

ОБЗОРЫ АКТУАЛЬНЫХ ПРОБЛЕМ

Дискретные бризеры в кристаллах

С.В. Дмитриев, Е.А. Корзникова, Ю.А. Баимова, М.Г. Веларде

Давно известно, что периодические дискретные системы, содержащие дефекты, допускают наличие как бегущих волн, так и колебательных мод, локализованных на дефектах. Оказалось, что если периодическая дискретная система нелинейна, то она может допускать точные решения в виде пространственно локализованных колебательных мод даже в отсутствие дефектов. Поскольку все узлы такой системы равноправны, лишь выбором специальных начальных условий можно выделить ту группу узлов, на которой будет возбуждена такая мода, называемая дискретным бризером (ДБ). Частота ДБ должна лежать вне спектра бегущих волн. Не резонируя с бегущими волнами, не расходуя энергии на их возбуждение, ДБ теоретически может сохранять свою колебательную энергию вечно при отсутствии тепловых колебаний и других возмущений. Кристаллы представляют собой нелинейные дискретные системы, и открытие в них ДБ было лишь вопросом времени. Экспериментальные исследования ДБ сталкиваются со значительными техническими трудностями, и главным инструментом изучения ДБ сегодня является атомистическое компьютерное моделирование. Несмотря на то что существование ДБ в кристаллах твёрдо установлено, их роль в физике твёрдого тела всё ещё неясна. Освещаются специфические для физики реальных кристаллов вопросы, которые не рассматривались в классических работах по ДБ. Обсуждается взаимодействие движущихся ДБ с дефектами кристаллической решётки, анализируется влияние упругой деформации решётки на свойства ДБ и саму возможность их существования. Представлены недавние работы по влиянию нелинейных возмущений решётки на электронную подсистему кристалла и др.

Ключевые слова: кристаллическая решётка, нелинейные колебания, дискретный бризер, дефект кристаллической решётки

PACS numbers: 05.45. – a, 05.45.Yv, 63.20. – e

DOI: 10.3367/UFNr.2016.02.037729

Содержание

1. Введение (471).
2. Примеры дискретных бризеров в кристаллах (473).
3. Экспериментальные исследования дискретных бризеров в кристаллах (475).
4. Исследования дискретных бризеров в кристаллах методами компьютерного моделирования (476).

С.В. Дмитриев. Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, ул. Халтурина 39, 450001 Уфа, Российская Федерация; Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Научно-исследовательская лаборатория механики новых материалов, ул. Политехническая 29, 195251 С.-Петербург, Российская Федерация. E-mail: dmitriev.sergey.v@gmail.com

Е.А. Корзникова. Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, ул. Халтурина 39, 450001 Уфа, Российская Федерация E-mail: elena.a.korznikova@gmail.com

Ю.А. Баимова. Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, ул. Халтурина 39, 450001 Уфа, Российская Федерация; Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, ул. С. Ковалевской 18, 620990 Екатеринбург, Российская Федерация E-mail: julia.a.baimova@gmail.com

М.Г. Веларде (M.G. Velarde). Instituto Pluridisciplinar, Universidad Complutense, Paseo Juan XXIII, 1, 28040 Madrid, Spain E-mail: mgvelarde@pluri.ucm.es

Статья поступила 27 июля 2015 г.,
после доработки 30 января 2016 г.

- 4.1. Квазibriзерность реальных дискретных бризеров. 4.2. Размерность решётки. 4.3. Дальнодействующие межатомные связи. 4.4. Взаимодействие дискретных бризеров с дефектами кристаллической решётки. 4.5. Дискретные бризеры на поверхности кристаллов. 4.6. Влияние упругой деформации решётки на свойства дискретных бризеров. 4.7. Взаимодействие дискретных бризеров с электронной и магнитной подсистемами кристалла. 4.8. Механизмы возбуждения дискретных бризеров в кристаллах. 4.9. Движущиеся дискретные бризеры в кристаллах и их столкновения. 4.10. Расчёты *ab initio*. 4.11. Исследования методами теории групп дискретных бризеров в кристаллах с различными типами пространственной симметрии.
5. Вклад дискретных бризеров в физические свойства кристаллов (484).
6. Заключение (485).
- Список литературы (486).

1. Введение

Более четырёх десятилетий назад в физике нелинейных явлений было сделано важное открытие. Было показано, что бесконечная одномерная ангармоническая цепь идентичных частиц, периодически расположенных в пространстве, способна поддерживать пространственно локализованные колебательные моды [1–4]. Предвестниками этого открытия можно назвать работы по локализации колебательной энергии в гармонических

кристаллах с примесями и пространственными дефектами [5–8]¹, нелинейных молекулах и молекулярных кристаллах при высоких уровнях колебательного возбуждения [10, 11]. Оказалось, что именно дискретность и нелинейность среды являются двумя главными условиями, необходимыми для возбуждения пространственно локализованных мод, получивших название дискретных бризеров (ДБ) (в англоязычной литературе — *discrete breathers* или *intrinsic localized modes*). При этом размерность системы и конкретный вид потенциала взаимодействия между частицами, как правило, влияют лишь на характеристики ДБ, но не на саму возможность их существования. Пионерские работы по ДБ были направлены на строгое доказательство существования и устойчивости ДБ и чаще всего ограничивались рассмотрением одномерных цепочек частиц, взаимодействующих с ближайшими соседями посредством простых нелинейных потенциалов [1–4, 12–17]. Актуальность теоретических работ, анализирующих условия интегрируемости для нелинейных цепочек, сохраняется и по сей день [18–22].

Среди популярных одномерных моделей, активно использовавшихся для изучения ДБ, назовём модель Ферми – Пасты – Улама [23]

$$\ddot{x}_n = V'(u_{n+1}) - V'(u_n), \quad u_n = x_n - x_{n-1}, \quad (1)$$

описывающую цепочку частиц, взаимодействующих с ближайшими соседями посредством полиномиального потенциала

$$V(u_n) = \frac{1}{2} u_n^2 + \frac{\alpha}{3} u_n^3 + \frac{\beta}{4} u_n^4 \quad (2)$$

с коэффициентами α и β , определяющими вклады от квадратичной и кубической (в выражении для силы $V'(u_n)$) нелинейностей соответственно. Для описания взаимодействия между частицами вместо полиномиального разложения (2) нередко используют потенциалы Тоды

$$V(u_n) = \exp(-u_n) + u_n - 1, \quad (3)$$

Леннарда-Джонса

$$V(u_n) = D \left[\left(\frac{r_0}{u_n} \right)^{12} - 2 \left(\frac{r_0}{u_n} \right)^6 \right] \quad (4)$$

или Морса (Morse)

$$V(u_n) = D \left\{ 1 - \exp[-\alpha(u_n - r_0)] \right\}^2. \quad (5)$$

Силы взаимодействия, определяемые потенциалами (2) и (3), не обращаются в нуль на больших расстояниях, что не позволяет использовать их для описания дальнедействующих межатомных связей в кристаллах. Потенциалы (4) и (5) лишены этого недостатка. Параметры D и r_0 в (4) и (5) определяют энергию связи и равновесную длину связи соответственно. Потенциал Морса имеет третий важный параметр — α , позволяющий контролировать жёсткость связи и через неё жёсткость кристалла, что делает этот потенциал наиболее привлекательным

среди простых парных потенциалов для описания межатомных сил в кристаллах. Потенциал (4) в молекулярно-динамических расчётах чаще используют для моделирования свойств жидкостей, сжимаемостью которых можно пренебречь.

В одномерных упрощённых моделях часто учитывают, помимо межатомных взаимодействий, локальный потенциал, который описывает взаимодействие атомов цепочки с её окружением. Одной из таких моделей, широко используемых в физике конденсированного состояния для описания динамики дислокаций или доменных стенок, является модель Френкеля – Конторовой [25]:

$$\ddot{x}_n = \frac{1}{h^2} (u_{n-1} - 2u_n + u_{n+1}) - \sin u_n, \quad (6)$$

где h — межатомное расстояние. В этой модели межатомные взаимодействия — гармонические, а нелинейный локальный потенциал является периодическим. Гармонический межатомный потенциал в (6) может быть заменён одним из нелинейных потенциалов (2)–(5).

Модели, которые приводят к ДБ, тесно связаны с дискретным нелинейным уравнением Шрёдингера (ДНУШ) [26], а также с более общей моделью Салерно [27], интерполирующей между ДНУШ и моделью Абловица – Ладика [28],

$$i \frac{d\psi_n}{dt} + \frac{1}{2h^2} (\psi_{n-1} - 2\psi_n + \psi_{n+1}) + \delta |\psi_n|^2 \psi_n + \frac{1 - \delta}{2} |\psi_n|^2 (\psi_{n-1} + \psi_{n+1}) = 0. \quad (7)$$

Здесь ψ_n — комплексная динамическая переменная для n -го узла решётки, t — время, h — шаг решётки, δ — вещественный параметр, который определяет кроссовер между моделью Абловица – Ладика ($\delta = 0$) и ДНУШ ($\delta = 1$). Обзор по дискретным солитонам в одномерных (1D) и двумерных (2D) нелинейных системах, генерируемых моделью Салерно, можно найти в [29].

Модели с низкой размерностью, сходные с приведёнными выше, позволили всесторонне изучить явление пространственной локализации колебаний в нелинейных дискретных системах.

Теоретическое предсказание ДБ поставило вопрос о существовании подобных объектов в реальном мире, и спустя примерно одно десятилетие их стали обнаруживать экспериментально в нелинейных дискретных системах различной физической природы, например в массивах оптических волноводов [30–32], атомных волновых пакетах [33], массивах сверхпроводящих джозефсоновских контактов [34–36], периодических нелинейных электрических цепях [37, 38], массивах механических кантилеров и нано-электромеханических челноков [39–43] и др. [44, 45].

Внимание исследователей, безусловно, привлекали и кристаллы, которые также являются дискретными нелинейными системами. Однако микроскопический размер таких локализованных возбуждений кристаллической решётки сильно затрудняет постановку эксперимента по их непосредственному наблюдению. Тем не менее выполнено несколько успешных экспериментов, подтверждающих существование ДБ в кристаллах [46–55]. Ещё больше результатов, убедительно демонстрирующих возможность существования ДБ в кристаллах, получено

¹ Статьи [5–8] и другие труды И.М. Лифшица и его учеников по неупорядоченным кристаллам вошли в книгу [9].

методами атомистического компьютерного моделирования [56–73]. Сложность функциональной записи реалистичных многочастичных межатомных потенциалов затрудняет применение аналитических методов для анализа ДБ в кристаллах.

Перед специалистами в физике твёрдого тела и материаловедении открылось новое научное направление. Предстоит досконально изучить свойства дискретных бризеров в различных кристаллах, механизмы возбуждения ДБ, накачки их энергией, возможность их движения по кристаллу, описать, как они взаимодействуют друг с другом, с дефектами кристаллической решётки, тепловыми колебаниями и внешними полями. Результаты таких исследований позволят выяснить роль ДБ в физике и механике кристаллов, и в перспективе ДБ могут стать частью новых технологий.

В настоящем обзоре представлены последние достижения в области исследования ДБ в кристаллах и в заключении сформулированы нерешённые проблемы.

2. Примеры дискретных бризеров в кристаллах

Приведём несколько примеров нелинейных пространственно локализованных колебательных мод, именуемых дискретными бризерами, в различных бездефектных кристаллах, опираясь на результаты молекулярно-динамического моделирования. При отсутствии тепловых колебаний решётки данные моды имеют очень большое время жизни, измеряемое несколькими тысячами и более периодов колебаний.

