

На правах рукописи



Захаров Павел Васильевич

**ТРАНСПОРТ ЭНЕРГИИ ВОЛНАМИ СОЛИТОННОГО
ТИПА И ЕЁ ЛОКАЛИЗАЦИЯ В МОДЕЛЬНЫХ
ГЦК РЕШЕТКАХ**

Специальность 01.04.07 - физика конденсированного состояния

Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

Барнаул – 2018

Работа выполнена в ФГБОУ ВО «Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова».

Научный консультант: заслуженный деятель науки РФ,
доктор физико-математических наук, профессор
Старостенков Михаил Дмитриевич

Официальные
оппоненты: **Зольников Константин Петрович**,
доктор физико-математических наук, профессор,
главный научный сотрудник лаборатории
компьютерного конструирования материалов
ФГБУН «Институт физики прочности и
материаловедения СО РАН»

Гафнер Юрий Яковлевич,
доктор физико-математических наук, профессор,
заведующий кафедрой физики и информационных
технологий ФГБОУ ВО «Хакасский
государственный университет им. Н.Ф. Катанова»

Четвериков Александр Петрович,
доктор физико-математических наук, профессор
кафедры радиофизики и нелинейной динамики
ФГБОУ ВО «Саратовский национальный
исследовательский государственный университет
имени Н. Г. Чернышевского»

Ведущая организация: ФГБУН «**Институт проблем сверхпластичности
металлов РАН**», г. Уфа

Защита состоится "____" _____ 2018 г. в ____ 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.

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

<https://www.altstu.ru/structure/unit/odia/scienceevent/3654/>

Автореферат разослан "____" _____ 2018 г.

Ученый секретарь диссертационного совета,
кандидат физико-математических наук



Романенко В.В.

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

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность исследования. В течение нескольких последних десятилетий в физике конденсированного состояния активно изучаются нелинейные явления, обусловленные интенсивными внешними воздействиями и нелинейностью межатомных связей. Особый интерес среди нелинейных объектов вызывают волны солитонного типа [1-6], они тесно связаны с локализацией энергии на атомном уровне и ее транспортом по кристаллической решетке. Волны солитонного типа играют большую роль в различных областях знаний [7-13], в том числе в физике твердого тела [14]. Несмотря на то что солитоны известны науке более 180 лет, они продолжают активно изучаться: при этом следует признать, что в твердых телах они остаются менее изученными, чем в жидкостях или оптике [15]. В последнее время возрос интерес к дискретным нелинейным системам в силу того, что долгое время считалось невозможным существование волн солитонного типа в таких средах. Примером такого рода солитонных объектов могут служить дискретные бризеры (ДБ) – локализованные в пространстве и периодические по времени высокоамплитудные возбуждения в нелинейных дискретных структурах с трансляционной симметрией [8].

Солитонные волны как в континуальных, так и в дискретных физических системах могут переносить энергию, импульс, массу, электрический и топологический заряд, другие физические величины, а также информацию [7, 16]. Уникальным свойством уединенных волн является их живучесть и устойчивость по отношению к возмущениям. Для математической физики солитоны представляют огромный интерес как точные решения некоторых нелинейных уравнений, среди которых особое положение занимают полностью интегрируемые уравнения, такие как уравнения синус-Гордона, Кортевега-де-Фриза или нелинейное уравнение Шредингера [7].

В то же время дефекты в конденсированных средах также могут быть описаны посредством теории солитонов. Дефекты кристаллической структуры, такие как точечные дефекты, дислокации, краудионы и ряд других, относятся к топологическим солитонам [17]. Под данным понятием понимают солитон с нетривиальной топологической характеристикой – топологическим зарядом. В расширенном смысле термин "топологический солитон" принято использовать как для обозначения топологически нетривиальных решений с конечными динамическими характеристиками в теории поля (кинков, монополей, инстантонов, скирмионов и т.д.), так и для модельного описания устойчивых неоднородных состояний (локализованных структур) в конденсированных средах: вихрей, дислокаций, дисклинаций, доменных стенок, точечных дефектов и т. п. [17-19].

Возможность локализации энергии в бездефектных дискретных упорядоченных структурах, которая впервые предсказана авторами работы [20], получила экспериментальное подтверждение. Дискретные бризеры были обнаружены в различных областях, например, в нелинейной оптике [9, 10], джозефсоновских сверхпроводящих контактах [11], в антиферромагнетиках

[12, 13]. Гораздо сложнее найти подтверждение существования дискретных бризеров в кристаллах из-за невозможности непосредственного наблюдения движения отдельных атомов. В связи с этим о локализации колебаний в кристаллической решётке можно судить лишь по косвенным признакам.

Относительно недавно был получен ряд экспериментальных фактов, которые свидетельствуют о существовании ДБ в различных кристаллах. Так, например, в работе [21] говорится об обнаружении ДБ в кристалле NaI в состоянии теплового равновесия, однако позднее авторы работы [22] подвергли сомнению данный результат. В работе [23] на основе исследования квазиодномерного кристаллического комплекса $\{[Pt(en)_2][Pt(en)_2Cl_2](ClO_4)_4\}$ (где (en) - этилендиамин) с помощью рамановского рассеяния делается вывод о возможности существования в нем некоторых локализованных динамических объектов, интерпретируемых как дискретные бризеры. Было исследовано возбуждение локализованных спиновых мод в квазиодномерном антиферромагнетике $(C_2H_5NH_3)_2CuCl_4$ с помощью микроволновых импульсов. В работе [24] авторы трактуют эффект отжига дефектов в Ge при низкоэнергетической обработке плазмой возбуждением и движением дискретных бризеров. Существует ряд других экспериментальных работ, свидетельствующих в пользу существования дискретных бризеров в кристаллах [16]. В свете наличия экспериментальных работ по идентификации ДБ, необходимо сделать терминологическую оговорку. В математической физике под ДБ понимаются строго периодические, незатухающие во времени нелинейные колебательные моды, но в реальных системах, где неизбежно наличие всевозможных возмущений, следует рассматривать квази-бризеры [25], имеющие нестрогую периодичность колебаний и конечное время жизни. По сути, говоря о дискретных бризерах, будем подразумевать квази-бризеры.

Отметим, что открытие во второй половине XX века эффекта малых доз и эффекта дальнего действия, состоящих в транспорте энергии от поверхности вглубь кристалла в локализованной форме, до сих пор не имеют однозначной трактовки. Например, авторы работ [26, 27] предполагают, что именно солитонный механизм является одним из основных при ионном облучении кристаллов. Отсутствие четкого понимания данных эффектов является мотивирующим фактором в изучении таких процессов на атомном уровне и в анализе возможного вклада солитонного механизма в транспорт энергии по кристаллу.

Объектом исследования в работе являются волны солитонного типа в ГЦК кристаллах, а **предметом** исследования выступают явления локализации энергии и транспорта энергии волнами солитонного типа, а также сопутствующие эффекты.

Исследование солитонных явлений в конденсированных средах на атомном уровне связано с рядом трудностей. В первую очередь, как уже отмечалось, с трудностью, а порой и невозможностью непосредственного наблюдения процессов, происходящих внутри кристаллического тела. Кроме того, многие процессы, такие как движение краудина, колебания нелинейной локализованной моды либо рекомбинация вакансий и межузельных ато-

мов, происходят со столь высокой скоростью, что изучение таких процессов в натурном эксперименте практически невозможно. В большинстве таких случаев актуальным является использование методов компьютерного моделирования.

Компьютерное моделирование является в настоящее время таким же признанным методом исследования, как экспериментальный и теоретический методы. Оно начало применяться в физике твердого тела с конца пятидесятих годов XX в. С его помощью на атомном уровне возможно исследование не только быстропротекающих процессов таких, как, например, движение краудина, но и процессов более длительных по времени. При помощи компьютерной модели можно проверить теоретические предположения, объяснить и спрогнозировать явления еще не освещенные в полной мере другими методами исследования.

В данной работе использовался метод молекулярной динамики. Этот метод имеет ряд преимуществ по сравнению с другими при изучении волн солитонного типа в кристаллах, так как он позволяет рассматривать достаточно большие ансамбли атомов и временные интервалы, существенно превосходящие размеры и время жизни исследуемых объектов. Динамика атомов описывается с помощью дифференциальных уравнений движения Ньютона. Это позволяет наиболее реалистично моделировать различные процессы как в идеальных кристаллических структурах, так и при наличии различных дефектов.

На основании вышесказанного можно сформулировать цель и задачи данного диссертационного исследования.

Цель работы: изучить методами атомистического моделирования механизмы локализации энергии и ее транспорта волнами солитонного типа в кристаллах на основе ГЦК решетки.

Для достижения данной цели были поставлены следующие *задачи*:

1. Для исследования на атомном уровне волн солитонного типа в кристаллах с ГЦК структурой построить молекулярно-динамические модели.
2. Исследовать условия существования нелинейных локализованных колебательных мод, дискретных бризеров в моноатомных кристаллах, а также в биатомных кристаллах стехиометрии АВ и A_3B .
3. Изучить возможность возбуждения дискретных бризеров в кристаллах в состоянии термодинамического равновесия и при наличии интенсивных внешних воздействий.
4. Изучить взаимодействие ДБ с дефектами структуры и поверхностью кристаллов.
5. Проанализировать характеристики квази-бризеров в моноатомных и биатомных ГЦК кристаллах.
6. Провести исследование динамических краудионов в моноатомных металлах и биметаллических соединениях.
7. Исследовать процессы массопереноса и атомных смещений вблизи дислокаций несоответствия на границе различных биметаллических соединений, вызванных наличием точечных дефектов.

8. Изучить взаимодействие уединенных волн, порожденных рекомбинацией пар Френкеля, и ударных волн с точечными дефектами, их агрегатами, а также с дислокациями несоответствия на границе биметаллов.

Научная новизна диссертационной работы состоит в следующем:

1. Изучено взаимодействие двух типов дискретных бризеров в кристалле Pt_3Al друг с другом и с точечными дефектами.
2. Выявлено два механизма возбуждения ДБ с мягким типом нелинейности при внешнем воздействии на кристалл потоком частиц. Также предложен механизм возбуждения дискретных бризеров с мягким типом нелинейности посредством периодического воздействия на частотах вне фононного спектра кристалла.
3. Впервые рассмотрены ДБ на поверхности кристалла Pt_3Al , показано существенное влияние поляризации ДБ на их амплитудно-частотную характеристику.
4. Впервые описаны два типа дискретных бризеров в сплаве $CuAu$.
5. Рассчитаны статистические характеристики рассматриваемых квази-бризеров в моноатомных и биатомных кристаллах.
6. Изучено прохождение краудiona через границу биметалла. Установлено, что при столкновении краудiona и дислокации несоответствия порождается продольная волна, вызывающая миграцию вакансий в сторону ближайшей дислокации несоответствия на границе биметалла.
7. Показана возможность возникновения зародышей пор вблизи двудольной границы биметаллов после прохождения ударной волны.

Научно-практическая ценность диссертационной работы заключается в том, что полученные результаты развивают современные представления о нелинейных процессах, происходящих в кристаллических твердых телах на атомарном уровне. Полученные результаты полезны для дальнейшего развития концепции квази-бризеров в кристаллах. Исследования в данных направлениях соответствуют следующим приоритетным направлениям развития науки, технологий и техники Российской Федерации: «Индустрия наносистем и материалов» и «Энергетика и энергосбережение». Проведенные компьютерные эксперименты могут послужить основой при разработке новых математических и вычислительных моделей. Кроме того, возможно использование результатов компьютерного моделирования в качестве демонстрационного материала, отображающего процессы, протекающие в кристаллических структурах, и полезного для студентов, осваивающих курс физики твердого тела. Развиваемые в диссертации представления могут найти применение в областях нелинейной динамики решетки кристаллов, при исследовании солитонов, а также при объяснении эффектов отжига дефектов на значительном расстоянии от поверхности. Полученные результаты могут быть полезны при создании материалов с заранее заданными свойствами, а также для улучшения свойств уже известных материалов, подвергающихся различным экстремальным воздействиям.

Достоверность результатов диссертации обеспечивается использованием хорошо апробированных алгоритмов метода молекулярной динамики

для решения новых задач в нелинейной динамике кристаллических решеток различного типа и размерности. Для решения поставленных задач использовались как относительно простые парные потенциалы (потенциал Морзе), так и непарные потенциалы, полученные методом погруженного атома. Парный потенциал использовался для поиска новых физических эффектов, в то время как более сложные потенциалы применялись для уточнения параметров наблюдаемых эффектов, например, на поверхности кристаллов. Полученные результаты сопоставлялись при различных размерах расчетных ячеек и шаге интегрирования. Показана непротиворечивость результатов базовым физическим законам и известным результатам, полученным в данном направлении для модельных и реальных кристаллов.

На защиту выносятся следующие положения:

1. Дискретный бризер с жестким типом нелинейности в кристалле Pt_3Al локализован преимущественно на атомах Al и может перемещаться по кристаллу вдоль плотноупакованных направлений на сотни нанометров.
2. Выявлены два способа возбуждения дискретных бризеров с мягким типом нелинейности в кристаллах стехиометрии A_3B потоком частиц, посредством одного соударения или путем нескольких последовательных соударений.
3. На поверхности кристалла Pt_3Al возможно существование нелинейных локализованных мод, которые можно классифицировать, как дискретные бризеры с мягким типом нелинейности.
4. Внешние поля, осциллирующие с частотой вне фононного спектра кристалла, могут являться причиной возбуждения дискретных бризеров с мягким типом нелинейности вблизи его поверхности.
5. В кристалле $CuAu$ получен дискретный бризер с жестким типом нелинейности, локализованный на атомах меди. Для существования ДБ с мягким типом нелинейности в данном кристалле необходимо создать деформацию, которая обеспечит наличие щели в фононном спектре $CuAu$.
6. Квази-бризер разрушается в тот момент, когда среднеквадратичное отклонение частот атомов превышает разность между средней частотой квази-бризера и ближайшей границей фононного спектра кристалла.
7. Вблизи границы двудольных биметаллических частиц при прохождении ударной волны сетки дислокаций несоответствия возможно формирование зародышей пор. Минимальный размер пор наблюдается при распространении волны вдоль плотноупакованных направлений, что обусловлено присутствием эффекта самофокусировки атомных столкновений.

Апробация работы. Результаты работы были доложены и обсуждены на 33 научных конференциях и форумах, основными из которых являются: «International Symposium on Intrinsic Localized Modes», 30th Anniversary of Discovery, Kyoto, Japan (2018); X, XI International Scientific and Technical Conference «Dynamics of Systems, Mechanisms and Machines», Omsk (2017, 2016); II и IV открытая школа-конференция стран СНГ «Ультрамелкозернистые и наноструктурные материалы» Уфа (2012, 2016); X, XII, XIV школа-семинар «Эволюция дефектных структур в конденсированных средах», Барнаул

(2012, 2014, 2016); IX Международная конференция «Фазовые превращения и прочность кристаллов» памяти академика Г.В. Курдюмова (ФППК-2016); «Новые материалы и технологии», Барнаул (2016); Международные научные чтения им. чл -корр. РАН И.А. Одингга «Механические свойства современных конструкционных материалов», Москва (2016); «Структура и свойства перспективных материалов», Черноголовка (2016); International Workshop «Discrete Breathers in Crystals», Уфа (2015); «International Siberian Conference on Control and Communications», Омск (2015); V Всероссийская конференция «Фундаментальные основы МЭМС- и Нанотехнологий», Новосибирск (2015); «Современные проблемы физики и технологий» IV Международная молодежная научная школа-конференция, Москва (2015); «Краевые задачи и математическое моделирование», Новокузнецк (2014); Восьмая международная конференция «Фазовые превращения и прочность кристаллов», памяти академика Г.В. Курдюмова, Черноголовка (2014); «Физические свойства металлов и сплавов», VII Всероссийская научно-техническая конференция, Екатеринбург (2013). XIV Международная научно-техническая уральская школа-семинар металловедов, Екатеринбург (2013).

