда скорость ДБ максимальна, он проходит расстояние равное параметру решетки a примерно за 10-12 периодов колебаний.

3.4 Выводы по главе 3

Впервые показано, что в структуре CsCl с межатомными взаимодействиями, описываемыми потенциалом β -ФПУЦ, могут существовать подвижные щелевые ДБ с ангармонизмом жесткого типа. Атомные колебания для стационарных ДБ локализованных на тяжелом атоме и посередине между двумя тяжелыми атомами показаны на рисунке 3.4(а) и (б), соответственно. ДБ, локализованный на атоме устойчив, а междоузельный ДБ неустойчив. ДБ, помещенный между этими двумя высокосимметричными конфигурациями, осциллирует относительно устойчивого положения, см. рисунок 3.5. Амплитудно-частотная характеристика стационарного ДБ показана на рисунке 3.3, откуда видно, что ДБ с амплитудой $A < 0,2$ невозможны, так как частота ДБ малой амплитуды входит в акустическую полосу фононного спектра. ДБ может распространяться вдоль атомного ряда тяжелых атомов, как показано на рисунке 3.6. Скорость движения ДБ контролируется параметром анзаца (3.2) θ , как видно из рисунка 3.7. Максимальная скорость ДБ, полученная в расчетах, оказалась равной 0,07, при этом ДБ проходит расстояние a за 10-12 периодов колебаний.

Полученные щелевые ДБ следует сравнить с щелевыми ДБ в кристалле NaI [192] и интерметаллидном соединении Pt₃Al [193; 194]. Основное отличие заключается в том, что из-за жесткого ангармонизма потенциала β -ФПУЦ, рассматриваемого в данной главе, ДБ в структуре CsCl также проявляет жесткий

ангармонизм, в то время как ДБ в NaI и Pt₃Al показывают мягкий ангармонизм. Следует отметить, что упоминаний о движущихся щелевых ДБ в кристаллах нами не обнаружено за исключением блуждающего движения ДБ в кристалле со структурой NaCl [204].

Исследование движущихся ДБ в кристаллах типа CsCl может быть продолжено путем рассмотрения более сложных и точных межатомных потенциалов или *ab initio* моделирования. В этом семействе есть много кристаллов с достаточно большой разницей в атомных массах компонент, в которых в принципе могут существовать щелевые ДБ, поскольку фононный спектр имеет запрещенную зону. Например, для CsCl отношение масс составляет 3,75 [89; 196], а для CuBe - 7,05 [86].

Глава 4. Нелинейная динамика кристаллов CsCl, LiPb и NiTi

В данной главе методом молекулярной динамики с использованием пакета программ LAMMPS рассчитаны амплитудно-частотные характеристики ДНКМ в кристаллах CsCl, LiPb и NiTi. Даны примеры щелевых ДБ в кристалле LiPb, полученных путем задания начальных смещений тяжелым атомам одного плотноупакованного ряда.

4.1 Детали молекулярно-динамического моделирования

Для моделирования применяется метод молекулярной динамики с использованием пакета прикладных программ Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS) [205], который включает библиотеку межатомных потенциалов для различных веществ и соединений. Для кристалла CsCl использовался потенциал, разработанный в статье [206], для LiPb потенциал, описанный в [207], и для NiTi потенциал, представленный в [208]. Для визуализации результатов моделирования использовалось программное обеспечение Open Visualization Tool (OVITO) [209]. Вычислительная ячейка представляет собой структуру B2, представленную на рисунке 2.1(а). Используются периодические граничные условия и термодинамический потенциал NVE. Моделирование ДНКМ осуществляется в расчетной ячейке из $2 \times 2 \times 2$ примитивных трансляционных ячеек размера $2a \times 2a \times 2a$, где a – параметр решетки. Такая ячейка содержит по 8 атомов каждой из компонент. ДБ изучаются в расчетной ячейке из $20 \times 20 \times 20$ примитивных трансляционных ячеек размера $20a \times 20a \times 20a$, с общим количеством атомов 16000. Задание начальных условий обсуждается ниже. Уравнения движения атомов интегрируются численно с использованием метода Верле четвертого порядка точности при шаге интегрирования 0,5 фс. При таком шаге по времени достигалась высокая точность расчетов, поскольку дальнейшее уменьшение шага не влияло на результат.

4.2 Амплитудно-частотные характеристики ДНКМ в кристалле CsCl

Рассмотрим зависимости частот от амплитуды для всех изученных ДНКМ в ионном кристалле CsCl с параметром решетки $a = 3,984 \text{ \AA}$. Результаты молекулярно-динамических расчетов представлены на рисунке 4.1. Атом хлора имеет массу $m_1 = 35,45$ а.е.м., в то время как масса атома цезия равна $m_2 = 132,91$ а.е.м. Существенная разница в массах составляющих атомов является фундаментальным фактором, определяющим вид фононного спектра данного кристалла, приводя к формированию запрещенной зоны. Распространение фононов с частотами, лежащими в запрещенной зоне, невозможно, зато появляется возможность существования щелевых ДБ.

Горизонтальными розовыми пунктирными линиями на рисунке 4.1 обозначены границы запрещенной зоны фононного спектра, которая лежит в диапазоне от $\Omega = 6,51$ ТГц до $\Omega = 8,88$ ТГц. Черной штрих-пунктирной линией на (а) показана верхняя граница спектра на частоте $\Omega = 11,53$ ТГц. Как свидетельствуют полученные результаты, все пять групп ДНКМ в кристалле CsCl имеют жесткий тип нелинейности, и с ростом амплитуды частоты всех мод увеличиваются. Жесткий ангармонизм является ключевым фактором, необходимым для формирования ДБ с частотами выше фононного спектра либо в запрещенной зоне.

ДНКМ группы G2 при малых амплитудах имеют одну частоту колебаний, это объясняется тем, что у данных мод обе моноатомные подрешетки колеблются в противофазе друг относительно друга. Частоты ДНКМ группы G2 при не слишком больших амплитудах лежат в оптической части фононного спектра, но при значительных амплитудах выходят выше спектра. Для случая группы ДНКМ G5 для Cl, см. панель (а), частоты при увеличении амплитуды ответвляются от верхней границы запрещенной зоны и растут в оптической полосе фононного спектра. ДНКМ группы G7 при возбуждении колебаний на легких атомах Cl, см. черные кривые на панели (а), имеют частоты в оптической полосе спектра, но при больших амплитудах колебаний частоты некоторых из них оказываются выше фононного спектра. ДНКМ групп G5 и G7 для Cs, см. панель (б), лежат в акустической полосе спектра. При больших амплитудах ко-

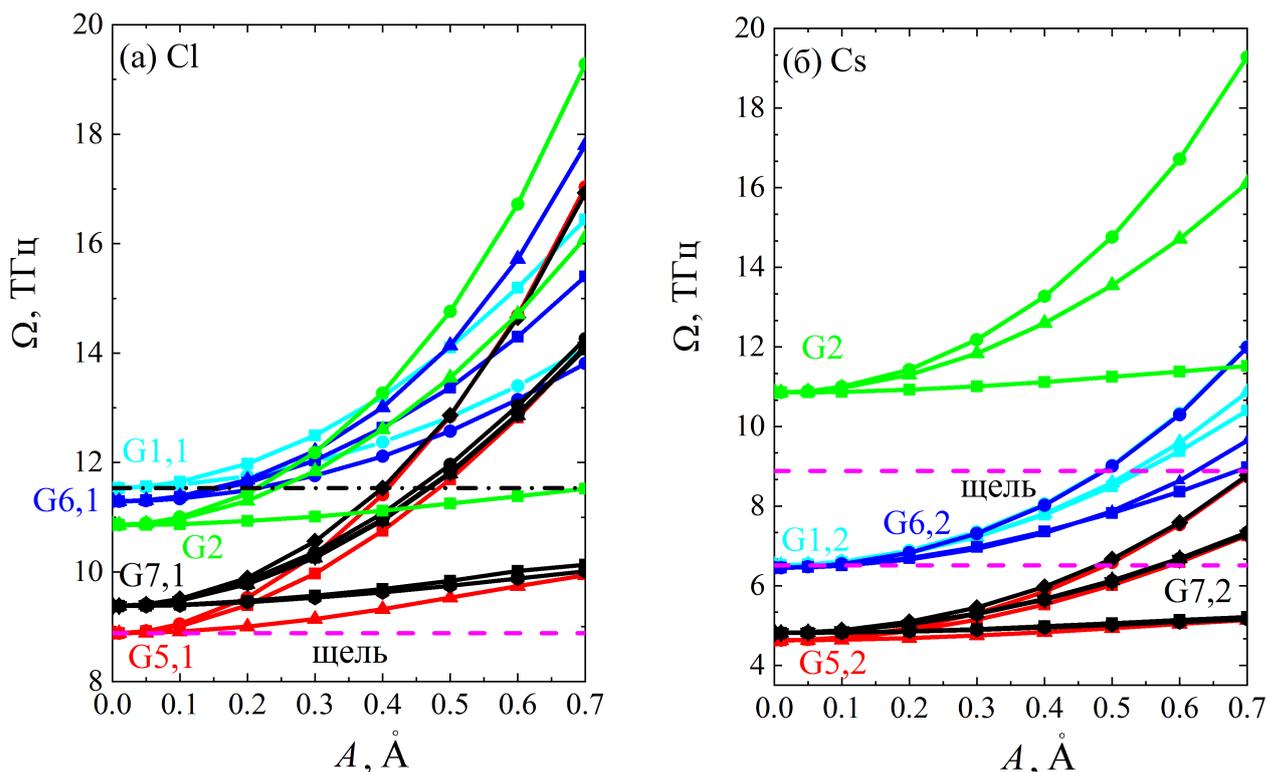


Рисунок 4.1 — Амплитудно-частотные характеристики ДНКМ в кристалле CsCl. На (а) ДНКМ возбуждены на легких атомах Cl, а на (б) - на тяжелых атомах Cs. По этой причине, для всех мод, кроме ДНКМ группы G2, частоты колебаний на (б) ниже, чем на (а). ДНКМ группы G2 представляют собой колебания обеих моноатомных подрешеток в противофазе, поэтому они характеризуются одной частотой колебаний. Розовыми горизонтальными пунктирными линиями обозначены границы запрещенной зоны фононного спектра (щели). Верхний край спектра отмечен горизонтальной черной штрих-пунктирной линией на (а).

частоты некоторых из них входят в щель фононного спектра. ДНКМ группы G6, возбужденные на атомах хлора, имеют частоты несколько ниже, чем ДНКМ группы G1, и при амплитудах менее 0,17 Å лежат в оптической части спектра, а при больших амплитудах выше спектра. ДНКМ группы G6 на атомах Cs также имеют частоты несколько ниже соответствующих частот ДНКМ группы G1 и при небольших амплитудах лежат в акустической области спектра, а с ростом амплитуды входят в оптическую полосу спектра и далее даже выше спектра.

Таким образом, только ДНКМ группы G1 являются основными кандидатами для получения ДБ с частотами выше спектра (при возбуждении их на

Таблица 2 — Отношения частот ДНКМ, возбужденных на тяжелых и легких атомах в кристалле CsCl и рассчитанные из формулы (2.8), справедливой для кристалла β -ФПУЦ с межатомными взаимодействиями не зависящими от сорта атомов.

Группа	ω_2/ω_1 для CsCl	ω_2/ω_1 по формуле (2.8)	Разница в %
G1	0,565	0,516	8,7
G5	0,521	0,516	0,96
G6	0,571	0,516	9,6
G7	0,513	0,516	-0,6

легких атомах хлора) или щелевых ДБ (при возбуждении их на тяжелых атомах цезия). Учитывая, что частоты колебаний ДНКМ группы G6 лишь немного меньше частот ДНКМ группы G1, можно сделать предположение о возможности существования щелевых ДБ, основанных на ДНКМ группы G6, но только в случае, если амплитуды ДБ не слишком малы, чтобы их частота вышла за пределы фононного спектра.

Вспомним, что для кристалла β -ФПУЦ, рассмотренного в главе 2, для малых амплитуд колебаний выполнялось соотношение (2.8) для частот ДНКМ, возбужденных на легкой и тяжелой подрешетках, поскольку, для упрощения модели, жесткости межатомных связей не зависели от типа взаимодействующих атомов. Для кристаллов, рассматриваемых в данной главе, атомы различных компонент взаимодействуют по-разному, и можно ожидать, что уравнение (2.8) не будет выполняться. Отклонение соотношения частот ω_1 и ω_2 от данного соотношения будет характеризовать соотношение жесткостей связей между атомами различных сортов, поэтому важно обсудить величину этого отклонения для различных ДНКМ. В таблице 2 приведены отношения ω_2/ω_1 для кристалла CsCl и для сравнения даны эти отношения, рассчитанные из формулы (2.8). Видим, что для кристалла CsCl жесткости связей между различными компонентами отличаются незначительно и формула (2.8), выведенная в предположении одинаковых жесткостей всех связей, дает хорошую оценку отношения частот.

4.3 Амплитудно-частотные характеристики ДНКМ в кристалле LiPb

Рассмотрим полученные амплитудно-частотные характеристики для кристалла LiPb с металлической связью, см. рисунок 4.2. Масса атома лития $m_1 = 6,941$ а.е.м., а масса атома свинца $m_2 = 207,2$ а.е.м. Параметр решетки $a = 3,568$ Å. Как можно заметить, данный кристалл имеет весьма большую разницу масс компонент, что приводит к сильному разделению частот колебаний тяжелых и легких атомов и, как следствие, образованию широкой запрещенной зоны в фононном спектре. На рисунке 4.2 розовыми пунктирными горизонтальными линиями отмечены границы запрещенной зоны фононного спектра: (а) верхняя граница, находящаяся на частоте $\Omega = 6,26$ ТГц, (б) нижняя граница, находящаяся на частоте $\Omega = 1,503$ ТГц. Черной штрих-пунктирной линией на панели (а) показана верхняя граница фононного спектра на частоте $\Omega = 7,61$ ТГц.

На панели (а), при возбуждении легких атомов Li, для ДНКМ групп G1 и G6 наблюдается жесткий тип ангармоничности, в то время как для некоторых ДНКМ групп G2, G5 и G7 наблюдается жесткий тип ангармоничности, но присутствует также и ДНКМ с мягким типом ангармоничности. Частоты ДНКМ группы G1 при малых амплитудах лежат на верхнем краю фононного спектра, но при больших амплитудах частоты выходят за пределы фононного спектра. Для случая ДНКМ группы G6 частоты колебаний при малых амплитудах лежат в оптической полосе спектра, но при увеличении амплитуды частоты оказываются выше фононного спектра. Частоты колебаний ДНКМ групп G2 и G7 лежат в оптической полосе фононного спектра. Для двух ДНКМ группы G5 частоты колебаний ответвляются от верхнего края запрещенной зоны и растут в оптической полосе фононного спектра. Третья ДНКМ этой группы при больших амплитудах ответвляется вниз от границы запрещенной зоны и входит в щель.