Исторически первым является результат для щёлко-галогенидного кристалла NaI с ионным типом межатомных связей (рис. 1) [56]. Подрешётки натрия и йода имеют гранецентрированную кубическую (ГЦК) структуру с параметром решётки a , при этом одна из них сдвинута относительно другой на вектор $(a/2, 0, 0)$, так что атомы кристалла занимают узлы простой кубической решётки. Колебания с большой амплитудой совершает один атом Na в кристаллографических направлениях $\langle 111 \rangle$ или $\langle 011 \rangle$ с частотой, принадлежащей щели фононного спектра кристалла, поэтому такой ДБ называют щелевым. Частота ДБ убывает с возрастанием амплитуды, отражая мягкий тип нелинейности данной колебательной моды. Наличие щели в фононном спектре обусловлено значительной разницей масс компонентов кристалла (атом йода в 5,5 раз тяжелее атома натрия). Позднее было показано, что долгоживущие щелевые ДБ в ионных кристаллах со структурой NaCl могут иметь поляризацию $\langle 001 \rangle$, $\langle 011 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$ [57, 58].

Следующий пример — это ДБ в ковалентных кристаллах Si и Ge, полученный в работе [59] с использованием межатомных потенциалов Терсоффа (рис. 2). Этот ДБ имеет частоты, превышающие частоты бесщелевого фононного спектра. Частота ДБ сначала возрастает, а после достижения своего максимума начинает убывать с возрастанием амплитуды.

Легко могут быть возбуждены щелевые ДБ в моделях упорядоченных сплавов с большой разницей масс компонентов, обеспечивающей наличие широкой щели в фононном спектре, например, в Pt_3Al [74–82]. Указанные работы основывались на парных межатомных потенциалах Морса [83]. Отметим, что в Pt_3Al можно возбудить как щелевой ДБ, так и ДБ с частотой, превышаю-

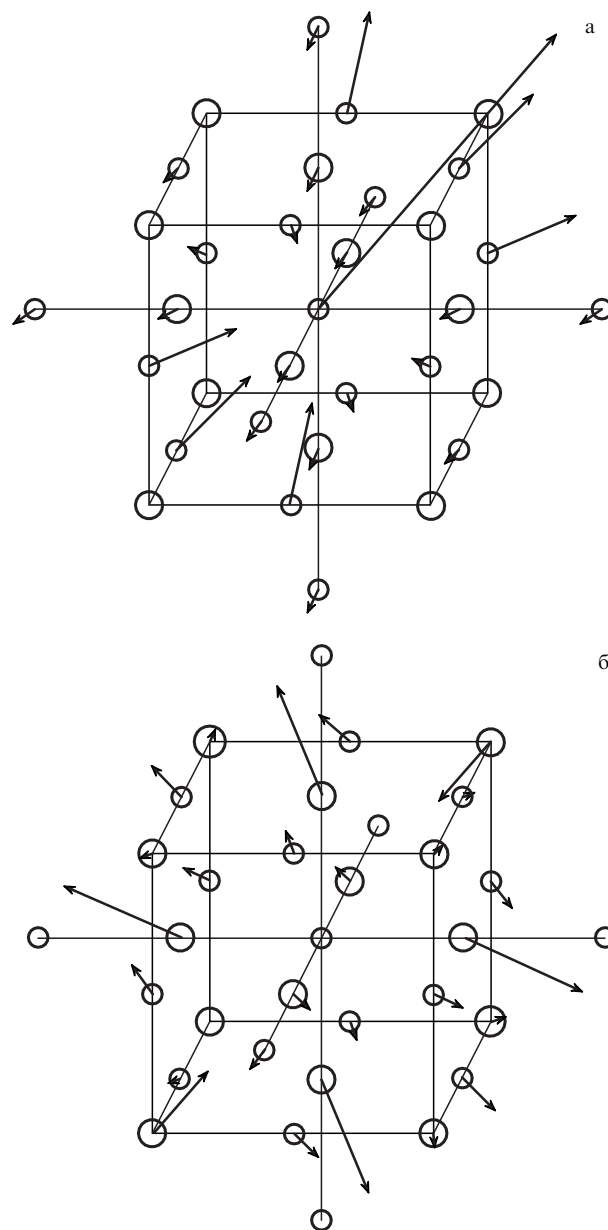


Рис. 1. ДБ в кристалле NaI (по результатам работы [56]). Более тяжёлые атомы йода показаны кружками большего размера. Амплитуды колебаний атомов (а), смещения центров колебаний атомов (б) (увеличены в 10 раз). Видно, что колебания совершают преимущественно лёгкие атомы Na, причём максимальную амплитуду имеет один атом Na, колеблющийся в направлении $\langle 111 \rangle$. Частота ДБ лежит в щели фононного спектра и уменьшается с возрастанием амплитуды ДБ (мягкий тип нелинейности). Изучение ДБ в ионных кристаллах со структурой NaCl было продолжено в работах [57, 58].

щей частоты фононного спектра (рис. 3) [80, 81]. Щелевой ДБ локализуется преимущественно на одном атоме алюминия и является немобильным. Напротив, ДБ с частотой выше частот фононного спектра локализован преимущественно на четырёх-пяти атомах алюминия, и он может двигаться вдоль плотноупакованного ряда. В работе [80] изучены столкновения подвижных ДБ друг с другом и немобильными щелевыми ДБ.

Вопросы изучения квазибризеров при наличии точечных дефектов в кристалле состава A_3B затрагивались авторами работы [82].

Японскими исследователями изучались ДБ в графене и углеродных нанотрубках [60–64]. Для запуска ДБ в

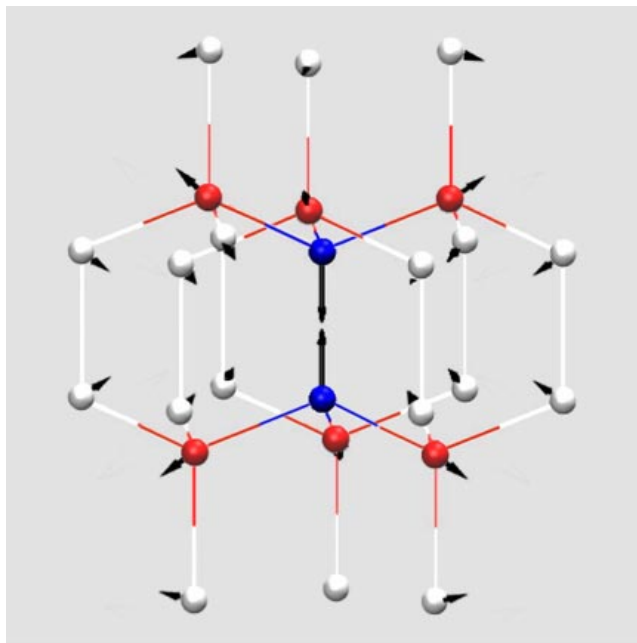


Рис. 2. (В цвете онлайн.) ДБ в кристалле Si (по результатам работы [59]). Колебания с большой амплитудой в противофазе совершают два атома кремния (показаны синим цветом). Этот ДБ имеет частоты, лежащие выше частот бесщелевого фононного спектра, сначала возрастающие, а по достижении максимума убывающие с увеличением амплитуды.

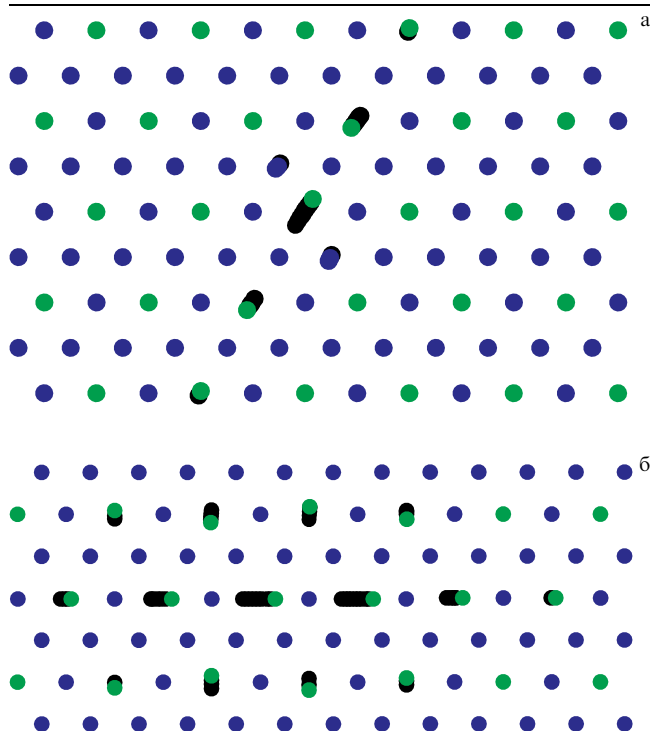


Рис. 3. Стробоскопическая картина движения атомов вблизи ДБ в кристалле Pt_3Al (по результатам работы [80]). Тяжёлые атомы Pt изображены более тёмным цветом, чем лёгкие атомы Al. (а) Щелевой ДБ, локализованный преимущественно на одном лёгком атоме, совершающем колебания в противофазе с соседними лёгкими атомами в плотноупакованном атомном ряду. (б) ДБ с частотой выше частот фононного спектра, локализованный преимущественно на четырёх-пяти атомах Al, расположенных в одном плотноупакованном ряду. Данные атомы совершают синфазные колебания. Этот ДБ, в отличие от щелевого, может двигаться вдоль плотноупакованного ряда.

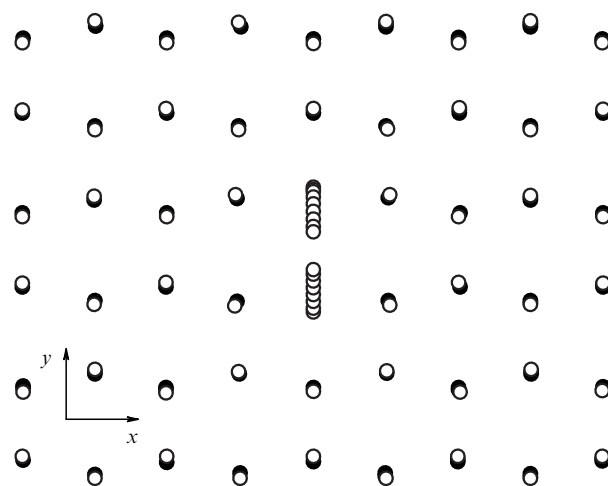


Рис. 4. Стробоскопическая картина движения атомов вблизи ДБ в однородно деформированном графене (по результатам работы [68]). Изучены также кластеры таких ДБ [69]. Частота ДБ лежит в щели фононного спектра графена, появившейся в результате приложения однородной деформации.

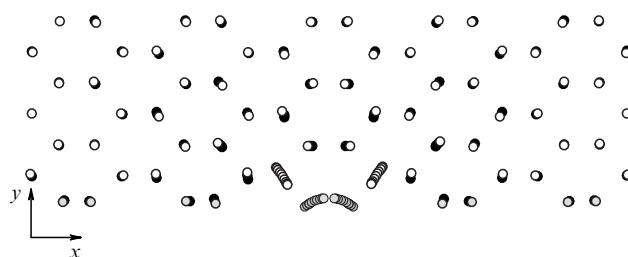


Рис. 5. Стробоскопическая картина движения атомов, представляющая ДБ на краю растянутой графеновой наноленты типа "кресло" [70, 71]. Атомы на краю наноленты окрашены в серый цвет. Частота ДБ лежит в щели фононного спектра наноленты, возникшей вследствие растяжения наноленты.

графене использовалась сложная процедура выбора начальных условий [60]. ДБ имел частоты выше частот бесщелевого фононного спектра и оказался неустойчивым. Щель в фононном спектре графена может быть открыта приложением однородной упругой деформации, что и позволило легко возбудить сильно локализованный щелевой ДБ [68], представленный на рис. 4. Кластеры таких ДБ изучались в работе [69], где была показана возможность обмена энергией между ДБ в кластерах.

ДБ можно возбудить также на краю растянутой графеновой наноленты ориентации "кресло", как показано на рис. 5 [70, 71]. Частота ДБ лежит в щели фононного спектра, возникшей в результате приложения растягивающей деформации.

Принципиально новый тип ДБ в графене — с колебаниями атомов перпендикулярно листу графена — описан в работе [84].