Публикации. Результаты работы отражены в 103 публикациях, 46 из которых в журналах, включенных в список ВАК для публикации диссертационных работ, 17 работ в изданиях, индексируемых Web of Science и/или Scopus. Кроме того, получено три авторских свидетельства о государственной регистрации на программы для ЭВМ, и опубликовано 2 учебных пособия.

Благодарности. Работа велась при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант РНФ № 16-12-10175 «Локализованные колебания и волны в нелинейных решетках и ансамблях консервативных и активных частиц: дискретные бризеры, диссипативные солитоны, химеры»), грантов Российского фонда фундаментальных исследований (грант РФФИ № 16-42-220002 р_а «Физическая природа дискретных бризеров в наноразмерных ГЦК металлах и сплавах», №15-58-04033 Бел_мол_а «Установление зависимости влияния ионно-плазменной обработки на кристаллическую структуру металлов и сплавов», РФФИ №15-32-50523 мол_нр «Дискретные бризеры в чистых металлах и упорядоченных сплавах»), а также целевых федеральных и региональных программ: проект № 166 программы Министерства образования и науки РФ «Формирование государственных заданий высшим учебным заведениям в части проведения научно-исследовательских работ» «Исследование процессов структурной перестройки материалов на наноуровне при внешних высокоинтенсивных воздействиях и их роли в физических свойствах материалов с определенными функциональными свойствами», проект № 3.4820.2017/БЧ «Исследование процессов структурной перестройки в металлах Ni, Al, Ti, Fe и сплавах на их основе при наличии точечных дефектов внедрения типа H, C, O, N на наноуровне при внешних высокоинтенсивных воздействиях и их роли в физических свойствах материалов с определенными функциональными свойствами».

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, шести глав, заключения и списка литературы из 410 наименований. Работа изложена на 355 страницах машинописного текста, содержит 12 таблиц и 176 рисунка.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обосновывается актуальность и практическая ценность выбранного направления исследований. Сформулированы цель и задачи диссертационной работы, описана научная новизна, практическая значимость и достоверность полученных результатов. Приведены основные защищаемые положения и краткое содержание работы по главам.

В первой главе дается обзор литературы по главам диссертации. Рассматриваются вопросы, связанные с теорией солитонов в конденсированных средах. Обсуждаются дискретные бризеры, квази-бризеры, краудионы и фокусоны. В конце главы приводится параграф, посвященный эффекту малых доз и эффекту дальнего действия.

Вторая глава посвящена описанию компьютерных моделей, используемых в работе. В ней дается обзор основных методов компьютерного моделирования на атомном уровне в физике конденсированного состояния, показаны стадии компьютерного моделирования и проблемы, связанные с ними, дается описание потенциальных функций межатомного взаимодействия, использованных при решении поставленных задач.

В настоящей работе в ряде задач межатомное взаимодействие задавалось парным центральным потенциалом Морзе:

$$\varphi(r_{ij}) = D\beta e^{-\alpha r_{ij}} (e^{-\alpha r_{ij}} - 2), \quad (1)$$

где D – энергетический параметр, соответствующий глубине потенциальной ямы, α – параметр, определяющий жесткость межатомных связей, $\beta = e^{\alpha \cdot r_0}$, r_0 – некоторое усредненное равновесное расстояние по координационным сферам, в которых учитывается взаимодействие между атомами.

Метод определения параметров потенциала Морзе впервые был предложен Жирифалько и Вайзером в [28].

Сила, действующая на i -ый атом со стороны j -го, равна:

$$\vec{F}(r_{ij}) = -2D\alpha \left[\left(\beta e^{-\alpha r_{ij}} - \frac{1}{2} \right)^2 - \frac{1}{4} \right]. \quad (2)$$

Потенциал Морзе включает в себя две составляющие, одна из которых представляет собой жесткое экспоненциальное отталкивание, а вторая – более мягкое экспоненциальное притяжение. Поэтому с помощью данного потенциала возможно описание стабильной плотноупакованной решетки. Параметры потенциала α , β , D подбираются по свойствам материала, которые определяются экспериментальным путем. Так, например, в методе, который предложили Жирифалько и Вайзер [28], параметры подбирались по экспериментальным данным энергии сублимации E_s , упругих модулей и равновесного параметра решетки.

Основной объем вычислений произведен с использованием потенциалов, полученных методом погруженного атома (ЕАМ – embedded atom method). Этот подход был описан в работе [29]. Данный метод базируется на квантовомеханической теории функционала электронной плотности, согласно которой вклад в энергию произвольно расположенных ядер от взаимодействия с электронами может быть представлен как однозначный функционал полной электронной плотности. Допускается, что состояние и энергия атома определяется только плотностью электронов, а сама плотность в металле представляется линейной суперпозицией вкладов отдельных атомов. Кроме этого, электронная плотность, создаваемая одним атомом, сферически симметрична. Потенциальная энергия кристалла в данном случае будет представляться в виде суммы энергии парного взаимодействия атомов и энергии взаимодействия атомов с электронным газом. Полная энергия кристалла E может быть выражена следующим образом:

$$E = \frac{1}{2} \sum_{i,j,i \neq j} \phi_{ij}(r_{ij}) + \sum_i F_i(\rho_i), \quad (3)$$

где ϕ_{ij} представляет парную энергию между атомами i и j , отделенными друг от друга расстоянием r_{ij} , а F_i – энергия вложения атома i в локальном местоположении с электронной плотностью ρ_i . Электронную плотность можно рассчитать по формуле: $\rho_i = \sum_{j,j \neq i} f_j(r_{ij})$, где $f_j(r_{ij})$ – электронная плотность на участке атома i , находящегося на расстоянии r_{ij} от атома j .

Существуют межатомные потенциалы, которые аппроксимируют сложные межатомные взаимодействия с использованием вычислительно эффективных функций в диапазоне от простых парных взаимодействий до более сложных композиций, включающих локальные электронные плотности и валентные углы. Из всех таких потенциалов ЕАМ-потенциалы используются наиболее широко из-за их низких вычислительных затрат и способности точно моделировать объемные свойства и дефекты в металлах [30].

Наиболее близкими к реальности являются неэмпирические методы, но расчёты с их использованием требуют больших вычислительных мощностей и многих часов компьютерного времени. В зарубежной литературе данные методы называют «ab initio», дословно «из первых принципов», и основываются они на решении уравнения Шредингера [31]. В принципе, в данных методах должны учитываться и электроны, и ядра, но, как правило, используется приближение Борна-Оппенгеймера, в котором полагается, что электроны, имея намного меньшую массу, мгновенно подстраиваются под текущую конфигурацию ядер. Таким образом, первопринципные методы расчёта, в отличие от методов молекулярной механики и полуэмпирических методов, позволяют учесть такие параметры как кулоновское взаимодействие электронов с ядрами и между собой, электростатическое взаимодействие ядер, а также, в случае необходимости и нерелятивистские эффекты [31].

Нами проведен ряд экспериментов с применением данного метода, которые показали, что при решении рассматриваемых в работе задач и объема проводимых экспериментов, применение данного метода видится непродуктивным в силу крайне больших временных затрат.

Таким образом, рассмотрев основные методы, используемые на данный момент при моделировании в физике конденсированных сред, можно сделать вывод, что наиболее оптимальным является метод молекулярной динамики с применением как парных межатомных потенциалов, так и потенциалов, полученных методом погруженного атома.

В конце главы описаны трех- и двумерные модели, используемые в данной работе.

Третья глава посвящена исследованию дискретных бризеров в 2D и 3D модельных ячейках стехиометрии A_3B . В зависимости от задач применялся либо парный потенциал Морзе, либо потенциал, полученный методом погруженного атома. Как уже отмечалось, дискретный бризер представляет собой пространственно локализованные незатухающие колебания большой амплитуды атомов идеального кристалла. Основное внимание уделено изучению ДБ в трехмерном кристалле Pt_3Al . Рассматриваются дискретные бризеры с мягким типом нелинейности (ДБ1) и с жестким типом нелинейности (ДБ2). У дискретных бризеров мягкого типа частота уменьшается с увеличением амплитуды, и по этой причине они могут существовать только в кристаллах, имеющих щель в фононном спектре. Их называют щелевыми, поскольку их частота лежит в щели фононного спектра. Для дискретных бризеров жесткого типа имеет место обратная зависимость, то есть их частота увеличивается с увеличением амплитуды, при этом они могут иметь частоты как в щели, так и выше фононного спектра.

Первоначально рассмотрены дискретные бризеры с мягким типом нелинейности в кристалле Pt_3Al . Установлено, что такие бризеры локализованы на атомах Al и они должны иметь строго поляризованные направления колебаний атомов, соответствующих направлениям на ближайший атом Al (рис. 1 а).

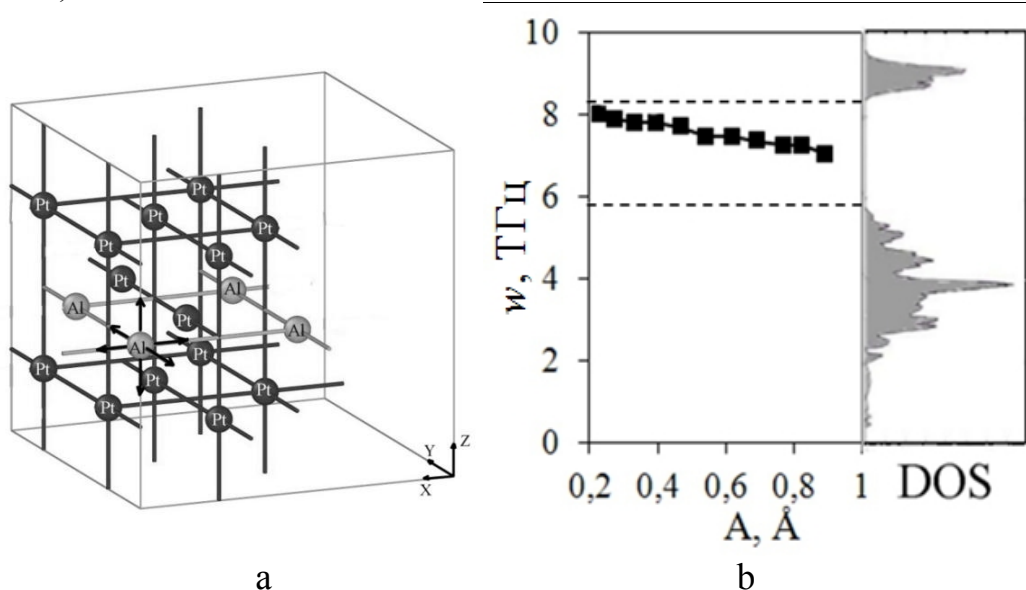


Рис. 1 а) Фрагмент кристалла Pt_3Al . Стрелками показаны возможные направления колебаний ДБ1; б) зависимость частоты колебаний ДБ1 в объеме кристалла от амплитуды в сравнении с плотностью фононных состояний кристалла (eam-потенциал)

Для возбуждения подобных объектов нужно вывести из положения равновесия один из атомов Al на расстояние, достаточное для проявления нелинейности связей. Для ДБ1 получены зависимости частоты от амплитуды (рис. 1 б), время жизни и оценена степень пространственной локализации (рис. 2).

Такой тип дискретных бризеров способен локализовать энергию порядка 1 эВ, при амплитудах 0,5 Å. В момент разрушения бризера данная энергия рассеивается в виде тепловых колебаний на соседние атомы.

В результате проведенных экспериментов установлено, что незначи-

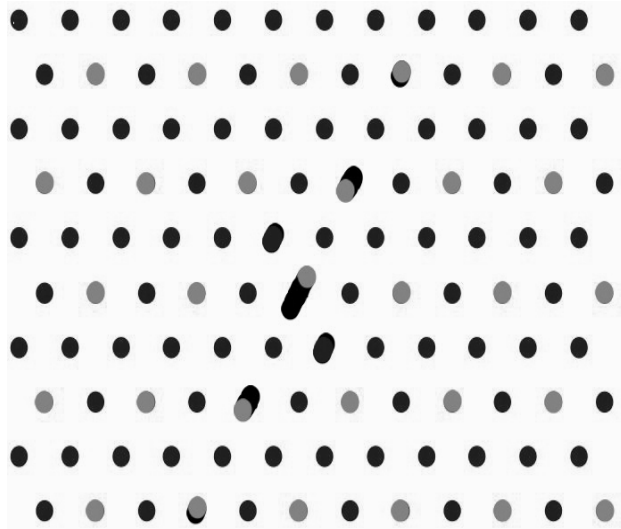


Рис. 2. Стробоскопическая картина ДБ1 в масштабе 1:1, визуализирована плоскость (111)

тельное повышение температуры приводит к существенному сокращению времени жизни ДБ. Увеличение начальной температуры с 3 до 15 К приводит к уменьшению времени жизни с 420 пс до 70 пс, дальнейшее повышение начальной температуры ячейки до 100 К и выше приводит к уменьшению времени жизни ДБ до 10 – 6 пс. Определяющим фактором, обуславливающим это, является то, что атомы, окружающие основной атом, на котором происходит локализация колебаний, не совершают согласованных с ним колебаний. Чем выше начальная температура ячейки, тем меньшее количество атомов входит в состав

ДБ1, делая его профиль более узким и, соответственно, менее устойчивым к воздействиям со стороны других атомов кристалла.

Далее рассматривался дискретный бризер с жестким типом нелинейности. Поиск ДБ2 осуществлялся вдоль плотноупакованных направлений кристалла Pt₃Al. Возбудить ДБ в кристалле можно, задав группе из n атомов определенные начальные перемещения

$$\mathbf{r}(t) = \{r_1(t), r_2(t), \dots, r_n(t)\} \quad (4)$$

или начальные скорости.

Таким образом удалось возбудить ДБ2, локализованный преимущественно на атомах Al (рис. 3). В отличие от ДБ1 в колебаниях ДБ2 принимают участие несколько атомов легкой подрешетки. ДБ2 могут перемещаться по кристаллу на значительные расстояния, практически не рассеивая своей энергии. Возбуждение ДБ2 возможно вдоль следующих плотноупакованных направлений: $[110]$, $[0\bar{1}1]$, $[\bar{1}01]$, $[\bar{1}\bar{1}0]$.