На панели (б), при возбуждении ДНКМ на тяжелых атомах Pb, все ДНКМ группы G1 имеют жесткий тип ангармоничности. Для случая ДНКМ группы G1 при малых значениях амплитуды частоты колебаний находятся на нижней границе щели фононного спектра, а при увеличении амплитуды частоты ко-

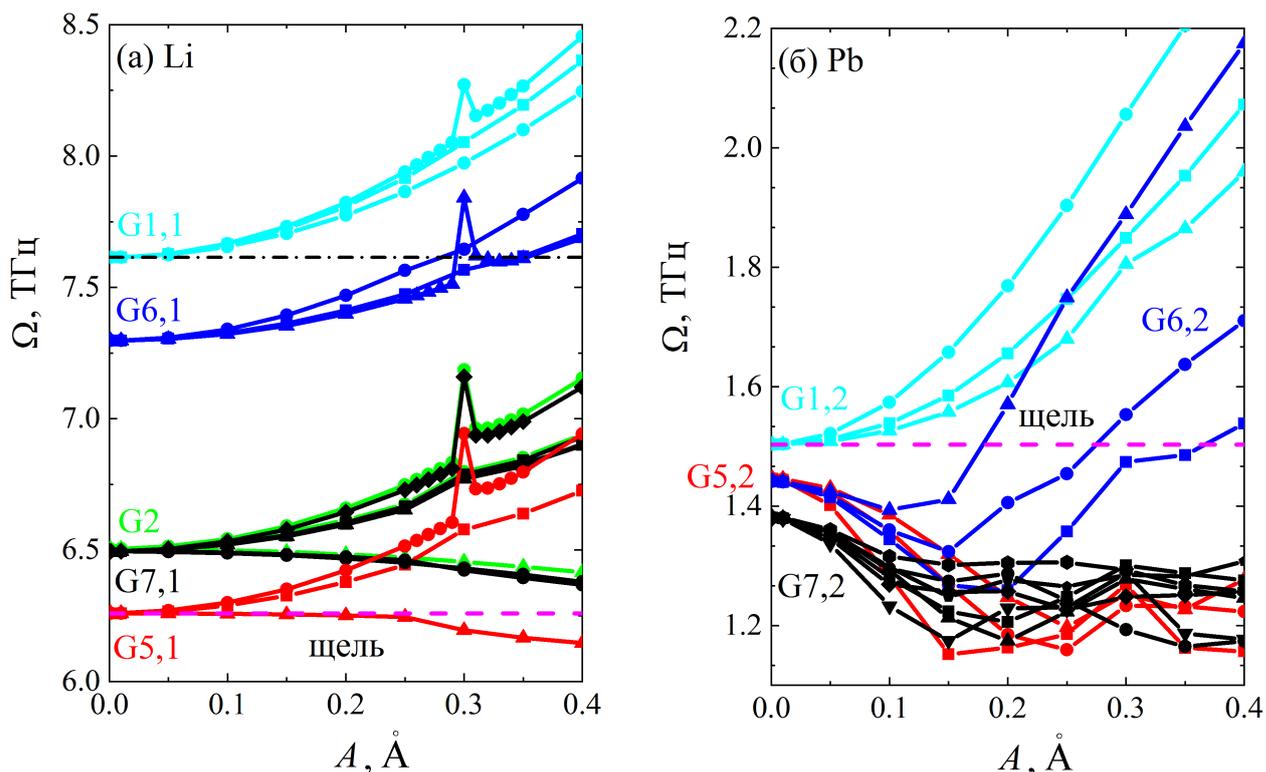


Рисунок 4.2 — Амплитудно-частотные характеристики ДНКМ в кристалле LiPb. На (а) ДНКМ возбуждены на легких атомах Li, на (б) на тяжелых атомах Pb. Розовыми горизонтальными пунктирными линиями обозначены границы запрещенной зоны фононного спектра (щели). Верхний край спектра отмечен горизонтальной черной штрих-пунктирной линией на (а).

лебаний входят в щель. Для ДНКМ группы G5 и G7 преобладает мягкий тип ангармоничности. ДНКМ группы G6 имеют мягкий тип ангармоничности примерно до значения амплитуды $A = 0,15 \text{ \AA}$, но при больших амплитудах характер ангармонизма ДНКМ меняется на жесткий, и на больших амплитудах колебаний частоты мод оказываются в щели фононного спектра. Частоты колебаний ДНКМ группы G6 лежат в акустической полосе фононного спектра, но при увеличении амплитуды частоты оказываются в запрещенной зоне. ДНКМ групп G5 и G7 лежат в акустической части фононного спектра.

Итак, потенциальными кандидатами для возбуждения ДБ являются ДНКМ группы G1 с частотами выше спектра (при возбуждении их на легких атомах лития) или щелевых ДБ (при возбуждении на тяжелых атомах свинца). ДНКМ группы G5 тоже могут быть потенциальными кандидатами для возбуждения щелевых ДБ, но только если амплитуда ДБ достаточна для нахождения частоты в запрещенной зоне.

Таблица 3 — Отношения частот ДНКМ, возбужденных на тяжелых и легких атомах в кристалле LiPb и рассчитанные из формулы (2.8), справедливой для кристалла β -ФПУЦ с межатомными взаимодействиями не зависящими от сорта атомов.

Группа	ω_2/ω_1 для LiPb	ω_2/ω_1 по формуле (2.8)	Разница в %
G1	0,197	0,183	7,1
G5	0,231	0,183	20,8
G6	0,198	0,183	7,6
G7	0,213	0,183	14,1

Как было сказано в разделе 4.2, где упоминалась глава 2 и изучение кристалла β -ФПУЦ в рамках упрощенной модели, где жесткости межатомных связей были одинаковы для всех атомов, и поэтому для частот ДНКМ на легкой и тяжелой подрешетках выполнялось соотношение (2.8). Однако, в этом разделе рассматривается кристалл LiPb, в котором атомы разного типа взаимодействуют по-разному. Поэтому ожидается, что соотношение (2.8) больше не будет справедливым. Отклонение частот ω_1 и ω_2 от этого соотношения будет отражать разницу в жесткостях связей между атомами разных сортов, следовательно, важно проанализировать величину этого отклонения для различных ДНКМ. В таблице 3 представлены отношения (2.8) для кристалла LiPb, а также для сравнения приведены значения, рассчитанные по формуле (2.8). Как видно из таблицы 3 для кристалла LiPb жесткости связей между атомами почти одинаковы. Поэтому формула (2.8), которая предполагает одинаковую жесткость всех связей, хорошо предсказывает отношение частот.

На панели (а) рисунка 4.2 при $A = 0,3 \text{ \AA}$ виден резкий скачок частот одновременно у ДНКМ разных групп. Такое поведение амплитудно-частотных характеристик ДНКМ не имеет физического обоснования. Есть несколько возможных объяснений почему так получилось. Во-первых, используемый межатомный потенциал может иметь особенность (например, излом или разрыв производной) при $A = 0,3 \text{ \AA}$, что может привести к численной неустойчивости. Во-вторых, при больших амплитудах колебаний ангармонические члены становятся настолько существенными, что стандартные вычислительные подходы теряют свою точность.

4.4 Амплитудно-частотные характеристики ДНКМ в кристалле NiTi

На рисунке 4.3 представлены АЧХ для кристалла NiTi. Масса атома никеля $m_1 = 58,693$ а.е.м., масса атома титана $m_2 = 47,867$ а.е.м., равновесный параметр решетки $a = 2,999$ Å. Кристалл NiTi, так же как и кристалл LiPb, имеет металлическую связь. В отличие от LiPb, который имеет весьма большую разницу в массах элементов, в NiTi эта разница незначительна. Это существенное отличие приводит к совершенно иной картине в динамике ДНКМ. Фононный спектр NiTi не имеет запрещенной полосы в фононном спектре, по сравнению с LiPb, где эта полоса весьма широка. Акустические и оптические ветви в спектре NiTi будут располагаться ближе друг к другу, и, скорее всего, будет наблюдаться их сильное перемешивание.

На панели (а), для подрешетки Ti, две ДНКМ группы G2 имеют жесткий тип ангармоничности, третья ДНКМ из этой группы имеет мягкий тип ангармоничности. Частота колебаний данной группы мод с увеличением амплитуды незначительно изменяется, оставаясь в пределах фононного спектра до значительных амплитуд колебаний и лишь при весьма больших амплитудах частоты двух ДНКМ с жестким типом нелинейности выходят за пределы фононного спектра. ДНКМ групп G5 и G7 имеют сложную зависимость частоты от амплитуды, при малых амплитудах они показывают незначительный рост частоты, а при больших также незначительное снижения. ДНКМ групп G1 и G6 имеют жесткий тип ангармоничности, с ростом амплитуды частоты колебаний этих групп возрастают.

На панели (б), для подрешетки Ni, оранжевой штрих-пунктирной линией показана верхняя граница фононного спектра на частоте $\Omega = 7,52$ ТГц. Одна ДНКМ группы G6 имеет жесткий тип ангармоничности. На малых амплитудах частоты колебаний лежат на верхнем краю фононного спектра и выходят за пределы спектра. Эта единственная ДНКМ в сплаве NiTi, которая может быть кандидатом для поиска ДБ. Две другие ДНКМ группы G6 имеют мягкий тип ангармоничности и ответвляются вниз от верхней границы фононного спектра. ДНКМ группы G1 имеет жесткий тип ангармоничности и лежит в фононном спектре. При весьма больших амплитудах частоты колебаний этих ДНКМ ока-

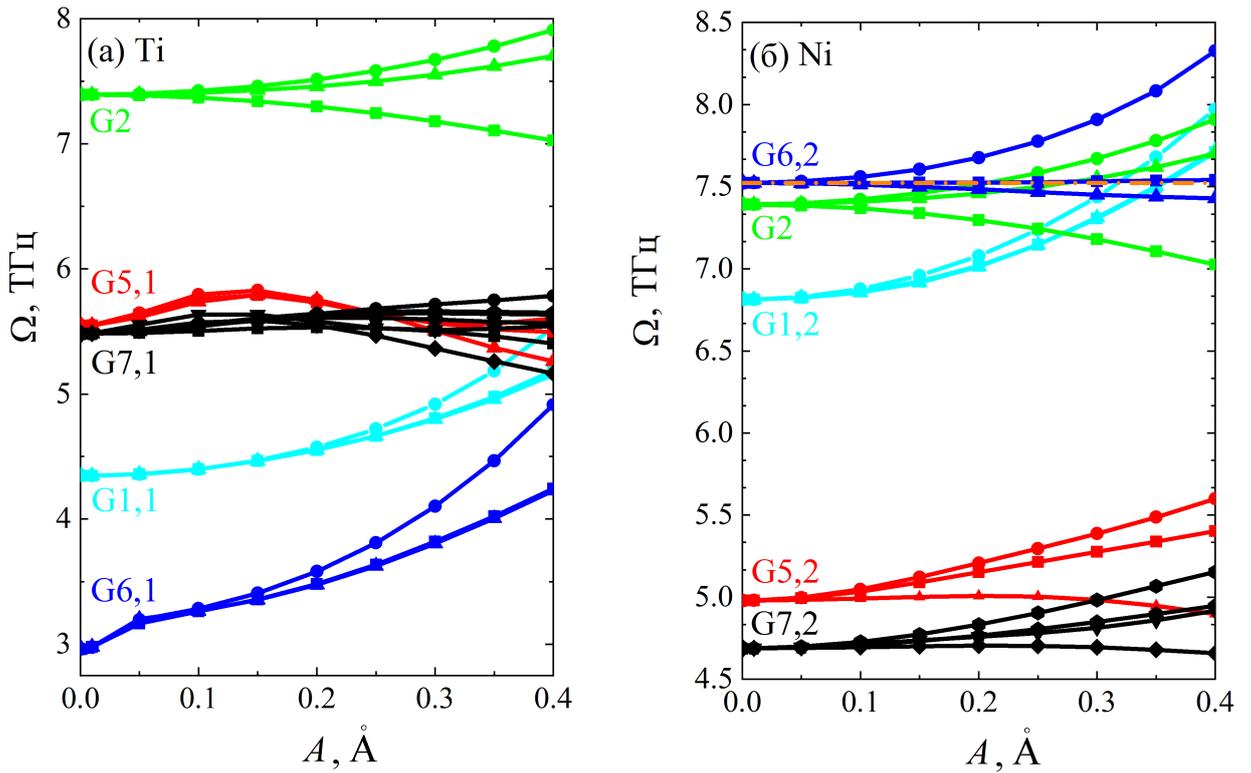


Рисунок 4.3 — Амплитудно-частотные характеристики ДНКМ в кристалле NiTi. На (а) ДНКМ возбуждены на легких атомах Ti, на (б) на тяжелых атомах Ni. Отличие атомных масс компонент невелико, поэтому щель в фонном спектре отсутствует. Оранжевой штрих-пунктирной линией на (б) показана граница фонного спектра на частоте $\Omega = 7,52$ ТГц.

зываются выше фонного спектра. Две ДНКМ группы G5 имеют жесткий тип ангармоничности, третья ДНКМ этой группы имеет мягкий тип ангармоничности. Частоты ДНКМ данной группы лежат в спектре. ДНКМ группы G7, все кроме одной, имеют жесткий тип ангармоничности и их частоты лежат в спектре.

Как было замечено в разделах 4.2 и 4.3, где упоминалась модель с одинаковым типом связей между различными компонентами, частоты ДНКМ в ней удовлетворяют соотношению (2.8). Однако в данной главе изучаются кристаллы с взаимодействиями, которые зависят от типа атомов, что предположительно, делает соотношение (2.8) недействительным. Количественная оценка этого расхождения для различных ДНКМ в кристалле NiTi дана в таблице 4. Из полученных результатов видно, что существенная разница в жесткости межатомных связей в NiTi делает невозможным использование упрощенной модели, и соотношение (2.8) не работает. Следовательно, расхождение между измеренными

Таблица 4 — Отношения частот ДНКМ, возбужденных на тяжелых и легких атомах в кристалле NiTi и рассчитанные из формулы (2.8), справедливой для кристалла β -ФПУЦ с межатомными взаимодействиями не зависящими от сорта атомов.

Группа	ω_2/ω_1 для NiTi	ω_2/ω_1 по формуле (2.8)	Разница в %
G1	1,567	0,903	42,4
G5	1,114	0,903	18,9
G6	0,394	0,903	-129,2
G7	1,169	0,903	22,8

частотами ω_1 и ω_2 и значениями, предсказанными по формуле (2.8), указывает на различия в жесткости межатомных связей между атомами разных типов.

4.5 Сравнительный анализ АЧХ для кристаллов CsCl, LiPb и NiTi

В данном разделе будут проанализированы АЧХ ДНКМ, полученные в разделах 4.2 - 4.4, для трех биатомных кристаллов, которые различаются соотношением атомных масс составляющих их элементов и характером химической связи.

В щелочно-галогидном кристалле CsCl наблюдается значительная разница в массах атомов хлора и цезия. Это различие приводит к образованию довольно широкой запрещенной зоны в фоновом спектре, в диапазоне частот от $\Omega = 6,51$ ТГц до $\Omega = 8,88$ ТГц. Данный кристалл демонстрирует очень сильную нелинейность жесткого типа: при увеличении амплитуды колебаний частоты всех групп ДНКМ возрастают. Наиболее перспективными для возбуждения ДБ являются ДНКМ группы G1. При возбуждении на легких атомах хлора они могут генерировать ДБ с жестким типом нелинейности с частотами выше фонового спектра, а при возбуждении на тяжелых атомах цезия – щелевые ДБ с жестким типом нелинейности. Отметим, что для CsCl упрощенная модель (2.8) хорошо описывает соотношение частот ДНКМ, возбужденных на легких и тяжелых атомах, что говорит о незначительном различии в жесткости связей между атомами хлора и цезия, см. табл. 2.

Кристалл LiPb имеет весьма значительное различие в массах между литием и свинцом, что приводит к образованию особенно широкой запрещенной зоны в диапазоне частот 1,503 – 6,26 ТГц. В отличие от CsCl, для различных ДНКМ наблюдается смешанный тип нелинейности: при возбуждении ДНКМ на легких атомах лития проявляется жесткий тип, тогда как возбуждение мод на тяжелых атомах свинца – мягкий тип на малых амплитудах и жесткий на больших. Несмотря на сложное поведение частот ДНКМ разных групп, в кристалле LiPb, моды группы G1 могут служить кандидатами для возбуждения ДБ с жестким типом нелинейности, как целевых, так и с частотами выше фонного спектра. В расчетах была зафиксирована аномалия – резкий скачок на АЧХ при амплитуде $A = 0,3 \text{ \AA}$, что может быть связано с некачественными межатомными потенциалами. Упрощенная модель, связывающая частоты ДНКМ, возбужденных на легких и тяжелых атомах, для LiPb остается приемлемой, и формула (2.8) достаточно хорошо предсказывает соотношение частот, как это видно из табл. 3.

Фундаментальное отличие кристалла NiTi от двух предыдущих заключается в минимальной разнице масс атомов никеля и титана. Это порождает совершенно новую физику: фонный спектр не имеет запрещенной зоны, а акустические и оптические ветви спектра оказываются тесно переплетенными. Для АЧХ ДНКМ в NiTi характерна смешанная нелинейность, проявляющаяся на обеих подрешетках. Существует единственная ДНКМ группы G6, возбужденная на никеле, с помощью которой могут быть возбуждены ДБ с частотами выше спектра. Ключевым моментом является неработоспособность для NiTi упрощенной модели, связывающей частоты ДНКМ, возбужденных на легких и тяжелых атомах, поскольку соотношение (2.8) нарушается из-за существенной разницы в жесткости межатомных связей, см. табл. 4.