Пример ДБ в двумерном кристалле графана (полностью наводороженного графена) приведён на рис. 6 [72, 73]. ДБ представляет собой один атом водорода, колеблющийся с большой амплитудой перпендикулярно листу графана. Частота ДБ лежит в щели фононного спектра и убывает с возрастанием амплитуды [73]. Обмен энергией между ДБ и влияние температуры на время жизни

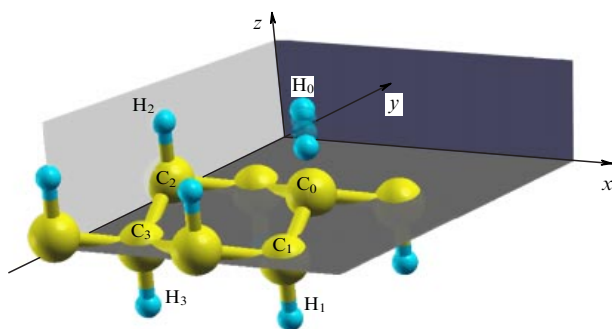


Рис. 6. ДБ в графите [72, 73]. ДБ представляет собой один атом водорода, H_0 , совершающий колебания на частоте, принадлежащей щели фононного спектра, в направлении, перпендикулярном плоскости листа графита.

ДБ в графите изучались в работе [85], где сделан вывод о возможном участии ДБ в процессе разводороживания графита при повышенных температурах.

Обзор по ДБ в углеродных и углеводородных материалах дан в [86].

Начиная с работы [65], в которой впервые были успешно возбуждены подвижные ДБ в гранцентрированной кубической решётке Ni и объёмноцентрированной кубической (ОЦК) решётке Nb, ведутся активные исследования ДБ в чистых металлах [66, 87–90]. Обнаруженные к настоящему времени ДБ во всех чистых металлах имеют одинаковую структуру. Атомы, расположенные в одном плотноупакованном ряду, совершают колебания в противофазе с соседями на частоте выше частот фононного спектра, возрастающей с увеличением амплитуды ДБ. Пример колебания длин межатомных связей вблизи ДБ в ГЦК-никеле приведён на рис. 7 [90]. ДБ практически во всех чистых металлах могут перемещаться вдоль плотноупакованных атомных рядов, в которых они возбуждены, на несколько сотен или тысяч

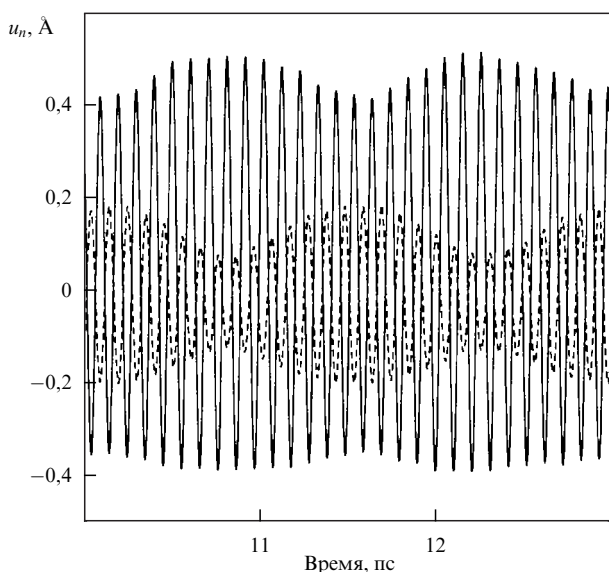


Рис. 7. ДБ в ГЦК-Ni [90]. Показаны колебания длин (u_n) межатомных связей: центральной (сплошная кривая) и третьей от центра (штриховая кривая). Частота ДБ лежит выше частот фононного спектра и возрастает с увеличением амплитуды.

межатомных расстояний со скоростью от нуля до некоторого максимального значения. Для различных металлов максимальная скорость ДБ составляет 0,1–0,5 скорости звука [65, 66, 87–89].

На примере двумерной гексагональной решётки для запуска движущихся ДБ в металлах был предложен анзац, содержащий небольшое число параметров, имеющих ясный физический смысл [91, 92]. Исследовалось взаимодействие движущихся ДБ друг с другом [93, 94] и с дефектами кристаллической решётки [95, 96].

3. Экспериментальные исследования дискретных бризеров в кристаллах

В работе [46] сообщалось об экспериментальном обнаружении ДБ в сильно нелинейном и сильно анизотропном кристалле $[\text{Pt}(\text{en})_2][\text{Pt}(\text{en})_2\text{Cl}_2](\text{ClO}_4)_4$ (en — этилендиамин, атомы водорода опущены). Эти локализованные состояния определены из анализа структуры кристалла и по результатам изучения резонансных спектров комбинационного рассеяния, демонстрирующих значительный красный сдвиг старших гармоник. В последующих теоретических статьях [47–49] получены убедительные доказательства того, что данные особенности спектров комбинационного рассеяния действительно связаны с возбуждением локализованных колебаний связи Pt–Cl, сопровождающимся возбуждением колебательных поляронов.

Неупругое рассеяние рентгеновских лучей и нейтронов использовалось в работах [50, 51] для анализа колебательных мод кристаллической решётки α -урана на границе зоны Бриллюэна $[01\zeta]$. Было показано возбуждение колебательной моды в результате флуктуаций амплитуды другой моды, представляющей собой её зеркальный образ, что может свидетельствовать о возбуждении ДБ. Найденные моды вытянуты в направлении их поляризации $[010]$ и практически полностью локализованы в перпендикулярном направлении $[001]$.

Поскольку дискретные бризеры являются существенно нелинейными модами, они более активно возбуждаются при повышенных температурах. При температурах более 450 К оба экспериментальных метода показали смягчение и резкое снижение интенсивности продольной оптической ветви вдоль $[00\zeta]$. С превышением этого значения температуры отмечено также появление новой динамической моды вдоль границы зоны Бриллюэна $[01\zeta]$ с частотой, несколько превышающей частотный диапазон фононного спектра. Авторы [51] ассоциируют эту моду с ДБ, возникшими в результате сильного электрон-фононного взаимодействия.

В работе [52] по измерению высокотемпературных колебательных спектров кристалла NaI методом неупругого рассеяния нейтронов в условиях теплового равновесия при температуре 555 К в щели фононного спектра был обнаружен слабый пик, появление которого связывалось авторами с возбуждением щелевых ДБ. Существование таких ДБ было предсказано ранее в результате молекулярно-динамических расчётов [56]. К аналогичным выводам пришли и авторы работы [53]. Однако в теоретической работе [54] было показано, что вероятность термофлуктуационного зарождения ДБ в кристалле NaI невелика. Имеются данные, свидетельствующие об упорядоченном расположении ДБ в NaI [97, 98]. Работа [99], в которой термофлуктуационные ДБ не были

обнаружены в кристалле NaI, вероятнее всего, свидетельствует лишь о сложности постановки подобных экспериментов, чем об отсутствии ДБ, поскольку многочисленные теоретические исследования говорят в пользу их существования [100–109].

Аномальное (неэкспоненциальное) затухание медленной компоненты люминесценции ряда щёлочно-галогидных кристаллов, допированных свинцом или таллием [110], может быть объяснено зарождением ДБ в непосредственной близости от примесного атома [111, 112].

Методом рассеяния нейтронов были измерены частоты фононов в твёрдом ^4He с ОЦК-решёткой [113]. В дополнение к трём акустическим ветвям фононов была обнаружена новая мода — с оптическими колебаниями атомов вдоль направления [110]. Одной из возможных интерпретаций полученных данных является спонтанное возбуждение локализованных колебаний [113].

Весьма убедительные доказательства существования движущихся ДБ в германии представлены в тонкой экспериментальной работе [55]. Авторы [55] обрабатывали монокристалл германия высокой чистоты плазмой и изучали спектры, выявляющие пять характерных дефектов кристаллической структуры. Воздействие плазмы сводится к бомбардировке поверхности кристалла ионами с энергией от 2 до 8 эВ. Такая бомбардировка привела к отжигу дефектов, находящихся на достаточно большой глубине в материале — на удалении от поверхности в несколько микрометров. Интересно, что простой нагрев не приводит к аналогичному эффекту отжига дефектов в германии.

Таким образом, результаты, полученные в работе [55], могут быть объяснены только при предположении, что энергия в концентрированной форме передаётся от поверхности в глубь кристалла и носителями такой энергии могут быть ДБ.

Ускорение диффузии на границе контакта медь–никель в результате бомбардировки поверхности биметаллического образца ионами Ag^+ с энергией 500 эВ обнаружено для случаев, в которых граница раздела удалена от поверхности на расстояния 0,5, 1,0 и 1,5 мм [114]. Известно, что структурные изменения, вызванные ударами ионов в условиях проведённого эксперимента, не способны проникать на столь значительные глубины, поэтому естественно предположить, что существует эффективный механизм транспорта энергии от поверхности в глубь кристалла, и в качестве такого механизма авторы [114] рассматривают ДБ.

В работе [115] показано, что бомбардировка тяжёлыми ионами поверхности кристалла слюды-мусковита при комнатной температуре приводит к выбиванию атомов на противоположной поверхности из кристалла толщиной 7 мм. Авторы [115] предполагают, что именно ДБ ответственны за перенос энергии, достаточной для выбивания атома с противоположной поверхности кристалла толщиной порядка 10^7 трансляционных ячеек. Интерес к изучению нелинейных возбуждений в слюде пробудил Рассел [116–118], высказав гипотезу о том, что тёмные линии, видимые невооружённым глазом в кристаллах слюды, могут быть треками квазичастиц, которые он впоследствии назвал кудонами (quodon).

В теоретических работах [119–123] исследовались ДБ в ферромагнитных спиновых решётках. Возможность возникновения ДБ в слоистом квазиодномерном ферромагнетике $(\text{C}_2\text{H}_5\text{NH}_3)_2\text{CuCl}_4$ вследствие неустойчивости

однородной колебательной моды продемонстрирована экспериментально [124].

С использованием дифракции Кикучи показано наличие в графене нелинейных колебаний, поляризационные свойства которых кардинально отличаются от поляризации линейных мод [125]. В качестве возможного объяснения этого факта авторами [125] рассматривается возбуждение ДБ.

4. Исследования дискретных бризеров в кристаллах методами компьютерного моделирования

Опишем ряд специфичных для физики реальных кристаллов проблем, которым было уделено недостаточно внимания в классических пионерских работах по ДБ.

4.1. Квазибризерность реальных дискретных бризеров

Введение концепции квазибризера (КБ) [126] стало важным шагом на пути от теории ДБ к их изучению в реальных кристаллах. Колебания отдельных частиц КБ не являются полностью синхронизованными, поэтому КБ имеют конечное, но достаточно большое время жизни. Степень квазибризерности может быть оценена, например, близостью КБ к одночастотной колебательной моде [126].

Происхождение КБ может быть связано, во-первых, с неточностью начальных условий, использованных для запуска идеализированного ДБ. Во-вторых, рассматриваемый кристалл может вообще не допускать точного решения в виде идеализированного ДБ, но может поддерживать долгоживущие пространственно локализованные колебательные моды, т.е. КБ. В-третьих, идеализированный ДБ может превратиться в КБ при наличии возмущений различного рода, неизбежно присутствующих в реальных физических системах. Например, ДБ, расположенный недалеко от топологического дефекта, будет испытывать дисторсию кристаллической решётки, и время его жизни станет конечным.

Различные механизмы излучения фононов дискретным бризером изучались в работе [127]. Для каждого кристалла важно иметь оценку степени квазибризерности поддерживаемых им ДБ. Необходимо установить связь между степенью квазибризерности и временем жизни ДБ. Несмотря на практическую важность этих задач, нам не известны попытки их решения для реальных кристаллов.