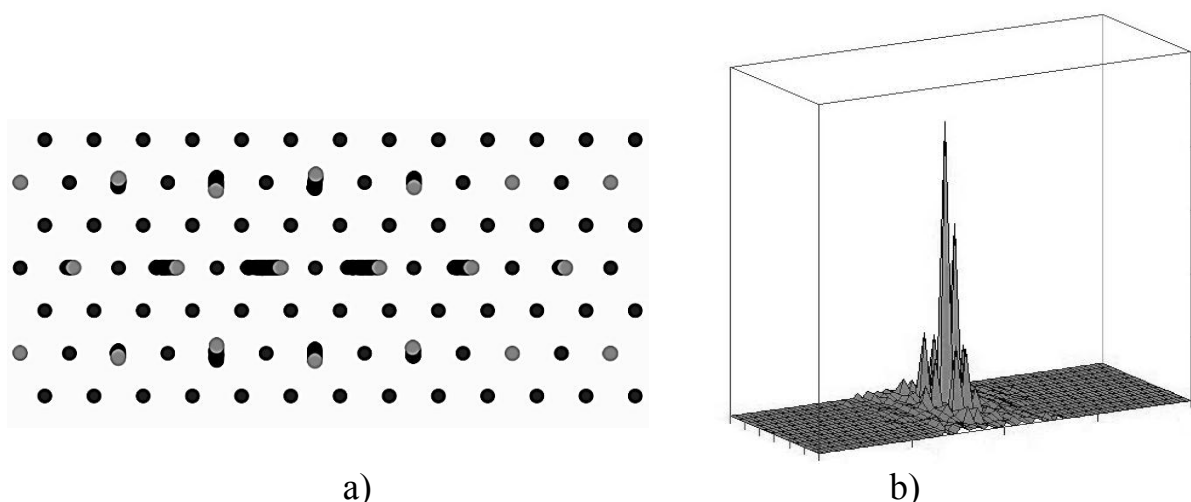


Рис 3. а) Стробоскопическая картина дискретного бризера с жестким типом нелинейности, б) трехмерный профиль ДБ2 в плоскости (111)

Такие бризеры способны локализовать энергию порядка 2-3 эВ. На рис. 4 приведена зависимость энергии, локализованной на ДБ2, от времени его существования.

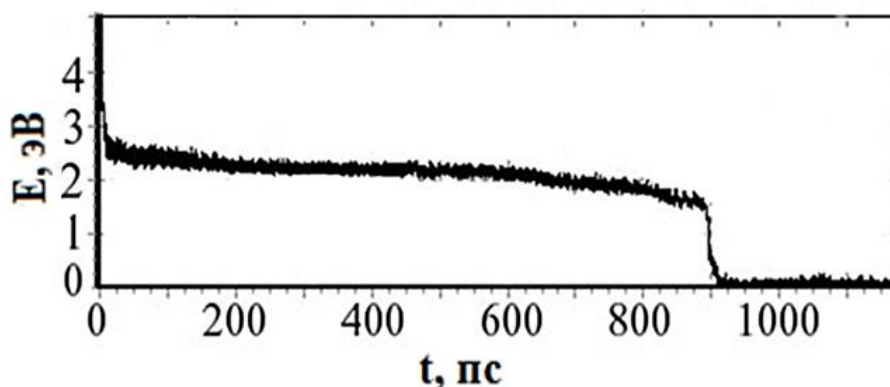


Рис. 4. Зависимость энергии дискретного бризера с жестким типом нелинейности от времени.

Важной характеристикой ДБ является его время жизни и максимальное расстояние, на которое он способен переместиться по кристаллу. Полученная начальная скорость движения ДБ2 по кристаллу достигает 450 м/с, однако в дальнейшем происходит ее снижение до значений 110 – 120 м/с, при этом ДБ2 медленно рассеивает энергию в подрешетку Al. Изменение амплитуды происходит плавно в течение всего времени жизни бризера, но снижение амплитуды колебаний атомов до $0,4 \text{ \AA}$ приводит к его разрушению. Это связано с тем, что с уменьшением амплитуды ДБ2, его частота также уменьшается и входит в оптическую ветвь фононного спектра, что приводит к возбуждению фононов и быстрому рассеиванию энергии в легкую подрешетку кристалла. Таким образом, за время жизни таких объектов в несколько наносекунд он способен преодолеть сотни нанометров.

Далее изучено взаимодействие ДБ в трехмерном кристалле Pt_3Al . В теории солитонов, развитой для интегрируемых нелинейных уравнений, показано их упругое взаимодействие, но в данной работе рассматриваются ква-

зи-бризеры и абсолютно упругих взаимодействий между ДБ не наблюдалось. Рассмотрим взаимодействие двух зеркально симметричных ДБ2, движущихся навстречу друг другу.

При столкновении ДБ2 происходит их близкое к упругому отталкивание друг от друга (рис. 5).

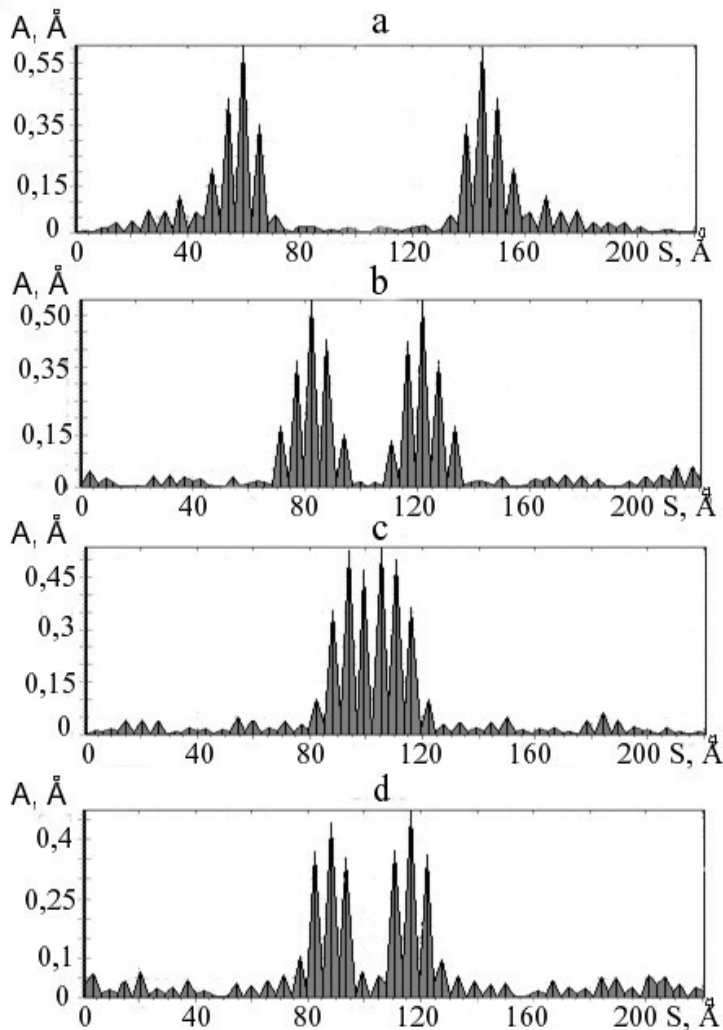


Рис. 5. Столкновение двух зеркально симметричных ДБ2, движущихся навстречу друг другу вдоль направления $\langle 110 \rangle$ кристалла Pt_3Al . Вдоль оси абсцисс отложено расстояние вдоль направления $\langle 110 \rangle$, вдоль оси ординат амплитуда колебаний атомов в ангстремах: а) формирование ДБ2 через 4 пс после начала эксперимента; б) сближение ДБ2 через 8 пс, в) столкновение двух ДБ2 через 10 пс, г) расхождение двух ДБ2 в разные стороны после столкновения через 16 пс от начала эксперимента

При столкновении происходит рассеяние части их энергии в подрешетку Al. Это хорошо заметно при сравнении рис. 5 а и рис. 5 д, где видно, что амплитуды ДБ2 до столкновения составляли 0,6 Å, а после столкновения – 0,45 Å. Повторное столкновение ДБ приводит к разрушению одного из них. В этом процессе играет роль не только уменьшение амплитуды колебаний ДБ2, но и разогрев подрешетки Al за счет энергии, рассеянной бризерами.

Рассматривая столкновение ДБ2 с ДБ1, обратим внимание на большую устойчивость ДБ1, поляризованного вдоль направления $[100]$. В результате столкновения ДБ2 замедлил скорость своего движения, а его амплитуда уменьшилась до 0,55 Å. Повторные столкновения не приводили к таким же значительным потерям энергии ДБ2, однако время его жизни не превысило 350 пс. ДБ1 практически не терял свою энергию в результате столкновений и мог существовать в течение 2 – 2,5 нс.

Конструкционные и функциональные материалы зачастую подвергаются ин-

тенсивным внешним воздействиям, проявляющимся в деформациях материа-

ла. Возникает задача исследования влияния упругой деформации всестороннего растяжения/сжатия на характеристики дискретных бризеров в рассматриваемой модели сплава Pt_3Al . Как показали компьютерные эксперименты, деформация кристалла приводит к существенным изменениям характеристик

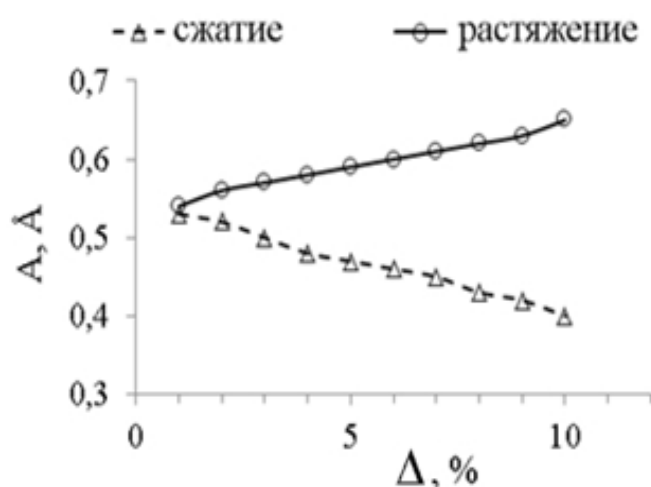


Рис. 6. Зависимость амплитуды колебаний A дискретного бризера от величины упругой деформации всестороннего растяжения-сжатия Δ ячейки кристалла Pt_3Al

дискретных бризеров. Например, на рис. 6 приведена зависимость амплитуд колебаний атомов ДБ от величины деформации при одинаковых начальных условиях. Также увеличение упругой деформации сжатия приводит к увеличению частоты колебаний ДБ, а увеличение упругой деформации растяжения приводит к уменьшению частоты колебаний. Отмечая общий характер зависимости времени жизни бризеров от величины упругой деформации можно говорить о том, что увеличение упругой деформации сжатия уменьшает время

жизни ДБ, а увеличение упругой деформации растяжения увеличивает время жизни ДБ.

Одной из основных задач, связанных с дискретными бризерами, является исследование способов их возбуждения. Далее рассматриваются возможные механизмы возбуждения ДБ при интенсивных внешних воздействиях, задаваемых в виде нагрева ячейки, взаимодействия с потоком высокоэнергетических частиц, а также в виде периодического внешнего воздействия на частоте вне фононного спектра кристалла. Такие воздействия на кристаллы приводят к значительным отклонениям атомов от решеточных положений, активизируя различные процессы, изучение которых невозможно в рамках линеаризованных уравнений движения. Ангармонизмы межатомных связей ответственны за различные нелинейные явления, начиная от теплового расширения кристаллов, возбуждения локализованных колебательных мод и кончая структурными перестройками в кристалле.

При анализе воздействия потока частиц на кристалл Pt_3Al рассмотрим два варианта возбуждения ДБ: при однократном столкновении частицы с атомом решетки или более сложный процесс, связанный с многократными столкновениями. Модель представляла собой объемный кристалл Pt_3Al со сверхструктурой $L1_2$ на основе ГЦК решетки (рис. 7). Расчетная ячейка содержала 18720 атомов. Использовались периодические граничные условия. Атомы взаимодействовали посредством парного потенциала Морзе.

Для моделирования воздействия потока частиц случайно выбранным атомам кристалла Pt_3Al передавался импульс вдоль возможного направления возбуждения ДБ с мягким типом нелинейности, тем самым имитировалось взаимодействие атомов, например, с медленными нейтронами или высокоэнергетическими электронами. Количество атомов, получающих импульс, зависело от энергии, передаваемой атомам. Диапазон передаваемой энергии варьировался от 0,2 до 5 эВ за одно взаимодействие, при этом его получали соответственно от 1,5% до 0,025% от общего числа атомов расчетной ячейки. Периодичность импульсов энергии от потока частиц изменялась в пределах от 0,5 пс до 10 пс. Таким образом, контролировался процесс нагрева, не приводящий к разрушению модели. Такой нагрев может наблюдаться, например, при электроимпульсной обработке металлов.

Установлено, что минимальная энергия E_{db} ДБ с мягким типом нелинейности для кристалла Pt_3Al составляет величину порядка 0,8 эВ,

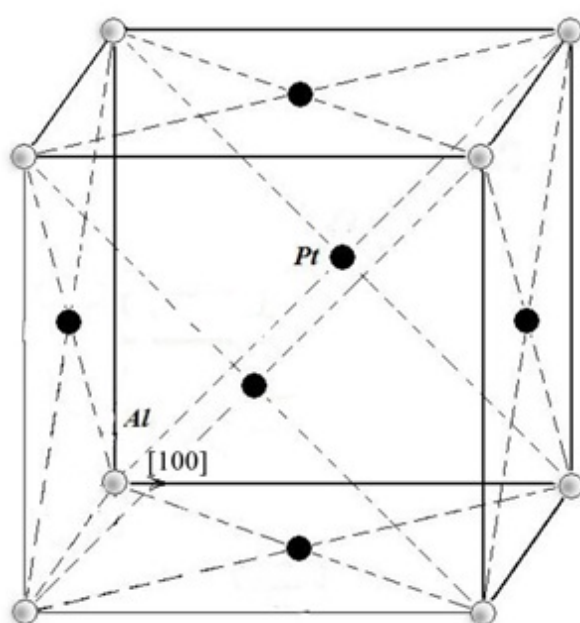


Рис. 7. Трехмерная элементарная ГЦК ячейка Pt_3Al с указанием направления импульса частиц. Серым цветом обозначены атомы Al, черным – Pt

однако для возбуждения ДБ требуется больше энергии, т.к. часть энергии рассеивается по решетке. Таким образом, атом Al должен аккумулировать необходимую энергию за счет одного или нескольких полученных импульсов (рис. 8).

При исследовании зависимости времени появления ДБ от количества атомов, получивших импульс одновременно, было установлено, что вероятность появления ДБ значительно возрастает, если процент атомов, получивших импульс, превышает 0,6 %. Энергии взаимодействия 1 эВ не достаточно, чтобы возбудить ДБ за одно столкновение, следовательно, чем большее количество атомов получает импульс за

один раз, тем больше вероятность получить повторный импульс атому алюминия, что способствует возбуждению ДБ. Проведенные компьютерные эксперименты показали, что при интенсивных внешних воздействиях на кристалл Pt_3Al возможна генерация дискретных бризеров с мягким типом нелинейности на узлах кристаллической решетки Al. Выявлены два механизма возбуждения ДБ. В случае энергии взаимодействия более 1,4 эВ возбуждение ДБ может происходить при единичном столкновении с узлом легкой подрешетки сплава Pt_3Al . Если же энергия взаимодействия меньше 1,4 эВ, то при множественных столкновениях частиц с атомами кристаллической решетки происходит накопление энергии в легкой подрешетке сплава, тем самым создаются благоприятные условия для генерации ДБ.