Анализ выявил, что нелинейная динамика кристаллов определяется двумя основными параметрами: разницей в массах атомов и характером межатомных взаимодействий. В кристаллах CsCl и LiPb упрощенная модель, связывающая частоты ДНКМ, возбужденных на легких и тяжелых атомах, хорошо работает. Однако для интерметаллида NiTi учет различных жесткостей связи между различными компонентами становится критически важным для точного моделирования колебаний ДНКМ. В свете полученных данных можно констатировать, что модель кристалла с одинаковыми жесткостями связей меж-

ду различными компонентами, рассмотренная в главах 2 и 3, дает неплохие результаты для определенных кристаллов, но она должна применяться с осторожностью, поскольку для некоторых кристаллов (например, для NiTi), ошибка может быть существенной.

4.6 Дискретные бризеры в кристалле LiPb

Анализируя полученные амплитудно-частотные характеристики ДНКМ для кристалла LiPb, рисунок 4.2, можно выделить группы мод, которые могут быть использованы для возбуждения ДБ. Когда колебания совершают легкие атомы Li, рисунок 4.2(а), группа мод G1,1 имеет частоты выше фононного спектра. Видно еще, что для одной из ДНКМ группы G5,1 частота лежит ниже верхней границы щели. Для возбуждения ДБ данная мода, скорее всего, не подойдет, так как частота этой моды с ростом амплитуды лишь незначительно отходит от границы щели. Для колебаний атомов Pb, рисунок 4.2(б), возможно возбуждение щелевых ДБ на модах группы G1,2, поскольку частоты этих мод лежат в щели. Данная группа мод подходит для нахождения долгоживущих ДБ тем, что на частотах в щели не распространяются бегущие фононы и у ДБ нет механизма для возбуждения бегущих волн и рассеяния своей энергии. Кроме того, отметим, что и вторая и третья гармоники ДНКМ группы G1,2 имеют частоты в щели фононного спектра.

Для получения ДБ в кристалле LiPb были взяты ДНКМ группы G1, возбуждение которой на легких атомах Li дает частоты выше фононного спектра, а в случае, когда моды возбуждаются на тяжелых атомах Pb, частота их колебаний оказывается в щели спектра. Поскольку частота данной группы мод находится вне спектра, есть высокая вероятность того, что могут быть получены долгоживущие ДБ с частотой как выше спектра, так и в щели.

При возбуждении ДБ смещения атомов задавались опираясь на ДНКМ группы G1a; схематично смещение атомов показано на рисунке 4.4. Как видно из рисунка, начальные смещения задаются тяжелым атомам (показаны зеленым цветом), а легкие атомы находятся в равновесных решеточных положениях (показаны оранжевым цветом). Это справедливо для возбуждения щелевых ДБ, а

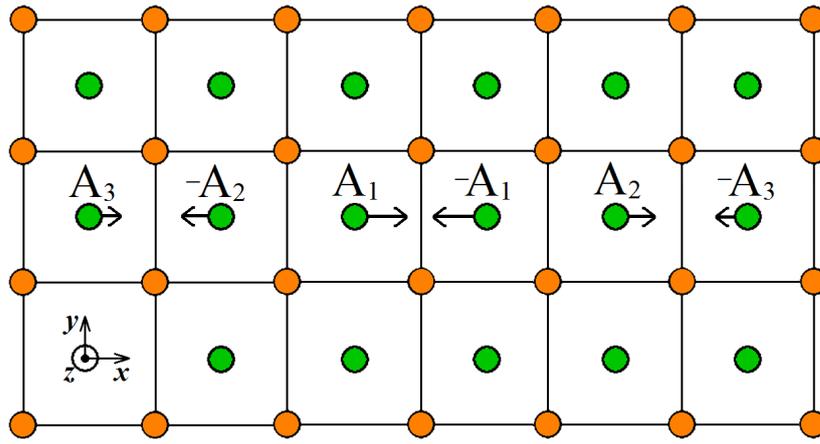


Рисунок 4.4 — Начальные смещения атомов для возбуждения ДБ на основе ДНКМ G1a, где колебания совершают тяжелые атомы (показаны зеленым цветом), в то время легкие атомы (показаны оранжевым цветом) находятся в состоянии покоя. Возбуждение атомов одного ряда происходит вдоль оси x , при этом амплитуда начальных смещений убывает с удалением от центра ДБ.

в случае возбуждения ДБ с частотой выше спектра, смещаются легкие атомы по той же схеме, а тяжелые атомы не получают начальных смещений. Во всех случаях, начальные скорости всех атомов равны нулю. Параметры A_1 , A_2 , и A_3 описывают отклонения атомов от положений равновесия, при этом стрелками показано в каком направлении оси x происходит отклонение. На рисунке 4.5 представлен ДБ возбужденный на легких атомах лития, а на рисунках 4.6 - 4.8 показаны ДБ возбужденные на тяжелых атомах свинца.

На рисунке 4.5 показан ДБ, полученный в подрешетке Li с параметрами $A_1 = 0,90 \text{ \AA}$, $A_2 = 0,70 \text{ \AA}$ и $A_3 = 0,50 \text{ \AA}$. Частота колебаний данного ДБ оказалась равной $\Omega = 8,57 \text{ ТГц}$. Можно заметить, что эта частота лежит выше верхнего края фононного спектра, см. рисунок 4.2(а). Полученный ДБ существует примерно 2 пс и далее затухает, см. рисунок 4.5, где показаны зависимости перемещений атомов, принадлежащих ДБ, от времени. ДБ имеет жесткий тип нелинейности, поскольку такой тип нелинейности имеет ДНКМ G1,1.

Далее ДБ возбуждались на подрешетке Pb, используя различные начальные смещения атомов. К примеру, ДБ, полученный с параметрами начальных смещений атомов $A_1 = 0,50 \text{ \AA}$, $A_2 = 0,38 \text{ \AA}$ и $A_3 = 0,15 \text{ \AA}$, показан на рисунке 4.6. Как видно из рисунка, полученный ДБ стабилен, не затухает на всем интервале моделирования. В процессе моделирования не наблюдается потерь

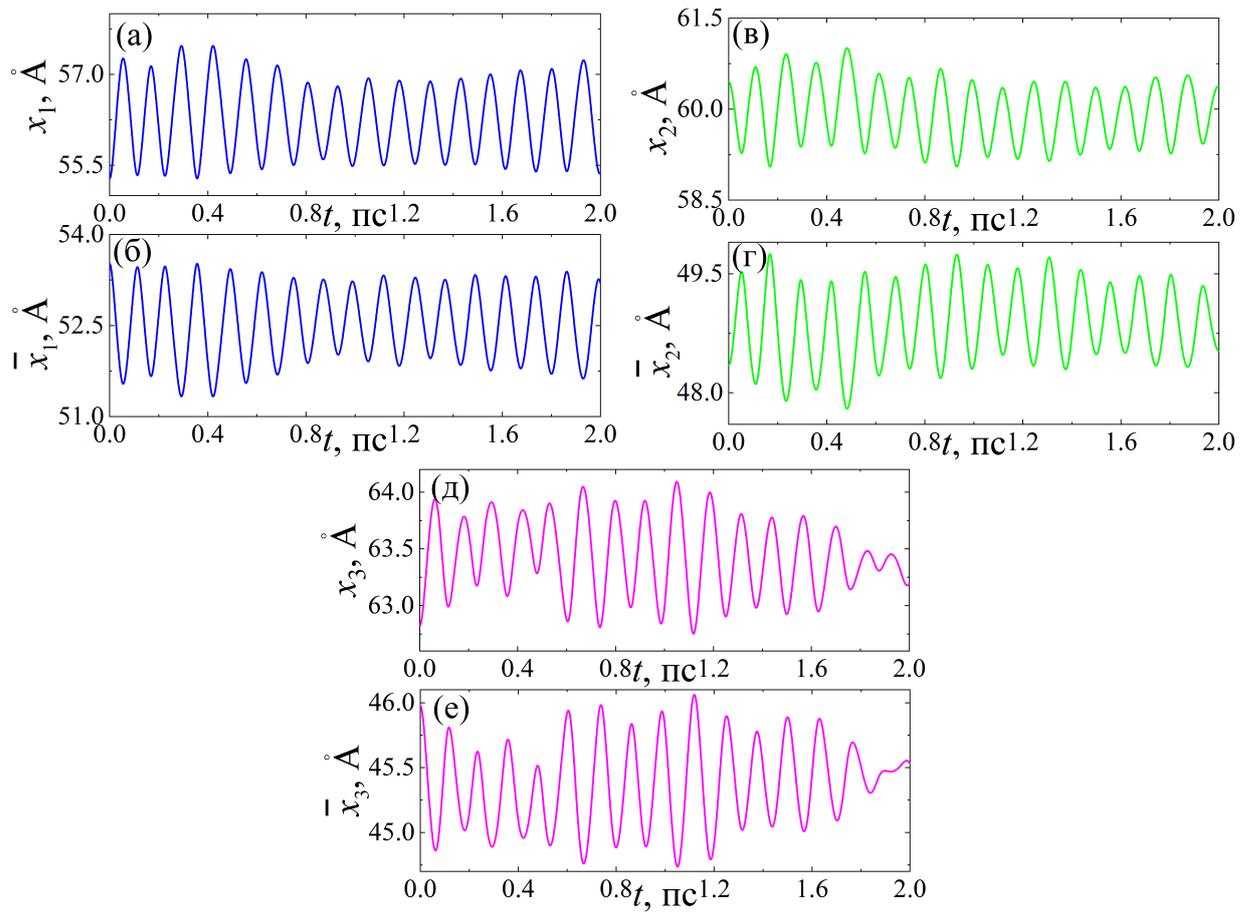


Рисунок 4.5 — Для кристалла LiPb был получен ДБ путем смещения шести атомов лития в атомном ряду вдоль оси x ; смещение атомов схематично показано на рисунке 4.4. Частота ДБ находится выше фононного спектра.

Параметры, используемые для возбуждения ДБ, следующие: (а,б) $A_1 = 0,90 \text{ \AA}$, (в,г) $A_2 = 0,70 \text{ \AA}$ и (д,е) $A_3 = 0,50 \text{ \AA}$. Частота колебаний ДБ равна $\Omega = 8,57 \text{ ТГц}$ (выше фононного спектра).

энергии ДБ. Энергия, изначально сосредоточенная на ДБ, практически не рассеивается в решетку, что свидетельствует о высокой стабильности ДБ.

На рисунке 4.7 показан ДБ, возбужденный с параметрами $A_1 = 0,55 \text{ \AA}$, $A_2 = 0,40 \text{ \AA}$ и $A_3 = 0,15 \text{ \AA}$. Можно отметить, что на всех графиках наблюдаются периодические колебания с постоянной амплитудой на всем интервале моделирования. Время жизни полученного ДБ велико и существенно превышает время моделирования (20 пс). Колебания в подрешетки Li, см. рисунок 4.5, и колебания в подрешетки Pb, см. рисунок 4.7, являются устойчивыми и синхронными. Это приводит к образованию ДБ, который охватывает обе подрешетки кристалла, но атомы свинца в данном щелевом ДБ колеблются со значительно больши-

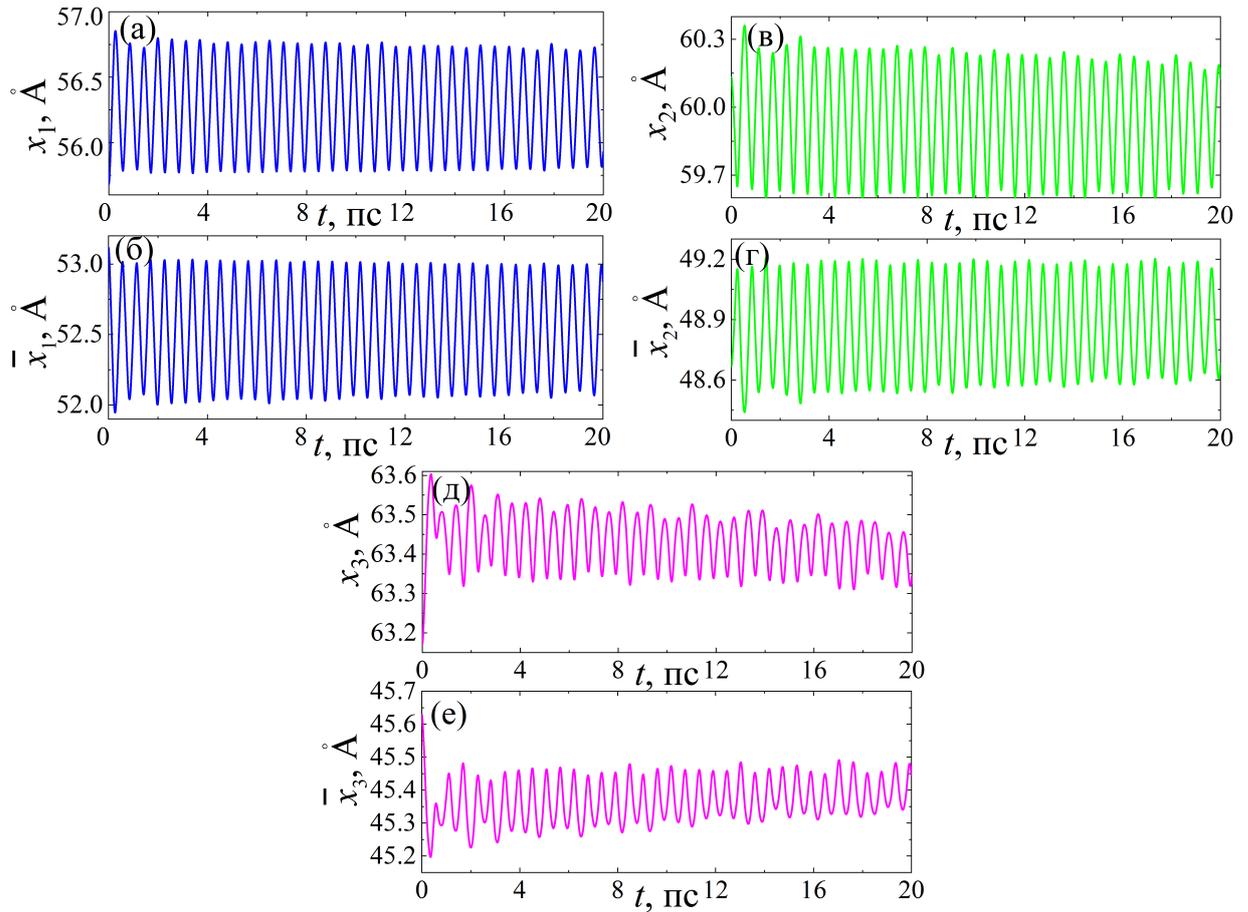


Рисунок 4.6 — Для кристалла LiPb был получен щелевой ДБ путем смещения шести атомов свинца в атомном ряду вдоль оси x . Смещение атомов схематично показано на рисунке 4.4. Параметры, используемые для возбуждения ДБ, следующие: (а,б) $A_1 = 0,50 \text{ \AA}$, (в,г) $A_2 = 0,38 \text{ \AA}$ и (д,е) $A_3 = 0,15 \text{ \AA}$. Частота колебаний ДБ равна $\Omega = 1,81 \text{ ТГц}$ (в щели фононного спектра).

ми амплитудами, чем атомы лития. Данный результат показывает, что выбранный набор начальных смещений атомов свинца, $A_1 = 0,55 \text{ \AA}$, $A_2 = 0,40 \text{ \AA}$ и $A_3 = 0,15 \text{ \AA}$, является оптимальным для возбуждения долгоживущего щелевого ДБ.