4.2. Размерность решётки

Кристаллические твёрдые тела обладают трансляционной симметрией в одном, двух или трёх пространственных измерениях. Примеры одномерных кристаллов — это полимерные цепочки [128], углеродные нанотрубки типа "зигзаг" или "кресло" и др. Среди двумерных кристаллов большой интерес исследователей в последние годы привлекают графен (моноатомный слой углерода) [60, 68, 69] и графан [72, 73]. Однако подавляющее большинство кристаллов, с которыми имеет дело современная физика, являются трёхмерными. Влияние размерности кристаллической решётки на существование, устойчивость, подвижность и способы возбуждения ДБ в реальных кристаллах изучено далеко не в полной мере.

Теоретический фундамент для изучения свойств ДБ в модельных нелинейных дискретных системах с различ-

ной размерностью был заложен в классических работах [12, 129–138]. Существование ДБ, не перемещающихся по решётке, в решётках с различной размерностью строго доказано авторами работы [12] исходя из анти-континуального предела, т.е. случая невзаимодействующих осцилляторов. Оценка верхнего предела параметра межчастичного взаимодействия, обеспечивающего существование ДБ, дана, например, в работах [15, 16].

Одним из важных вопросов является наличие или отсутствие нижней границы энергии ДБ. Установлено, что для широкого класса гамильтоновых решёток размерностью единица, два или три ДБ могут иметь сколь угодно малую энергию [135, 136]. Указанные работы уточнили основанную на более жёстких предположениях более раннюю оценку [133], согласно которой только в одномерных решётках ДБ могут иметь сколь угодно малую энергию, а в решётках с большей размерностью энергия ДБ не может быть меньше определённого значения. В молекулярно-динамических расчётах для трёхмерных кристаллов ДБ нередко имеют ярко выраженную нижнюю границу энергии [80].

В одномерных кристаллах возможны лишь два типа поляризации ДБ: вдоль и поперёк направления трансляции. Для кристаллов с большей размерностью возрастает число возможных направлений колебания атомов в ДБ. Например, уже отмечалось, что в кристалле со структурой NaCl, где атомы занимают узлы простой кубической решётки, один атом лёгкой ГЦК-подрешётки в центре ДБ может колебаться с большой амплитудой в высокосимметричных направлениях $\langle 001 \rangle$, $\langle 011 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$ [56–58]. Такие щелевые ДБ имеют различные зависимости частоты от амплитуды, а также различные минимальные и максимальные энергии.

Для движущихся ДБ в одномерных кристаллах существует лишь одно направление движения, в то время как в двумерных и трёхмерных кристаллах вопрос о направлении возможного движения ДБ является открытым. В серии работ [139–143], посвящённых ДБ в двумерных моделях кристаллов (слюда-мусковит, купраты), ДБ могли двигаться вдоль плотноупакованных атомных рядов. То же самое относится и к ДБ в двумерном кристалле Морса [89, 91, 92] и чистых металлах [65, 66, 87, 88]. В кристалле со структурой NaCl может происходить обмен энергией между близко расположенными ДБ, что делает возможным случайное блуждание ДБ по кристаллу [144, 145].

Опишем один нетривиальный эффект влияния размерности решётки на саму возможность существования ДБ определённого типа. В теоретической работе [146] показано, что одномерная цепочка атомов, взаимодействующих посредством любого из классических потенциалов, таких как потенциал Тоды, Борна–Майера, Леннарда-Джонса или Морса, не может поддерживать ДБ с частотами выше частот фононного спектра. Дело в том, что все реалистичные межатомные взаимодействия являются жёсткими на малых расстояниях и мягкими — на больших, отражая строение атомов, состоящих из компактных ядер и окружающих их электронных облаков. Для того чтобы частота колебательной моды возрастала с увеличением амплитуды и имела возможность превысить частоты фононного спектра, жёсткое ядро потенциала должно вносить больший вклад в динамику, чем его мягкий "хвост". Однако вследствие локального разрежения решётки в окрестности ДБ

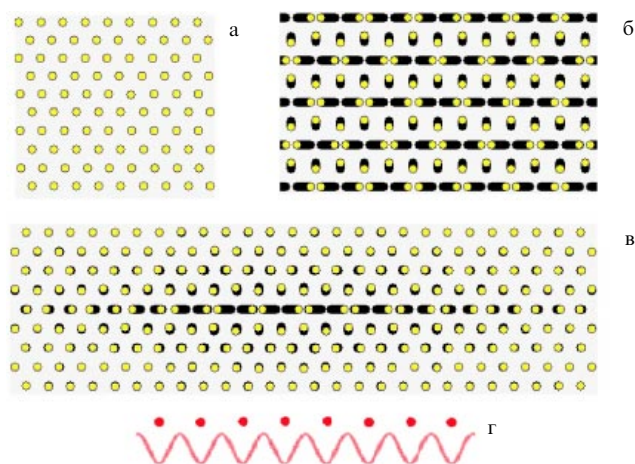


Рис. 8. (а) Двумерный кристалл Морса, атомы которого расположены в узлах треугольной решётки. (б) Стробоскопическая картина движения атомов для коротковолновой фононной моды в нелинейном режиме. (в) Стробоскопическая картина движения атомов в окрестности ДБ, полученного наложением колоколообразных функций на коротковолновую фононную моду, изображённую на рис. б. Перемещения атомов на рис. б и в увеличены для наглядности в семь раз. (г) Схема одномерной модели для качественного изучения ДБ, изображённого на рис. в. Цепочка атомов испытывает действие периодического локального потенциала, созданного атомами, окружающими плотноупакованный атомный ряд, в котором возбуждён ДБ.

(эффект локального теплового расширения решётки) расстояния между центрами колебаний атомов увеличиваются по сравнению с решёточными и возрастает вклад мягких "хвостов". В этих условиях авторы работы [146] смогли получить лишь щелевые ДБ, рассмотрев биатомные цепочки. Частота таких ДБ, уменьшаясь с увеличением амплитуды, входит в щель фононного спектра, которая разделяет частоты акустических и оптических фононов. На основании полученных результатов авторы [146] пришли к выводу о том, что экспериментальный поиск ДБ следует проводить для кристаллов, имеющих широкую щель в фононном спектре.

Однако на основе результатов работы [65] было показано, что двумерные и трёхмерные кристаллы Морса без локального потенциала, в отличие от одномерных, поддерживают ДБ с частотами выше частот фононного спектра [91–93]. Для объяснения этого факта следует обратиться к структуре ДБ в двумерном кристалле Морса (рис. 8а), которая представлена на рис. 8в. Расчёты проводились в безразмерных величинах для параметров потенциала (5) $D = r_0 = 1$, $\alpha = 5$ и массы атома, равной единице. Равновесное межатомное расстояние a равнялось 0,98813 при радиусе обрезания потенциала $5,5a$. Из рисунка 8в видно, что ДБ вытянут вдоль одного плотноупакованного атомного ряда, но этот ряд, очевидно, испытывает воздействие периодического локального потенциала, индуцированного окружающими его атомами (рис. 8г). Этот потенциал ограничивает "тепловое расширение" атомного ряда, в котором возбуждён ДБ, что приводит к заметному вкладу жёстких ядер потенциала в динамику данной колебательной моды, и её частота возрастает с увеличением амплитуды. В работе [146] периодический локальный потенциал не вводился и поэтому ДБ с частотой, превышающей частоты фононного спектра, получены не были.

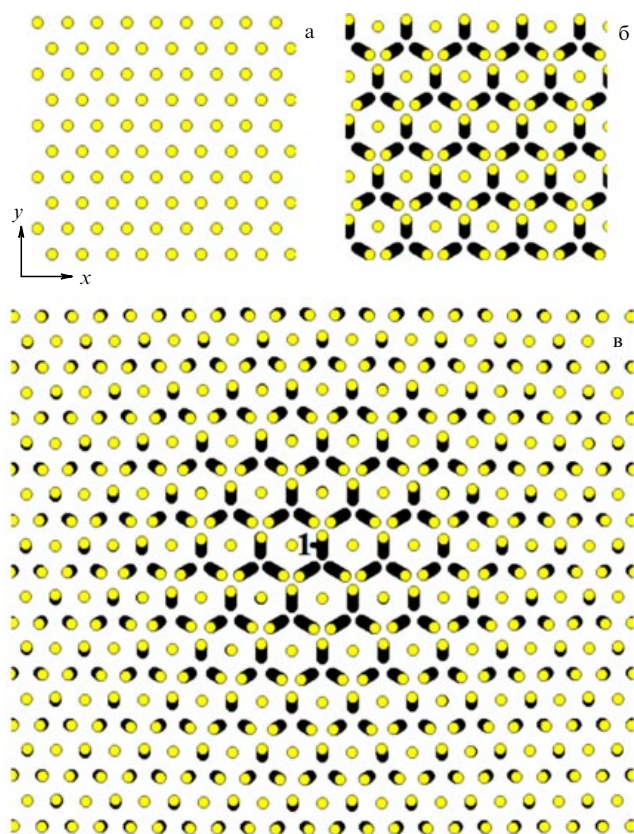


Рис. 9. (а) Двумерный кристалл Морса, атомы которого расположены в узлах треугольной решётки. (б) Стробоскопическая картина движения атомов для высокосимметричной фононной моды с волновым вектором на границе зоны Бриллюэна в нелинейном режиме. (в) Стробоскопическая картина движения атомов в окрестности ДБ, полученного наложением колоколообразной функции с радиальной симметрией на коротковолновую фононную моду в нелинейном режиме. На рисунках б, в перемещения атомов для наглядности увеличены в семь раз.

Для возбуждения ДБ, аналогичных изображённому на рис. 8в, был предложен анзац [91], успешно использовавшийся в последующих работах [92]. Однако более эффективным способом возбуждения ДБ в двумерном кристалле Морса оказалось наложение колоколообразных функций на коротковолновую фононную моду, показанную на рис. 8б. Отметим, что вдоль вертикального направления колоколообразная функция имела существенно бóльшую степень локализации, чем вдоль горизонтального направления, отражая структуру ДБ, представленного на рис. 8в.

Недавно было показано [147], что кроме ДБ, описанного в работах [91–93] (рис. 8в), тот же самый двумерный кристалл Морса (рис. 9а) может поддерживать и высокосимметричный ДБ, изображённый на рис. 9в. Этот ДБ был получен посредством наложения радиально-симметричной колоколообразной функции на коротковолновую фононную моду в нелинейном режиме (рис. 9б).

На рисунке 10 показано, как частота коротковолновой фононной моды ω зависит от амплитуды A в двух случаях: при неизменных размерах расчётной ячейки (сплошная кривая) и при нулевом давлении (штриховая кривая). Нулевое давление обеспечивалось увеличением размеров расчётной ячейки в зависимости от амплитуды фононной моды, чтобы учесть эффект "теплого рас-

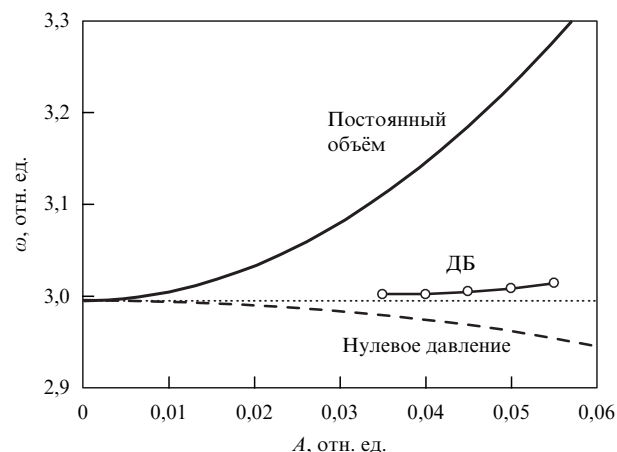


Рис. 10. Зависимость частоты фононной моды, представленной на рис. 9б, от амплитуды в нелинейном режиме: сплошная кривая — при неизменных размерах расчётной ячейки, штриховая кривая — при нулевом давлении. Горизонтальная пунктирная линия показывает верхнюю границу фононного спектра, $\omega_{\max} = 2.995$. Кружки, соединённые линией, представляют зависимость частоты ДБ, показанного на рис. 9в, от амплитуды колебания его центральных атомов.

