

На правах рукописи



Лобзенко Иван Павлович

**ИЗУЧЕНИЕ ДИСКРЕТНЫХ БРИЗЕРОВ В ГРАФЕНЕ И ГРАФАНА
МЕТОДАМИ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ НА ОСНОВЕ
ТЕОРИИ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ**

Специальность: 01.04.07 — физика конденсированного состояния

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Барнаул - 2015

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

Научный руководитель: кандидат физико-математических наук, доцент

Чечин Георгий Михайлович

Официальные оппоненты:

Медведев Николай Николаевич,

доктор физико-математических наук, доцент,
доцент каф. физики Бийского технологического
института (филиала) ФГБОУ ВО «Алтайский
государственный технический университет им. И. И.
Ползунова»

Закирьянов Фарит Кабирович,

кандидат физико-математических наук, доцент,
доцент каф. теоретической физики, ФГБОУ ВПО
«Башкирский государственный университет»

Ведущая организация:

Федеральное государственное бюджетное
образовательное учреждение высшего
профессионального образования «Саратовский
государственный университет имени
Н. Г. Чернышевского»

Защита состоится « 27 » января 2016 г. в 12⁰⁰ часов на заседании диссертационного
совета Д 212.004.04 при Алтайском государственном техническом университете им. И.И.
Ползунова по адресу: 656038, г. Барнаул, пр. Ленина, 46.,

e-mail: veronika_65@mail.ru.

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке и на сайте Алтайского
государственного технического университета им. И.И. Ползунова.

<http://www.altstu.ru/structure/unit/odia/scienceevent/2687/>

Автореферат разослан « ____ » _____ 2016 г.

Ученый секретарь диссертационного
совета,
кандидат физико-математических наук,
доцент



Романенко В.В.

Примечание: отзывы на автореферат, заверенные гербовой печатью организаций, просим
присылать в 2-х экз. на адрес университета и e-mail: veronika_65@mail.ru

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность работы и степень её разработанности

В настоящее время большой научный интерес представляют исследования различного типа нелинейных явлений. С момента выделения нелинейной динамики в самостоятельное направление естествознания, около полувека назад, в физике получили широкое распространение такие понятия как солитоны, динамический хаос, диссипативные структуры, бризеры и т.д. Важными и активно изучаемыми в наши дни динамическими объектами являются дискретные бризеры (ДБ), существующие исключительно в дискретных упорядоченных нелинейных системах. ДБ являются локализованными в пространстве и периодическими во времени возбуждениями нелинейных гамильтоновых решёток различной физической природы. Важным отличием этих объектов от бризеров в непрерывных системах является то, что они обладают большой структурной устойчивостью по отношению к малым изменениям изучаемой модели.

Начало становления теории ДБ связывают с работой Сиверса и Такено [1], вышедшей в 1988 году. С этого момента ДБ были экспериментально обнаружены в большом числе систем различной физической природы. В первую очередь здесь следует упомянуть макро- и мезоскопические структуры, в которых имеется возможность напрямую проследить за динамикой отдельных элементов (примерами могут служить цепочки контактов Джозефсона [2], массивы оптических волноводов [3], массивы механических микроантителей [4], гранулированные кристаллы [5]). Обнаружение дискретных бризеров в кристаллах представляет собой весьма сложную физическую задачу, и на сегодняшний день об их существовании можно судить лишь по косвенным экспериментальным данным, полученным с помощью таких методов как ИК-поглощение и рамановская спектроскопия, неупругое рассеяние медленных нейтронов на колебаниях кристаллической решётки. В связи с этим, следует упомянуть работы по исследованию локализации энергии в кристаллическом комплексе, условно называемом $PtCl$ [6], в кристаллах NaI [7,8], в квазиодномерных антиферромагнетиках [9] и в кристаллах $\alpha-U$ [10]. С учетом сложности постановки таких экспериментов при исследовании ДБ в

кристаллических структурах, а также в связи с трудностями их чисто теоретического исследования [11,12,13], на первый план выходят методы компьютерного моделирования.

Подавляющее число работ, посвящённых численному моделированию ДБ, выполнены в рамках метода молекулярной динамики (МД) [14]. При этом подходе атомы заменяются материальными точками, взаимодействие между которыми описывается с помощью простых парных потенциалов, типа Морзе, Леннарда-Джонса и K_2 - K_3 - K_4 , или более реалистичных феноменологических потенциалов, примером которых могут служить многочастичные потенциалы Бреннера [15] и AIREBO [16], широко использующиеся для моделирования углеводородов.

Основным недостатком использования традиционных методов молекулярной динамики является то, что результаты такого моделирования могут сильно зависеть от выбора феноменологического потенциала взаимодействия между частицами системы [17]. Особенно этот недостаток может проявиться при исследовании дискретных бризеров, представляющих собой существенно нелинейные динамические объекты, поскольку им отвечают колебания атомов с *большими* амплитудами. Действительно, все феноменологические потенциалы строятся из того расчёта, чтобы правильно описать линейные свойства исследуемой системы, такие как частоты фононных мод и энергия связи атомов друг с другом.

Альтернативой методам молекулярной динамики являются первопринципные (*ab initio*) расчёты, основанные на применении квантово-механического подхода. Особенно успешным в этом отношении является подход, основанный на теории функционала плотности (ТФП) [18]. В рамках этой теории были разработаны эффективные и достаточно точные численные методы расчёта многоэлектронных атомных, молекулярных и кристаллических структур. Важным отличием квантово-механических методов от традиционных методов молекулярной динамики является то, что при описании колебаний атомов автоматически учитывается поляризация их электронных оболочек. С другой стороны, этот эффект является существенным при рассмотрении бризерных колебаний и не может быть учтён в рамках исследования модели материальных точек, взаимодействие которых описывается

феноменологическими потенциалами. В свете вышесказанного, проведение первопринципных расчётов на основе теории функционала плотности является весьма *актуальной* и важной задачей теории ДБ.