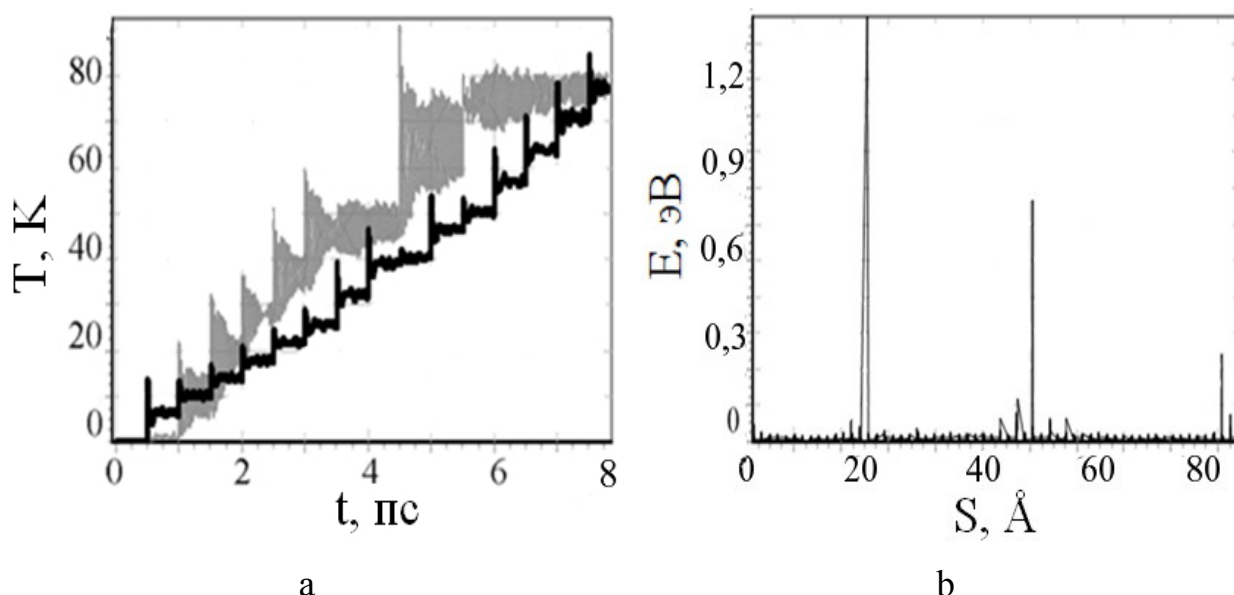


Рис. 8. а) Температурные кривые подрешеток Pt (черный цвет) и Al (серый цвет) при взаимодействии кристаллической решетки сплава Pt_3Al с частицами с энергией 1 эВ; б) Распределение энергии вдоль кристалла в момент времени 5 пс

Как было показано в обзоре, существуют экспериментальные работы по косвенной идентификации дискретных бризеров в состоянии термодинамического равновесия. Соответственно нами проведена оценка вероятности возбуждения ДБ в рассматриваемом кристалле при различных температурах. Как известно, вероятность для атомов и молекул запасти в результате серии столкновений большую энергию незначительна. Для этого требуется большое число последовательных целенаправленных столкновений, в результате которых атом набирает энергию, практически не теряя ее. Поэтому для многих процессов лишь ничтожная доля атомов имеет энергию, достаточную для преодоления барьера создания ДБ. Эту долю, в соответствии с теорией Аррениуса, в нашем случае можно определить по следующей формуле:

$$k = e^{\frac{-E_a}{RT}}, \quad (5)$$

где R – универсальная газовая постоянная, T – температура кристалла, E_a – энергия активации процесса.

Из формулы следует, что доля активных столкновений k , очень сильно зависит, как от энергии активации, так и от температуры. Для ДБ1 E_a составляет величину порядка 0,8 – 1,0 эВ. Из полученных данных можно сделать вывод, что до 0,01% атомов модельного кристалла при температуре 1000 К могут являться носителями ДБ1. В свою очередь ДБ2 обладает большей энергией активации, чем ДБ1. Минимальная энергия при которой ДБ2 может стабильно существовать составляет величину порядка 1,8 эВ. Полученные значения говорят о том, что вероятность возбуждения ДБ2 в состоянии термодинамического равновесия крайне мала, и спонтанное возбуждение ДБ2 без внешних воздействий на кристалл не возможно.

На двумерной модели кристалла Pt_3Al нами показано, что внешнее периодическое воздействие на частотах вне фононного спектра кристалла может вызывать возбуждение дискретных бризеров вблизи области воздействия. Такое явление называется эффектом супратрансмиссии, подразумевающим передачу энергии на частотах вне фононного спектра кристаллов. Для изучения данного эффекта рассматривалась трехмерная модель сплава Pt_3Al , содержащая $2,8 \cdot 10^4$ частиц, взаимодействующих посредством еам-потенциала. Периодическое воздействие осуществлялось по гармоническому закону $z(t) = A \sin(\omega t)$ с частотами от 0,2 до 15 ТГц, а также с различными амплитудами от 0,05 до 0,5 Å. Такой диапазон позволяет охватить весь спектр малоамплитудных колебаний атомов для рассматриваемого кристалла.

Фиксировалась поглощенная энергия в зависимости от частоты воздействия и амплитуды в указанных диапазонах (рис. 9).

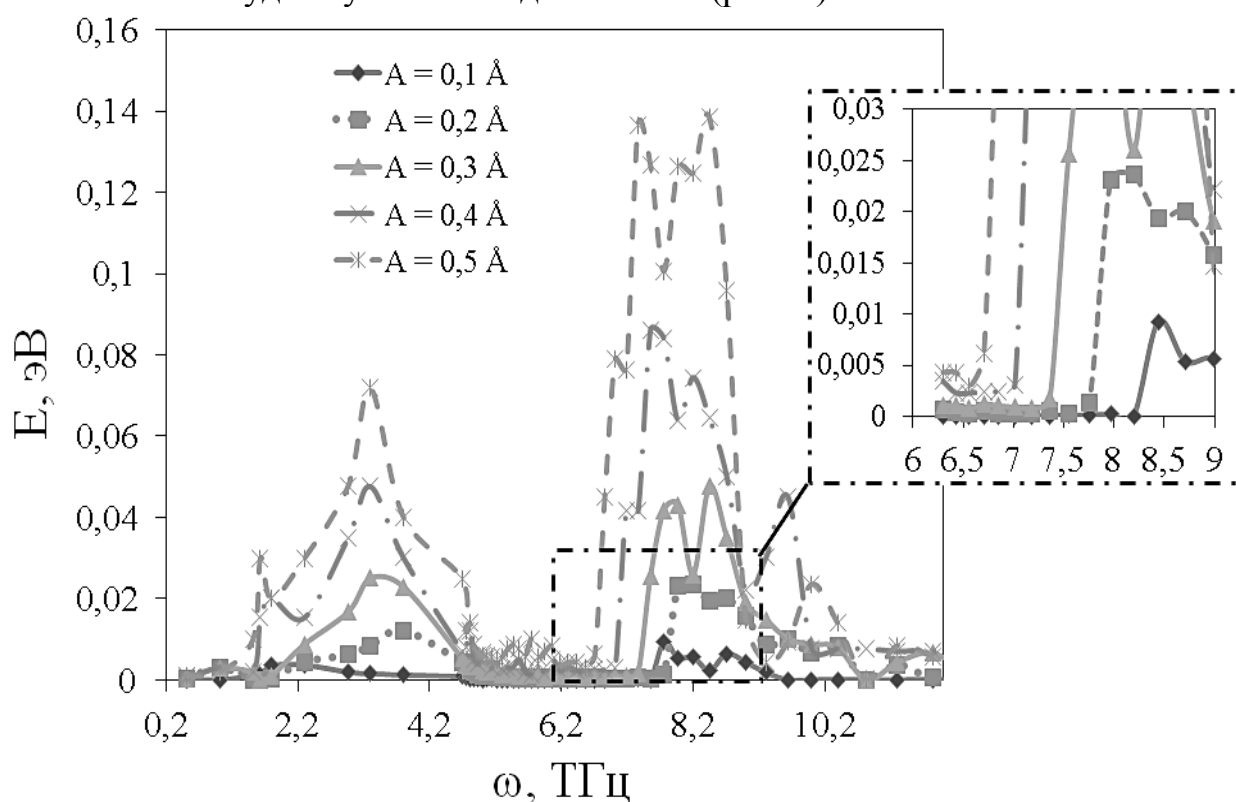


Рис. 9. Зависимость поглощенной энергии расчетной ячейкой на один атом за одну пикосекунду от частоты внешнего воздействия и амплитуды, увеличен масштаб для частот от 6 до 9 ТГц

Исходя из данного графика (рис. 9) можно отметить, что для амплитуд менее 0,2 Å эффект передачи энергии кристаллу отсутствовал в запрещенной зоне фононного спектра.

Для амплитуд 0,2 ангстрем и более происходит передача энергии кристаллу, в том числе на частотах в запрещенной зоне фононного спектра. С увеличением амплитуды пик поглощения смещается глубже в запрещенные частоты фононного спектра кристалла, что свидетельствует об увеличении доли нелинейных мод в процессе передачи энергии. При рассмотрении дис-

кретных бризеров в различных кристаллах чаще всего речь идет об их свойствах в «идеальных» решетках без каких-либо дефектов структуры. Однако очевидным является и тот факт, что дефекты и различные неоднородности среды оказывают влияние на характеристики таких объектов.

Далее было проведено исследование дискретных бризеров с мягким типом нелинейности вблизи поверхности кристалла Pt_3Al и при наличии точечных дефектов в объеме кристалла. Количество частиц в рассматриваемых моделях варьировалось от $1,08 \cdot 10^5$ частиц до $1,92 \cdot 10^5$ частиц, взаимодействующих посредством еам-потенциала, в зависимости от ориентации кристаллографических плоскостей. Рассматривалось три плоскости таким образом, что они являлись поверхностью кристалла: (100), (110), (111).

По результатам расчетов можно сказать, что в случае расположения

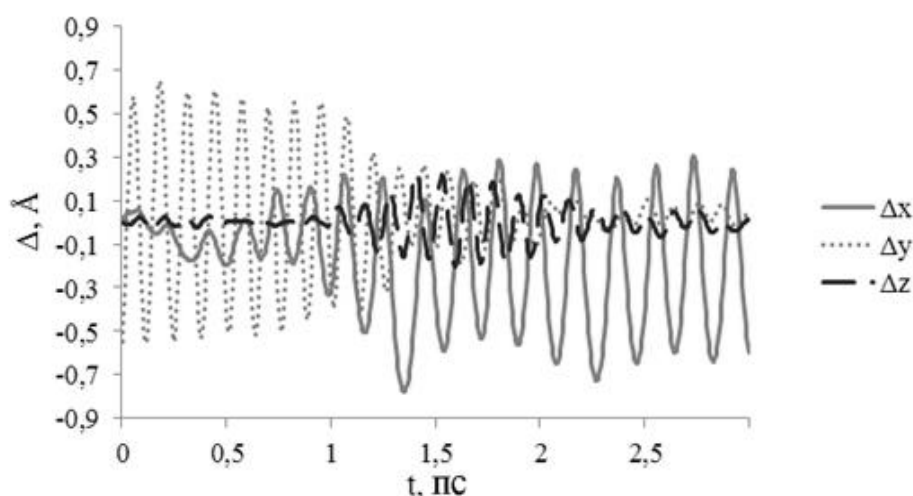


Рис. 10. Процесс изменения поляризации колебаний атома дискретного бризера вблизи поверхности кристалла Pt_3Al

бризера вблизи поверхности возможны колебания преимущественно перпендикулярно поверхности, при этом направления колебаний могут отличаться от случая ДБ в объеме. При попытке возбудить ДБ вдоль поверхности происходила переориентация колебаний перпендикулярно поверхности (рис. 10), за исключением плоскости (111). Возможна миграция дискретного бризера на соседний атом легкой подрешетки вглубь кристалла. Значение амплитуд колебаний в большинстве случаев для устойчивых колебаний перпендикулярно поверхности не превышает 0,5-0,6 Å, в то время как в объеме возможны устойчивые колебания до амплитуды 0,9 Å. Объем запасенной энергии на ДБ вблизи поверхности не превышает 0,6 эВ, в то время как в объеме кристалла, возможно локализовать ДБ с мягким типом нелинейности с энергией до 2,5 эВ при максимальной амплитуде в 0,9 Å.

Далее ДБ1 был проанализирован с позиции концепции квази-бризеров и получены основные статистические характеристики. Отклонение частоты периферийных атомов квази-бризера от частоты ядра квази-бризера крайне незначительно. Причём средняя частота варьируется в пределах от 7,687 ТГц до 7,840 ТГц, что соответствует щели фононного спектра кристалла Pt_3Al . Следовательно, в рамках данной модели кристалла Pt_3Al можно говорить о

близости модельного квази-бризера к соответствующему ему точному бризеру. Это свидетельствует об устойчивости полученного дискретного бризера в модельных ячейках и возможности возбуждения в реальных сплавах рассмотренного состава.

При нарушении трансляционной симметрии в кристаллах путем внесения дефектов следует говорить даже не о квази-бризерах, а о квази-бризерной моде или о нелинейной локализованной колебательной моде. Такие колебания менее устойчивы ввиду наличия искажений идеальной структуры кристалла, однако время их жизни существенно зависит от направлений расположения и расстояния относительно дефектов.

В четвертой главе рассматриваются дискретные бризеры в моноатомных ГЦК кристаллах, а также биатомном кристалле стехиометрического состава АВ на примере CuAu. В моноатомных кристаллах дискретные бризеры уже достаточно хорошо изучены, поэтому целью исследования стало изучение их устойчивости по отношению к начальным условиям возбуждения, времени их жизни и получение статистических характеристик с позиции концепции квази-бризеров.

Исследуемые модели представляли собой объемные ГЦК кристаллы, содержащие от $6 \cdot 10^3$ до $2,5 \cdot 10^5$ атомов, для моделирования межатомного взаимодействия которых использовался еam-потенциал.

Начальные условия для возбуждения неподвижного дискретного бризера с жестким типом нелинейности задавались посредством анзаца, предложенного в работе [32], следующим образом:

$$x_n^0 = T_n + S_n, \quad \dot{x}_n^0 = 0, \quad y_n^0 = 0, \quad \dot{y}_n^0 = 0, \quad (6)$$

где x_n^0 , y_n^0 и $\dot{x}_n^0$, $\dot{y}_n^0$ – компоненты векторов начальных перемещений и начальных скоростей n -го атома плотноупакованного ряда кристалла. Все остальные атомы кристалла имели нулевые начальные перемещения и начальные скорости. Функции T_n и S_n описывают амплитуды колебания и смещения центров колебания атомов. То есть, $T_n = (x_{n,\max} - x_{n,\min})/2$, $S_n = (x_{n,\max} + x_{n,\min})/2$, где $x_{n,\max}$ и $x_{n,\min}$ – это максимальное и минимальное значение функции $x_n(t)$, описывающей движение n -го атома. Данные функции имели вид:

$$T_n = \frac{(-1)^n A}{\cosh[\beta(n-x_0)]}, \quad S_n = \frac{-B(n-x_0)}{\cosh[\gamma(n-x_0)]}, \quad (7)$$

где параметр A определяет амплитуду ДБ, параметр B определяет амплитуду смещений центров колебаний атомов, параметры β и γ задают степень пространственной локализации ДБ, а x_0 – его начальное положение. При $x_0=0$ имеем ДБ, центрированный на атоме, а при $x_0=1/2$ – посередине между двумя соседними атомами.

В данной части работы проводится исследование устойчивости ДБ, полученных путем подбора параметров для анзаца (6) в ряде ГЦК кристаллов: Pt, Au, Ni, Pd, Cu. Для анализа частотных характеристик бризеров рассчитаны дисперсионные кривые и плотности фононных состояний для указанных кристаллов (рис. 11).

Фононный спектр моноатомного кристалла не имеет щели, поэтому возбуждение бризеров возможно только в случае отщепления его частоты от верхней границы спектра. Для всех металлов частоты ДБ должны быть больше определенного значения, например, в кристалле Pd частота ДБ должна быть более 5,6 ТГц.