На рисунке 4.8 показан ДБ, возбужденный с параметрами $A_1 = 0,60 \text{ \AA}$, $A_2 = 0,50 \text{ \AA}$ и $A_3 = 0,20 \text{ \AA}$. Как видно на панелях (а,б) колебания стабильны, но наблюдается осцилляция амплитуды колебаний. Это происходит потому, что при выбранном параметре $A_1 = 0,60 \text{ \AA}$ в полученном ДБ наблюдаются более заметные колебания атомов легкой подрешетки, чем в предыдущем случае. Возбуждение атомов лития можно объяснить тем, что частота ДБ равна

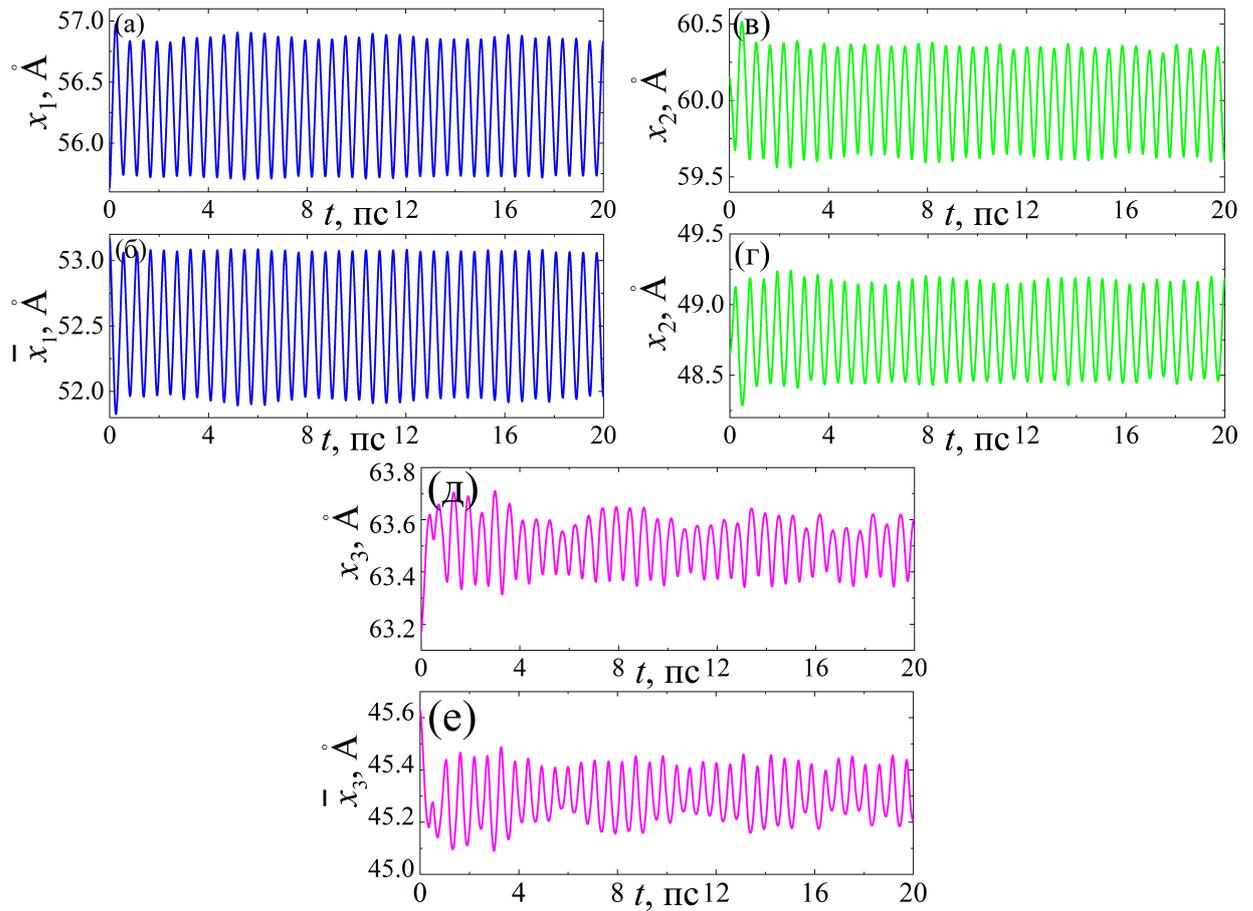


Рисунок 4.7 — Для кристалла LiPb был получен ДБ путем смещения атомов свинца в атомном ряду вдоль оси x , смещение атомов схематично показано на рисунке 4.4. Параметры, используемые для возбуждения ДБ: (а,б) $A_1 = 0,55 \text{ \AA}$, (в,г) $A_2 = 0,40 \text{ \AA}$ и (д,е) $A_3 = 0,15 \text{ \AA}$. Частота ДБ равна $\Omega = 1,88 \text{ ТГц}$.

$\Omega = 1,98 \text{ ТГц}$, и ее третья гармоника приближается к оптической полосе спектра. При дальнейшем увеличении амплитуды полученный ДБ, вероятно, будет не стабилен и распадется. На панелях (в,г) $A_2 = 0,50 \text{ \AA}$ и (д,е) $A_3 = 0,20 \text{ \AA}$ видно, что ДБ проявляет тенденцию к движению влево, поскольку амплитуда колебаний увеличивается у одних атомов и уменьшается у других. С учетом движения ДБ, можно говорить о том, что колебания периодичны на протяжении всего времени моделирования (20 пс).

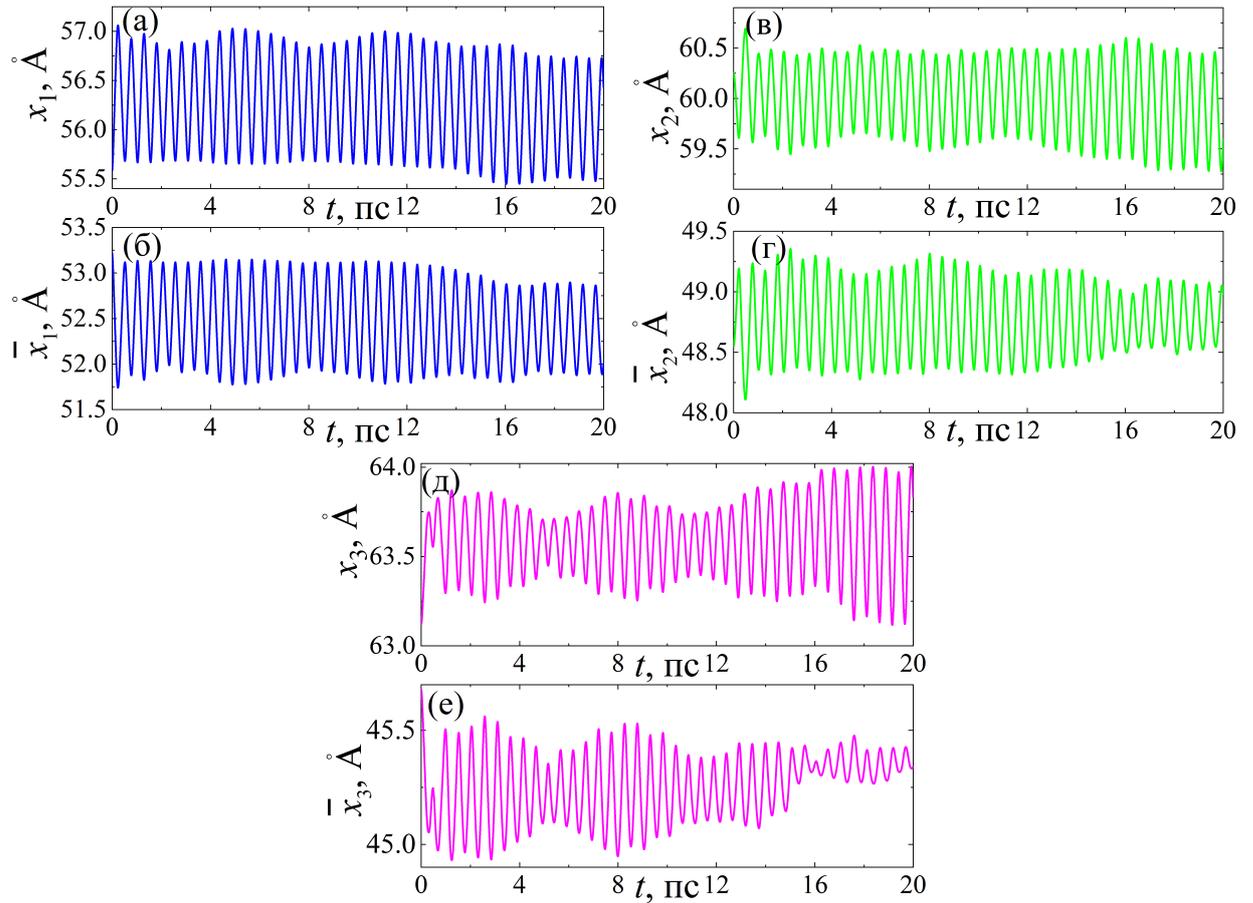


Рисунок 4.8 — То же, что и на рисунке 4.7, но для следующих параметров, используемых для возбуждения ДБ: (а,б) $A_1 = 0,60 \text{ \AA}$, (в,г) $A_2 = 0,50 \text{ \AA}$ и (д,е) $A_3 = 0,20 \text{ \AA}$. Частота ДБ равна $\Omega = 1,98 \text{ ТГц}$.

4.7 Выводы по главе 4

В данной главе анализ нелинейной динамики кристаллов CsCl, LiPb и NiTi со структурой B2 проводился методом молекулярной динамики, реализованным в пакете LAMMPS. Фундаментальное влияние на фоннный спектр и формирование запрещенной зоны оказывает существенная разница в массах атомов компонентов, что ярко проявляется для кристаллов CsCl и LiPb. В кристаллах с близкими массами атомов, например NiTi, щель в фоннном спектре отсутствует.

Поведение реальных кристаллических решеток отклоняется от прогнозов, основанных на упрощенной модели с потенциалом β -ФПУЦ одинаковым для всех типов атомов. В трех рассмотренных кристаллах жесткости связей между

различными элементами отличаются и соотношение (2.8), описывающее связь между частотами ДНКМ, возбужденных на легких и тяжелых атомах, перестает выполняться. Это видно из таблиц 2, 3 и 4. Это отклонение минимально для кристалла CsCl, оно возрастает для LiPb и становится весьма большим для NiTi. Можно сделать вывод о том, что в кристалле CsCl жесткости связей между различными компонентами отличаются слабо, несколько сильнее они отличаются в кристалле LiPb и весьма сильно в NiTi.

Жесткий тип нелинейности необходим для возбуждения ДБ с частотами выше фононного спектра. В кристаллах CsCl и LiPb частоту выше фононного спектра имеют все ДНКМ группы G1,1, возбужденные на легких атомах. В кристалле NiTi таким свойством обладает одна из ДНКМ группы G6,2, возбужденной на атомах Ni. Щелевые ДБ возможны только в кристаллах CsCl и LiPb, поскольку в кристалле NiTi щель в фононном спектре отсутствует. Щелевые ДБ в CsCl и LiPb могут быть возбуждены на ДНКМ группы G1,2, на тяжелых атомах. Такие ДБ будут иметь жесткий тип нелинейности, поскольку такой тип нелинейности имеют ДНКМ.

Исследование показало, что ДБ могут быть успешно возбуждены в кристалле LiPb, используя ДНКМ группы G1. Ключевым фактором, определяющим стабильность и продолжительность существования ДБ, является выбор начальных смещений атомов A_1 , A_2 и A_3 . Были определены условия, при которых щелевые ДБ демонстрируют высокую стабильность и практически не затухают за время моделирования 20 пс. ДБ с частотой выше фононного спектра в кристалле LiPb менее устойчивы и имеют относительно небольшое время жизни (около 2 пс).

Заключение

Аналитически и с применением метода молекулярной динамики изучены линейные и нелинейные колебания бинарных кристаллов со сверхструктурой В2, представительным примером которых является кристалл CsCl. Аналитические исследования проводились для модели кристалла с простейшим нелинейным межатомным потенциалом β -ФПУЦ с учетом взаимодействий до четвертых соседей. Для простоты, атомы двух сортов в данной модели имеют разную массу, но взаимодействие между атомами различных сортов описываются одинаковыми потенциалами. Аналитически получены выражения, определяющие положение границ щели в фононном спектре кристаллов со структурой В2, что позволило сформулировать количественные критерии существования щелевых ДБ в зависимости от соотношения масс компонентов и параметров межатомных связей. Методом молекулярной динамики изучены кристаллы CsCl, LiPb и NiTi, межатомные взаимодействия в которых описываются многочастичными потенциалами, полученными по методу погруженного атома.

Основной целью работы являлось определение условий существования ДБ различного типа в рассматриваемом семействе кристаллов с учетом дальнедействующих взаимодействий, которые могут вносить заметный вклад в динамику решетки ионных кристаллов с дальнедействующими кулоновскими взаимодействиями или в кристаллах с металлической связью, которая является дальнедействующей из-за делокализованного состояния электронов проводимости.

Поскольку основным условием существования долгоживущих ДБ является выход их частоты за пределы фононного спектра, то отправной точкой исследования являлось изучение фононных спектров бинарных кристаллов В2 в зависимости от отношения атомных масс компонент и жесткостей межатомных связей. В кристаллах со сплошным фононным спектром могут существовать только ДБ с частотой выше спектра, а в случае наличия щели (запрещенной зоны) в спектре добавляется возможность существования щелевых ДБ с частотами колебаний в запрещенной зоне.

Поиск различных типов ДБ осуществлялся посредством анализа амплитудно-частотных характеристик ДНКМ, которые являются особыми высокосимметричными фононными модами с волновыми векторами на границе первой зо-

ны Бриллюэна, и обладают тем свойством, что даже при больших амплитудах колебаний они не возбуждают других фононных мод. Если частота ДНКМ с ростом амплитуды, за счет нелинейности взаимодействий, выходит за пределы фононного спектра, то можно пытаться построить пространственно-локализованную колебательную моду (то есть ДБ) путем наложения на ДНКМ локализирующей функции.

Основные результаты работы заключаются в следующем.

1. Выполнен аналитический вывод и проведен анализ дисперсионного соотношения для кристалла со структурой В2 с учетом взаимодействия атомов в первых четырех координационных сферах. Для модели с потенциалом β -ФПУЦ изучена нелинейная динамика кристалла. Установлено соотношение атомных масс, при превышении которого появляется щель в фононном спектре, что является необходимым условием существования щелевых ДБ. Путем наложения локализирующей функции на ДНКМ G1a с частотой в щели фононного спектра обнаружен долгоживущий стационарный ДБ с жестким типом нелинейности. Показано, что при слишком большой разнице атомных масс, удвоенная частота щелевого ДБ, возбужденного на тяжелых атомах, может попадать в оптическую полосу спектра, что приведет к снижению его времени жизни.
2. В рамках модели β -ФПУЦ для структуры CsCl впервые продемонстрирована возможность существования движущихся щелевых ДБ жесткого типа нелинейности. Рассчитана их амплитудно-частотная характеристика, исследована динамика перемещения вдоль атомной цепочки. Определена зависимость скорости движения ДБ от параметров возбуждения. Тем самым описан канал транспорта колебательной энергии в кристалле посредством ДБ. Показано, что движущиеся планарные ДБ могут генерироваться в режиме супратрансмиссии при внешнем воздействии на поверхность кристалла.
3. Методом молекулярной динамики с использованием многочастичных межатомных потенциалов выполнено сравнительное исследование нелинейных свойств трех кристаллов со структурой В2 (CsCl, LiPb и NiTi). Установлено, что большая разница атомных масс в кристаллах CsCl и LiPb приводит к формированию широкой запрещенной зоны в фононном спектре, тогда как при близких атомных массах в кристалле

NiTi щель отсутствует. Тип химической связи (ионная в CsCl, металлическая с ковалентной компонентой в LiPb и NiTi) определяет характер нелинейности ДНКМ: в CsCl наблюдается исключительно жесткая нелинейность, в LiPb и NiTi — смешанная, зависящая от типа возбуждаемой подрешетки и от ДНКМ. В кристалле LiPb впервые численно продемонстрировано возбуждение долгоживущего щелевого ДБ на основе ДНКМ группы G1, возбужденной на тяжелых атомах свинца.