Настоящая диссертация посвящена исследованию дискретных бризеров в графене и графана. Эти материалы были открыты лишь в начале нашего века и обладают целым рядом свойств, которые делают их весьма перспективными для использования в самых разнообразных высокотехнологичных областях науки и производства. Возможность практического использования графена и графана обусловлена их уникальными механическими и электронными свойствами [19-23]. Исследованию дискретных бризеров в графене с помощью методов молекулярной динамики посвящена работа [24]. В работе [25] с помощью аналогичных методов рассмотрены щелевые бризеры в графене, подвергнутом одноосному растяжению. Обе эти работы выполнены в рамках классической физики. В связи с этим, проведенное в настоящей диссертации исследование дискретных бризеров в графене и графана с помощью методов теории функционала плотности, учитывающей квантово-механическое описание поляризации электронных оболочек атомов, представляется весьма актуальным.

Другой важной задачей теории локализованных возбуждений в кристаллах является исследование возможности существования *точных* движущихся дискретных бризеров (ДДБ), для создания которых при численном моделировании требуется задание идеального начального профиля этого динамического объекта. Несмотря на то, что точные решения, соответствующие ДДБ, были получены для цепочек типа Ферми-Пасты-Улама из 3 и 4 частиц [26,27], вопрос о природе движения дискретных бризеров в кристаллических решётках остаётся в значительной степени открытым (см., например, обзор [13]).

На основании приведённых выше актуальных проблем теории дискретных бризеров были сформулированы цели данной работы.

Цели и задачи работы

1. Построить дискретные бризеры в графанах и графене в рамках метода функционала плотности и изучить их свойства.

2. Сопоставить результаты анализа найденных бризеров, полученные методом функционала плотности, с известными молекулярно-динамическими расчетами, основанными на феноменологических потенциалах.
3. Разработать методику уточнения начального профиля локализованных в пространстве, но не строго периодических во времени динамических объектов (квазибризеров [28]), с целью построения машинно-точных стационарных дискретных бризеров.
4. Разработать метод построения машинно-точных *движущихся* дискретных бризеров и осуществить их поиск в цепочках Ферми-Пасты-Улама с достаточно большим числом частиц.

Научная новизна

- Впервые для изучения щелевых дискретных бризеров в графене и графене использовалась квантово-механическая теория функционала плотности. Принципиально важным является то, что первопринципные расчёты, основанные на этой теории, в отличие от традиционных методов молекулярной динамики, позволяют учесть поляризацию электронных оболочек в процессе атомных колебаний. Показано, что для бризеров в графене применение такого подхода приводит в области больших амплитуд колебаний к качественно отличным результатам, по сравнению с результатами работы [24], полученными методом молекулярной динамики с использованием феноменологического потенциала AIREBO.

- Для щелевых ДБ в графене разработан и успешно апробирован метод уточнения начальных условий их возбуждения, основанный на вычислении степени квазибризерности данного динамического объекта.

- Исследованы движущиеся бризероподобные динамические объекты в цепочках типа K_2 - K_3 - K_4 различной длины с закреплёнными концами. Предложена целевая функция для оценки близости решения к точному движущемуся дискретному бризеру (ДДБ), и показано отсутствие локальных минимумов этой функции в окрестности такого динамического объекта.

- Разработан программный комплекс для нахождения движущихся дискретных бризеров с заданной степенью точности. В цепочках типа Ферми-Пасты-Улама с периодическими граничными условиями построены машинно-точные ДДБ с различными скоростями движения.

Теоретическая и практическая значимость

Полученные в диссертации результаты представляют интерес для специалистов в области физики кристаллов и в области нелинейной динамики систем с дискретной симметрией. Разработанные методы могут быть использованы при исследовании дискретных бризеров в кристаллических структурах различных типов. Свойства дискретных бризеров, рассчитанные в данной работе с помощью надёжных и достаточно точных методов теории функционала плотности, могут применяться для верификации феноменологических потенциалов, используемых в молекулярной динамике.

Положения, выносимые на защиту

1. На основе квантово-механической теории функционала плотности показано существование щелевых дискретных бризеров в графене и однородно деформированном графене.
2. В рамках теории функционала плотности развит метод уточнения начальных условий для возбуждения дискретных бризеров. Предложенный метод применён для улучшения синхронизации колебаний атомов бризера с частотой, находящейся в щели фононного спектра графана.
3. Для произвольных цепочечных моделей развит численный метод построения машинно-точных движущихся дискретных бризеров (ДДБ) на основе минимизации целевой функции, определяющей точность воспроизведения профиля бризера через заданный временной интервал (период ДДБ).
4. На основе разработанных методов для цепочек типа Ферми-Пасты-Улама- β различной длины построены точные движущиеся дискретные бризеры с разными скоростями движения.

Методы исследования и достоверность результатов

Проведённые в диссертации первопринципные расчёты осуществлены с помощью программного пакета ABINIT, который является одной из самых распространённых в настоящее время реализаций методов теории функционала плотности. Автором также были использованы разнообразные численные методы решения систем нелинейных дифференциальных уравнений. Достоверность результатов подтверждается надёжностью вышеуказанных методов и согласием полученных автором результатов с литературными данными в тех случаях, когда такое сравнение было возможно провести.

Апробация результатов

Результаты исследований были представлены на следующих международных и всероссийских конференциях:

- «The International Symposium on Atomistic Modeling for Mechanics and Multiphysics of Materials» ISAM4 (Япония, Токио, 2013);
- «International Conference on Nonlinear Dynamics» ND-KhPI2013 (Украина, Севастополь, 2013);
- «Ультрамелкозернистые и наноструктурные материалы» (Россия, Уфа, 2014);
- XIII Международная школа-семинар «Эволюция дефектных структур в конденсированных средах» ЭДС – 2014 (Россия, Барнаул, 2014).

Личный вклад автора

Все численные эксперименты, результаты которых представлены в диссертации, подготовлены и проведены лично автором. Им же были разработаны программы оптимизации профилей стационарных и движущихся дискретных бризеров. Постановка задач и анализ полученных результатов проводились совместно с научным руководителем. Основные положения и выводы диссертационной работы сформулированы автором.

Публикации

По теме диссертации опубликовано 8 работ, в том числе 4 статьи в рецензируемых физических журналах, рекомендованных ВАК РФ, при чём одна из них - в журнале Physical Review B, индексируемом в Web of Science и Scopus.

Структура и объём работы

Диссертация состоит из введения, четырёх глав, заключения, списка литературы. Работа содержит 122 страницы, в том числе 54 рисунка и 4 таблицы. Список литературы насчитывает 107 наименования.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснована актуальность темы исследования, сформулированы задачи и цели работы, отмечена новизна основных результатов, раскрыто их научное и практическое значение, приведены сведения о личном вкладе соискателя и об апробации работы.