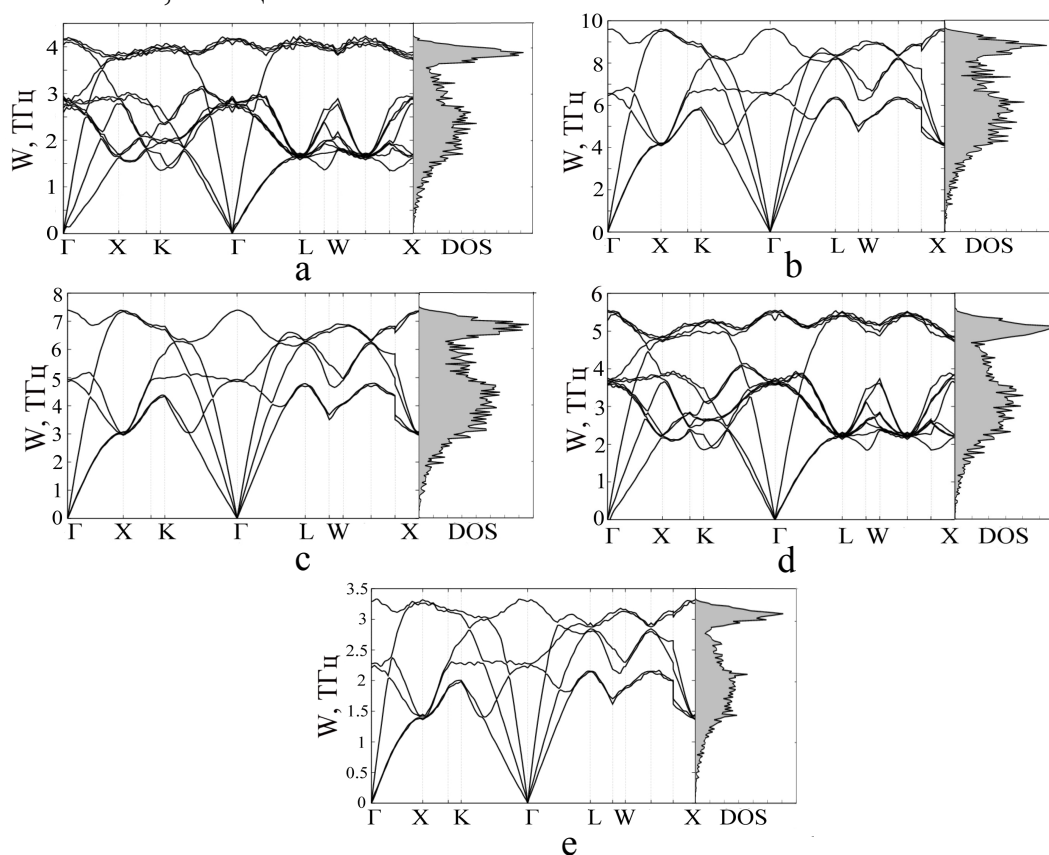


Рис. 11. Дисперсионные кривые и плотности фононных состояний для моноатомных кристаллов: а) Pt; б) Ni; в) Cu; д) Pd; е) Au

Далее для каждого выбранного металла исследованы такие важные характеристики, как время жизни ДБ (рис.12) и зависимость частоты колебаний атомов ДБ от амплитуды. При изменении параметра A в уравнении (7), фиксировалось значение амплитуды и измерялась частота колебаний атомов, входящих в дискретный бризер. Полученная зависимость близка к линейной и соответствует жесткому типу нелинейности. На рис. 13 приведена данная зависимость для Pd.

Так как задание идеальных начальных условий для возбуждения ДБ в реалистичных моделях достаточно сложно, то происходит рассе-

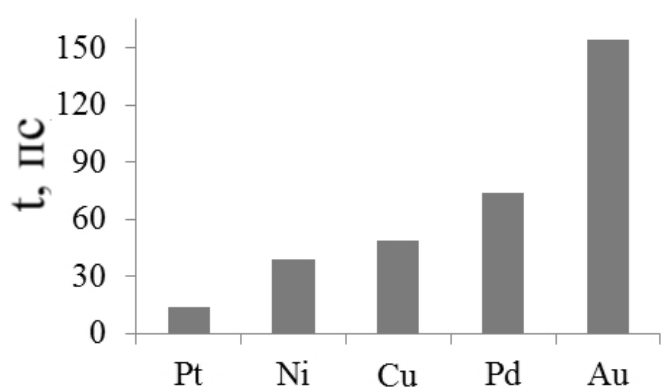


Рис.12. Время жизни дискретного бризера с жестким типом нелинейности в рассмотренных ГЦК металлах

ивание энергии в кристалл на начальных этапах моделирования. Следовательно, начальные условия играют определяющую роль в продолжительности существования ДБ в кристаллах.

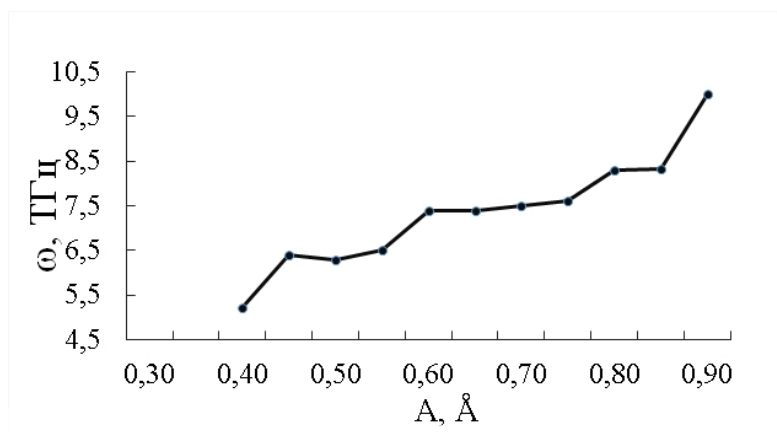


Рис. 13. Зависимость частоты дискретного бризера от амплитуды колебаний атомов.

Для анализа возможности существования ДБ в кристалле CuAu был произведен расчет плотности фоновых состояний рассматриваемого кристалла. Отсутствие щели в фононном спектре CuAu говорит о том, что в нем не могут существовать дискретные бризеры с мягким типом нелиней-

ности.

Для чистых металлов или сплавов с небольшим отличием масс компонент условия возбуждения ДБ с жестким типом нелинейности более специфичны. В данном случае для создания начального профиля ДБ использовалась функция Гаусса (8):

$$f(x) = A_0 e^{-\frac{x^2}{2C^2}}, \quad (8)$$

где A_0 задает начальную амплитуду центральных атомов дискретного бризера, x — относительная координата пары атомов в ряду, параметр C — степень пространственной локализации дискретного бризера. Варьируя значения A_0 и C , подбираем профиль дискретного бризера, тем самым задавая начальные отклонения из положения равновесия атомам, входящим в ДБ (рис. 14).

Наиболее продолжительные колебания удалось получить для параметров уравнения (8)

$A_0 = 0,48 \text{ Å}$, $C = 0,75$. Время жизни ДБ в этом случае превысило 50 пс. Сформированный дискретный бризер был локализован на 6-8 атомах меди, колеблющихся в

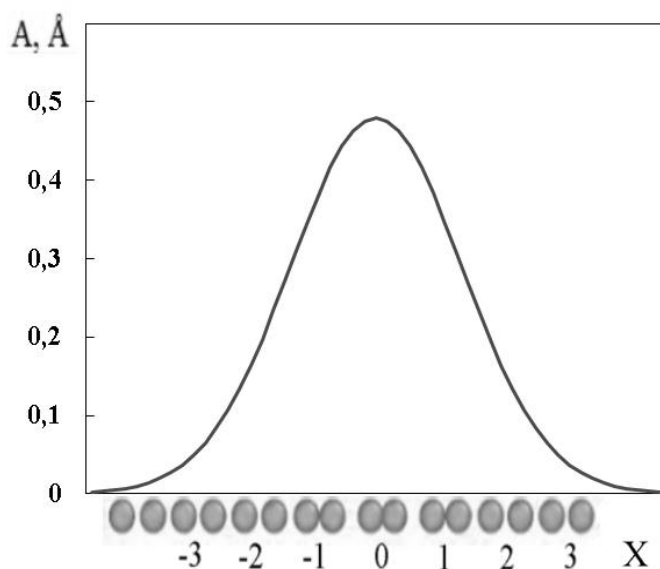


Рис. 14. Начальный профиль дискретного бризера, задаваемый функцией (2) для ряда меди вдоль направления [110]

противофазе, и он может иметь энергию до 2,1 эВ. Так же была рассчитана зависимость частоты от амплитуды для данного типа ДБ (рис. 15).

Далее производилась деформация кристалла CuAu с учетом принципа Пуассона, т.е. объем модельной ячейки сохранялся. Характерным показателем для кристаллов с тетрагональной структурой является отношение параметров решетки c/a для CuAu при нормальных условиях это соотношение равно 0,92. Деформируя кристалл вдоль кристаллографического направления [001], соответствующего параметру решетки c , учитывая изменения параметра решетки a для сохранения объема рассматриваемой модели, получали плотности фоновых состояний кристалла. Достаточно широкая щель в фоновом спектре кристалла была получена при $c/a=0,8$, что составляло 9,5 % деформации сжатия вдоль направления [001]. Дальнейшее увеличение деформации сжатия приводило к расширению щели, но в то же время отрицательно влияло на стабильность модели. При деформации растяжения кристалла CuAu, т.е. при увеличении соотношения c/a , щели в фоновом спектре кристалла не возникало.

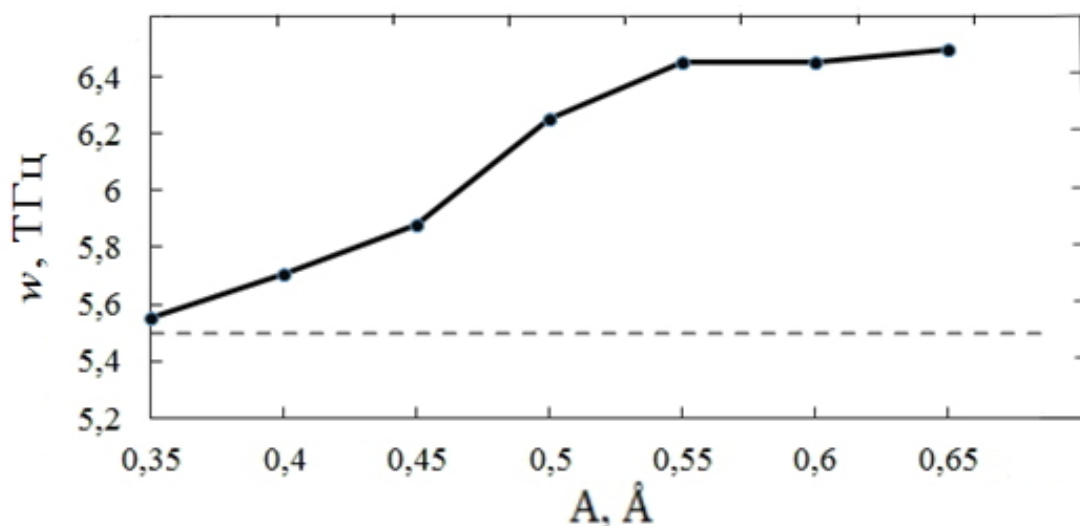


Рис. 15. Зависимость частоты ω колебаний атомов, входящих в дискретный бризер, от амплитуды A центральных атомов ДБ. Пунктирной линией показана верхняя граница фонованого спектра кристалла CuAu

Для поиска дискретного бризера с мягким типом нелинейности в условиях деформированного кристалла отклонялся из положения равновесия один из атомов Cu вдоль различных кристаллографических направлений. Как и ожидалось, в этом случае удалось получить дискретный бризер вдоль направления [100]. Частота полученного ДБ с мягким типом нелинейности лежит в щели фонованого спектра и соответствует 3,5 ТГц. Время жизни полученных локализованных колебаний составляет порядка 2 пс или более 15 периодов колебаний. Такой тип ДБ локализован в основном на одном атоме Cu и способен сосредотачивать энергию порядка 0,9 эВ.

Для задания движущегося ДБ необходимо внести асимметрию в профиль дискретного бризера. Для этой цели вводился множитель γ при C для

переопределения одной из ветвей функции (8), вторая ветвь рассчитывалась при $\square=1$:

$$f(x) = A_0 e^{-\frac{x^2}{2\gamma C^2}} \quad (9)$$

Подбирая множитель для правой ветви, можно получить ДБ с различной начальной скоростью движения по кристаллу. Полученные результаты свидетельствуют, что скорость таких смещений ДБ значительно ниже скорости звука в рассматриваемом кристалле. Движение дискретного бризера с несимметричным профилем происходит в сторону более крутой ветви функции. Результаты свидетельствуют о слабой мобильности таких объектов в рассматриваемом кристалле. Но все же возможен транспорт энергии вдоль плотноупакованных направлений подрешетки Си.

В заключительной части данной главы все рассмотренные ДБ проанализированы с позиции концепции квази-бризеров, получены соответствующие статистические характеристика бризеров.

Далее, в **пятой главе**, рассматривается движение краудиона в двумерной и трехмерной ячейках Ni, выявлены факторы, влияющие на его устойчивость. Показано, что движение краудиона в двумерном кристалле Ni устойчиво при скоростях от 12 до 14,1 км/с, в то время как оценочный критерий стабильности выполнен вплоть до 15,7 км/с. Для трехмерной модели кристалла Ni краудион был устойчив при скоростях от 18 до 22 км/с. Крайние значения скоростей в трехмерном случае в полтора раза больше, чем в двумерном. Это можно объяснить тем, что мы использовали различные межатомные потенциалы для этих кристаллов: в двумерном случае никеля использовался потенциал Морзе, в трехмерном никеле – потенциал ЕАМ. Теоретическая оценка для рассматриваемых моделей только на 10 % отличается от численных результатов найденного порога стабильности краудиона.

В следующем параграфе рассматривается процесс формирования границы биметалла в модельных ячейках, исследуется взаимодействие динамического краудиона с границей биметалла Ni-Al (рис. 16).

Было установлено, что при скоростях 12-12,3 км/с краудион не может преодолеть границу биметалла. Это вызвано наличием дислокаций несоответствия на границе. При этом происходит движение дислокации вглубь Al, т.е. происходит диссипативное движение дислокации несоответствия. Таким образом, кинетическая энергия краудиона переходит в структурные трансформации границы биметалла. При скоростях краудиона от 12,3 до 14 км/с он способен преодолеть границу биметалла и продолжить движение во второй компоненте – Al.

Уделено внимание вопросам, связанным с массопереносом вблизи границы двудольных биметаллических блоков. Показано, что единичный межузельный атом может вызывать процесс массопереноса вблизи границы биметалла Ni-Al, приводящий к движению дислокации несоответствия вглубь Al. Результаты в 2D и 3D моделях достаточно хорошо согласуются между собой. В качестве примера на рис. 17 показаны траектории атомных смеще-

ний, вызванных одним межузельным атомом Ni в краудиионной конфигурации.