ширения". Видно, что в первом случае коротковолновая фононная мода демонстрирует жёсткий тип нелинейности, а во втором — мягкий, т.е. частота моды увеличивается (уменьшается) с возрастанием амплитуды в первом (во втором) случае. Это связано с тем, что в условиях постоянства объёма больший вклад в динамику коротковолновой моды вносит жёсткое ядро потенциала Морса, а в условиях свободного теплового расширения — его мягкий "хвост".

Что касается ДБ, показанного на рис. 9в, то его ядро демонстрирует тенденцию к тепловому расширению, которое сдерживается окружающей ДБ частью кристалла. Оказывается, что эффект сдерживания локального расширения в ядре ДБ достаточен для того, чтобы частота ДБ лежала выше частот фононного спектра кристалла и слабо возрастала с увеличением амплитуды ДБ. Это видно из рис. 10, где горизонтальная пунктирная линия показывает верхнюю границу фононного спектра кристалла, $\omega_{\max} = 2.995$, а кружки, соединённые сплошной линией, представляют зависимость частоты ДБ от амплитуды колебания его центральных атомов. Напомним, что расчёты проводятся для безразмерного времени, нормированного так, что масса атома равна единице.

Можно показать, что статическое поле радиальных перемещений атомов, вызванных ДБ в двумерном кристалле, на больших расстояниях убывает как $1/r$, т.е. весьма медленно. Это следует из решения задачи теории упругости для круглой тонкой пластины диаметром d с концентрическим круглым отверстием диаметром c [148]. Пусть пластина выполнена из изотропно-упругого материала с модулем Юнга E и коэффициентом Пуассона ν . Радиальное давление p приложено к краям внутреннего выреза. В полярных координатах имеем неизвестное радиальное перемещение $u(r)$, две ненулевые компоненты тензора напряжений, σ_r и σ_θ , и три ненулевые компоненты тензора деформаций: ε_r , ε_θ и ε_z . Уравнение равновесия, выраженное в перемещениях, имеет вид

$$\frac{d^2 u}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{du}{dr} - \frac{u}{r^2} = 0, \quad (8)$$

и его общее решение

$$u = C_1 r + \frac{C_2}{r}, \quad (9)$$

где константы интегрирования

$$C_1 = \frac{1-v}{E} \frac{c^2 p}{d^2 - c^2}, \quad C_2 = \frac{1+v}{E} \frac{c^2 d^2 p}{d^2 - c^2} \quad (10)$$

определены из граничных условий, согласно которым на внутреннем вырезе $\sigma_r(c) = -p$, а на внешнем крае $\sigma_r(d) = 0$. Для бесконечной пластины с круговым отверстием следует рассмотреть предел $d \rightarrow \infty$, что даёт $C_1 = 0$, $C_2 = c^2 p(1+v)/E$. Тогда из (9) для радиального перемещения получаем

$$u = c^2 p \frac{1+v}{E} \frac{1}{r}. \quad (11)$$

Выражение (11) определяет дальнедействующее статическое поле радиальных перемещений атомов в двумерном кристалле вдали от центра ДБ. Множитель $c^2 p$ имеет размерность силы и, следовательно, представляет собой эффективную сосредоточенную силу, действующую со стороны ДБ на бесконечный двумерный кристалл.

Отметим, что в трёхмерном кристалле поле упругих перемещений, созданных ДБ, с увеличением расстояния от центра ДБ убывает как $u(r) \sim 1/r^2$, т.е. быстрее, чем в двумерном случае. Это следует из результатов расчёта поля радиального перемещения для полой упругой сферы под действием внутреннего давления в пределе бесконечного внешнего радиуса сферы. Как следствие, в трёхмерном кристалле локальное расширение в ядре ДБ более эффективно подавляется его окружением и ДБ должны быть сильнее локализованы в пространстве, чем в двумерном случае.

Ещё один важный вывод состоит в том, что ДБ, создавая дальнедействующие поля упругих перемещений, должны взаимодействовать между собой на значительных расстояниях, подобно дислокациям [149].

4.3. Дальнедействующие межатомные связи

В теоретических работах, как правило, рассматриваются цепочки в приближении, которое учитывает взаимодействие только между ближайшими частицами [44, 45]. Однако в кристаллах межатомные силы могут быть дальнедействующими (например, кулоновское взаимодействие в ионных кристаллах или металлическая связь). Полиномиальные потенциалы типа α - и β -Ферми–Пасты–Улама, а также потенциал Тоды не годятся для описания дальнедействующих сил в реальных кристаллах, поскольку на больших расстояниях они не обращаются в нуль, что нефизично для межатомных взаимодействий. Реалистичные межатомные потенциалы, как отмечалось в разделе 4.2, являются жёсткими на малых межатомных расстояниях и становятся мягкими с увеличением расстояния, отражая структуру атомов, состоящих из ядер и электронных оболочек.

В основе метода молекулярной динамики, широко используемого для изучения ДБ в кристаллах, лежат потенциалы межатомного взаимодействия, параметры которых подбираются таким образом, чтобы воспроизвести как можно больше экспериментальных данных, прежде всего структуру кристалла и параметр решётки, энергию сублимации, константы упругости.

Наиболее простыми являются парные межатомные потенциалы, например потенциалы Леннарда–Джонса и Морса. Использование таких потенциалов основано на предположении, что присутствие других атомов не влияет на взаимодействие рассматриваемой пары атомов. Такое допущение не всегда оправдано — например, для многих металлов и сплавов непарная составляющая взаимодействий может быть существенной. Классические (одноатомные) парные потенциалы могут воспроизвести только плотнейшие упаковки, например двумерную треугольную решётку или трёхмерную ГЦК-решётку, но более рыхлые упаковки, например двумерная квадратная решётка или трёхмерная ОЦК-решётка, всегда оказываются неустойчивыми для однокомпонентного вещества. Кроме того, при использовании парных потенциалов для кристаллов с кубической симметрией всегда выполняется соотношение Коши для констант упругости: $C_{12} = C_{44}$ [150, 151], однако из экспериментов известно, что, например, для многих ГЦК- и ОЦК-металлов возможно заметное отклонение от последнего равенства, и по величине этого отклонения можно судить о степени непарности межатомных взаимодействий. Указанные трудности можно преодолеть, используя многочастичные потенциалы, построенные, например, на основе модели погружённого атома [152].

4.4. Взаимодействие дискретных бризеров с дефектами кристаллической решётки

Дискретный бризер, согласно его классическому определению, — это пространственно локализованная колебательная мода в *бездефектной* нелинейной решётке. Однако в физике конденсированного состояния и материаловедении дефекты кристаллической решётки играют исключительно важную роль. ДБ могут взаимодействовать с дефектами, которые порождают искажения кристаллической решётки и локальные изменения массы и жёсткости связей как напрямую, так и посредством возбуждения колебательных мод, локализованных на дефекте, или получения энергии от таких мод.

Первые работы по изучению взаимодействия ДБ с вакансией были выполнены в рамках одномерной модели Френкеля–Конторовой с нелинейным взаимодействием между частицами [153, 154]. Было показано, что движущийся ДБ, взаимодействуя с вакансией, может приводить к её миграции. Более того, существенную роль в этом процессе может играть нелинейная колебательная мода, локализованная на атоме, соседнем с вакансией [154]. В рамках той же модели изучалось взаимодействие подвижных ДБ с межузельным атомом [155]. Рассеяние ДБ на межузельном атоме приводит к его миграции, причём, в соответствии с экспериментальными результатами, межузельный атом более подвижен, чем вакансия. Таким образом, было установлено, что ДБ могут повышать мобильность точечных дефектов, что в свою очередь связано с диффузией (массопереносом). Известно, что подвижность точечных дефектов способствует "переползанию" дислокаций [149].

Двумерный кристалл Морса поддерживает движущиеся ДБ [91], что позволяет изучать их взаимодействие с дефектами кристаллического строения, например с вакансией [95]. На рисунке 11 представлены результаты такого исследования. Стробоскопическая картина движения атомов двумерного кристалла Морса, в котором ДБ движется вдоль плотноупакованного атомного ряда

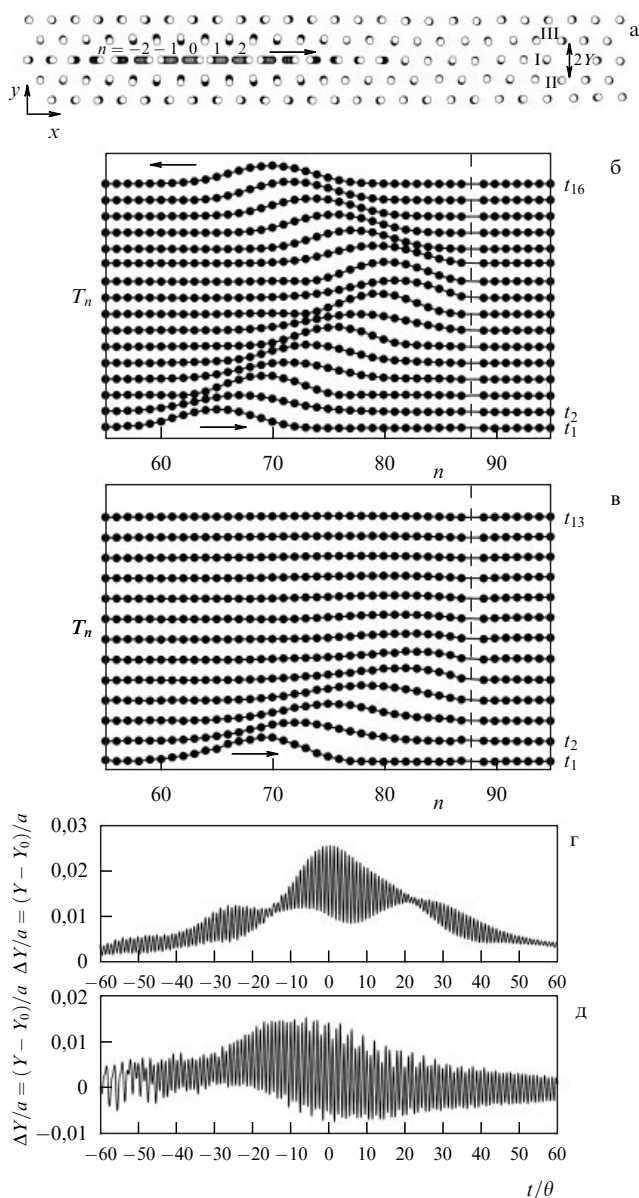


Рис. 11. (а) Движение ДБ в направлении вакансии. Для оценки потенциального барьера миграции атома I в вакантный узел исследуется эволюция во времени расстояния $2Y$ между атомами II и III. T_n — безразмерная амплитуда колебания n -го атома плотноупакованного ряда в направлении оси x , вычисляемая как $T_n = (u_n^{\max} - u_n^{\min})/(2a)$, где $u_n^{\max}$ и $u_n^{\min}$ — последовательные максимум и минимум функции $u_n(t)$, описывающей временную зависимость колебания n -го атома вдоль оси x , a — межатомное расстояние. (б, в) Примеры взаимодействия ДБ с вакансией, положение которой отмечено вертикальной штриховой линией. Зависимость отклонения величины Y/a от равновесного значения Y_0/a как функция времени: (г) ДБ упруго отражается от вакансии, (д) ДБ рассеивается на вакансии [95].