В первой главе дан обзор литературы по теме диссертации. В обзоре показана необходимость изучения ДБ в кристаллах компьютерными методами, основанными на теории функционала плотности, а также исследования точных движущихся бризеров в рамках классической динамики.

Во второй главе обсуждаются свойства ДБ в модели графана – полностью гидрогенизированного графена. Результаты, приведённые в этой главе, получены с помощью численного моделирования на основе метода функционала плотности.

В **разделе 2.1** приводится сравнение численного моделирования на основе классического приближения, в котором атомы заменяются материальными точками (МТ-модели), с моделированием в рамках квантово-механической теории функционала плотности (ABINIT-модели). Фактически, расчёты в ABINIT-моделях выполняются в ряде приближений. Для разделения быстрого движения электронов и медленного движения ядер используется приближение Борна-Оппенгеймера. При этом движение электронной подсистемы описывается квантово-механическими уравнениями Кона-Шема, а движение ядерной подсистемы – классическими уравнениями движения (входящие в них силы определяются электронной подсистемой, мгновенно подстраивающейся под конфигурацию ядер). Результаты, полученные в таких приближениях, представляются намного более адекватными по сравнению с результатами, полученными в каких бы то ни было МТ-моделях, поскольку они учитывают сложные квантово-механические эффекты поляризации электронных оболочек атомов в процессе бризерных колебаний.

В разделе 2.2 описывается исследуемая система - графан, представляющий собой лист графена с присоединёнными атомами водорода по одному к каждому атому углерода, с обеих сторон листа в шахматном порядке (см. Рис. 1, слева). Исследование фононного спектра данной системы показывает наличие широкой щели (Рис 1, справа) в промежутке частот от $\omega_L = 41.7 \text{ THz}$ до $\omega_H = 81.6 \text{ THz}$.

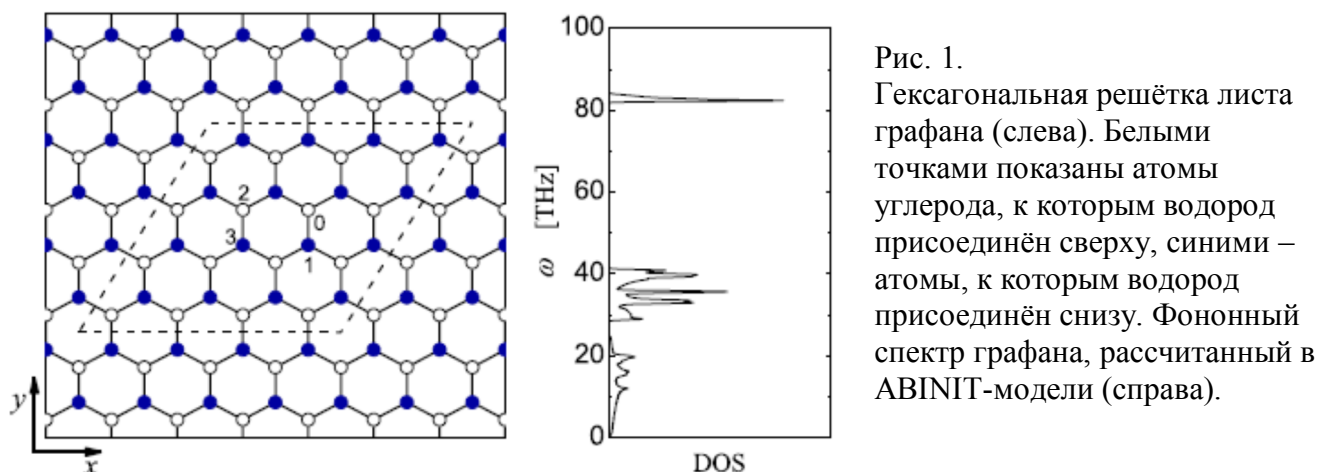


Рис. 1.
Гексагональная решётка листа графана (слева). Белыми точками показаны атомы углерода, к которым водород присоединён сверху, синими – атомы, к которым водород присоединён снизу. Фононный спектр графана, рассчитанный в ABINIT-модели (справа).

В разделе 2.3 обсуждается простой метод возбуждения бризероподобных объектов, заключающийся в том, что в начальный момент времени из положения равновесия выводится один атом водорода в z -направлении, при этом все остальные атомы находятся в узлах решётки графана, и все атомы имеют нулевую начальную скорость. В процессе моделирования динамики графана возбуждение не распространяется по всей решётке, а остаётся локализованным вокруг ядра бризера – атома H_0 и расположенного под ним атома C_0 , колеблющихся в y -направлении.

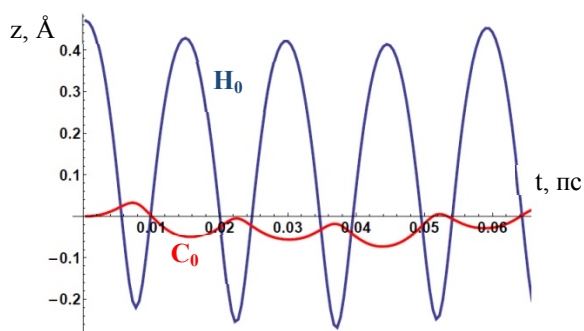


Рис. 2.
Динамика ядра квазibriзера, состоящего из атома водорода H_0 и находящегося под ним углерода C_0 . Атом углерода начинает движение из своего положения равновесия и сразу «подстраивается» под колебания атома водорода.

В разделе 2.4 описываются свойства локализованных бризероподобных динамических объектов в графана. Вводится амплитуда и частота ДБ, рассчитываемые по функции $zH_0(t)$, описывающей отклонение центрального атома водорода из своего положения равновесия в z -направлении, усредненные по десятку

колебательных периодов. Разным начальным отклонениям атома H_0 соответствуют бризеры с разной амплитудой и частотой.

На Рис. 3 представлена зависимость частоты ω_{DB} бризеров в графене от их амплитуды A , при этом с увеличением амплитуды наблюдается монотонное убывание частоты бризера, что соответствует мягкому типу нелинейности. Данная зависимость для ДБ, впервые полученная в ABINIT-модели, качественно отличается от результата, приведённого в статье [24], полученного при помощи МТ-модели (с потенциалом межатомного взаимодействия AIREBO). Авторами указанной работы для зависимости $\omega_{DB}(A)$ была получена сложная немонотонная функция, которая свидетельствовала о существовании трёх качественно разных областей значений амплитуд A и описывала две смены типа нелинейности – от мягкого типа к жёсткому и затем обратно к мягкому.