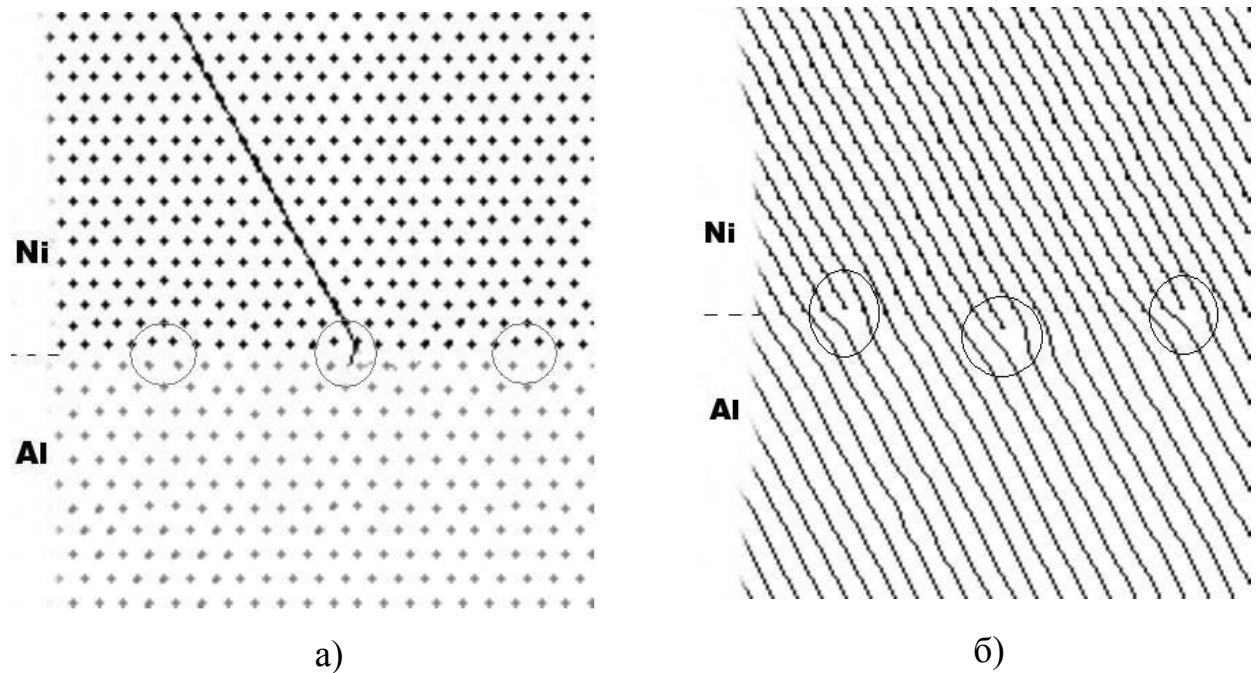


Рис. 16. Граница биметалла Ni-Al после взаимодействия динамического краудииона с вершинной дислокацией несоответствия

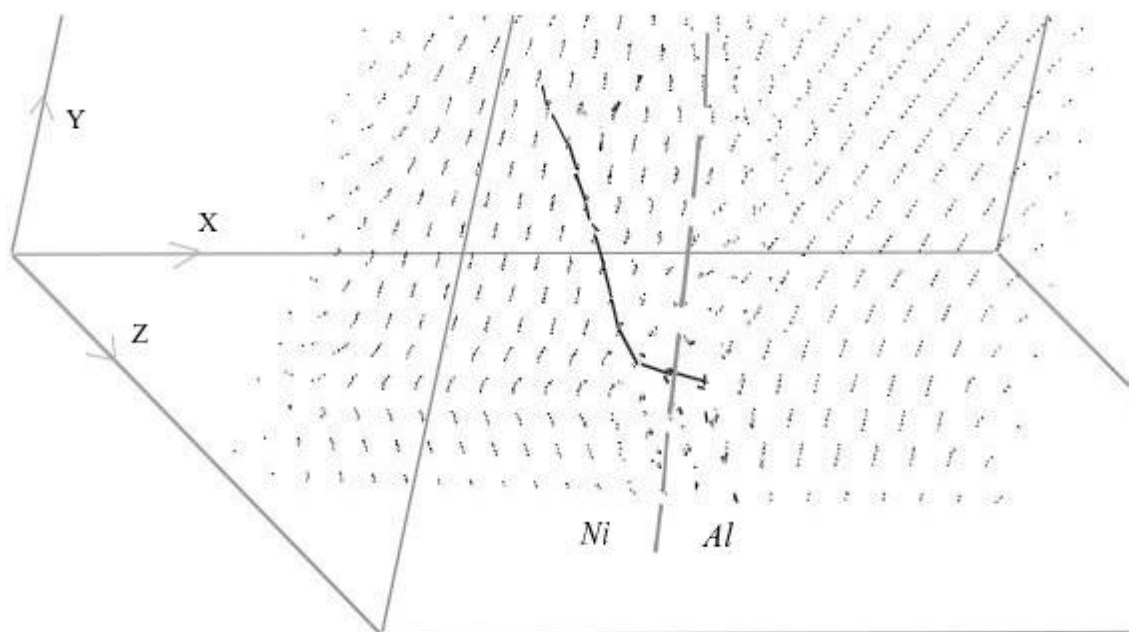


Рис.17. Эстафетные атомные смещения при внедрении межузельного атома на стороне никеля в конфигурации краудииона, 3D случай.

Характер смещения обусловлен, главным образом, расстоянием внедрения атома от границы металлов. Прямолинейная траектория вдоль плотноупакованного ряда атомов свойственна при внедрении на расстоянии от 3 до 8 межатомных расстояний от границы металлов. При более близком расположении межузельного атома к границе возможно вытеснение атома не вдоль

плотнупакованного ряда, а напрямую, т.е. сначала атом вытесняется в соседний металл, а потом происходит смещение ряда атомов вдоль границы металлов к ближайшей дислокации несоответствия. При более отдаленном расположении внедренного атома наблюдается ломаная траектория смещения атомов вдоль плотноупакованных направлений.

В конце главы рассмотрена подвижность дислокаций несоответствия на границе биметалла Pt-Al при наличии дефектов. Установлено, что на границе биметалла Pt-Al в 2D модели ядра вершинных дислокаций несоответствия, при наличии точечного дефекта замещения в виде легкой компоненты, могут служить аккумуляторами энергии нелинейных колебаний в течение продолжительного времени при отсутствии ее диссипации.

Шестая глава посвящена рассмотрению взаимодействия волн, порожденных рекомбинацией пар Френкеля в модельной решетке Ni и биметаллического соединения Ni-Al. Проанализировано влияние таких волн на точечные дефекты и их агрегаты. Волна не взаимодействует с уединенными точечными дефектами, а лишь с их агрегатами. Если размеры агрегатов сравнимы с длиной волны, то вакансионные объединения и краудионные комплексы испытывают разнонаправленные перемещения после ее прохождения. Импульс, переносимый рассматриваемой одиночной волной, оказывается существенно меньшим по сравнению с импульсом одиночной продольной волны, например, при баллистическом переносе тепла.

Проведено исследование взаимодействия волны с границей биметалла Ni-Al. Показана роль волны в движении дислокаций несоответствия на границе Ni-Al.

При достижении границы биметалла волна взаимодействует с упругим полем напряжений, образовавшимся при формировании границы Ni-Al. При этом частично отражаясь, а частично проходя через границу биметалла, волна вызывает структурные трансформации, связанные с движением дислокаций несоответствия на границе биметалла (рис. 18). Движение дислокаций несоответствия имеет как диссипативный, так и консервативный характер.

Вторая часть данной главы затрагивает вопросы, связанные с ударными волнами в моноатомных и биметаллических системах. Проводится изучение влияния ударной послекаскадной волны на динамику краевой дислокации. Показано, что дислокационный сегмент выгибается после прохождения ударной волны и в дальнейшем возвращается в первоначальное положение, совершая колебания около положения равновесия. Проведенные компьютерные эксперименты свидетельствуют о возможности появления зародышей поры при прохождении ударной послекаскадной волны по расчетному блоку, содержащему вакансии.

При этом для зарождения поры в данном случае концентрация вакансий может быть значительно ниже, чем в экспериментах без генерации ударной волны.

В заключительной части главы рассмотрено прохождение ударной волной границы двудольных биметаллических частиц в 2D и 3D случаях.

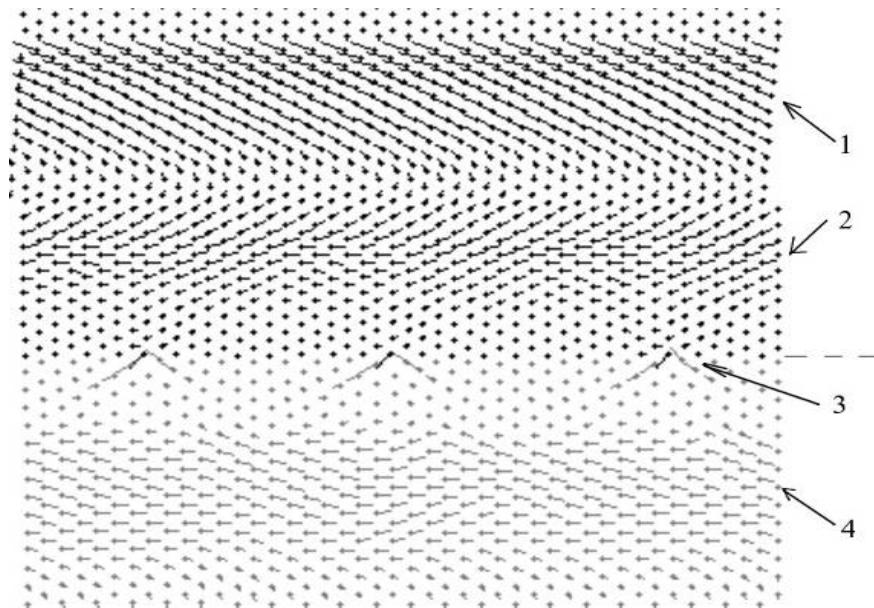


Рис.18. Расчетная ячейка двумерного биметалла Ni-Al: 1 – место рекомбинации пар Френкеля; 2 – волна, отраженная от границы Ni-Al; 3 – атомные смещения, вызванные уединенной волной; 4 – волна, прошедшая границу биметалла Ni-Al

На рис. 19 представлена характерная картина распределения частиц вблизи границы биметалла после прохождения ударной волны. Если энергии волны достаточно, то возможно формирование зародыша поры вблизи границы металлов (рис. 20).

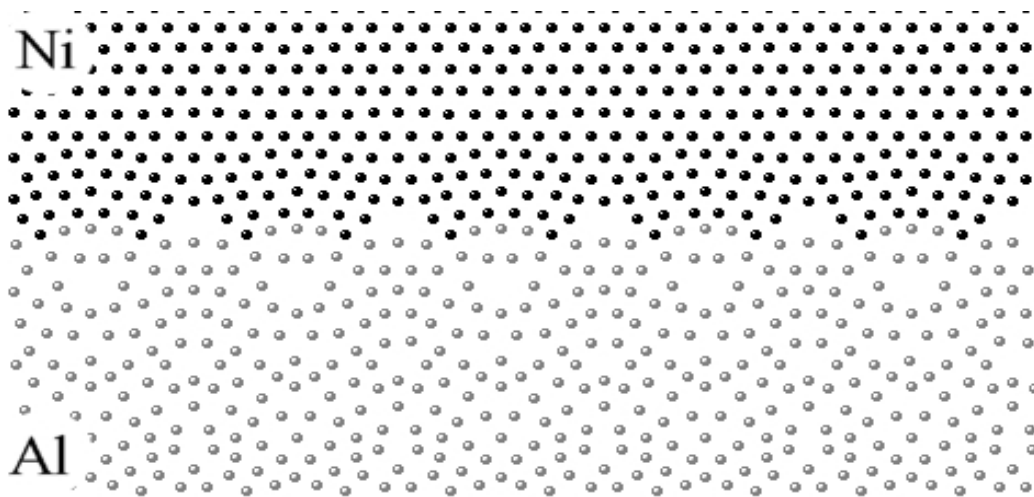


Рис. 19. Граница биметалла Ni-Al в момент прохождения ударной волны с характерными областями сжатия и растяжения вблизи границы металлов

Более детально процесс формирования нанопор вблизи раздела металлов был изучен в трехмерном случае. Как показали эксперименты, начальная скорость ударной волны влияла на размер зародышей пор, которые формировались на стороне Al. При этом распределение пор и скорость их схлопыва-

ния в биметалле зависели от линейных размеров рассматриваемой модели частицы.

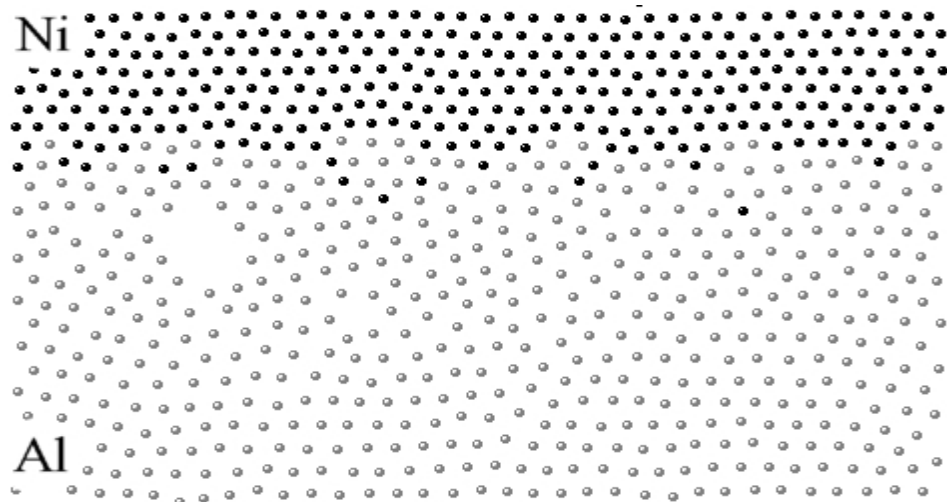


Рис.20. Формирование поры вблизи границы биметалла Ni-Al после прохождения ударной волны со скоростью, превышающей скорость звука в Ni в 1,6 раза

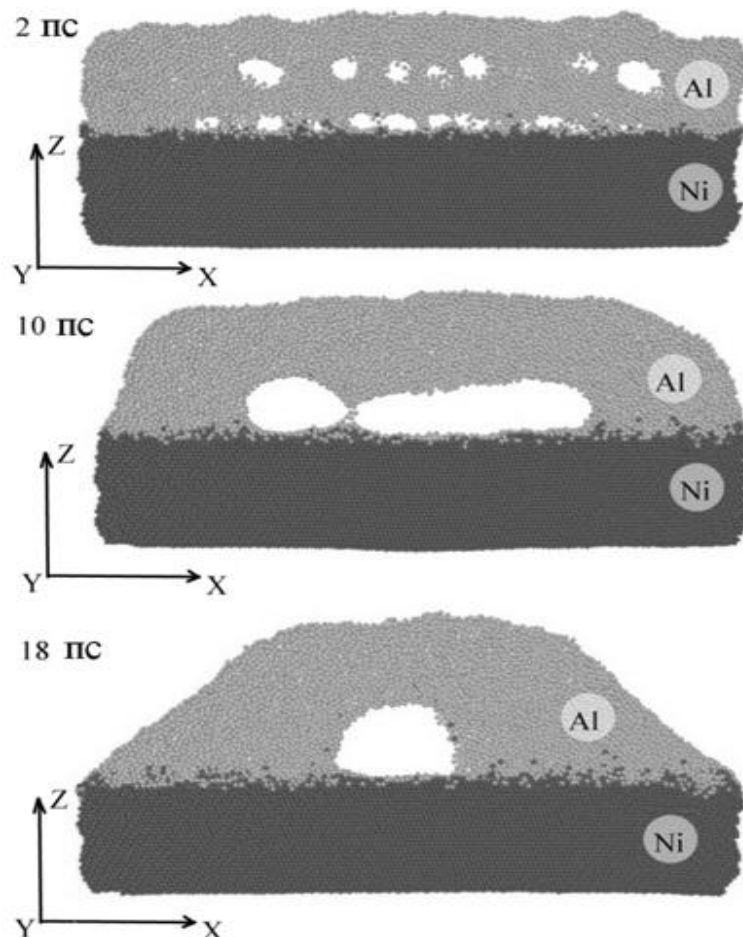


Рис. 21. Эволюция пор в двудольном биметаллическом кластере в результате прохождения ударной волны со скоростью, превышающей скорость звука в Ni в 1,25 раза. Толщина визуализированной плоскости – 4 нм. Линейные размеры биметалла вдоль осей X и Y соответствовали 41,8 нм, вдоль оси Z – 14,1 нм