4. Теоретически обоснована принципиальная возможность экспериментального обнаружения щелевых ДБ в ряде соединений В2 с большой разницей атомных масс (таких как CuBe, AuZn, CsCl, SrS, AgMg). Результаты работы служат основой для целенаправленного поиска щелевых ДБ в кристаллах структуры В2 с помощью современных экспериментальных методов.

Полученные результаты раскрывают механизм локализации и транспорта колебательной энергии атомов в кристаллах посредством ДБ и открывают перспективы для исследования влияния ДБ на макроскопические свойства кристаллов, такие как теплоемкость, теплопроводность, тепловое расширение и другие.

Список сокращений и условных обозначений

ГЦК решетка – Гранецентрированная кубическая решетка

ОЦК решетка – Объемноцентрированная кубическая решетка

ИПД – Интенсивная пластическая деформация

ПФС – Плотность фононных состояний

Потенциал β -ФПУЦ – потенциал β -Ферми-Паста-Улама-Цингоу

Потенциал ЕАМ – потенциал, полученный с использованием метода погружённого атома (embedded atom method)

LAMMPS – пакет программ для молекулярно-динамического моделирования (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator)

OVITO – пакет программ для визуализации и анализа научных данных моделирования частиц (Open Visualization Tool)

Список литературы

1. *Борн М.* Динамическая теория кристаллических решеток / М. Борн, Х. Кунь. — Москва, Издательство иностранной литературы, 1958. — с. 488.
2. *Dolgov A. S.* On localization of oscillations in nonlinear crystal structure / A. S. Dolgov // *Sov. Phys. Solid State*. — 1986. — Vol. 28. — P. 907.
3. *Sievers A. J.* Intrinsic localized modes in anharmonic crystals / A. J. Sievers, S. Takeno // *Phys. Rev. Lett.* — 1988. — Vol. 61, no. 8. — P. 970–973.
4. *Page J. B.* Asymptotic solutions for localized vibrational modes in strongly anharmonic periodic systems / J. B. Page // *Phys. Rev. B*. — 1990. — Vol. 41, issue 11. — P. 7835–7838.
5. *Aubry S.* Breathers in nonlinear lattices: Existence, linear stability and quantization / S. Aubry // *Physica D*. — 1997. — Vol. 103, no. 1–4. — P. 201–250.
6. *Flach S.* Discrete breathers / S. Flach, C. R. Willis // *Phys. Rep.* — 1998. — Vol. 295, no. 5. — P. 181–264.
7. *Flach S.* Discrete breathers — Advances in theory and applications / S. Flach, A. V. Gorbach // *Phys. Rep.* — 2008. — Vol. 467, no. 1. — P. 1–116.
8. *Manley M. E.* Impact of intrinsic localized modes of atomic motion on materials properties / M. E. Manley // *Acta Mater.* — 2010. — Vol. 58, no. 8. — P. 2926–2935.
9. Intrinsic localized modes observed in the high-temperature vibrational spectrum of NaI / M. E. Manley [et al.] // *Phys. Rev. B*. — 2009. — Vol. 79, no. 13. — P. 134304.
10. Intrinsically localized mode in α -U as a precursor to a solid-state phase transition / M. E. Manley, J. W. Lynn, Y. Chen, G. H. Lander // *Phys. Rev. B*. — 2008. — Vol. 77, issue 5. — P. 052301.
11. *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.

12. One-component delocalized nonlinear vibrational modes of square lattices / D. S. Ryabov, G. M. Chechin, E. K. Naumov, Y. V. Bebikhov, E. A. Korznikova, S. V. Dmitriev // *Nonlinear Dynamics*. — 2023. — Vol. 111. — P. 8135–8153.
13. *Chechin G.* Large-amplitude periodic atomic vibrations in diamond / G. Chechin, D. Ryabov, S. Shcherbinin // *Journal of Micromechanics and Molecular Physics*. — 2018. — Vol. 03, 01n02. — P. 1850002.
14. Unified approach to generating a training set for machine learning interatomic potentials: The case of BCC tungsten / A. A. Kistanov, I. V. Kosarev, S. A. Shcherbinin, A. V. Shapeev, E. A. Korznikova, S. V. Dmitriev // *Materials Today Communications*. — 2025. — Vol. 42. — P. 111437.
15. Impact of delocalized nonlinear vibrational modes on the properties of NiTi / O. V. Bachurina, A. A. Kudreyko, S. V. Dmitriev, D. V. Bachurin // *Phys. Lett. A*. — 2025. — Vol. 555. — P. 130769.
16. *Nwobu A. I. P.* Nitride formation in titanium based substrates during laser surface melting in nitrogen–argon atmospheres / A. I. P. Nwobu, R. D. Rawlings, D. R. F. West // *Acta Materialia*. — 1999. — Vol. 47, no. 2. — P. 631–643.
17. Phonon measurement of RbCl at 4.9 kbar / Y. Ishii, A. Mori, A. Onodera, S. Kawano, Y. Morii // *Physica B: Condensed Matter*. — 1997. — Vol. 241. — P. 409–411.
18. *Pettifor D. G.* Bonding and structure of molecules and solids / D. G. Pettifor. — Oxford university press, 1995.
19. *Lipson H.* The structure of beta-brass / H. Lipson, W. H. Taylor // *Proceedings of the Royal Society of London. Series A*. — 1939. — Vol. 173, no. 952. — P. 232–238.
20. *Bradley A. J.* The crystal structure of the superlattice CuZn / A. J. Bradley, A. H. Jay // *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character*. — 1932. — Vol. 136, no. 829. — P. 210–232.

21. Temperature-dependent vibrational properties of NiAl, CoAl, and FeAl β -phase alloys / D. Brewe, D. M. Pease, J. I. Budnick, C. C. Law // Physical Review B. — 1997. — Vol. 56, no. 18. — P. 11449.
22. *Fleischer R. L.* Mechanical properties of B2 compounds / R. L. Fleischer, R. J. Zabala // Metallurgical Transactions A. — 1990. — Vol. 21, no. 10. — P. 2709–2717.
23. *Darolia R.* NiAl alloys for high-temperature structural applications / R. Darolia // JoM. — 1991. — Vol. 43, no. 3. — P. 44–49.
24. *Christian J.* The theory of transformations in metals and alloys / J. Christian. — Newnes, 2002.
25. *Yang Y.* Effects of alloying additions on the plasticity of NiAl / Y. Yang, et al. // Intermetallics. — 2015. — Vol. 66. — P. 111–120.
26. *Draper S. L.* Alloying effects in polycrystalline NiAl / S. L. Draper, et al. // Materials Science and Engineering: A. — 2005. — Vol. 396, no. 1/2. — P. 18–27.
27. *Ranganath S.* A review on in-situ composites of the NiAl-Mo system / S. Ranganath, J. Subrahmanyam // Journal of Materials Science. — 2002. — Vol. 37, no. 24. — P. 5141–5152.
28. *Ball A.* The deformation properties and electron microscopy studies of the intermetallic compound NiAl / A. Ball, R. E. Smallman // Acta metallurgica. — 1966. — Vol. 14, no. 10. — P. 1349–1355.
29. *Fu C. L.* Electronic, elastic, and fracture properties of trialuminide alloys: Al₃Sc and Al₃Ti / C. L. Fu // Journal of Materials Research. — 1990. — Vol. 5, no. 5. — P. 971–979.
30. *Miracle D. B.* A critical review of high entropy alloys and related concepts / D. B. Miracle, O. N. Senkov // Acta materialia. — 2017. — Vol. 122. — P. 448–511.
31. *Zhang B.* Additive manufacturing of NiAl-based alloys / B. Zhang, et al. // Journal of Alloys and Compounds. — 2019. — Vol. 789. — P. 1–10.
32. The high-throughput highway to computational materials design / S. Curtarolo, G. L. Hart, M. B. Nardelli, N. Mingo, S. Sanvito, O. Levy // Nature materials. — 2013. — Vol. 12, no. 3. — P. 191–201.

33. *Otsuka K.* Physical metallurgy of Ti–Ni-based shape memory alloys / K. Otsuka, X. Ren // Progress in materials science. — 2005. — Vol. 50, no. 5. — P. 511–678.
34. *Khachaturyan A. G.* Theory of structural transformation in solids / A. G. Khachaturyan. — 1983.
35. *Kresse G.* Ab initio molecular dynamics for liquid metals / G. Kresse, J. Hafner // Physical review B. — 1993. — Vol. 47, no. 1. — P. 558.
36. *Yamaguchi M.* Dislocation processes in B2-type compounds / M. Yamaguchi, et al. // Prog. Mater. Sci. — 2000.
37. *Miller M. K.* Atom probe tomography: analysis at the atomic level / M. K. Miller. — Springer Science & Business Media, 2012.
38. *Hafner J.* Theory of the structure and thermodynamics of B2 compounds / J. Hafner, et al. // Physical review B. — 1991.
39. *Mishin Y.* Point defect complexes in B2 NiAl / Y. Mishin, et al. // Acta Mater. — 2000.
40. *Yoo M. H.* Theory of deformation and fracture of B2 compounds / M. H. Yoo, C. L. Fu // Mater. Sci. Eng. A. — 1995.
41. *Ono S.* Role of the M point phonons for the dynamical stability of B2 compounds / S. Ono, D. Kobayashi // Scientific Reports. — 2022. — Vol. 12, no. 1. — P. 7258.
42. *Ngobe B.* Virtual Crystal Approximation and Supercell Approaches Are Used to Systematically Investigate the Effect of Pt on Inducing Martensitic Phase Transformation in Stable B2 TiRu Phase / B. Ngobe, M. Molepo, M. Phasha // International Conference on Materials Engineering and Nanotechnology. — Springer. 2024. — P. 230–240.
43. *Nair V. S.* The role of NiTi shape memory alloys in quality of life improvement through medical advancements: A comprehensive review / V. S. Nair, N. Radhika // Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part H: Journal of Engineering in Medicine. — 2022. — т. 236, № 7. — с. 923–950.
44. Investigating the Tribocorrosion Behaviour of NiTiNOL60 Alloy in Engineering and Biomedical Applications—An Overview / A. O. Okoani, A. V. Nand, C. Jiang, M. Ramezani // Metals. — 2024. — т. 14, № 12. — с. 1334.

45. A Review of Nitinol Shape Memory Alloys for Biomedical Applications: Advancements and Biocompatibility / N. Bouchareb, M. Fellah, N. Hezil, A. Guesmi, L. H. Khezami // JOM. — 2026. — т. 78, № 1. — с. 140–167.
46. *Firstov G. S.* High temperature shape memory alloys problems and prospects / G. S. Firstov, J. Van Humbeeck, Y. N. Koval // Journal of intelligent material systems and structures. — 2006. — Vol. 17, no. 12. — P. 1041–1047.
47. *Chang Y. A.* Thermodynamics and defect structure of intermetallic phases with the B2 (CsCl) structure / Y. A. Chang, J. P. Neumann // Progress in Solid State Chemistry. — 1982. — Vol. 14, no. 4. — P. 221–301.
48. Atomistic simulations reveal slip selection in B2-type intermetallic alloys / L. La Rosa, J. Brodie, M. Ghazisaeidi, F. Maresca // Acta Materialia. — 2025. — т. 301. — с. 121561.
49. Automated indentation-based slip trace analysis for bcc and B2 intermetallic plasticity / V. G. L. Gagneur, J. P. Magnussen, K. Ma, M. J. Lloyd, N. Martin, A. J. Knowles // Materials Characterization. — 2025. — т. 229. — с. 115524.
50. The intrinsic high ductility in B2 intermetallic compound YAg: Causality clarified by ab initio study / X. Pang, L. Wang, Y. Tian, G. QIN // Materials Today Communications. — 2023. — т. 34. — с. 105177. — Cited by: 0.
51. The core characteristics and Peierls stress of dislocations in 110 plane of B2–AlY / S. Li [и др.] // Intermetallics. — 2022. — т. 140. — с. 107403.
52. Deformation behavior of PST-TiAl bicrystals at 800 °C / Y. Ma, J. Yang, Z. Liu, R. Chen // Materials Science and Engineering: A. — 2024. — т. 915. — с. 147267.
53. Crystal Structure and Properties of Heusler Alloys: A Comprehensive Review / A. Wederni, J. Daza, W. Ben Mbarek, J. Saurina, L. I. Escoda, J. J. Suñol // Metals. — 2024. — т. 14, № 6. — с. 688.
54. *Tamaoka T.* Magnetism of antiphase boundaries in ordered alloys studied using electron holography / T. Tamaoka, R. Aso, Y. Murakami // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. — 2021. — т. 539. — с. 561–637.
55. Structure and energy of planar superstructure defects in X₂YZ Heusler alloys / A. R. Khalikov, M. D. Starostenkov, E. A. Korznikova, E. A. Sharapov, S. V. Dmitriev // Intermetallics. — 2021. — т. 137. — с. 107276.

56. *Khalikov A. R.* Structure and energy of ternary alloys of stoichiometric composition A_2BC having $L1_0$ superstructure / A. R. Khalikov, Y. V. Bebikhov, S. V. Dmitriev // Т. 2533. — 2022. — с. 020018.
57. Planar superstructure defects in ordered alloys with $L1_0$ structure / A. R. Khalikov, E. A. Korznikova, A. A. Kudreyko, Y. V. Bebikhov, S. V. Dmitriev // Metals and Materials International. — 2023. — т. 29, № 6. — с. 1712–1722.
58. *Hillel G.* Strain-induced disorder stimulation of Antiphase boundaries' (APBs) formation in B2 Fe-Al based alloys / G. Hillel, L. Meshi // Materials Science and Engineering: A. — 2025. — т. 942. — с. 148688.
59. Impacts of elemental contents and components on APB energy and its role in precipitation-strengthened multi-principal component alloys / Q. Wang [и др.] // Journal of Alloys and Compounds. — 2025. — т. 1018. — с. 179266.
60. *Friák M.* Temperature-dependent impact of antiphase boundaries on properties of Fe_3Al / M. Friák, M. Černý, M. Šob // Intermetallics. — 2022. — т. 151. — с. 107746.
61. Local chemical disorder and its anomalous impacts in chemically complex intermetallic alloys / W. Xiao [и др.] // Journal of Materials Science and Technology. — 2026. — т. 255. — с. 134–140.
62. Anomalous temperature dependence of yield strength and deformation mechanisms in chemically complex intermetallic alloy / J. Hou [и др.] // Materials Science and Engineering: A. — 2025. — т. 931. — с. 148211.
63. *Yoo M.* Fundamental Aspects of Deformation and Fracture in High-temperature Ordered Intermetallics / M. Yoo, C. Fu // ISIJ International. — 1991. — т. 31, № 10. — с. 1049–1062.
64. *Ono S.* Stability of B2 compounds: Role of the M point phonons / S. Ono, D. Kobayashi // arXiv preprint arXiv:2111.00183. — 2021.
65. *La Rosa L.* Unravelling atomistic mechanisms of martensitic transformations in shape-memory alloys / L. La Rosa. — 2025.
66. *Wollmershauser J. A.* In situ neutron diffraction study of the plastic deformation mechanisms of B2 ordered intermetallic alloys: NiAl, CuZn, and CeAg / J. A. Wollmershauser, S. Kabra, S. R. Agnew // Acta materialia. — 2009. — Vol. 57, no. 1. — P. 213–223.