В данном разделе также рассматривается изменение электронной плотности системы в процессе колебаний ДБ (см. Рис. 4).

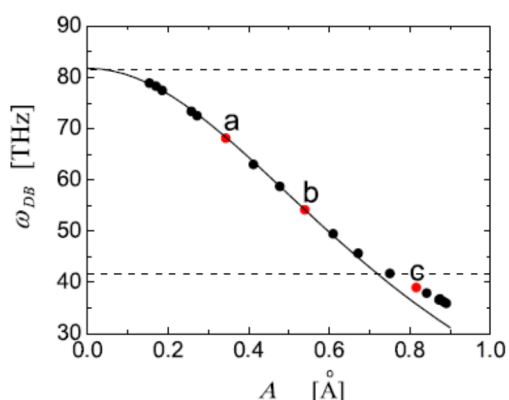


Рис. 3.
Зависимость частоты от амплитуды для щелевых ДБ в графене. Пунктирными линиями показаны границы запрещённой зоны фононного спектра. Точки представляют экспериментальные данные. Кривая – расчет в модели с одной степенью свободы при наличии морзе-связи между H_0 и C_0 .

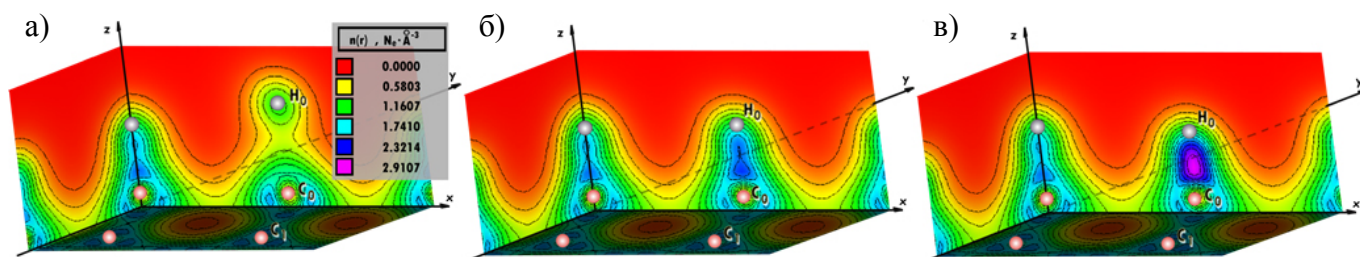


Рис. 4.

Распределение электронной плотности вблизи ядра дискретного бризера.

а – начальный момент времени, соответствующий максимальному отклонению атома H_0 из своего положения равновесия в сторону противоположную атому C_0 ;

б – прохождение атомом H_0 своего положения равновесия;

в – положение максимального сближения атомов H_0 и C_0 .

В разделе 2.5 разработан метод уточнения бризерного решения для приближения его к точному ДБ. Метод использует концепцию квазibriзеров, развитую в работе [28]. Введена функция, которая может быть использована как невязка для метода спуска с целью нахождения численно точного ДБ с периодом T :

$$\Delta_H[P(0)] = \sqrt{\sum_{i=1}^M \frac{(zh_0(0) - zh_0(i \cdot T))^2}{M(M-1)}}, \quad (1)$$

где $P(0)$ – начальный профиль бризера (отклонения всех атомов из своих положений равновесия в момент времени $t=0$), $zh_0(t)$ – отклонение атома H_0 из положения своего равновесия в z -направлении в данный момент времени, M – количество учитываемых периодов бризерных колебаний.

Очевидно, значение глобального минимума функции $\Delta_H[P(0)]$ равняется нулю и достигается лишь для строго периодической функции $zh_0(t)$. Формально, функция (1) представляет собой функционал, определяющийся в явном виде лишь временной зависимостью смещения атома H_0 из своего положения равновесия - $zh_0(t)$. Тем не менее, функция (1) неявно зависит от начальных положений всех атомов, и является, таким образом, определённой в пространстве $3N$ переменных (где N – количество атомов в системе). Это приводит к необходимости находить минимум в многомерном пространстве, что само по себе является нетривиальной задачей. Однако в силу симметричных соображений можно выделить несколько параметров, вносящих основной вклад в невязку, что позволяет ускорить расчёты за счёт уменьшения размерности пространства, в котором осуществляется спуск (см. Рис. 5).

На Рис. 6 представлен динамический объект, полученный после уточнения квазibriзера с учётом 3 периодов ($M=3$) на каждом шаге спуска. Из этого рисунка ясно видна более точная синхронизация движения атомов H_0 и C_0 по сравнению с картиной, представленной на Рис. 2.

В третьей главе обсуждаются свойства ДБ, полученных в ходе численного моделирования на основе метода функционала плотности, в однослойном растянутом графене.

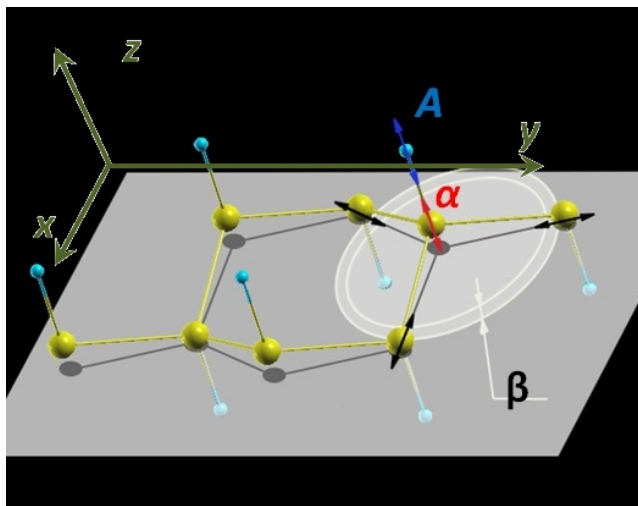


Рис. 5.
Параметры конфигурации системы, вносящие основной вклад в невязку (1): α – отклонение атома C_0 в z -направлении, β – изменение радиуса первой координационной сферы (атома C_0) в проекции на плоскость xy . A – амплитуда бризера (отклонение атома H_0 в начальный момент времени).