Отметим, что для частиц менее 8 нм поры не формировались. Это связано с влиянием свободной поверхности биметалла и с меньшим количеством дислокаций на межфазной границе. Для биметаллов размером от 8 до 15 нм происходит формирование двух-трех пор, расположенных в областях первого и второго интерференционного минимума ударной волны на дислокациях несоответствия. Для больших размеров ячейки количество зародышей пор увеличивалось, пример эволюции данной структуры представлен на рис. 21. Влияние свободной поверхности уменьшается при увеличении линейных размеров ячейки, однако для частиц, в том числе более 60 нм, оно имеет место. Далее рассматривалось влияние толщины слоя Al на возможность формирования пор. Полученные результаты свидетельствуют о том, что при толщине более 15 нм формирование пор не происходит. Несмотря на расплав Al вблизи границы раздела металлов, энергии волны недостаточно для создания свободного объема за счет смещения атомов Al. Таким образом, возможность формирования зародышей пор в значительной степени определяется размерами биметаллических частиц, а также взаимной ориентацией компонент сплава и скоростью волны.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Дискретный бризер с жестким типом нелинейности в кристалле Pt_3Al являются мобильными и существуют на частотах выше оптической ветви фононного спектра кристалла. Такой ДБ локализован на нескольких атомах Al, способен сосредотачивать порядка 2,5 эВ энергии и транспортировать ее вдоль плотноупакованных направлений кристалла на сотни нанометров.
2. Выявлены два механизма возбуждения щелевых ДБ с мягким типом нелинейности в кристалле стехиометрии A_3B (на примере Pt_3Al) потоком частиц. В случае если частица способна передавать атому Al энергию более 1,4 эВ, возбуждение дискретного бризера может происходить единственной частицей. При меньших энергиях частиц образование ДБ происходит при не-однократных столкновениях частиц с атомами Al.
3. Внешние поля, осциллирующие с частотой вне фононного спектра системы кристалла A_3B , могут являться причиной возбуждения ДБ с мягким типом нелинейности вблизи поверхности. Такие дискретные бризеры поляризованы перпендикулярно поверхности кристалла.
4. В случае термодинамического равновесия была проведена оценка вероятности возбуждения ДБ с мягким типом нелинейности за счет тепловых флуктуаций в кристалле Pt_3Al . Показано, что при температуре 1000 К до 0,01% атомов Al могут являться носителями ДБ с мягким типом нелинейности.
5. В кристаллах стехиометрического состава AB, на примере CuAu, показана возможность существования ДБ на атомах более легкой компоненты сплава вдоль плотноупакованного ряда. Такие ДБ способны сосредото-

вать до 1,8 эВ энергии и перемещаться на несколько межатомных расстояний. Возбуждение ДБ с мягким типом нелинейности возможно только при наличии упругой деформации кристалла, обеспечивающей появление запрещенной зоны в фононном спектре.

6. Для монокристаллов ГЦК металлов Pt, Au, Ni, Pd, Cu показано, что время жизни ДБ увеличивается для кристаллов с большим значением коэффициента Пуассона. Получены амплитудно-частотные характеристики и зависимости времени жизни ДБ от параметров возбуждения бризера.

7. Все объекты, рассмотренные с позиции квази-бризеров, разрушаются в тот момент, когда среднее квадратичное отклонение частот превышает разность между средней частотой квази-бризера и ближайшей границей фононного спектра кристалла. При этом происходит делокализация колебаний и рассеивание энергии по кристаллу в виде малоамплитудных тепловых колебаний решетки.

8. При нарушении трансляционной симметрии в кристаллах путем внесения дефектов следует говорить не о квази-бризерах, а о квази-бризерной моде или о нелинейной локализованной колебательной моде. Такие колебания менее устойчивы ввиду наличия искажений идеальной структуры кристалла, время их жизни существенно зависит от расстояния локализованной моды до дефектов.

9. Исследовано прохождение краудииона границы биметалла. Установлено, что при столкновении краудииона и дислокации несоответствия порождается продольная волна, вызывающая миграцию вакансий в сторону ближайшей дислокации несоответствия на границе биметалла.

10. Межузельный атом вблизи границы биметалла Ni-Al вызывает направленные атомные смещения, осуществляемые по краудиионному механизму, в сторону ближайшей дислокации несоответствия, приводя к диссипативному движению дислокации. Скорость атомных смещений не превышает скорость звука в рассматриваемом материале.

11. Вблизи границы двудольных биметаллических частиц, при прохождении ударной волной сетки дислокаций несоответствия, возможно формирование зародышей пор. Размер пор обусловлен взаимной ориентацией кристаллов, размером частиц и скоростью волны.

Цитируемая литература

1. Пригожин И., Николис Г. Познание сложного: Введение. / Пер. с англ. В. Ф. Пастушенко – Изд. 2-е, стереотип. 1990. 344 с.
2. Kivshar Yu. S., Agrawal G. P. Optical Solitons: From Fibers to Photonic Crystals. // San Diego: Academic Press. 2003. P. 540.
3. Браун О.М., Кившарь Ю.С. Модель Френкеля-Конторова. Концепции, методы, приложения. / Пер. с англ. под ред. А.В. Савина. М.: Физ.-мат. лит., 2008. 536 с.

4. Hwang M., Arrieta A. F. Input-Independent Energy Harvesting in Bistable Lattices from Transition Waves // *Scientific Reports*. 2018. 3630. V.8. №1. p 2045-2322
5. Zhang, M. et al. Mid-infrared Raman-soliton continuum pumped by a nanotube-mode-locked sub-picosecond Tm-doped MOPFA // *Opt. Express*. 2013. V. 21. P. 23261–23271 .
6. Infeld E., Rowlands G. *Nonlinear Waves, Solitons and Chaos*. // Cambridge: Cambridge University Press. 2000. P. 423.
7. Дмитриев С.В. Волны солитонного типа в дискретных системах в физике конденсированного состояния / Диссертация на соискание ученой степени доктора физ.-мат. наук. – Барнаул. 2007. 236 с.
8. Sievers A.J., Takeno S. Intrinsic Localized Modes in Anharmonic Crystals // *Phys. Rev. Lett*. 1988. V.61. № 8. P. 970-973.
9. Eisenberg H.S., Silberberg Y., Morandotti R., Boyd A.R. and Aitchison J.S. Discrete Spatial Solitons in Waveguide Arrays // *Phys. Rev. Lett*. 1998. V.81. P. 3383.
10. Kivshar Yu.S., Agrawal G.P. *Optical solitons*. // Academic Press, Amsterdam. 2003. p. 540.
11. Miroshnichenko A.E., Flach S., Fistul M.V., Zolotaryuk Y., Page J.B. Breather in Josephson junction ladders: resonances and electromagnetic waves spectroscopy. // *Phys. Rev*. 2001. V.64. P. 066601.
12. Schwarz U.T., English L.Q., and Sievers A.J. Experimental Generation and Observation of Intrinsic Localized Spin Wave Modes in an Antiferromagnet // *Phys. Rev. Lett*. 1999. V.83. P. 223.
13. Kim S.K., Tchernyshyov O., Tserkovnyak Y. Thermophoresis of an Antiferromagnetic Soliton // *Phys. Rev*. 2015. В 92. 020402
14. Филин Д.В., Галкина Е.Г., Иванов Б.А. Динамические топологические солитоны большого радиуса в одноосных ферромагнетиках. // *Письма в ЖЭТФ*. 2013. Т.97. Вып. №5. С. 291-296.
15. Maugin G.A. Solitons in elastic solids (1938–2010) // *Mechanics Research Communications*. V.38. Issue 5. 2011. P. 341-349.
16. Дмитриев С.В и др. Дискретные бризеры в кристаллах // *УФН*. 2016. Т. 186. №5. с. 471-488.
17. *Физическая энциклопедия*. / Гл. ред. А.М. Прохоров. – М.: Большая Российская энциклопедия, Т.5, 1998. – 691 с.
18. Раджараман Р. Солитоны и инстантоны в квантовой теории поля: монография. / Пер. с англ. под ред. О. А. Хрусталева. – М.: Мир, 1985. – 416 с.
19. Шварц А.С. Квантовая теория поля и топология. – М.: Наука, Гл. ред. физ.-мат. лит., 1989. – 400 с.
20. Dolgov, A.S. The localization of vibrations in a nonlinear crystalline structure // A.S. Dolgov. *Sov. Phys. Solid State*. 1986. V.28. P. 907–909.
21. Manley M.E., Sievers A.J., Lynn J.W., Kiselev S.A., Agladze N.I., Chen Y., Llobet A., Alatas A. Intrinsic Localized Modes Observed in the High Tem-

- perature Vibrational Spectrum of NaI // *Phys. Rev.* 2009. V.79 (13). P. 134304.
22. Manley M.E., Jeffries J.R., Lee H., Butch N.P., Zabalegui A., Abernathy D.L., *Phys. Rev.* 2013. B 89, 224106.
 23. Swanson B. I., Brozik J. A., Love S. P., Strouse G. F., Shreve A. P., Bishop A. R., Wang W.-Z. Observation of intrinsically localized modes in a discrete low-dimensional material // *Phys. Rev. Lett.* –1999. – V. 82. – P. 3288-3291.
 24. Archilla, J.F.R., Coelho, S.M.M., Aurret, F.D., et al. // *Phys. D*, 2015, V. 297, p. 56.
 25. Chechin G.M., Dzhelauhova G.S., and Mehonoshina E.A. Quasibreathers as a generalization of the concept of discrete breathers. // *Physical Review E*. 2006. Vol.74. P. 036608.
 26. Гроза А.А. и др. Эффекты дальнего действия в монокристаллах кремния при облучении протонами и альфа-частицами. // *Ядерная физика та енергетика*. 2010. Т.11. Вып. №1. С. 66-73.
 27. Псахье С.Г., Зольников К.П., Кадыров Р.И., Руденский Г.Е., Шаркеев Ю.П., Кузнецов В.М. О возможности формирования солитонобразных импульсов при ионной имплантации. // *Письма в ЖТФ*. 1999. Т.25. Вып. №6. С. 7.
 28. Girifalco L.A., Weizer V.G. Application of the Morse potential function of cubic metals. // *Phys. Rev.* 1959. V.1114. № 3. P. 687-694
 29. Daw M.S., Baskes M.I. Embedded-atom method: Derivation and application to impurities and other defects in metals. // *Physical Review B*. 1984. V.29. № 12. P. 6443-6453
 30. Копкин С.В., Крючков И.А. Алгоритм модернизированного многочастичного потенциала для молекулярно-динамического моделирования на графическом арифметическом ускорителе. // *Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов*. 2010. Вып. №3. С. 73-82.
 31. Kohn W. Nobel Lecture. Electronic structure of matter—wave functions and density functionals// *Rev. Mod. Phys.* 1999. V.71. P. 253.
 32. Кистанов А.А. и др. Движущиеся дискретные бризеры в моноатомном двумерном кристалле. // *Письма в ЖЭТФ*. 2014. Т.99. С. 403-408.

Основные результаты диссертации изложены в следующих работах:

Главы в коллективных монографиях

- 1) Маркидонов А.В., **Захаров П.В.**, Старостенков М.Д., Медведев Н.Н. Механизмы кооперативного поведения атомов в кристаллах. – Новокузнецк: филиал КузГТУ в Новокузнецке, 2016. – 220 с. (ISBN978-5-9907499-1-7)

Статьи в изданиях, рекомендованных ВАК Минобрнауки РФ

- 2) Медведев Н.Н., Дмитриев С.В., Старостенков М.Д., **Захаров П.В.** Устойчивость колебаний локализованной моды в двумерном упорядоченном сплаве стехиометрии A_3B // Перспективные материалы, Специальный выпуск (7), 2009, С. 213-217.
- 3) Медведев Н.Н., Старостенков М.Д., Маркидонов А.В., **Захаров П.В.** Волны, возникающие при рекомбинации пар Френкеля в двумерных модельных решетках металлов и их влияние на дрейф агрегатов точечных дефектов // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2009. Т. 6. № 2. С. 8-13.
- 4) Старостенков М.Д., **Захаров П.В.**, Медведев Н.Н. Взаимодействие краудина с границей биметалла Ni-Al в 2D модели // Письма о материалах. 2011. Т. 1. № 4. С. 238-240.
- 5) Медведев Н.Н., Старостенков М.Д., **Захаров П.В.**, Пожидаева О.В. Локализованные колебательные моды в двумерной модели упорядоченного сплава Pt_3Al // ПЖТФ, 2011, т.37, вып, 3, С.7-15.
- 6) Медведев Н.Н., Старостенков М.Д., Маркидонов А.В., **Захаров П.В.** Фокусирующиеся и краудионные столкновения атомов Cu в трехмерной модели упорядоченного сплава CuAu со сверхструктурой $L1_1$ // Перспективные материалы, 2011, Спец. вып. №12, С. 321-326.
- 7) Старостенков М.Д., **Захаров П.В.**, Медведев Н.Н. Изучение посредством двумерной модели возможности существования нелинейных локализованных колебаний на границе биметалла Pt-Al // Фундаментальные проблемы современного материаловедения, 2011, Т. 8, №4, С. 40 – 44.
- 8) Маркидонов А.В., Старостенков М.Д., **Захаров П.В.** Рост малых вакансионных скоплений, инициированный послекаскадными ударными волнами // Письма о материалах. 2012. Т. 2. № 2 (6). С. 111-114.
- 9) **Захаров П.В.**, Старостенков М.Д., Медведев Н.Н., Маркидонов А.В., Обидина О.В. Кооперативное поведение межузельных атомов в поле дислокаций несоответствия на границе биметалла Ni-Al // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2012. Т. 9. № 4. С. 431-435.
- 10) **Захаров П.В.**, Медведев Н.Н., Старостенков М.Д. Эффекты самоорганизации вещества на атомном уровне при прохождении уединенной поперечной волны через границу биметалла Ni-Al // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2012. Т. 9. № 1. С. 46-49.
- 11) Медведев Н.Н., Старостенков М.Д., **Захаров П.В.**, Маркидонов А.В. О локализации энергии нелинейных и линейных колебаний атомов в мо-