67. Phase stability, deformation mechanisms, and mechanical properties of Nb-Al-Ti alloys / J. Shyue, D. H. Hou, S. C. Johnson, H. L. Fraser // In Structural intermetallics. — 1993. — P. 631–635.
68. Achieving High Specific Strength via Multiple Strengthening Mechanisms in an Fe-Mn-Al-C-Ni-Cr Lightweight Steel / R. Bai, Y. Li, Y. Du, Y. Zhang, X. He, H. Liang // Materials. — 2025. — Vol. 18, no. 17. — P. 4023.
69. *Saunders N.* CALPHAD (calculation of phase diagrams): a comprehensive guide. Vol. 1 / N. Saunders, A. P. Miodownik. — Elsevier, 1998.
70. *Noebe R. D.* Physical and mechanical properties of the B2 compound NiAl / R. D. Noebe, R. R. Bowman, M. V. Nathal // International Materials Reviews. — 1993. — Vol. 38, no. 4. — P. 193–232.
71. *Stoloff N. S.* Iron aluminides: present status and future prospects / N. S. Stoloff // Materials Science and Engineering: A. — 1998. — Vol. 258, no. 1/2. — P. 1–14.
72. *Pfeifer F.* Soft magnetic Ni-Fe and Co-Fe alloys—some physical and metallurgical aspects / F. Pfeifer, C. Radloff // Journal of magnetism and magnetic materials. — 1980. — Vol. 19, no. 1–3. — P. 190–207.
73. *Kittel C.* Introduction to Solid State Physics / C. Kittel // 8th ed. Wiley. — 2004.
74. *Miracle D.* Overview No. 104 The physical and mechanical properties of NiAl / D. Miracle // Acta metallurgica et materialia. — 1993. — Vol. 41, no. 3. — P. 649–684.
75. Thermal expansion: metallic elements and alloys / Y. S. Touloukian, R. K. Kirby, R. E. Taylor, P. D. Desai. — 1975.
76. *Fahnle M.* Electrical resistivity of B2 compounds / M. Fahnle, et al. // Physical Review B. — 1991.
77. *Schaefer H. E.* Defect properties of B2 compounds / H. E. Schaefer, et al. // Materials Science Forum. — 1997.
78. *Wolfenstine J.* Creep of B2 compounds / J. Wolfenstine, et al. // Materials Science and Engineering A. — 1995.
79. *Hemker K. J.* High-temperature strength of B2 compounds / K. J. Hemker, et al. // Philosophical Magazine A. — 1993.

80. *Liu C. T.* Thermodynamics of B2 compounds formation / C. T. Liu, J. Stringer // Journal of Materials Science. — 1990.
81. *Massalski T. B.* Phase stability in binary systems / T. B. Massalski // Progress in Materials Science. — 1989.
82. *Pettifor D. G.* Theory of chemical bonding in intermetallics / D. G. Pettifor // Journal of Physics: Condensed Matter. — 1990.
83. *Freeman A. J.* Electronic structure of ordered compounds / A. J. Freeman // Physical Review B. — 1991.
84. *Kofstad P.* High temperature oxidation / P. Kofstad // Materials Science Reports. — 1988.
85. *Marcus P.* Corrosion behavior of intermetallic compounds / P. Marcus // Corrosion Science. — 1992.
86. *Durukan I.* DFT Analysis of Mechanical and Dynamic Properties of CuBe / I. Durukan, Y. Ciftci // Gazi University Journal of Science. — 2022. — Vol. 35. — P. 1652–1663.
87. Dynamic stabilization of cubic AuZn / L. Isaeva, O. Hellman, J. C. Lashley, I. A. Abrikosov, O. Eriksson // Materials Today: Proceedings. — 2015. — Vol. 2. — S569–S572.
88. *Hellman O.* Temperature-dependent effective third-order interatomic force constants from first principles / O. Hellman, I. A. Abrikosov // Physical Review B. — 2013. — Vol. 88, no. 14. — P. 144301.
89. *Bingol S.* Electronic band structure, optical, dynamical and thermodynamic properties of cesium chloride (CsCl) from first-principles / S. Bingol, B. Erdinc, H. Akkus // International Journal for Simulation and Multidisciplinary Design Optimization. — 2015. — Vol. 6. — P. 7.
90. *Rosenberg R. M.* The normal modes of nonlinear n -degree-of-freedom systems / R. M. Rosenberg // Journal of Applied Mechanics, Transactions ASME. — 1960. — Vol. 29, no. 1. — P. 7–14.
91. *Sakhnenko V.* Symmetrical selection rules in nonlinear dynamics of atomic systems / V. Sakhnenko, G. M. Chechin, S. J. Amoretty // Doklady Physics. — 1993. — т. 38. — с. 219–221.

92. *Sakhnenko V.* Bushes of modes and normal modes for nonlinear dynamical systems with discrete symmetry / V. Sakhnenko, G. M. Chechin // Doklady Physics. — 1994.
93. Discrete breathers in crystals / S. V. Dmitriev, E. A. Korznikova, J. A. Baimova, M. G. Velarde // Physics–Uspekhi. — 2016. — Vol. 59, no. 5. — P. 446–461.
94. Dynamics of a three-component delocalized nonlinear vibrational mode in graphene / S. A. Shcherbinin, M. N. Semenova, A. S. Semenov, E. A. Korznikova, G. M. Chechin, S. V. Dmitriev // Physics of the Solid State. — 2019. — Vol. 61. — P. 2139–2144.
95. Delocalized nonlinear vibrational modes in fcc metals / S. A. Shcherbinin, K. A. Krylova, G. M. Chechin, E. G. Soboleva, S. V. Dmitriev // Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simul. — 2022. — Vol. 104. — P. 106039.
96. *Chechin G. M.* Delocalized periodic vibrations in nonlinear LC and LCR electrical chains / G. M. Chechin, S. A. Shcherbinin // Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simul. — 2015. — Vol. 22. — P. 244–262.
97. *Chechin G. M.* Stability of low-dimensional bushes of vibrational modes in the Fermi-Pasta-Ulam chains / G. M. Chechin, K. G. Zhukov, D. S. Ryabov // Physica D: Nonlinear Phenomena. — 2004. — Vol. 203. — P. 121–166.
98. *Chechin G. M.* Bushes of vibrational modes for Fermi–Pasta–Ulam chains / G. M. Chechin, N. V. Novikova, A. A. Abramenko // Physica D: Nonlinear Phenomena. — 2002. — Vol. 166. — P. 208–238.
99. *Chechin G. M.* Nonlinear normal mode interactions in the SF₆ molecule studied with the aid of density functional theory. / G. M. Chechin, D. S. Ryabov, S. A. Shcherbinin // Physical review. E, Statistical, nonlinear, and soft matter physics. — 2015. — Vol. 921. — P. 012907.
100. *Bachurina O. V.* Plane and plane-radial discrete breathers in fcc metals / O. V. Bachurina // Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering. — 2019. — Vol. 27.
101. *Bachurina O. V.* Two-dimensional discrete breathers in fcc metals / O. V. Bachurina, A. A. Kudreyko // Computational Materials Science. — 2020. — Vol. 182. — P. 109737.

102. *Bachurina O. V.* Linear discrete breather in fcc metals / O. V. Bachurina // Computational Materials Science. — 2019.
103. Highly symmetric discrete breather in a two-dimensional Morse crystal / E. A. Korznikova, S. Y. Fomin, E. G. Soboleva, S. V. Dmitriev // JETP Letters. — 2016. — Vol. 103. — P. 277–281.
104. Moving discrete breathers in a monoatomic two-dimensional crystal / A. A. Kistanov, R. T. Murzaev, S. V. Dmitriev, V. I. Dubinko, V. V. Khizhnyakov // JETP Letters. — 2014. — Vol. 99. — P. 353–357.
105. Spherically localized discrete breathers in bcc metals V and Nb / K. A. Krylova, I. Lobzenko, A. S. Semenov, A. A. Kudreyko, S. V. Dmitriev // Computational Materials Science. — 2020. — Vol. 180. — P. 109695.
106. Discrete breathers in a triangular β -Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou lattice. / R. I. Babicheva, A. S. Semenov, E. G. Soboleva, A. A. Kudreyko, K. Zhou, S. V. Dmitriev // Physical review. E. — 2021. — Vol. 103 5–1. — P. 052202.
107. *Liu B.* Recent progress on graphene-analogous 2D nanomaterials: Properties, modeling and applications / B. Liu, K. Zhou // Progress in Materials Science. — 2019.
108. Gap discrete breathers in strained boron nitride / E. Barani, E. A. Korznikova, A. P. Chetverikov, K. Zhou, S. V. Dmitriev // Physics Letters A. — 2017. — Vol. 381. — P. 3553–3557.
109. Stability of delocalized nonlinear vibrational modes in graphene lattice / D. U. Abdullina, M. N. Semenova, A. S. Semenov, E. A. Korznikova, S. V. Dmitriev // The European Physical Journal B. — 2019. — Vol. 92. — P. 1–5.
110. Transverse discrete breathers in unstrained graphene / E. Barani [et al.] // The European Physical Journal B. — 2017. — Vol. 90. — P. 1–5.
111. *Stearrett R.* Experimental generation of intrinsic localized modes in a discrete electrical transmission line / R. Stearrett, L. Q. English // Journal of Physics D: Applied Physics. — 2007. — Vol. 40. — P. 5394–5398.
112. Instability of vibrational modes in hexagonal lattice / E. A. Korznikova, D. V. Bachurin, S. Y. Fomin, A. P. Chetverikov, S. V. Dmitriev // The European Physical Journal B. — 2017. — Vol. 90. — P. 1–8.

113. Modulational instability and nano-scale energy localization in ferromagnetic spin chain with higher order dispersive interactions / L. Kavitha, A. Mohamadou, E. Parasuraman, D. Gopi, N. Akila, A. Prabhu // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. — 2016. — Vol. 404. — P. 91–118.
114. Nonlinear nano-scale localized breather modes in a discrete weak ferromagnetic spin lattice / L. Kavitha, E. Parasuraman, D. Gopi, A. Prabhu, R. A. Vicencio // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. — 2016. — Vol. 401. — P. 394–405.
115. Effect of discrete breathers on macroscopic properties of the Fermi-Pasta-Ulam chain / E. A. Korznikova [et al.] // The European Physical Journal B. — 2019. — Vol. 93.
116. Chaotic breathers of two types in a two-dimensional Morse lattice with an on-site harmonic potential / K. Ikeda, Y. Doi, B.-F. Feng, T. Kawahara // Physica D: Nonlinear Phenomena. — 2007. — Vol. 225. — P. 184–196.
117. *Bajars J.* Nonlinear propagating localized modes in a 2D hexagonal crystal lattice / J. Bajars, E. C. J., B. J. Leimkuhler // Physica D: Nonlinear Phenomena. — 2014. — Vol. 301. — P. 8–20.
118. *Russell F. M.* Evidence for moving breathers in a layered crystal insulator at 300 K / F. M. Russell, J. C. Eilbeck // EPL (Europhysics Letters). — 2006. — Vol. 78. — P. 10004.
119. Linking tracks in mica crystals with phase transitions in a bistable lattice / K. A. Krylova, E. A. Korznikova, A. S. Semenov, D. V. Bachurin, S. V. Dmitriev // The European Physical Journal B. — 2020. — Vol. 93. — P. 1–8.
120. *Bajars J.* Two-dimensional mobile breather scattering in a hexagonal crystal lattice. / J. Bajars, C. Eilbeck, B. J. Leimkuhler // Physical review. E. — 2021. — Vol. 103 2–1. — P. 022212.
121. Room-temperature ferromagnetism in two-dimensional Fe₂Si nanosheet with enhanced spin-polarization ratio / Y. Sun, Z. Zhuo, W. X., J. Yang // Nano letters. — 2017. — Vol. 17 5. — P. 2771–2777.

122. Lattice with vacancies: elastic fields and effective properties in frameworks of discrete and continuum models / V. A. Kuzkin, A. M. Krivtsov, E. A. Podolskaya, M. Kachanov // *Philosophical Magazine*. — 2016. — Vol. 96. — P. 1538–1555.
123. Diffusive and martensitic nucleation kinetics in solid-solid transitions of colloidal crystals / Y. Peng, W. Li, F. Wang, T. Still, A. G. Yodh, Y. Han // *Nature Communications*. — 2017. — Vol. 8.
124. Nonlinear localized modes in two-dimensional hexagonally-packed magnetic lattices / C. Chong [et al.] // *New Journal of Physics*. — 2020. — Vol. 23. — P. 043008.
125. Delocalized nonlinear vibrational modes in graphene: Second harmonic generation and negative pressure / E. A. Korznikova [et al.] // *Phys. Status Solidi B*. — 2019. — Vol. 256, no. 2. — P. 1800061.
126. *Manley M. E.* Impact of intrinsic localized modes of atomic motion on materials properties / M. E. Manley // *Acta Materialia*. — 2010. — Vol. 58, no. 8. — P. 2926–2935.
127. *Dubinko V. I.* Reaction-rate theory with account of the crystal anharmonicity / V. I. Dubinko, P. A. Selyshchev, J. F. R. Archilla // *Phys. Rev. E*. — 2011. — Vol. 83. — P. 041124.
128. Moving discrete breathers in bcc metals V, Fe and W / R. T. Murzaev, A. A. Kistanov, V. I. Dubinko, D. A. Terentyev, S. V. Dmitriev // *Comp. Mater. Sci*. — 2015. — Vol. 98, no. 2. — P. 88.
129. *Kistanov A. A.* Properties of moving discrete breathers in a monoatomic two-dimensional crystal / A. A. Kistanov, A. S. Semenov, S. V. Dmitriev // *Journal of Experimental and Theoretical Physics*. — 2014. — Vol. 119, no. 4. — P. 766–771.
130. *Marin J. L.* Localized moving breathers in a 2D hexagonal lattice / J. L. Marin, J. C. Eilbeck, F. M. Russell // *Phys. Lett. A*. — 1998. — Vol. 248, no. 2–4. — P. 225–229.
131. Properties of moving discrete breathers in beryllium / O. V. Bachurina, R. T. Murzaev, A. S. Semenov, E. A. Korznikova, S. V. Dmitriev // *Phys. Solid State*. — 2018. — Vol. 60, no. 2. — P. 989.

132. Long range annealing of defects in germanium by low energy plasma ions / J. F. R. Archilla, S. M. M. Coelho, F. D. Auret, V. I. Dubinko, V. Hizhnyakov // *Physica D.* — 2015. — Vol. 297. — P. 56.
133. Interaction of propagating discrete breathers with a vacancy in a two-dimensional crystal / A. A. Kistanov, S. V. Dmitriev, A. S. Semenov, V. I. Dubinko, D. A. Terent'ev // *Technical Physics Letters.* — 2014. — Vol. 40, no. 8. — P. 657–661.
134. Interaction of discrete breathers with primary lattice defects in bcc Fe / D. A. Terentyev, A. V. Dubinko, V. I. Dubinko, S. V. Dmitriev, E. E. Zhurkin, M. V. Sorokin // *Model. Simul. Mater. Sc.* — 2015. — Vol. 23, no. 2. — P. 085007.
135. Surface discrete breathers in Pt3Al intermetallic alloy / P. V. Zakharov, E. A. Korznikova, S. V. Dmitriev, E. G. Ekomasov, K. Zhou // *Surf. Sci.* — 2019. — Vol. 679, no. 2. — P. 1.
136. Discrete-breather-assisted charge transport along DNA-like molecular wires / A. P. Chetverikov, W. Ebeling, V. D. Lakhno, M. G. Velarde // *Phys. Rev. E.* — 2019. — Vol. 100, no. 2. — P. 052203.
137. *Velarde M. G.* Thermal solitons and solectrons in 1D anharmonic lattices up to physiological temperature / M. G. Velarde, W. Ebeling, A. P. Chetverikov // *Int. J. Bifurc. Chaos.* — 2008. — Vol. 18, no. 2. — P. 3815.
138. *Chetverikov A. P.* Nonlinear soliton-like excitations in two-dimensional lattices and charge transport / A. P. Chetverikov, W. Ebeling, M. G. Velarde // *Eur. Phys. J.: Special Topics.* — 2013. — Vol. 222, no. 2. — P. 2531.
139. *Velarde M. G.* From polaron to solectron: The addition of nonlinear elasticity to quantum mechanics and its possible effect upon electric transport / M. G. Velarde // *J. Comput. Appl. Math.* — 2010. — Vol. 233. — P. 1432.
140. *Wang J.* Thermal transport in long-range interacting Fermi-Pasta-Ulam chains / J. Wang, S. V. Dmitriev, D. Xiong // *Phys. Rev. Research.* — 2020. — Vol. 2, no. 2. — P. 013179.