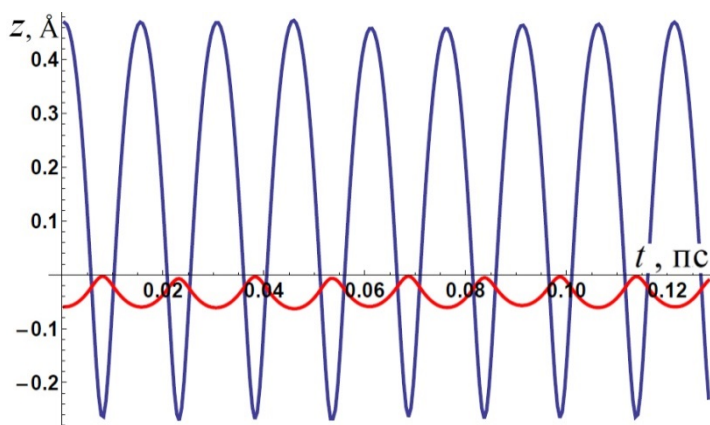


Рис. 6.
Эволюция во времени смещений из своих положений равновесия атомов H_0 (синяя кривая) и C_0 (красная кривая), для ДБ, полученного уточнением профиля квазибризера с амплитудой $A=0.469\text{\AA}$.

В разделе 3.1 рассмотрена исследуемая модель. Приводятся результаты расчёта фононного спектра графена при различных упругих деформациях. Показано, что при однородной деформации с компонентами $\varepsilon_{xx} = 0.2$, $\varepsilon_{yy} = -0.0244$, графен имеет запрещённую щель в спектре фононных частот (Рис. 7), в отличие от недеформированной структуры, где такая щель отсутствует. Отметим, что спектр, приведенный на Рис. 7, не содержит мнимых частот, что свидетельствует об устойчивости листа графена при данной однородной деформации.

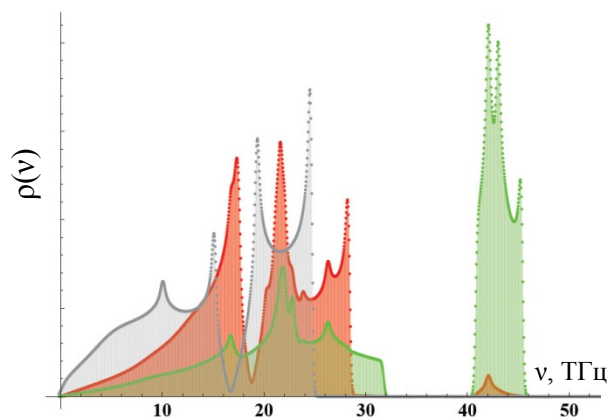


Рис. 7.
Плотность фононных состояний устойчивой конфигурации графена, подверженного однородной деформации с компонентами $\varepsilon_{xx} = 0.2$, $\varepsilon_{yy} = -0.0244$. Различными цветами показаны вклады в плотность состояний от трёх пространственных направлений: x - красным, y - зелёным, z - серым.

В разделе 3.2 рассмотрен простой способ возбуждения бризеров в однородно деформированном графене с компонентами деформации $\varepsilon_{xx} = 0.2$, $\varepsilon_{yy} = -0.0244$. В начальный момент времени атомы углерода 10 и 15 (см. Рис. 8), которые впоследствии будут являться ядром ДБ, выводятся из своего положения равновесия вдоль оси y на одинаковую величину в противоположные стороны. Остальные атомы имеют нулевые начальные перемещения, причём начальные скорости всех атомов равны нулю.

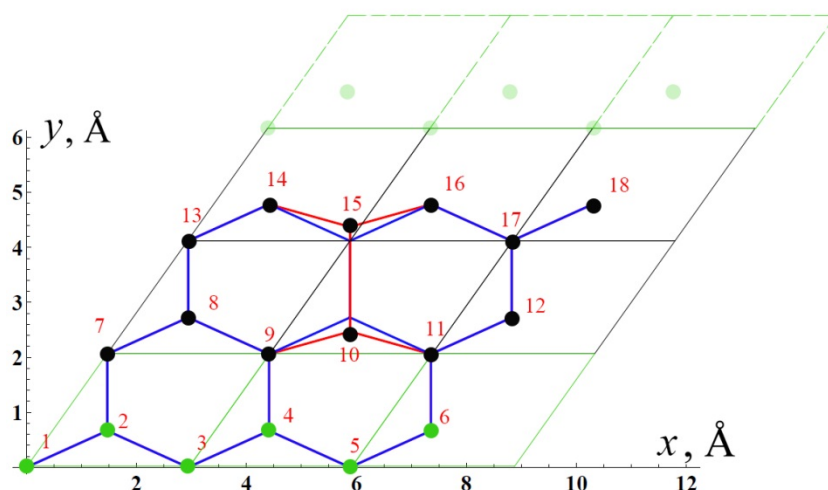


Рис. 8.
Расчётная ячейка деформированного графена, содержащая 9 примитивных ячеек (ПЯ) в форме параллелепипеда. Полупрозрачным показаны положения атомов, отмеченных зелёным, с учётом применения периодических граничных условий. Красными цифрами занумерованы атомы.

При достаточно большом отклонении атомов с номерами 10 и 15 из своих положений равновесия в начальный момент времени, в ходе численного моделирования динамики решётки возникает локализованный бризероподобный объект, эволюция которого показана на Рис. 9.

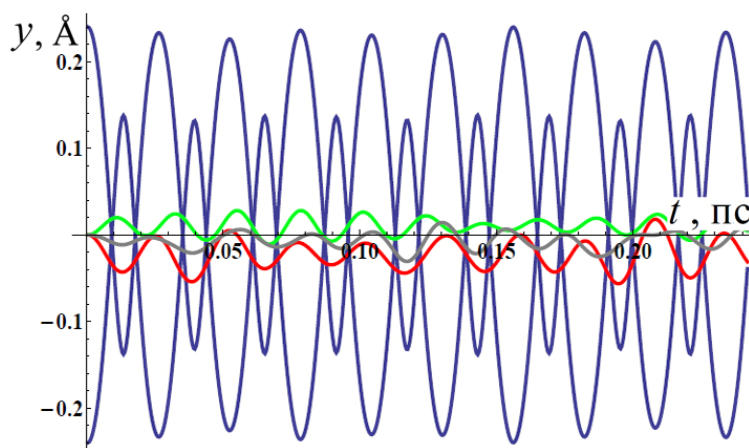


Рис. 9.
Динамика атомов графена, полученная с помощью алгоритма Верле. Зависимость отклонения из положения равновесия вдоль оси y для атомов с номерами 10 (синий), 15 (синий), 9 (красный), 4 (серый), 8 (зелёный).