в направлении вакансии показана на рис. 11а. Атомы плотноупакованного ряда, по которому движется ДБ, пронумерованы индексом n . Для оценки потенциального барьера миграции атома I в вакантный узел исследуется эволюция во времени расстояния между атомами II и III, обозначенного как $2Y$. На рисунке 11б, в представлены примеры взаимодействия ДБ с вакансией, положение которой отмечено вертикальной штриховой линией. Скорость движения ДБ на рис. 11б в два раза меньше, чем на рис. 11в, при этом на рис. 11б наблюдается прак-

тически упругое отталкивание ДБ от вакансии, а в случае рис. 11в ДБ рассеивается на вакансии. Зависимость отклонения расстояния Y от равновесного значения Y_0 как функция времени, измеряемого в периодах колебаний ДБ θ , показана для двух случаев: ДБ упруго отражается от вакансии (рис. 11г) и ДБ рассеивается на вакансии (рис. 11д). Увеличение расстояния Y означает снижение потенциального барьера миграции атома I в вакансию. На основе приведённых результатов можно заключить, что в двумерном кристалле Морса ДБ не вызывает перемещения вакансии, но понижает энергетический барьер её миграции в течение примерно 10^2 атомных колебаний, до тех пор пока длится взаимодействие вакансии с ДБ [79].

Взаимодействие ДБ с вакансией, дислокацией и поверхностью исследовалось методом молекулярной динамики для ОЦК-железа [96]. Во всех случаях установлено, что ДБ, взаимодействуя с дефектом, приводит группу атомов вблизи дефекта в возбуждённое колебательное состояние, что может способствовать структурным перестройкам в кристалле.

Взаимодействие ДБ с дефектом замещения изучалось в работе [156] для одномерной цепочки с ближайшим взаимодействием, учитывающим линейную составляющую и кубический ангармонизм. Было найдено несколько сценариев взаимодействия ДБ с дефектом, в зависимости от массы атома замещения, параметров межатомного взаимодействия, а также степени локализации и скорости движения ДБ. Захват одного или нескольких ДБ примесью изучался в одномерной модели дезоксирибонуклеиновой кислоты (ДНК) [157]. Показано, что примесь может способствовать слиянию двух ДБ в один, приводя к большей пространственной локализации энергии [158]. Взаимодействие движущихся ДБ с несколькими примесями изучалось экспериментально и теоретически в одномерной нелинейной цепочке, для того чтобы выявить различные механизмы их взаимодействия и тем самым охарактеризовать вид примеси [159].

Существование локализованных колебательных мод в монокристаллической цепочке на тяжёлом примесном атоме показано в работе [138].

4.5. Дискретные бризеры на поверхности кристаллов

Атомно-гладкая поверхность трёхмерного кристалла может рассматриваться как двумерная периодическая система, которая может поддерживать локализованные нелинейные колебания, т.е. ДБ. Ступеньки на видяльной поверхности трёхмерного кристалла имеют квазиодномерную периодическую структуру, и на них также могут существовать ДБ (рис. 12). Кроме того, существование ДБ возможно на краю двумерных кристаллов, один такой пример представлен на рис. 5 для графеновой наноленты [70, 71]. Подобные ДБ могут вносить свой вклад в физику поверхности твёрдого тела.

ДБ были идентифицированы методом молекулярной динамики на большой ступеньке щёлочно-галогенидного кристалла NaI и в монокристаллическом слое водорода на поверхности (111) кремния [160]. Авторы работы [160] проводят мысль о том, что ДБ на поверхности кристаллов легче изучать экспериментально, чем ДБ в объёме кристаллической решётки.

В одномерной модели адсорбированного слоя найдены три типа ДБ, два из которых оказались устойчивыми [161].

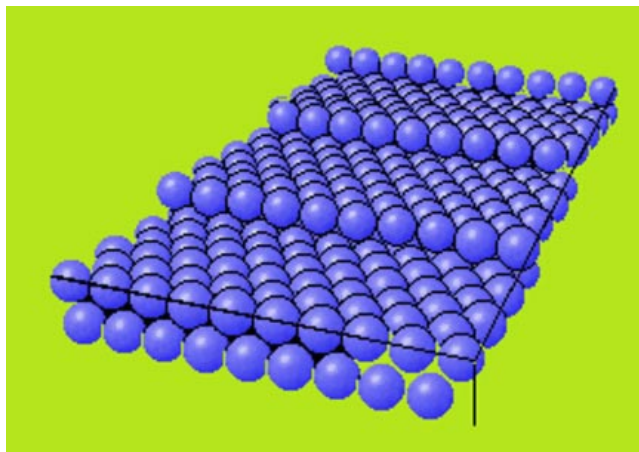


Рис. 12. Вицинальная поверхность кристалла. Край террасы представляет собой одномерную периодическую структуру, на которой могут существовать ДБ. Атомно-гладкая поверхность — это двумерная периодическая структура, которая также может поддерживать ДБ.

Отметим ряд работ по анализу линейных и нелинейных колебательных мод, локализованных на концах одномерных цепочек [162–165] и на краю графеновой наноленты [166]. Подобные работы развивают идею, высказанную в пионерских работах Тамма [167] и Шокли [168], заложивших основу физики поверхности. Моды, локализованные на краю одномерных цепочек, не могут классифицироваться как ДБ, поскольку трансляционная симметрия системы в этом случае нарушена.

4.6. Влияние упругой деформации решётки на свойства дискретных бризеров

Однородная упругая деформация кристалла может заметно влиять на его свойства посредством изменения симметрии кристалла и межатомных взаимодействий, зависящих от расстояний между решёточными положениями атомов [169]. С наибольшей эффективностью этот способ управления свойствами применим к наноматериалам (графен, нановолокна и др. [64, 169–171]), которые способны выдерживать значительную упругую деформацию без перестройки структуры и разрушения.

Для одномерной цепочки с ангармонизмами третьей и четвёртой степени показано, что упругая деформация приводит к перераспределению вкладов этих ангармонизмов, что влияет на свойства ДБ в цепочке [172].

Упругая деформация графена и графеновой наноленты индуцирует щель в фононном спектре, что обеспечивает возможность существования щелевых ДБ в этих материалах [68–71]. Упругая деформация порядка 0,01 заметно влияет на фононные спектры и частоты щелевых ДБ в кристалле со структурой NaCl [173].

4.7. Взаимодействие дискретных бризеров с электронной и магнитной подсистемами кристалла

В недавней работе Веларде [174] предложена концепция солектрона, которая расширила понятие полярона, т.е. связанного электрон-фононного состояния благодаря введению в рассмотрение вместо малоамплитудной фононной волны нелинейных локализованных возбуждений решётки (солитонов, ДБ и др.). Показано, что солектроны могут участвовать в транспорте электронов

[174–183]. Основываясь на том факте, что число ангармонических возбуждений в кристаллах возрастает с увеличением температуры [184, 185], и на недавно развитой теории транспорта электронов [178], авторы работы [186] получили степенную зависимость электрического сопротивления от температуры для достаточно общей одномерной модели кристалла.

На рисунке 13 представлены результаты численных расчётов в рамках одномерной модели, описываемой системой двух уравнений, одно из которых определяет динамику решётки (решётки Тоды), а другое — плотность электронных состояний (уравнение Шрёдингера) [174]. В случае рис. 13а, б взаимодействие между решёткой и электронной подсистемой отсутствует. В начальный момент времени возмущение подаётся в обе подсистемы, что приводит к солитонному возбуждению, распространяющемуся по решётке, и полной делокализации электронной плотности. При наличии взаимодействия между подсистемами (рис. в, г) был запущен решёточный солитон при полной делокализации электронов в нулевой момент времени. С течением времени наблюдаются захват электрона солитоном и его транспорт.

Колебания решётки с большой амплитудой в окрестности ДБ приводят к дилатации решётки [187], что может влиять на локальные магнитные свойства вследствие магнитоупругих эффектов [188].

Дискретные бризеры в ферромагнетиках исследовались теоретически [119–123] и экспериментально [124].

4.8. Механизмы возбуждения дискретных бризеров в кристаллах

Наиболее естественным механизмом возбуждения ДБ в кристаллах является их спонтанное термофлуктуационное зарождение в условиях термодинамического равновесия [52, 100–106]. Тепловые колебания решётки, с одной стороны, уменьшают время жизни ДБ [79], с другой стороны, с возрастанием температуры увеличивается вероятность термофлуктуационного возбуждения ДБ [100–105]. В результате концентрация ДБ возрастает с увеличением температуры [105].

Весьма интересный механизм генерации ДБ, который был открыт в работах [189, 190], обсуждался затем для одномерных [122, 191–194] и двумерных [195] моделей, а также для трёхмерного кристалла со структурой NaCl [57]. Согласно данному механизму дискретные бризеры возникают спонтанно в результате модуляционной неустойчивости [196, 197] фононной коротковолновой колебательной моды, амплитуда которой не слишком мала. Развитие неустойчивости приводит к пространственной локализации энергии в форме дискретных бризеров с большой амплитудой, которые затем медленно излучают энергию в виде малоамплитудных волн, и в итоге система приходит к тепловому равновесию с равным распределением энергии по всем колебательным модам. Пример такой динамики для цепочки магнитных спинов приведён на рис. 14.

Строгий анализ модуляционной неустойчивости различных фононных мод для двумерной нелинейной решётки проведён в работе [198].

Известно, что если на нелинейную дискретную систему воздействовать периодической силой на частоте, не принадлежащей спектру её малоамплитудных колебаний, то энергия не будет передаваться по системе, если амплитуда силы меньше определённого значения, по-

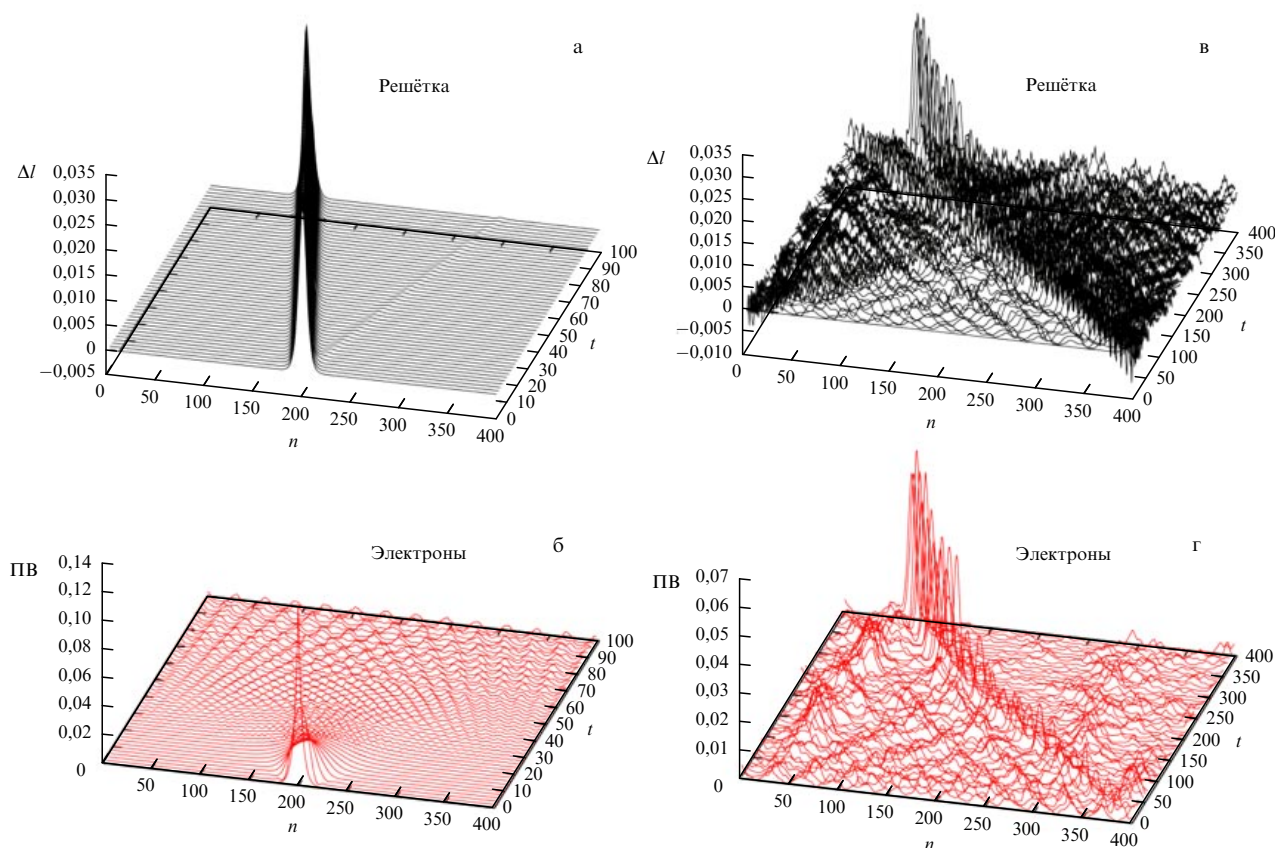


Рис. 13. (В цвете онлайн.) Динамика одномерной дискретной системы, описываемой системой двух уравнений, одно из которых определяет динамику решётки (решётки Тоды), а другое — плотность электронных состояний (уравнение Шрёдингера) [174]. Δl — относительное перемещение узлов решётки Тоды, ПВ — плотность вероятности электронных состояний. На рисунках а и б решёточная и электронная подсистемы не взаимодействуют между собой. Исходное возмущение, вводимое в обе подсистемы, приводит к появлению солитона, бегущего по решётке, и полной делокализации электронной плотности. На рисунках в и г решёточная и электронная подсистемы взаимодействуют между собой. Электронная подсистема в нулевой момент времени не возбуждалась. Решёточный солитон захватывает и транспортирует электрон.