141. *Xiong D.* Crossover from ballistic to normal heat transport in the ϕ^4 lattice: If nonconservation of momentum is the reason what is the mechanism? / D. Xiong, D. Saadatmand, S. V. Dmitriev // Phys. Rev. E. — 2017. — Vol. 96, no. 2. — P. 042109.
142. Effect of discrete breathers on the specific heat of a nonlinear chain / M. Singh [et al.] // J. Nonlinear Sci. — 2021. — Vol. 31, no. 2. — P. 12.
143. *Caputo J.-G.* Nonlinear energy transmission in the gap / J.-G. Caputo, J. Leon, A. Spire // Phys. Lett. A. — 2001. — Vol. 283, no. 1/2. — P. 129–135.
144. *Geniet F.* Energy transmission in the forbidden band gap of a nonlinear chain / F. Geniet, J. Leon // Phys. Rev. Lett. — 2002. — Vol. 89, no. 13. — P. 1341021–1341024.
145. *Geniet F.* Nonlinear supratransmission / F. Geniet, J. Leon // J. Phys. Condensed Matter. — 2003. — Vol. 15, no. 17. — P. 2933–2949.
146. *Chevriaux D.* Theory of a Josephson junction parallel array detector sensitive to very weak signals / D. Chevriaux, R. Khomeriki, J. Leon // Phys. Rev. B. — 2006. — Vol. 73, no. 21. — P. 214516.
147. *Malishava M.* All-phononic digital transistor on the basis of gap-soliton dynamics in an anharmonic oscillator ladder / M. Malishava, R. Khomeriki // Phys. Rev. Lett. — 2015. — Vol. 115, no. 10. — P. 104301.
148. *Macías-Díaz J. E.* On the propagation of binary signals in damped mechanical systems of oscillators / J. E. Macías-Díaz, A. Puri // Physica D. — 2007. — Vol. 228, no. 2. — P. 112–121.
149. *Macias-Diaz J. E.* An application of nonlinear supratransmission to the propagation of binary signals in weakly damped, mechanical systems of coupled oscillators / J. E. Macias-Diaz, A. Puri // Phys. Lett. A. — 2007. — Vol. 366, no. 4/5. — P. 447–450.
150. Experimental observation on asymmetric energy flux within the forbidden frequency band in the LC transmission line / F. Tao, W. Chen, J. Pan, W. Xu, S. Du // Chaos, Solitons and Fractals. — 2012. — Vol. 45, no. 6. — P. 810–814.

151. *Bountis T.* The effect of on-site potentials on supratransmission in one-dimensional hamiltonian lattices / T. Bountis, J. E. Macias-Diaz // Entropy. — 2023. — Vol. 25, no. 3. — P. 423.
152. *Bountis A.* Complex dynamics and statistics of 1-d hamiltonian lattices: Long range interactions and supratransmission / A. Bountis // Nonlinear Phenomena in Complex Systems. — 2020. — т. 23, № 2. — с. 133–148.
153. *Macias-Diaz J.* Energy transmission in nonlinear chains of harmonic oscillators with long-range interactions / J. Macias-Diaz, A. T. Motcheyo // Results in Physics. — 2020. — Vol. 18. — P. 103210.
154. *Macias-Diaz J. E.* Nonlinear supratransmission in quartic Hamiltonian lattices with globally interacting particles and on-site potentials / J. E. Macias-Diaz, A. Bountis // Journal of Computational and Nonlinear Dynamics. — 2021. — Vol. 16, no. 2. — P. 021001.
155. *Macias-Diaz J. E.* Supratransmission in β -Fermi–Pasta–Ulam chains with different ranges of interactions / J. E. Macias-Diaz, A. Bountis // Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation. — 2018. — Vol. 63. — P. 307–321.
156. *Wang Y.* Highly intensive and controllable supratransmission in a Kresling-origami metastructure / Y. Wang, X. Zhang, S. Zhu // Extreme Mechanics Letters. — 2023. — Vol. 59. — P. 101964.
157. *Zhang Q.* Tunable supra-transmission of a stacked miura-origami based meta-structure / Q. Zhang, H. Fang // Theoretical and Applied Mechanics Letters. — 2024. — Vol. 14, no. 6. — P. 100523.
158. *Bader A.* Supratransmission in a vibro-impact chain / A. Bader, O. Gendelman // Journal of Sound and Vibration. — 2023. — Vol. 547. — P. 117493.
159. *Motcheyo A. B. T.* Nonlinear bandgap transmission with zero frequency in a cross-stitch lattice / A. B. T. Motcheyo, J. E. Macias-Diaz // Chaos, Solitons & Fractals. — 2023. — Vol. 170. — P. 113349.
160. Energy transport in one-dimensional oscillator arrays with hysteretic damping / T. Bountis, K. Kaloudis, J. Shena, C. Skokos, C. Spitas // The European Physical Journal Special Topics. — 2022. — Vol. 231, no. 3. — P. 225–236.

161. Interaction effects of driving amplitudes and frequencies on transitivity in a granular chain / J.-G. Cui, T. Yang, M.-Q. Niu, L.-Q. Chen // Journal of Sound and Vibration. — 2022. — Vol. 529. — P. 116966.
162. Generation of travelling sine-Gordon breathers in noisy long Josephson junctions / D. De Santis, C. Guarcello, B. Spagnolo, A. Carollo, D. Valenti // Chaos, Solitons & Fractals. — 2022. — Vol. 158. — P. 112039.
163. Supratransmission-induced traveling breathers in long Josephson junctions / D. De Santis, C. Guarcello, B. Spagnolo, A. Carollo, D. Valenti // Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation. — 2022. — Vol. 115. — P. 106736.
164. *Mosquera-Sánchez J. A.* Dynamics and wave propagation in nonlinear piezoelectric metastructures / J. A. Mosquera-Sánchez, C. De Marqui Jr // Nonlinear Dynamics. — 2021. — Vol. 105, no. 4. — P. 2995–3023.
165. Discrete modulation instability and localized modes in chiral molecular chains with first-and third-neighbor interactions / S. Abbagari, A. Houwe, L. Akinyemi, M. Inc, T. Bouetou Bouetou // Physica Scripta. — 2023. — Vol. 98, no. 2. — P. 025210.
166. Collective escape and supratransmission phenomena in a nonlinear oscillators chain / M. Mekontchou Foudjio, F. Thomas Ndjomatchoua, C. Lawrence Gninzanlong, C. Tchawoua // Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science. — 2020. — Vol. 30, no. 12.
167. *Pechac J. E.* Non-reciprocal supratransmission in mechanical lattices with non-local feedback control interactions / J. E. Pechac, M. J. Frazier // Crystals. — 2021. — Vol. 11, no. 2. — P. 94.
168. Nonlinear supratransmission in a Pt 3 Al crystal at intense external influence / A. I. Cherednichenko, P. V. Zakharov, M. D. Starostenkov, M. O. Sysoeva, A. M. Eremin, [et al.] // Computer research and modeling. — 2019. — Vol. 11, no. 1. — P. 109–117.
169. Influence of a nonlinear coupling on the supratransmission effect in modified sine-Gordon and Klein–Gordon lattices / R. Alima, S. Morfu, P. Marquié, B. Bodo, B. Essimbi // Chaos, Solitons & Fractals. — 2017. — Vol. 100. — P. 91–99.

170. Supratransmission in discrete one-dimensional lattices with the cubic–quintic nonlinearity / A. B. Togueu Motcheyo, M. Kimura, Y. Doi, C. Tchawoua // *Nonlinear Dynamics*. — 2019. — Vol. 95, no. 3. — P. 2461–2468.
171. Nonlinear supratransmission in a discrete nonlinear electrical transmission line: Modulated gap peak solitons / F. Kenmogne, G. B. Ndombou, D. Yemélé, A. Fomethe // *Chaos, Solitons & Fractals*. — 2015. — Vol. 75. — P. 263–271.
172. Supratransmission phenomenon in a discrete electrical lattice with nonlinear dispersion / A. B. T. Motcheyo, C. Tchawoua, M. S. Siewe, J. D. T. Tchameu // *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*. — 2013. — Vol. 18, no. 4. — P. 946–952.
173. *Ruiz-Ramirez J.* On the propagation of binary signals in a two-dimensional nonlinear lattice with nearest-neighbor interactions / J. Ruiz-Ramirez, J. E. Macias-Diaz // *Journal of Nonlinear Mathematical Physics*. — 2010. — Vol. 17, no. 2. — P. 127–136.
174. *Macias-Diaz J. E.* Computational study of the transmission of energy in a two-dimensional lattice with nearest-neighbor interactions / J. E. Macias-Diaz, J. Ruiz-Ramirez, L. A. Flores-Oropeza // *International Journal of Modern Physics C*. — 2009. — Vol. 20, no. 12. — P. 1933–1943.
175. The effect of nonlinear supratransmission in discrete structures: a review / P. V. Zakharov [et al.] // *Comput. Res. Model.* — 2023. — Vol. 15, no. 3. — P. 599–617.
176. *Togueu Motcheyo A. B.* Supratransmission induced by waves collisions in a discrete electrical lattice / A. B. Togueu Motcheyo, C. Tchawoua, J. D. Tchintang Tchameu // *Physical Review E—Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics*. — 2013. — Vol. 88, no. 4. — P. 040901.
177. Homoclinic nonlinear band gap transmission threshold in discrete optical waveguide arrays / A. B. T. Motcheyo, J. D. T. Tchameu, M. S. Siewe, C. Tchawoua // *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*. — 2017. — Vol. 50. — P. 29–34.
178. *Susanto H.* Boundary driven waveguide arrays: supratransmission and saddle-node bifurcation / H. Susanto // *SIAM Journal on Applied Mathematics*. — 2008. — Vol. 69, no. 1. — P. 111–125.

179. *Susanto H.* Calculated threshold of supratransmission phenomena in waveguide arrays with saturable nonlinearity / H. Susanto, N. Karjanto // Journal of Nonlinear Optical Physics & Materials. — 2008. — Vol. 17, no. 02. — P. 159–165.
180. Dynamics of N-elastically longitudinal coupled rotating pendulums with smooth and discontinuous nonlinearities: Generation of chaotic bursting with many orbits as a solution / M. Fan, J. A. O. Ambassa, M. J. Gouajio, F. Kenmogne // Chinese Journal of Physics. — 2024. — Vol. 92. — P. 1331–1360.
181. *Tsuruta K.* Acoustic metasurfaces and topological phononics for acoustic/elastic device design / K. Tsuruta // Jpn. J. Appl. Phys. — 2023. — Vol. 62, SJ. — SJ0803.
182. *Maldovan M.* Sound and heat revolutions in phononics / M. Maldovan // Nature. — 2013. — Vol. 503, no. 7475. — P. 209–217.
183. *Banerjee A.* Waves in structured mediums or metamaterials: A review / A. Banerjee, R. Das, E. P. Calius // Archives of Computational Methods in Engineering. — 2019. — Vol. 26, no. 4. — P. 1029–1058.
184. Progress and perspectives on phononic crystals / T. Vasileiadis, J. Varghese, V. Babacic, J. Gomis-Bresco, D. Navarro Urrios, B. Graczykowski // J. Appl. Phys. — 2021. — Vol. 129, no. 16. — P. 160901.
185. *Patil G. U.* Review of exploiting nonlinearity in phononic materials to enable nonlinear wave responses / G. U. Patil, K. H. Matlack // Acta Mech. — 2022. — Vol. 233, no. 1. — P. 1–46.
186. *Bakhvalov N. S.* Numerical methods: analysis, algebra, ordinary differential equations / N. S. Bakhvalov. — Moscow: MIR Publishers, 1977.
187. Testing interatomic potentials for binary alloys using exact solutions to the equations of motion / D. S. Ryabov, G. S. Bezuglova, E. A. Korznikova, S. V. Dmitriev // Procedia Structural Integrity. — 2014. — Vol. 65. — P. 209–214.
188. *Bezuglova G. S.* Discrete breathers on symmetry-determined invariant manifolds for scalar models on the plane square lattice / G. S. Bezuglova, G. M. Chechin, P. P. Goncharov // Phys. Rev. E. — 2011. — Vol. 84, no. 3. — P. 036606.

189. *Chechin G.* Discrete breathers and nonlinear normal modes in monoatomic chains / G. Chechin, G. Dzhelauhova // J. Sound Vib. — 2009. — Vol. 322. — P. 490–512.
190. *Chechin G. M.* Quasibreathers as a generalization of the concept of discrete breathers / G. M. Chechin, G. S. Dzhelauhova, E. A. Mehonoshina // Phys. Rev. E. — 2006. — Vol. 74, issue 3. — P. 036608.
191. Delocalized nonlinear vibrational modes and discrete breathers in β -FPUT simple cubic lattice / S. A. Shcherbinin, A. M. Kazakov, Y. V. Bebikhov, A. A. Kudreyko, S. V. Dmitriev // Physical Review E. — 2024. — Vol. 109, no. 1. — P. 014215.
192. *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, issue 9. — P. 5755–5758.
193. Energy Localization in the Ordered Condensed Systems: A3B Alloys With L12 Superstructure / N. N. Medvedev, M. D. Starostenkov, A. I. Potekaev, P. V. Zakharov, A. V. Markidonov, A. M. Eremin // Russian Physics Journal. — 2014. — Vol. 57, no. 3. — P. 387–395.
194. *Medvedev N. N.* Energy localization on the Al sublattice of Pt₃Al with L12 order / N. N. Medvedev, M. D. Starostenkov, M. E. Manley // Journal of Applied Physics. — 2013. — Vol. 114, no. 21. — P. 213506.
195. Lattice dynamics of cubic AuZn from first principles / L. Isaeva, P. Souvatzis, O. Eriksson, J. C. Lashley // Phys. Rev. B. — 2014. — Vol. 89, issue 10. — P. 104101.
196. *Gao H.* Debye–Waller factors of compounds with the caesium chloride structure / H. Gao, L.-M. Peng // Acta Crystallographica Section A. — 2000. — Vol. 56. — P. 519–524.
197. *Uğur Ş.* Theoretical study of the phonon properties of SrS / Ş. Uğur // Materials Science and Engineering: B. — 2009. — Vol. 162, no. 2. — P. 116–119.
198. *Yari A.* Electronic, optical, magneto-optical, and thermoelectric properties of the SrS graphene-like under Cr impurity / A. Yari, A. Boochani, S. Rezaee // Chemical Physics. — 2021. — Vol. 551. — P. 111355.

199. *Baker I.* A review of the mechanical properties of B2 compounds / I. Baker // Mater. Sci. Eng. A. — 1995. — Vol. 192/193. — P. 1–13.
200. *Arikan N.* First-principles study of electronic and dynamic properties of AgMg and AgZn / N. Arikan, Ü. Bayhan // Solid State Communications. — 2012. — Vol. 152, no. 10. — P. 891–893.
201. The temperature dependence of the phononic band gap of NaI / M. Kempa [et al.] // Journal of Physics Condensed Matter. — 2013. — Vol. 25, no. 5. — P. 055403.
202. Lattice dynamics of NaI studied by inelastic neutron scattering: Absence of thermally induced discrete breathers / M. Kempa, P. Ondrejko, P. Bourges, P. Marton, J. Hlinka // Physical Review B. — 2014. — Vol. 89, no. 5. — P. 054308.
203. Delocalized nonlinear vibrational modes and discrete breathers in a body centered cubic lattice / S. A. Shcherbinin, Y. V. Bebikhov, D. U. Abdullina, A. A. Kudreyko, S. V. Dmitriev // Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation. — 2024. — Vol. 135. — P. 108033.
204. *Kistanov A. A.* Energy exchange between discrete breathers in crystal with NaCl structure / A. A. Kistanov, S. V. Dmitriev // Technical Physics Letters. — 2013. — Vol. 39, no. 7. — P. 618–620.
205. *Plimpton S.* Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics / S. Plimpton // Journal of computational physics. — 1995. — Vol. 117, no. 1. — P. 1–19.
206. *Zhou X. W.* Atomistic simulation study of atomic size effects on B1 (NaCl), B2 (CsCl), and B3 (zinc-blende) crystal stability of binary ionic compounds / X. W. Zhou, F. P. Doty, P. Yang // Computational materials science. — 2011. — Vol. 50, no. 8. — P. 2470–2481.
207. *Al-Awad A. S.* Parametrization of embedded-atom method potential for liquid lithium and lead-lithium eutectic alloy / A. S. Al-Awad, L. Batet, L. Sedano // Journal of Nuclear Materials. — 2023. — Vol. 587. — P. 154735.
208. *Sharifi H.* Developing interatomic potentials for complex concentrated alloys of Cu, Ti, Ni, Cr, Co, Al, Fe, and Mn / H. Sharifi, C. D. Wick // Computational Materials Science. — 2025. — Vol. 248. — P. 113595.