В разделе 3.3 обсуждаются свойства бризеров в графене. В зависимости от величины смещения центральных атомов бризера (атомы с номерами 10 и 15 на Рис. 8) из своего положения равновесия в начальный момент времени, в графене

возникают бризеры с различной амплитудой и частотой. Средняя амплитуда и частота рассчитывалась путем осреднения по десяти периодам колебаний. На Рис. 10 представлена зависимость частоты от амплитуды для щелевых ДБ в монослое графена с компонентами деформации $\varepsilon_{xx} = 0.2$, $\varepsilon_{yy} = -0.0244$.

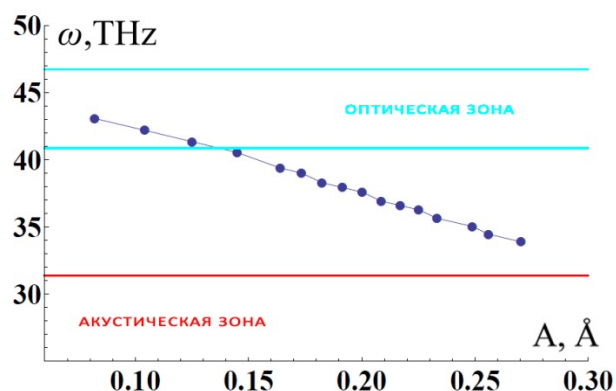


Рис. 10.
Зависимость частоты от амплитуды для квазibriзеров в деформированном графене. Голубые линии ограничивают оптическую полосу фононного спектра, красная линия соответствует верхней границе акустической полосы спектра.

Эксперименты показывают, что квазibriзеры с частотой, находящейся в оптической ветке фононного спектра, имеют достаточно маленькое время жизни (около 30 периодов колебаний), в то время как квазibriзеры с частотой в щели фононного спектра практически не затухают (см. Рис. 9).

В четвёртой главе обсуждаются движущиеся дискретные бризеры (ДДБ) в классических моделях монокристаллических цепочек с парным потенциалом межатомного взаимодействия.

В разделе 4.1 представлены движущиеся бризероподобные объекты в цепочках с потенциалом взаимодействия K_2 - K_3 - K_4 . В случае цепочек с закреплёнными концами может быть использован простой способ получения ДДБ. Для этого достаточно задать ненулевые начальные смещения лишь двух частиц, находящихся у края: $x_i(0) = \{0, a_0, -a_0, 0 \dots 0\}$, $\dot{x}_i(0) = \{0, 0, 0, 0 \dots 0\}$. Аналогично случаю стационарных бризеров, энергия не распределяется равномерно по всей цепочке, а остаётся локализованной. Отличие заключается в том, что центр локализации перемещается в процессе колебаний частиц, и таким образом бризер движется (см. Рис. 11).

В разделе 4.2 на основе определения дискретного бризера вводится целевая функция (функция невязки), которая может быть использована в различных методах спуска для нахождения машинно-точных движущихся дискретных бризеров.

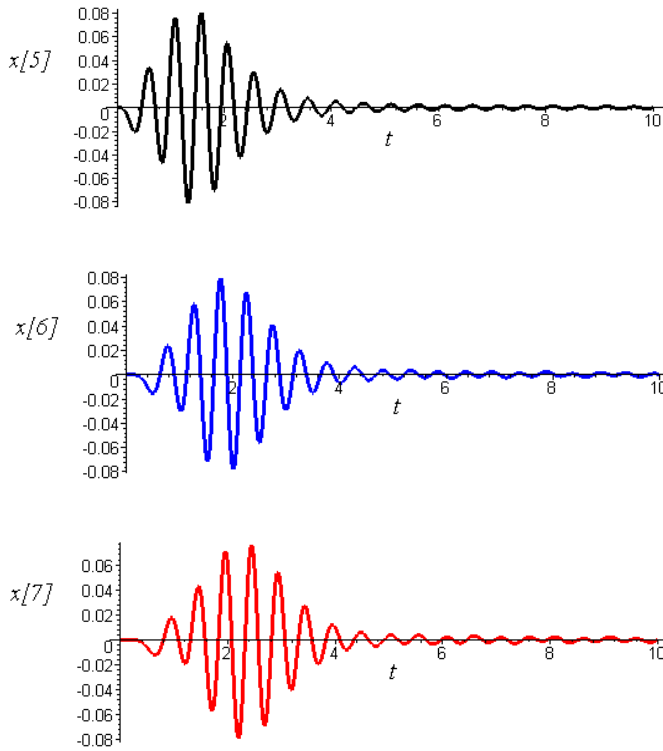


Рис. 11.

Колебания трёх расположенных друг за другом частиц в движущемся бризероподобном объекте в зависимости от времени.

Коэффициенты потенциала взаимодействия $K_2=4\pi^2$, $K_3=0$, $K_4=800$. Максимум амплитуды переходит со временем с одной частицы на другую, обеспечивая движение бризера без излучения энергии.

Точным ДДБ в цепочке из N частиц называется локализованное колебательное возмущение, которое через определенное время T полностью повторяет себя со сдвигом на некоторое число r узлов:

$$x_i(0) = x_{i+r}(T), v_i(0) = v_{i+r}(T), i = 1..N.$$

Здесь $x_i(t)$, $v_i(t)$ – соответственно смещение и скорость i -ой частицы в момент времени t , T условно называется периодом ДДБ. Наряду с этим периодом вводится понятие внутреннего периода t_b , за который совершается одно колебание частицы, являющейся в данный момент центром бризера.