- дельной кристаллической решетке состава A_3B // Письма о материалах. 2013. Т. 3. № 1 (9). С. 34-37.
- 12) Маркидонов А.В., Старостенков М.Д., Павловская Е.П., Яшин А.В., Медведев Н.Н., **Захаров П.В.** Структурная трансформация вакансионных пор в деформированном кристалле под воздействием ударных волн // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2013. Т. 10. № 4. С. 563-571.
 - 13) Маркидонов А.В., Старостенков М.Д., Павловская Е.П., Яшин А.В., Медведев Н.Н., **Захаров П.В.**, Ситников А.А. Расщепление вакансионной поры в зернограничной области ударной послекасадной волной // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2013. Т. 10. № 3. С. 443-450.
 - 14) Старостенков М.Д., **Захаров П.В.**, Медведев Н.Н., Маркидонов А.В., Ерёмин А.М., Сосков А.А., Микрюков В.Р. Особенности процесса массопереноса в различных биметаллах при наличии комплексов вакансий в поле дислокаций несоответствия // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2013. Т. 10. № 2. С. 245-250.
 - 15) Медведев Н.Н., Старостенков М.Д., **Захаров П.В.**, Маркидонов А.В. Миграция агрегатов точечных дефектов в модельных кристаллах // Вестник Тамбовского университета. Серия: Естественные и технические науки. 2013. Т. 18. № 4-2. С. 1852-1853.
 - 16) Медведев Н.Н., Старостенков М.Д., **Захаров П.В.**, Старостенкова О.Х. Факторы, влияющие на плотность фоновых состояний модельных упорядоченных сплавов состава A_3B // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2014. Т. 11. № 4-2. С. 667-671.
 - 17) **Захаров П.В.**, Старостенков М.Д., Медведев Н.Н., Ерёмин А.М., Маркидонов А.В. Влияние низких температур на характеристики дискретного бризера в кристалле Pt_3Al // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2014. Т. 11. № 4. С. 533-536.
 - 18) Маркидонов А.В., Старостенков М.Д., Смирнова М.В., Коваленко В.В., **Захаров П.В.** Влияние ударных послекасадных волн на динамику краевой дислокации // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2014. Т. 11. № 4. С. 461-469.
 - 19) **Захаров П.В.**, Старостенков М.Д., Медведев Н.Н., Ерёмин А.М., Маркидонов А.В. Антисимметричный дискретный бризер в кристалле Pt_3Al // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2014. Т. 11. № 3. С. 388-392.
 - 20) Маркидонов А.В., Старостенков М.Д., **Захаров П.В.**, Жилианг Ж. Роль ударных послекасадных волн в низкотемпературной активации самодиффузии // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2014. Т. 11. № 3. С. 346-352.
 - 21) **Захаров П.В.**, Старостенков М.Д., Ерёмин А.М., Маркидонов А.В. Поведение нелинейной локализованной моды вблизи комплексов вакансий в кристалле Pt_3Al // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2014. Т. 11. № 2. С. 260-265.
 - 22) Маркидонов А.В., Старостенков М.Д., Яшин А.В., **Захаров П.В.** Изучение структурных трансформаций пор цилиндрической формы мето-

- дом молекулярной динамики // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2014. Т. 11. № 2. С. 163-172.
- 23) Медведев Н.Н., Старостенков М.Д., Потекаев А.И., **Захаров П.В.**, Маркидонов А.В., Ерёмин А.М. Локализация энергии в упорядоченных конденсированных системах: сплавы состава A_3B со сверхструктурой $L1_2$ // Известия высших учебных заведений. Физика. 2014. Т. 57. № 3. С. 92-100.
 - 24) **Захаров П.В.**, Ерёмин А.М., Старостенков М.Д., Маркидонов А.В. Компьютерное моделирование нелинейной локализованной колебательной моды большой амплитуды в кристалле Pt_3Al с бивакансией Pt // Компьютерные исследования и моделирование. 2015. Т. 7. № 5. С. 1089-1096.
 - 25) Маркидонов А.В., Старостенков М.Д., **Захаров П.В.**, Обидина О.В. Изучение влияния ударной послекаскадной волны на динамику краевой дислокации с возможным ускорением диффузии // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2015. Т. 12. № 4. С. 464-471.
 - 26) **Захаров П.В.**, Дмитриев С.В., Старостенков М.Д., Ерёмин А.М., Маркидонов А.В., Чередниченко А.И. Об устойчивости дискретных бризеров в кристалле Pd // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2015. Т. 12. № 4. С. 453-458.
 - 27) Маркидонов А.В., Старостенков М.Д., **Захаров П.В.**, Обидина О.В. Перемещение дислокационных ансамблей в ГЦК кристалле при высокоэнергетическом внешнем воздействии // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2015. Т. 12. № 3. С. 373-381.
 - 28) **Захаров П.В.**, Ерёмин А.М., Старостенков М.Д., Маркидонов А.В., Обидина О.В. Research of the quasi-breather mode behavior in Pt_3Al crystal with the point defects // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2015. Т. 12. № 3. С. 283-288.
 - 29) Маркидонов А.В., Старостенков М.Д., **Захаров П.В.**, Обидина О.В. Порообразование в гцк кристалле под воздействием ударных послекаскадных волн // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2015. Т. 12. № 2. С. 231-240.
 - 30) **Захаров П.В.**, Ерёмин А.М., Старостенков М.Д., Маркидонов А.В., Луценко И.С. Квазибризерные состояния в кристалле состава A_3B при наличии точечных дефектов // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2015. Т. 12. № 2. С. 146-152.
 - 31) Медведев Н.Н., Старостенков М.Д., **Захаров П.В.** Взаимодействие дискретных бризеров в 3D модели Pt_3Al // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2015. Т. 12. № 1. С. 62-67.
 - 32) **Захаров П.В.**, Старостенков М.Д., Дмитриев С.В., Медведев Н.Н., Ерёмин А.М. Моделирование взаимодействия дискретных бризеров различного типа в нановолокне кристалла Pt_3Al // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 2015. Т. 148. № 2. С. 252-257.
 - 33) **Захаров П.В.**, Ерёмин А.М., Манаков Н.А., Старостенков М.Д., Маркидонов А.В. Поведение квазибризерной моды в кристалле Pt_3Al при

- наличии точечных дефектов // Вестник Оренбургского государственного университета. 2015. № 9 (184). С. 38-44.
- 34) Медведев Н.Н., Старостенков М.Д., **Захаров П.В.**, Дмитриев С.В. Возбуждение двух типов дискретных бризеров в компьютерной 3D-модели Pt_3Al // Письма в Журнал технической физики. 2015. Т. 41. № 20. С. 50-57.
 - 35) Старостенков М.Д., Потекаев А.И., Дмитриев С.В., **Захаров П.В.**, Ерёмин А.М., Кулагина В.В. Динамика дискретных бризеров в кристалле Pt_3Al // Известия высших учебных заведений. Физика. 2015. Т. 58. № 9. С. 136-140.
 - 36) **Захаров П.В.**, Старостенков М.Д., Ерёмин А.М., Чередниченко А.И. Дискретные бризеры в кристалле $CuAu$ // Письма о материалах. 2016. Т. 6. № 4 (24). С. 294-299.
 - 37) **Захаров П.В.**, Старостенков М.Д., Ерёмин А.М. Влияние упругой деформации всестороннего растяжения-сжатия на характеристики дискретного бризера в кристалле Pt_3Al // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2016. Т. 13. № 2. С. 223-229.
 - 38) **Захаров П.В.**, Маркидонов А.В., Старостенков М.Д., Полетаев Г.М., Ерёмин А.М., Обидина О.В. Влияние ударных послекаскадных волн на межфазную границу биметаллов Ni-Al, Ni-Fe // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2016. Т. 13. № 1. С. 77-83.
 - 39) Ерёмин А.М., **Захаров П.В.**, Старостенков М.Д. Статистические характеристики квази-бризера с мягким типом нелинейности в кристаллах стехиометрии A_3B // Химическая физика и мезоскопия. 2016. Т. 18. № 4. С. 565-573.
 - 40) **Захаров П.В.**, Ерёмин А.М., Старостенков М.Д. Влияние межузельных атомов на квази-бризерные моды в кристалле стехиометрии A_3B с морзевским взаимодействием // Химическая физика и мезоскопия. 2016. Т. 18. № 1. С. 114-121.
 - 41) **Захаров П.В.**, Ерёмин А.М., Манаков Н.А., Старостенков М.Д., Вдовин Р.С. Кооперативные атомные смещения вблизи межфазных границ Ni- γ Fe // Вестник Оренбургского государственного университета. 2016. № 6 (194). С. 96-101.
 - 42) **Захаров П.В.**, Ерёмин А.М., Старостенков М.Д., Манаков Н.А. Взаимодействие движущегося дискретного бризера с точечным дефектом в кристалле состава A_3B // Вестник Оренбургского государственного университета. 2016. № 3 (191). С. 98-103.
 - 43) **Захаров П.В.**, Старостенков М.Д., Ерёмин А.М., Чередниченко А.И. Влияние свободной поверхности кристалла на характеристики дискретного бризера // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2017. Т. 14. № 2. С. 165-171.
 - 44) **Захаров П.В.**, Полетаев Г.М., Старостенков М.Д., Чередниченко А.И. Моделирование прохождения ударных волн через границу раздела двудольных биметаллических частиц Ni-Al // Письма о материалах. 2017. Т. 7. № 3 (27). С. 296-302.
 - 45) **Захаров П.В.**, Старостенков М.Д., Ерёмин А.М., Корзникова Е.А., Дмитриев С.В. Возбуждение щелевых дискретных бризеров в кристал-

ле состава A_3B потоком частиц // Физика твердого тела. 2017. Т. 59. № 2. С. 217-222.

- 46) **Захаров П.В.**, Старостенков М.Д., Дмитриев С.В. Дискретные бризеры в биатомных кристаллах состава АВ и A_3B // Известия РАН. Серия физическая, 2017, том 81, № 11, с. 1471–1476
- 47) **Захаров П.В.**, Дмитриев С.В., Старостенков М.Д., Еремин А.М., Корзникова Е.А. Стационарные квазibriзеры в моноатомных металлах с ГЦК-структурой // Журнал экспериментальной и теоретической физики, 2017. Том 152, Вып. 5 (11), стр. 1073-1080

Статьи, проиндексированные в наукометрических базах данных Scopus и/или Web of Science

- 48) Iskandarov A.M., Medvedev N.N., **Zakharov P.V.**, Dmitriev S.V. Crowdion mobility and self-focusing 3D and 2D Nickel, Computational Materials Science, 47 (2009), p. 429-431.
- 49) Medvedev N.N., Starostenkov M.D., **Zakharov P.V.**, Pozidaeva O.V. Localized oscillating modes in two-dimensional model of regulated Pt_3Al alloy // Technical Physics Letters. 2011. V. 37. № 2. p. 98-101
- 50) Medvedev N.N. Starostenkov M.D., Potekaev A.I., **Zakharov P.V.**, Eremin A.M., Markidonov A.V., Energy localization in the ordered condensed systems: A_3B alloys with $L1_2$ superstructure // Russian Physics Journal. 2014. T. 57. № 3. С. 387-395.
- 51) **Zakharov P.V.**, Medvedev N.N., Starostenkov M.D., Eremin A.M. Prospects for the Use of Dynamic Discrete Breathers in Nanofibers Crystals Stoichiometry A_3B With the Structure of $L1_2$ // 2015 International Siberian Conference on Control and Communications (SIBCON). Proceedings. – Omsk: Omsk State Technical University. Russia, Omsk, May 21-23, 2015.
- 52) Medvedev N.N., Starostenkov M.D., **Zakharov P.V.**, Dmitriev S.V. Exciting discrete breathers of two types in a computer 3D model of Pt_3Al crystal // Technical Physics Letters. 2015. T. 41. № 10. С. 994-997.
- 53) **Zakharov P.V.**, Starostenkov M.D., Dmitriev S.V., Medvedev N.N., Eremin A.M. Modelling the interaction of different types of discrete breathers in nanofibers crystal Pt_3Al // Journal of Experimental and Theoretical Physics. 2015. V.148. Is.2(8). P. 252-257.
- 54) Starostenkov M.D., Potekaev A.I., Dmitriev S.V., **Zakharov P.V.**, Eremin A.M., Kulagina V.V. Dynamics of Discrete Breathers in a Pt_3Al Crystal // Russian Physics Journal. 2016. V.58. №9. P. 1353-1357
- 55) **Zakharov P.V.**, Dmitriev S.V., Starostenkov M.D. Dynamics of discrete breathers in the Pt_3Al crystal // Key Engineering Materials. 2016. V. 685. p. 65-69.
- 56) **Zakharov P.V.**, Starostenkov M.D., Dmitriev S.V., Eremin A.M., Cherednichenko A.I. Discrete breathers in the crystal $CuAu$ // Letters on materials 6 (4), 2016. - pp. 294-299.
- 57) **Zakharov P.V.**, Starostenkov M.D., Dmitriev S.V., Eremin A.M., Korznikova E.A., Lucenko I.S. Influence of elastic strain on the possibility of excitation of discrete breathers in the nanofiber crystal with A_3B stoichiometry

- // 2016 Dynamics of Systems, Mechanisms and Machines, Dynamics 2016 – Omsk: Omsk State Technical University. Russia, Omsk, 15-17 Nov. 2016.
- 58) **Zakharov P.V.**, Eremin A.M., Starostenkov M.D., Korznikova E.A., Dmitriev S.V. Excitation of gap discrete breathers in an A_3B crystal with a flux of particles // Physics of the Solid State. 2017. V. 59. № 2. P. 223-228.
 - 59) **Zakharov P.V.**, Poletaev G.M., Starostenkov M.D., Cherednichenko A.I. Simulation of the shock waves propagation through the interface of bipartite bimetallic Ni-Al particles // Letters on materials, 2017, 7(3) p 296-302.
 - 60) **Zakharov P.V.**, Eremin A.M., Starostenkov M.D., Lucenko I.S. Analysis of Statistical Characteristics of Quasi-Breather with Soft-Type of Nonlinearity in the Crystals of A_3B Stoichiometry // Key Engineering Materials. Vol.743. 2017. P. 86-90.
 - 61) **Zakharov P.V.**, Starostenkov M.D., Dmitriev S.V. Discrete breathers in bi-atomic crystals of AB and A_3B composition // Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics, 2017, Vol. 81, No. 11, pp. 1322–1326.
 - 62) **Zakharov P.V.**, Starostenkov M.D., Dmitriev S.V., Eremin A.M., Korznikova E.A., Kurykov A.V. Mobility of soliton-like waves in a CuAu crystal // 2017 Dynamics of Systems, Mechanisms and Machines (Dynamics), 2017 – Omsk: Omsk State Technical University. Russia, Omsk, 14-16 Nov. 2017 pp 1-4.
 - 63) **Zakharov P.V.**, Dmitriev S.V., Starostenkov M.D., Eremin A.M., Korznikova E.A. Stationary quasibreathers in monatomic metals with a fcc structure // Journal of Experimental and Theoretical Physics, 2017. Vol. 125, No. 5, pp. 913–919
 - 64) **Zakharov P.V.**, Korznikova E.A., Dmitriev S.V. Surface discrete breathers in the Pt_3Al intermetallic alloy // Mater. Phys. Mech.(MPM) N 1. Vol. 33. 2017. pp. 69-79

Свидетельства о государственной регистрации программ ЭВМ

- 65) Медведев Н.Н., **Захаров П.В.** Моделирование методом молекулярной динамики двухмерной кристаллической решетки стехиометрии A_3B с возможностью фиксирования дискретных бризеров (DKR_ A_3B _DB) Свидетельство о государственной. регистрации программы для ЭВМ №2010614584 от 29.07.2010 г.
- 66) **Захаров П.В.** Модуль расчета плотности фононных состояний модельных кристаллов методом молекулярной динамики // Роспатент. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2015614597 от 21 апреля 2015.
- 67) **Захаров П.В.**, Луценко И.С. Программа расчета параметров потенциала Морзе для ГЦК кристаллов // Роспатент. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2017614379 от 14 апреля 2017