209. *Stukowski A.* Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO—the Open Visualization Tool / A. Stukowski // Modelling and simulation in materials science and engineering. — 2009. — Vol. 18, no. 1. — P. 015012.

Список рисунков

1.1	Структура ионного кристалла CsCl. Желтым выделена примитивная кубическая трансляционная ячейка, содержащая один атом Cl и один Cs.	21
1.2	Дисперсионные кривые (слева) и плотность фононных состояний (справа) кристалла CuBe согласно работе [86].	25
1.3	Дисперсионные кривые и плотность фононных состояний кристалла AuZn согласно работе [87].	25
1.4	Дисперсионные кривые и плотность фононных состояний кристалла CsCl согласно работе [89].	26
2.1	(а) Структура B2 (CsCl) на основе ОЦК решетки состоит из двух простых кубических подрешеток с параметром решетки a . Подрешетки заполнены атомами с массой m_1 (синий) и m_2 (красный). Связи между ближайшими и вторыми соседями показаны оранжевым и зеленым цветом, соответственно. Связи между третьими и четвертыми соседями также учитываются, но они не показаны. (б) Координатные оси и точки высокой симметрии (показаны красным) в первой зоне Бриллюэна ОЦК решетки.	34
2.2	Координаты атомов внутри вычислительной ячейки, включающей 8 атомов с массой m_1 (желтый) и 8 с массой m_2 (синий).	36
2.3	ДНКМ группы G1. Траектории колеблющихся атомов показаны черным цветом. Атомы с положительной (отрицательной) z -компонентой смещения отмечены точкой (крестиком).	40
2.4	ДНКМ группы G2.	40
2.5	ДНКМ группы G5.	40
2.6	ДНКМ группы G6.	41
2.7	ДНКМ группы G7.	41
2.8	(а) Дисперсионные кривые и (б) плотность фононных состояний для моноатомной ОЦК решетки ($m_1 = m_2 = 1$). Горизонтальными линиями на (б) показаны частоты ДНКМ в малоамплитудном пределе.	44

- 2.9 (а) Дисперсионные кривые и (б) плотность фононных состояний для биатомного кристалла В2 ($m_1 = 1$, $m_2 = 9$ или наоборот). Горизонтальные линии на (б) отмечают частоты малоамплитудных колебаний ДНКМ. Все ДНКМ, за исключением тех, что относятся к группе G2, обладают двумя частотами в зависимости от массы колеблющихся атомов. Эти частоты связаны соотношением (2.8). 45
- 2.10 Частотная характеристика ДНКМ для жесткой ангармонической решетки $\beta_l > 0$, $l = 1, \dots, 4$: (а) моноатомная решетка с $m_1 = m_2 = 1$, (б) биатомная решетка с $m_1 = 1$, $m_2 = 9$, и (в) биатомная решетка с $m_1 = 9$, $m_2 = 1$. В (б) и (в) границы разрыва в фононном спектре обозначены горизонтальными пунктирными линиями. 46
- 2.11 Частотная характеристика ДНКМ для ангармонической решетки мягкого типа $\beta_l < 0$, $l = 1, \dots, 4$: (а) моноатомная решетка с $m_1 = m_2 = 1$, (б) биатомная решетка с $m_1 = 1$, $m_2 = 9$, и (в) биатомная решетка с $m_1 = 9$, $m_2 = 1$. В (б) и (в) границы разрыва в фононном спектре обозначены горизонтальными пунктирными линиями. 47
- 2.12 (а) Частота ДНКМ и (б) ширина щели в фононном спектре как функции отношения масс компонентов, m_2/m_1 , для фиксированного $m_1 = 1$. Значения ρ_1 и ρ_2 , определяемые уравнением (2.14) и уравнением (2.15), соответственно, обозначены пунктирными вертикальными линиями. Ширина зазора $\Delta\omega$ была рассчитана с помощью уравнения (2.16) (линии) и численно из ПФС (символы). 48
- 2.13 Плотность фононных состояний для различных соотношений атомных масс, как указано на каждой панели ($m_1 = 1$). Горизонтальными линиями показаны частоты малоамплитудных колебаний ДНКМ групп G1 и G2. На (б) частота малоамплитудных колебаний группы G7 показана черной линией, так как здесь именно она соответствует верхнему краю щели в фононном спектре. Оранжевые пунктирные линии показывают удвоенную частоту нижнего края щели в фононном спектре. 49

- 2.14 Щелевые ДБ на основе ДНКМ (а) G1a, (б) G1b и (в) G1c в кристалле с ангармонизмом жесткого типа. Параметры модели: $m_1 = 1$, $m_2 = 3$, $\beta_l > 0$, $l = 1, \dots, 4$. Параметры уравнения (2.26) приведены в тексте. 53
- 2.15 Неустойчивый ДБ на основе ДНКМ G1b, см. рисунок 2.14(б). Показаны амплитуды колебаний центрального атома ДБ по координатам x и y как функции времени, нормированного на период колебаний ДБ. $A_z = 0$ в течение всего времени моделирования. 54
- 2.16 (а) Щелевой ДБ на основе ДНКМ G7a в кристалле с ангармонизмом мягкого типа. Параметры модели: $m_1 = 1$, $m_2 = 2,1$, $\beta_l < 0$, $l = 1, \dots, 4$. Параметры уравнения (2.26) приведены в тексте. (б) Компоненты амплитуд колебаний атома, окрашенного в красный цвет на (а), как функции времени, нормированного на период колебаний ДБ. 54
- 2.17 Полукристалл с поверхностью перпендикулярной оси x , на которую воздействует внешняя сила таким образом, что две атомные плоскости совершают гармонические колебания с амплитудой A и частотой ω в направлении оси x . Изучается передача энергии внешнего воздействия полукристаллу в зависимости от частоты и амплитуды вынужденных колебаний пары плоскостей. Рассматривается кристалл с жестким типом нелинейности ($\beta_l > 0$) и атомными массами компонент $m_1 = 1$, $m_2 = 3$. Лёгкие (тяжелые) атомы показаны желтым (голубым) цветом. 56
- 2.18 (а) Зависимость энергии кристалла в момент времени $t = 100$ от частоты внешнего воздействия для четырех различных амплитуд воздействия, как указано в легенде. Энергия кристалла нормирована на максимальную энергию, которая достигалась примерно при $\omega = 2,6$. На (б) и (в) показано то же самое для узких областей частоты внешнего воздействия. Вертикальные линии показывают границы акустической и оптической зон фоннного спектра. Щель в спектре находится в интервале частот $1,7667 < \omega < 2,1499$, а верхний край фоннного спектра находится на отметке $\omega = 3,0768$ 57

- 2.19 (а) Зависимость энергии кристалла от времени для внешнего воздействия на частоте $\omega = 1,2$ (в акустической полосе фононного спектра) и амплитуде $A = 0,06$. (б) Распределение энергии кристалла вдоль оси x в момент времени $t = 100$ 59
- 2.20 (а) Зависимость энергии кристалла от времени для внешнего воздействия на частоте $\omega = 1,81$ (в щели фононного спектра, у её нижнего края) и амплитуде $A = 0,06$. (б) Распределение энергии кристалла вдоль оси x в момент времени $t = 400$ 60
- 2.21 (а) Зависимость энергии кристалла от времени для внешнего воздействия на частоте $\omega = 3,16$ (выше фононного спектра) и амплитуде $A = 0,06$. (б) Распределение энергии кристалла вдоль оси x в момент времени $t = 300$ 61
- 2.22 Профили энергий двух ДБ в момент времени $t = 400$, испущенных левой поверхностью кристалла, совершающей вынужденные колебания. На (а) показан второй слева, а на (б) третий слева ДБ, см. рисунок 2.20(б). Параметры внешнего воздействия: $\omega = 1,81$, $A = 0,06$. Лёгкие (тяжелые) атомы показаны желтым (голубым) цветом. 63
- 2.23 Профили энергий двух ДБ в момент времени $t = 300$, испущенных левой поверхностью кристалла, совершающей вынужденные колебания. На (а) показан третий слева, а на (б) четвертый слева ДБ, см. рисунок 2.21(б). Параметры внешнего воздействия: $\omega = 3,16$, $A = 0,06$. Лёгкие (тяжелые) атомы показаны желтым (голубым) цветом. 63
- 3.1 (а) Кристалл со структурой CsCl с атомами двух типов, которые отличаются только массами, а межатомные взаимодействия одинаковы и описываются потенциалом β -ФПУЦ, уравнение (2.2). Параметр решетки равен a . (б) Делокализованная нелинейная колебательная мода $G1a$ (см. рисунок 2.3) с атомными плоскостями ориентации (100), колеблющимися параллельно оси x в противофазе с соседними плоскостями. Колеблются атомы только одной подрешетки, в то время как атомы другой подрешетки находятся в состоянии покоя. 67

- 3.2 Плотность фононных состояний рассматриваемого двухкомпонентного кристалла. В фононном спектре имеется щель с нижней границей на частоте $\omega_1 = 1,776$ и верхней границей на частоте $\omega_3 = 2,150$. Максимальная частота фононов равна $\omega_2 = 3,077$, см. уравнение (2.9). 68
- 3.3 Частотная характеристика ДНКМ, показанного на рисунке 3.1(б) (зеленая сплошная линия), и частотная характеристика стационарного ДБ (синие точки и линия). Амплитуда A нормирована на параметр решетки a . Горизонтальными пунктирными линиями показаны края щели в фононном спектре. 69
- 3.4 Движения атомов в ДБ, расположенных (а) на тяжелом атоме и (б) между двумя тяжелыми атомами. Смещения атомов увеличены для наглядности в два раза. 71
- 3.5 (а) Стационарный ДБ расположенный на атоме и (б-е) ДБ, осциллирующие вокруг этой конфигурации. Показаны временные зависимости смещений u_n вдоль оси x для трех центральных атомов ДБ. Параметры уравнения (3.1), используемого для возбуждения ДБ, следующие: $A = 0,38$, $\beta = 1,4$, $\gamma = 2,2$, и (а) $x_0 = 0$, (б) $x_0 = 0,05a$, (в) $x_0 = 0,1a$, (г) $x_0 = 0,25a$, (д) $x_0 = 0,4a$ и (е) $x_0 = 0,45a$. На (а) представлен результат для ДБ, показанного на рисунке 3.4(а). 72
- 3.6 Движущиеся ДБ, представленные временными зависимостями смещений u_n вдоль оси x для атомов в атомном ряду, вдоль которого движется ДБ. Параметры уравнения (3.1), используемого для возбуждения ДБ, следующие: $A = 0,38$, $\beta = 1,40$, $\gamma = 2,20$, $x_0 = 0,5a$, и (а) $\theta = 0,15$, (б) $\theta = 0,20$, (в) $\theta = 0,25$, (г) $\theta = 0,30$, (д) $\theta = 0,35$, (е) $\theta = 0,40$, (ж) $\theta = 0,45$ и (з) $\theta = 0,50$ 73
- 3.7 Скорость ДБ как функция параметра θ . Остальные параметры уравнения (3.2), используемые для возбуждения ДБ, следующие: $A = 0,38$, $\beta = 1,4$, $\gamma = 2,2$, и $x_0 = 0,5a$ 74

- 4.1 Амплитудно-частотные характеристики ДНКМ в кристалле CsCl. На (а) ДНКМ возбуждены на легких атомах Cl, а на (б) - на тяжелых атомах Cs. По этой причине, для всех мод, кроме ДНКМ группы G2, частоты колебаний на (б) ниже, чем на (а). ДНКМ группы G2 представляют собой колебания обеих моноатомных подрешеток в противофазе, поэтому они характеризуются одной частотой колебаний. Розовыми горизонтальными пунктирными линиями обозначены границы запрещенной зоны фононного спектра (щели). Верхний край спектра отмечен горизонтальной черной штрих-пунктирной линией на (а). 79
- 4.2 Амплитудно-частотные характеристики ДНКМ в кристалле LiPb. На (а) ДНКМ возбуждены на легких атомах Li, на (б) на тяжелых атомах Pb. Розовыми горизонтальными пунктирными линиями обозначены границы запрещенной зоны фононного спектра (щели). Верхний край спектра отмечен горизонтальной черной штрих-пунктирной линией на (а). 82
- 4.3 Амплитудно-частотные характеристики ДНКМ в кристалле NiTi. На (а) ДНКМ возбуждены на легких атомах Ti, на (б) на тяжелых атомах Ni. Отличие атомных масс компонент невелико, поэтому щель в фононном спектре отсутствует. Оранжевой штрих-пунктирной линией на (б) показана граница фононного спектра на частоте $\Omega = 7,52$ ТГц. 85
- 4.4 Начальные смещения атомов для возбуждения ДБ на основе ДНКМ G1a, где колебания совершают тяжелые атомы (показаны зеленым цветом), в то время легкие атомы (показаны оранжевым цветом) находятся в состоянии покоя. Возбуждение атомов одного ряда происходит вдоль оси x , при этом амплитуда начальных смещений убывает с удалением от центра ДБ. 89
- 4.5 Для кристалла LiPb был получен ДБ путем смещения шести атомов лития в атомном ряду вдоль оси x ; смещение атомов схематично показано на рисунке 4.4. Частота ДБ находится выше фононного спектра. Параметры, используемые для возбуждения ДБ, следующие: (а,б) $A_1 = 0,90 \text{ \AA}$, (в,г) $A_2 = 0,70 \text{ \AA}$ и (д,е) $A_3 = 0,50 \text{ \AA}$. Частота колебаний ДБ равна $\Omega = 8,57$ ТГц (выше фононного спектра). 90

- 4.6 Для кристалла LiPb был получен щелевой ДБ путем смещения шести атомов свинца в атомном ряду вдоль оси x . Смещение атомов схематично показано на рисунке 4.4. Параметры, используемые для возбуждения ДБ, следующие: (а,б) $A_1 = 0,50 \text{ \AA}$, (в,г) $A_2 = 0,38 \text{ \AA}$ и (д,е) $A_3 = 0,15 \text{ \AA}$. Частота колебаний ДБ равна $\Omega = 1,81 \text{ ТГц}$ (в щели фононного спектра). 91
- 4.7 Для кристалла LiPb был получен ДБ путем смещения атомов свинца в атомном ряду вдоль оси x , смещение атомов схематично показано на рисунке 4.4. Параметры, используемые для возбуждения ДБ: (а,б) $A_1 = 0,55 \text{ \AA}$, (в,г) $A_2 = 0,40 \text{ \AA}$ и (д,е) $A_3 = 0,15 \text{ \AA}$. Частота ДБ равна $\Omega = 1,88 \text{ ТГц}$ 92
- 4.8 То же, что и на рисунке 4.7, но для следующих параметров, используемых для возбуждения ДБ: (а,б) $A_1 = 0,60 \text{ \AA}$, (в,г) $A_2 = 0,50 \text{ \AA}$ и (д,е) $A_3 = 0,20 \text{ \AA}$. Частота ДБ равна $\Omega = 1,98 \text{ ТГц}$. 93

Список таблиц

- 1 Частоты ДНКМ различных групп в малоамплитудном пределе, рассчитанные для $m_1 = 1$, $m_2 = 9$, и их волновые векторы в первой зоне Бриллюэна (в скобках указана кратность корня). 42
- 2 Отношения частот ДНКМ, возбужденных на тяжелых и легких атомах в кристалле CsCl и рассчитанные из формулы (2.8), справедливой для кристалла β -ФПУЦ с межатомными взаимодействиями не зависящими от сорта атомов. 80
- 3 Отношения частот ДНКМ, возбужденных на тяжелых и легких атомах в кристалле LiPb и рассчитанные из формулы (2.8), справедливой для кристалла β -ФПУЦ с межатомными взаимодействиями не зависящими от сорта атомов. 83
- 4 Отношения частот ДНКМ, возбужденных на тяжелых и легких атомах в кристалле NiTi и рассчитанные из формулы (2.8), справедливой для кристалла β -ФПУЦ с межатомными взаимодействиями не зависящими от сорта атомов. 86