Для построения движущихся бризеров были использованы разные варианты метода спуска в многомерных расширенных фазовых пространствах изучаемых динамических систем. При этом проводилась минимизация функции

$$d(\xi, T) = \frac{1}{N} \sum_i (x_i(0) - x_{i+r}(T))^2 + \frac{1}{N} \sum_i (v_i(0) - v_{i+r}(T))^2,$$

где $\xi = \{x_i(0), v_i(0) \mid i=1..N\}$ – полный набор начальных условий (начальный профиль) для численного интегрирования системы дифференциальных уравнений, описывающей динамику исследуемой цепочки. Функция $d(\xi, T)$ зависит не только от начального профиля ξ , но и от периода T , определяя степень близости искомого

решения к точному ДДБ. В результате применения метода спуска с использованием сопряжённых градиентов, нами были найдены с достаточно высокой степенью точности ДДБ в цепочках типа Ферми-Пасты-Улама- β с количеством частиц вплоть до $N=20$. Следует отметить, что в силу сильной локализации бризерного решения, ДДБ, найденные с высокой степенью точности для сравнительно небольших цепочек ($10 < N < 20$), практически не меняют свой профиль при дальнейшем увеличении длины цепочки.

В заключении формулируются основные результаты и выводы:

1. Впервые в рамках теории функционала плотности показано существование дискретных бризеров в моделях графана и графена.

2. Изучены свойства щелевых дискретных бризеров в графене, в ходе чего установлено качественное различие результатов, получаемых при помощи метода функционала плотности и метода молекулярной динамики на основе распространённого потенциала межчастичного взаимодействия AIREBO. Существенные различия наблюдаются в областях больших амплитуд. Полученные результаты могут быть использованы для верификации модельных феноменологических потенциалов в областях больших нелинейностей.

3. На основе концепции квазибризеров предложена функция невязки, которая показывает степень квазибризерности бризероподобного объекта и может быть использована в методе спуска для отыскания уточнённых начальных условий для возбуждения ДБ в графене. Функция невязки апробирована для улучшения синхронизации колебаний атомов одного из бризеров с частотой, лежащей в запрещённой зоне фононного спектра графана.

4. В ходе численного моделирования на основе метода функционала плотности изучены свойства щелевых бризеров в графене. Показано, что при попадании частоты бризера в область частот делокализованных мод фононного спектра, локализованное колебание имеет очень маленькое время жизни, в то время как бризеры с частотой в щели фононного спектра практически не затухают.

5. В классических моделях моноатомных цепочек с межчастичным потенциалом взаимодействия K_2 - K_3 - K_4 исследованы движущиеся дискретные

бризеры с различными скоростями движения. Показано, что при увеличении степени нелинейности локализованного объекта, скорость его движения убывает.

6. На основе определения точного движущегося дискретного бризера предложена функция невязки, которая может быть использована как целевая функция в методах спуска для нахождения движущихся дискретных бризеров с наперёд заданной точностью. Предложенная методика апробирована на модели типа Ферми-Пасты-Улама- β , в которой с помощью метода сопряжённых градиентов были найдены движущиеся дискретные бризеры с хорошей степенью точности, в том числе, и для достаточно длинных цепочек ($N \leq 20$).

Цитируемая литература

1. Sievers, A.J. Intrinsic localized modes in anharmonic crystals / A.J. Sievers, S. Takeno // Phys. Rev. Lett. – 1988. – V. 61. – P. 970-973.
2. Trias, E. Discrete breathers in nonlinear lattices: Experimental detection in a Josephson array / E. Trias, J. J. Mazo, T. P. Orlando // Phys. Rev. Lett. – 2000. – V. 84. – P. 741-744.
3. Morandotti, R. Dynamics of discrete solitons in optical waveguide arrays / R. Morandotti, U. Peschel, J. S. Aitchison, H. S. Eisenberg, Y. Silberberg // Phys. Rev. Lett. – 1999 – V. 83. – P. 2726-2729.
4. Sato, M. Nonlinear energy localization and its manipulation in micromechanical oscillator arrays / M. Sato, B.E. Hubbard, A.T. Sievers // Rev. Mod. Phys. – 2006. – V. 78. – P. 137-157.
5. Boechler, N. Discrete breathers in one-dimensional diatomic granular crystals / N. Boechler, G. Theoharis, S. Job, P.G. Kevrekidis, M.A. Porter, C. Daraio // Phys. Rev. Lett. – 2010. – V. 104. – P. 244302-4.
6. Swanson, B. I. Observation of intrinsically localized modes in a discrete low-dimensional material / B. I. Swanson, J. A. Brozik, S. P. Love, G. F. Strouse, A. P. Shreve, A. R. Bishop, W.-Z. Wang // Phys. Rev. Lett. – 1999. – V. 82. – P. 3288-3291.
7. Manley, M. E. Intrinsic Localized Modes Observed in the High Temperature Vibrational Spectrum of NaI / M.E. Manley, A.J. Sievers, J.W. Lynn, S.A. Kiselev, N.I. Agladze, Y. Chen, A. Llobet, A. Alatas // Phys. Rev. B. – 2009. – V. 79. – P. 134304-5.
8. Manley, M. E. Symmetry breaking dynamical pattern and localization observed in the equilibrium vibrational spectrum of NaI / M.E. Manley, D.L. Abernathy, N.I. Agladze, A.J. Sievers // Scientific Rep. – 2011. – V. 01. – P. 1-6.
9. Schwarz, U. T. Experimental Generation and Observation of Intrinsic Localized Spin Wave Modes in an Antiferromagnet / U.T. Schwarz, L.Q. English, A.J. Sievers // Phys. Rev. Lett. – 1999. – V. 83. – P. 223-226.
10. Manley, M.E. Formation of a New Dynamical Mode in α -Uranium Observed by Inelastic X-Ray and Neutron Scattering by x-ray and neutron scattering / M. E. Manley, M. Yethiraj, H. Sinn, H. M. Volz, A. Alatas, J. C. Lashley, W. L. Hults, G. H. Lander, and J. L. Smith // Phys. Rev. Lett. – 2006. – V. 96. – P. 125501.
11. Aubry, S. Breathers in nonlinear lattices: existence, linear stability and quantization / S. Aubry // Physica D. – 1997. – V. 103. – P. 201-250.
12. Aubry, S. Discrete breathers: localization and transfer of energy in discrete Hamiltonian nonlinear systems / S. Aubry // Physica D. – 2006. – V. 216. – P. 1-30.
13. Flach, S. Discrete breathers: advances in theory and applications / S. Flach, A. Gorbach // Phys. Rep. – 2007. – V. 467. – P. 1-116.
14. Холмуродов, Х.Т. Методы молекулярной динамики для моделирования физических и биологических процессов / Х.Т. Холмуродов, М.В. Алтайский, И.В. Пузынин, Т. Дардин, Ф.П. Филатов // Физика Элементарных Частиц и Атомного Ядра. – 2003. – Т. 34. – С. 472-515.
15. Brenner, D.W. Empirical potential for hydrocarbons for use in simulating the chemical vapor deposition of diamond films / Donald W. Brenner // Phys. Rev. B. – 1990. – V. 42 – P.15.
16. Stuart, S. J. A reactive potential for hydrocarbons with intermolecular interactions / S. J. Stuart, A. B. Tutein, and J. A. Harrison // J. Chem. Phys. – 2000. – V. 112 – P. 6472.