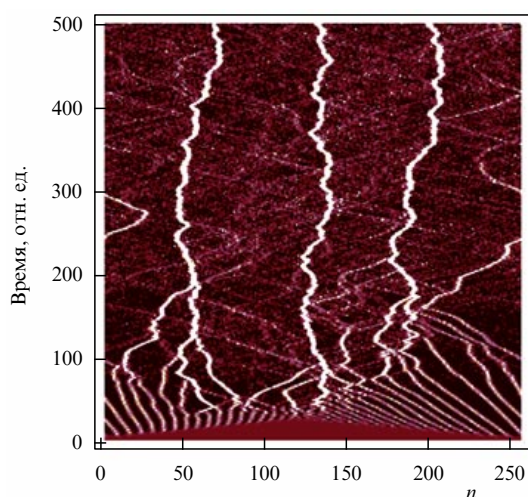


Рис. 14. (В цвете онлайн.) Эволюция плотности энергии в цепочке магнитных спинов [122]. Более светлым участкам соответствует большая плотность энергии. В результате модуляционной неустойчивости однородное распределение энергии по цепочке разрушается, возникающие при этом ДБ сталкиваются друг с другом и обмениваются энергией так, что амплитуда высокоэнергетических ДБ возрастает. В результате в системе возникают три малоподвижных ДБ с большой амплитудой, которые медленно излучают энергию, и в конце концов система приходит к тепловому равновесию с равным распределением энергии по всем колебательным модам (этот режим на рисунке не показан).

скольку бегущие фоновые волны возбуждаться не будут. Однако в нелинейном режиме, когда амплитуда силы превышает пороговое значение, становится возможным возбуждение нелинейных колебательных мод (например, ДБ), которые способны переносить энергию по системе. Такой механизм возбуждения нелинейных мод внешней периодической силой с частотой, не принадлежащей малоамплитудному спектру системы, названный нелинейной супратрансмиссией (nonlinear supratransmission) [199], впоследствии изучался для различных дискретных нелинейных систем [200, 201].

В работе [202] была предпринята успешная попытка генерации щелевых ДБ в кристалле Pt_3Al посредством воздействия на него с частотой, близкой к частоте ДБ.

Возможность возбуждения ДБ в процессе облучения кристаллов частицами с различной энергией обсуждалась в работе [66].

Теоретические основы наблюдения в кристаллах ДБ, инициированных внешним воздействием, заложены в работах [203 – 205].

4.9. Движущиеся дискретные бризеры в кристаллах и их столкновения

Строгое определение движущегося ДБ в одномерной цепочке подразумевает точное повторение его профиля через время t со сдвигом на некоторое число узлов решётки k . Возможность существования таких решений

в нелинейных цепочках активно обсуждалась, и были предложены алгоритмы построения машинно-точных движущихся ДБ [44, 45, 193, 206–210]. В недавней работе Сато и др. [211] описан способ построения движущихся ДБ в цепочке, учитывающий нелинейный локальный потенциал, за счёт компенсации одного типа нелинейности межатомных связей противоположным типом нелинейности локального потенциала.

Для квазибризеров [126] в реальных кристаллах следует видоизменить понятие движущихся ДБ, потребовав, чтобы пространственно локализованная мода в процессе движения по решётке излучала энергию достаточно медленно.

Движущиеся ДБ в двумерных моделях кристаллов, включающих в себя локальный потенциал, изучались в работах [139–142]. Известно, что ДБ, по крайней мере в чистых металлах, могут двигаться со скоростями 0,1–0,5 скорости звука [65, 87, 212]. Кроме того, известно, что сильно локализованные ДБ в деформированном графене способны обмениваться энергией [69]. Таким образом, ДБ могут участвовать в процессе переноса энергии по кристаллу. Сталкиваясь между собой, ДБ приводят к ещё большей пространственной локализации энергии в точке столкновения [93]. Возможен обмен энергией и импульсом между сталкивающимися ДБ [93, 94].

В квадратично-нелинейной 2D-решётке дискретные солитоны могут двигаться в произвольном направлении [213].

Для системы параллельных слабо связанных цепей с потенциалом Ферми–Пасты–Улама в работе [214] показано существование перехода делокализации, когда бризер, изначально возбуждённый на заданной цепи, внезапно распределяет свою колебательную энергию по всей двумерной системе цепей при уменьшении своей амплитуды (или частоты) до значения ниже порогового. В работе [214] показано также существование двух режимов: туннелирования между цепями и самозахвата на одной цепи — для стационарных или движущихся бризеров в системе двух слабо связанных цепей Ферми–Пасты–Улама. Эти режимы разделены сепаратрисой, на которой частота обмена энергией между двумя цепями стремится к нулю. Такие же два режима наблюдались для линейных джозефсоновских плазменных колебаний и нелинейного самозахвата в туннельном контакте двух слабо связанных бозе-эйнштейновских конденсатов [215], что не удивительно, поскольку обе физические системы описываются аналогичной парой уравнений.

ДБ движутся по решётке сравнительно медленно, смещаясь на один период решётки за десять периодов колебаний [65, 139–142, 144, 145]. Сверхзвуковое движение демонстрируют ультрадискретные кинки, профиль которых связан с "магическим" волновым числом $q = 2\pi/(3a)$, где a — параметр решётки кристалла [216]. Это волновое число возникало ранее при анализе стоячих или бегущих синусоидальных волн, являющихся точными решениями модели Ферми–Пасты–Улама [193, 217, 218].

4.10. Расчёты *ab initio*

Молекулярная динамика опирается на эмпирические межатомные потенциалы, которые должны проверяться более точными методами, такими как квантово-механический метод функционала плотности, который учитывает квантовую природу электронной подсистемы

кристалла. В работе [73] по изучению ДБ в кристаллах из первых принципов на примере графана наглядно показана важность таких расчётов. Зависимость частоты от амплитуды для ДБ в графене, найденная ранее методом молекулярной динамики [72], только при относительно малых амплитудах качественно совпала с зависимостью, рассчитанной *ab initio* [73]. Применение метода наискорейшего спуска позволило уточнить начальные условия для запуска ДБ в графене [219].

Недавно Лобзенко и др. [219] провели моделирование из первых принципов щелевого ДБ в однородно деформированном графене. В расчётной ячейке с периодическими граничными условиями, включающей в себя 18 атомов углерода, ДБ возбуждался заданием начальных перемещений в направлении оси Y атомам под номерами 10 и 15 на рис. 15а. Зависимость частоты от амплитуды для данного ДБ показана на рис. 15б. Частота ДБ лежит в щели фононного спектра и убывает с возрастанием амплитуды, что качественно согласуется с результатами, полученными ранее методом молеку-

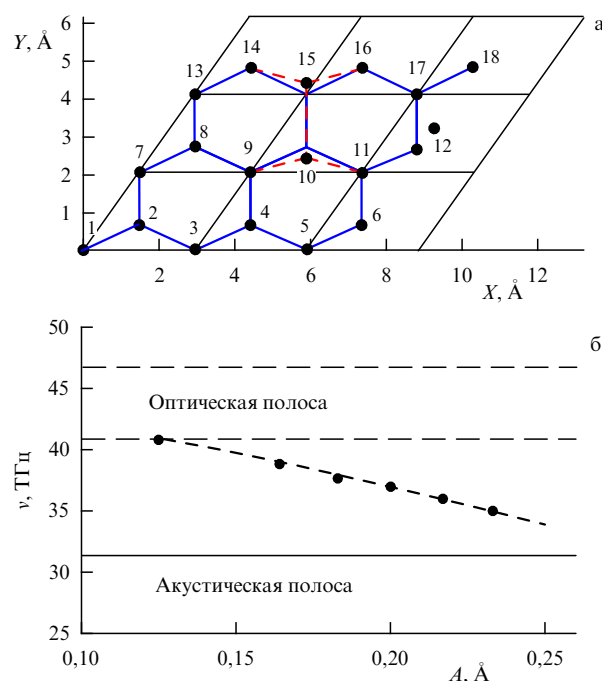


Рис. 15. (а) Расчётная ячейка с периодическими граничными условиями для моделирования из первых принципов ДБ в графене, подвергнутому одноосному растяжению вдоль оси X [220]. ДБ возбуждался посредством начального отклонения атомов 10 и 15 вдоль оси Y в противоположных направлениях. (б) Зависимость частоты ν ДБ в графене от его амплитуды A .

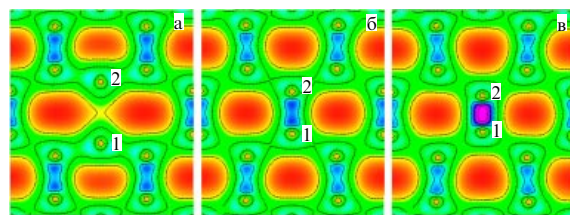


Рис. 16. (В цвете онлайн.) Распределение электронной плотности в окрестности ядра щелевого ДБ в деформированном графене в моменты (а) максимального удаления, (б) прохождения положений равновесия и (в) максимального сближения атомов углерода 1 и 2, соответствующих атомам 10 и 15 на рис. 15а.

лярной динамики [68, 70]. Распределения электронной плотности в окрестности ядра ДБ в графене в моменты максимального удаления, прохождения положений равновесия и максимального сближения атомов углерода 1 и 2 (соответствующих атомам 10 и 15 на рис. 15а) показаны соответственно на рис. 16а – в.

Нелинейные колебательные моды в графене были изучены с помощью расчётов *ab initio* в работе [221]. Некоторые из описанных мод можно трактовать как периодически расположенные ДБ.

Квантовое описание ДБ может быть представлено в модели Бозе – Хаббарда (см. недавний обзор [29]).

4.11. Исследования методами теории групп дискретных бризеров в кристаллах с различными типами пространственной симметрии

В одномерных цепочках обычно выделяют два типа различных по симметрии ДБ: симметричный (мода Сиверса – Такено) и антисимметричный (мода Пейджа). В работе [222] на примере плоской квадратной решётки впервые были применены методы теории групп для выделения всех возможных инвариантных многообразий кристаллической решётки, на которых могут локализоваться ДБ. В этой же работе для исследования устойчивости дискретных бризеров была использована доказанная в [223] теорема о возможности расщепления многомерных вариационных систем (получаемых в рамках теории Флоке) на независимые подсистемы с малой размерностью. Метод такого расщепления, основанный на применении аппарата неприводимых представлений групп симметрии, является общим, и он может быть использован для исследования устойчивости ДБ разных типов симметрии в различных двумерных и трёхмерных кристаллических структурах вне зависимости от типа межатомных взаимодействий.