17. Voulgarakis, N.K. Computational investigation of intrinsic localization in crystalline Si / N.K. Voulgarakis, G. Hadjisavvas, P.C. Kelires, G.P. Tsironis // *Phys. Rev. B.* – 2004. – V. 69. – P. 113201.
18. Kohn, W. Nobel Lecture / W. Kohn // *Rev. Mod. Phys.* – 1999. – V. 71 – P. 1253.
19. Geim, A. The rise of graphene / A. Geim, K. Novoselov // *Nat. Mater.* – 2007. – V. 6. – P. 183-191.
20. Sofo, J.O. Graphane: A two-dimensional hydrocarbon / J. O. Sofo, A. S. Chaudhari, and G. D. Barber // *Phys. Rev. B.* – 2007. – V. 75 – P. 153401.
21. Boukhvalov, D.W. Hydrogen on graphene: Electronic structure, total energy, structural distortions and magnetism from first-principles calculations / D. W. Boukhvalov, M. I. Katsnelson, and A. I. Lichtenstein // *Phys. Rev. B.* – 2008. – V. 77. – P. 035427.
22. Elias, D.C. Control of graphene's properties by reversible hydrogenation: evidence for graphene / D. C. Elias, R. R. Nair, T. M. G. Mohiuddin, S. V. Morozov, P. Blake, M. P. Halsall, A. C. Ferrari, D. W. Boukhvalov, M. I. Katsnelson, A. K. Geim, and K. S. Novoselov // *Science.* – 2009. – V. 323. – P. 610-613.
23. Tozzini, V. Prospects for hydrogen storage in graphene / V. Tozzini, V. Pellegrini // *Phys. Chem. Chem. Phys.* – 2013. – V. 15. – P. 80-89.
24. Liu, B. Discrete breathers in hydrogenated graphene / B. Liu, J. A. Baimova, S. V. Dmitriev, X. Wang, H. Zhu, and K. Zhou // *J. Phys. D: Appl. Phys.* – 2013. – V. 46. – P. 305302.
25. Doi, Y. Numerical Study on Unstable Perturbation of Intrinsic Localized Modes in Graphene / Yusuke Doi and Akihiro Nakatani // *JSME Int. J. A-Solid M.* – 2012. – V. 6. – P. 71-80.
26. Feng, B. Intrinsic localized modes in a three particle Fermi-Pasta-Ulam lattice with on-site harmonic potential / Bao-Feng Feng, Youn-Sha Chan // *Math. Comput. Simulat.* – 2007. – V. 74. – P. 292-301.
27. Doi, Y. Translational Asymmetry Controlled Lattice and Numerical Method for Moving Discrete Breather in Four Particle System / Yusuke Doi, Kazuyuki Yoshimura // *J. Phys. Soc. Jpn.* – 2009 – V. 78. – P. 034401-9.
28. 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. – V. 74. – P. 36608-15.

Список публикаций автора по теме диссертации:

Публикации в изданиях, рекомендованных ВАК РФ.

1. Лобзенко, И.П. Численное моделирование движущихся дискретных бризеров в моноатомных цепочках / И.П. Лобзенко, Г.М. Чечин // *Вестник Нижегородского государственного университета.* – 2013. – Т. 4(1). – С. 67-69.
2. Chechin, G.M. Properties of discrete breathers in graphane from ab initio simulations / G.M. Chechin, S.V. Dmitriev, I.P. Lobzenko, D.S. Ryabov // *Phys. Rev. B.* – 2014. – V. 90 – P. 045432-6.
3. Chechin, G.M. *Ab initio* refining of quasibreathers in graphane / G.M. Chechin, I.P. Lobzenko // *Letters on materials.* – 2014. – V. 4(4) – P. 226-229.
4. Баимова, Ю.А. Двумерные кластеры Дискретных бризеров в графене / Ю.А. Баимова, А.Б. Ямилова, И.П. Лобзенко, С.В. Дмитриев, Г.М. Чечин // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения.* – 2014. – Т.11(4/2). – С. 599-604.

Прочие публикации.

5. Chechin, G.M. Numerical modeling of mobile discrete breathers in monoatomic 1D lattices / G.M. Chechin, I.P. Lobzenko // In *Proceedings of the International Symposium on Atomistic Modeling for Mechanics and Multiphysics of Materials (ISAM4)*, Tokyo, Japan. – 2013, P. 50.
6. Chechin, G. Studying of mobile discrete breathers in monoatomic chains / G. Chechin, I. Lobzenko // In *Proceedings of the 4th International Conference on Nonlinear Dynamics, ND-KhPI2013*, Sevastopol, Ukraine. – 2013, P. 25-27.
7. Лобзенко, И.П. Изучение влияния поляризации электронных оболочек на динамические свойства сильно локализованных дискретных бризеров в графене: численное моделирование с использованием теории функционала плотности / И.П. Лобзенко // В сборнике трудов конференции Ультрамелкозернистые и наноструктурные материалы, Уфа. – 2014, С. 157.
8. Лобзенко, И.П. Ab-initio расчёты дискретных бризеров в графене / И.П. Лобзенко // Тез. докл. XIII Международной школа-семинара «эволюция дефектных структур в конденсированных средах» (ЭДС – 2014), г. Барнаул. – 2014, С. 15.

Лобзенко Иван Павлович

ИЗУЧЕНИЕ ДИСКРЕТНЫХ БРИЗЕРОВ В ГРАФЕНЕ И ГРАФАНЕ МЕТОДАМИ
МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ НА ОСНОВЕ ТЕОРИИ
ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Подписано в печать
Формат 60x84_{1/16}
Гарнитура «Times»
Печать оперативная.
Усл. печ. л.
Тираж 100 экз.
Заказ №

Отпечатано в _____