В недавней работе Чечина с соавторами [224] показано, что недеформированный графен допускает 4 одномерных (рис. 17), 14 двумерных, один трёхмерный и 6 четырёхмерных колебательных бушей, являющихся точными решениями динамических уравнений движения. Эти буши мод, если их частота возрастает с увеличением амплитуды, могут использоваться для получения пространственно локализованных колебательных мод посредством наложения колоколообразных функций.

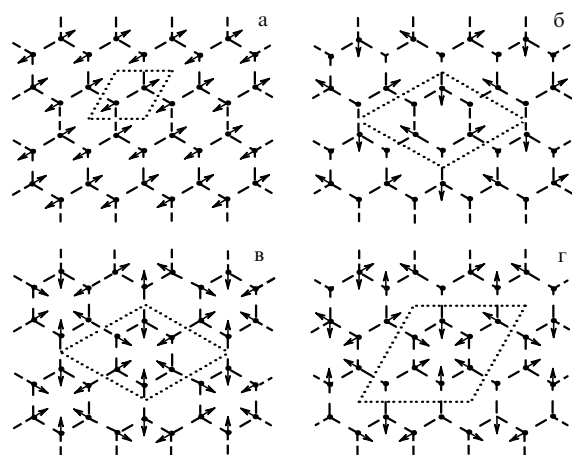


Рис. 17. Одномерные буши мод в графене с пространственными группами симметрии (а) $C_{mm}2$, (б) $P31m$, (в), (г) $P6mm$ [224].

5. Вклад дискретных бризеров в физические свойства кристаллов

Если свойства ДБ известны, то это позволяет говорить о их влиянии на свойства кристаллов. ДБ могут вносить вклад в теплоёмкость кристаллов [50], а подвижные ДБ — и в теплопроводность. ДБ могут переносить не только энергию, но и электрический заряд [174–183, 186]. Колебания с большой амплитудой в ядре ДБ приводят к локальной дилатации решётки, что должно отражаться на тепловом расширении кристалла [187]. Возбуждение ДБ в релаксорных сегнетоэлектриках позволяет объяснить многие экспериментально наблюдаемые в этих материалах явления [225, 226]. Перенос энергии на значительные расстояния, ДБ, возбуждённые при плазменной обработке поверхности монокристалла германия, способны трансформировать дефекты кристаллической структуры на значительной глубине [55]. Велика роль нелинейных колебаний и в образовании вакансий [227].

Весьма значительным представляется вклад ДБ в кинетику термоактивируемых реакций в кристаллах. Несмотря на низкую концентрацию ДБ, скорость химических реакций и фазовых превращений в окрестности ДБ экспоненциально зависит от их энергии. Эта энергия может быть меньше высоты активационного барьера реакции, но больше средней энергии тепловых колебаний атомов, что приводит к гигантскому ускорению реакции в окрестности ДБ [228]. Так, например, для типичной энергии ДБ порядка 0,5 эВ скорость реакции в его окрестности при средней температуре 300 К возрастает на восемь порядков [229]. При этом наблюдаемая скорость фазовых превращений зависит от концентрации ДБ и возрастает на 4–5 порядков величины, в полном согласии с экспериментальными данными [228–230].

Особенно велик вклад ДБ в кинетику радиационно-индуцированных реакций [231]. Это связано с тем, что облучение является эффективным механизмом возбуждения ДБ вследствие локализованного смещения атомов из положения равновесия. Если смещение слишком велико, то возникает пара Френкеля — вакансия и междоузельный атом — или целый каскад первично выбитых атомов, эволюцию которых изучает физика радиационных повреждений кристаллов. Пороговая энергия образования пары Френкеля порядка 10 эВ. Поэтому большая часть энергии налетающих частиц расходуется на возбуждение колебательных смещений атомов, т.е. на образование ДБ. Следствием этого является не только радиационно-индуцированное ускорение химических реакций, но и возникновение качественно новых реакций и фазовых превращений, не связанных с разогревом кристалла.

Так, например, взаимодействие подвижных ДБ с вакансионными порами приводит к выбиванию из них вакансий, т.е. к растворению пор, названному радиационным отжигом [232], так как его скорость определяется, в первую очередь, интенсивностью облучения, а не температурой кристалла. Более того, естественная анизотропия распространения квадонов в кристалле (вдоль плотноупакованных кристаллографических направлений) приводит к селективному растворению пор и, как следствие, к образованию сверхрешётки пор, копирующей решётку кристалла (ОЦК-решётка пор в ОЦК-металлах, ГЦК-решётка в ГЦК-металлах и плоское упорядочение

пор в ГПУ-кристаллах, где ДБ распространяются в базисных плоскостях) [232, 233].

Другим примером качественного отличия явлений, связанных с радиационно-индуцированным образованием ДБ, от известных явлений, обусловленных радиационными повреждениями, является радиационно-индуцированная пластификация (РИП) металлов [234, 235]. Радиационные дефекты приводят к широко известному радиационному упрочнению (и тем самым к охрупчиванию) материалов атомных реакторов, которое является следствием стопорения дислокаций на структурных дефектах. Такое радиационное упрочнение накапливается годами и представляет собой серьёзную технологическую проблему.

В то же время облучение приводит к мгновенному разупрочнению материала (РИП) вследствие облегчения отрыва дислокаций от стопоров, вызванного взаимодействием с ДБ [234, 235]. Этот эффект является обратимым, т.е. он исчезает вне реактора, в связи с чем в течение длительного времени РИП игнорировалась радиационным научным сообществом, несмотря на экспериментальные наблюдения данного явления непосредственно в реакторе [236]. В последнее время благодаря пониманию физики этого явления в его связи с ДБ интерес к нему возобновился, что инициировало проведение ряда экспериментальных работ по исследованию РИП в лабораторных условиях [235].

Список новых работ по изучению роли ДБ в радиационной физике растёт, и в качестве примеров укажем работы по фазовым превращениям [237] и явлению радиационного роста ГПУ-металлов [238], которые позволяют взглянуть на старые проблемы под новым углом зрения.

6. Заключение

В настоящем обзоре освещены главные достижения в изучении ДБ в кристаллах. Отражено основное содержание выполненных в течение последних трёх десятилетий классических работ, составивших теоретический фундамент, на который опирается изучение ДБ в кристаллах. Подавляющее большинство таких работ выполнено для модельных дискретных нелинейных систем с низкой размерностью и сильно упрощёнными потенциалами, что позволяло применять математические методы анализа. Основная цель исследований состояла в доказательстве того факта, что ДБ являются вездесущими объектами в нелинейных дискретных системах.

Переход к изучению ДБ в реальных кристаллах связан с постановкой экспериментальных работ и повышением роли численных методов, поскольку возможности аналитических методов при использовании реалистичных межатомных потенциалов или при квантовомеханических расчётах невелики. Акцент исследований смещается с поиска общих закономерностей, наблюдаемых в широком спектре нелинейных дискретных систем, к анализу отличительных особенностей ДБ в конкретных кристаллах. Именно эта задача должна быть решена для объяснения роли ДБ в формировании свойств реальных кристаллов и для того, чтобы в перспективе заставить ДБ работать в новых технологиях.

Очертим круг дальнейших возможных исследований, направленных на выяснение пока ещё слабо изученных вопросов, связанных с ДБ.

1. Разработка методов возбуждения ДБ в кристаллах в молекулярно-динамических расчётах. Имеется ряд подходов к поиску начальных условий, генерирующих долгоживущие локализованные колебания, например с использованием приближения вращающейся волны (rotating wave approximation) [60], метода градиентного спуска [219], спонтанного возбуждения хаотических ДБ в результате модуляционной неустойчивости определённых колебательных мод [57, 60, 122, 189–195], а также посредством быстрого отвода тепловых колебаний от расчётной ячейки [107] или наложения колоколообразных функций на определённые коротковолновые фононные моды в нелинейном режиме [46, 239–241]. Сложность данной проблемы состоит в том, что один и тот же кристалл может поддерживать ДБ различных типов [80] (см. рис. 8 и 9).

2. Определение основных свойств ДБ в кристаллах с различными типами связи при нулевой температуре: их минимальной и максимальной энергий, диапазона частот и амплитуд колебаний, степени пространственной локализации, способности или неспособности к движению по кристаллу, создаваемых ими полей упругих напряжений и др. Основным инструментом при решении этих задач может являться метод молекулярной динамики.

3. Проведение расчётов *ab initio* с целью уточнения данных, получаемых методом молекулярной динамики. На сегодняшний день с использованием теории функционала плотности проведены лишь единичные расчёты для ДБ в кристаллах с низкой размерностью [73, 219, 231], что связано с высокими затратами вычислительных ресурсов при реализации таких расчётов. Тем не менее расчёты с использованием теории функционала плотности, по сравнению с расчётами методом молекулярной динамики, являются более доказательными, поскольку, в отличие от последних, они не зависят от эмпирических межатомных потенциалов.

4. Оценка вероятности термофлуктуационного зарождения ДБ в кристаллах, определение концентрации и времени жизни ДБ в условиях теплового равновесия. Разработка численных методов идентификации ДБ на фоне тепловых колебаний решётки в молекулярно-динамических расчётах.

5. Изучение вклада ДБ в физику кристаллов, далёких от равновесия, при интенсивных внешних воздействиях. Поскольку ДБ являются нелинейными колебательными модами, их возникновение наиболее вероятно при интенсивных внешних воздействиях (облучение, высокоскоростной нагрев, протекание электрического тока высокой плотности, пластическая деформация, наличие фазового перехода и т.п.), когда кристалл получает энергию значительными порциями [55, 229, 231, 234]. Поэтому естественно предполагать, что роль ДБ существенно возрастает в процессах, далёких от термодинамического равновесия.

6. Оценка вклада ДБ в перенос электрического заряда [174–183, 186], магнитного момента [122], в теплоёмкость, теплопроводность [106–109], тепловое расширение [187] и другие свойства кристаллов.

7. Исследование участия ДБ в генерации дефектов и взаимодействия ДБ с дефектами кристалла [95, 96, 153–155].

8. Проведение экспериментальных работ по изучению ДБ в кристаллах, что остаётся особенно важным.

Наиболее прямым методом исследования ДБ является анализ спектров различных волн, взаимодействующих с кристаллами (см. раздел 3). С увеличением объёма информации о влиянии ДБ на свойства кристаллов появится возможность постановки экспериментальных работ по не прямой идентификации ДБ посредством изменения физических свойств, чувствительных к присутствию ДБ.

Решение этих проблем приблизит нас к выяснению роли ДБ в физике твёрдого тела.

Благодарности. Авторы признательны В.И. Дубинко, Ю.А. Косевичу, Б.А. Маломеду, А.В. Савину, А.П. Четверикову, Г.М. Чечину за замечания, сделанные ими при прочтении рукописи настоящего обзора. Работа выполнена при поддержке грантом Российского научного фонда 14-12-10175 (С.В.Д.), грантом Президента РФ для молодых учёных МК-5283.2015.2 (Е.А.К.), грантом Российского научного фонда 14-13-00982 (Ю.А.Б.).

Список литературы

1. Косевич А М, Ковалев А С *ЖЭТФ* **67** 1793 (1974); Kosevich A M, Kovalev A S *Sov. Phys. JETP* **40** 891 (1975)
2. Долгов А С *ФТТ* **28** 1641 (1986); Dolgov A S *Sov. Phys. Solid State* **28** 907 (1986)
3. Sievers A J, Takeno S *Phys. Rev. Lett.* **61** 970 (1988)
4. Page J B *Phys. Rev. B* **41** 7835 (1990)
5. Лифшиц И М *ЖЭТФ* **12** 156 (1942)
6. Lifshitz I M *Nuovo Cimento Suppl.* **3** 716 (1956)
7. Лифшиц И М *УФН* **83** 617 (1964); Lifshitz I M *Sov. Phys. Usp.* **7** 549 (1965)
8. Lifshitz I M, Kosevich A M *Rep. Prog. Phys.* **29** 217 (1966)
9. Лифшиц И М *Избранные труды. Физика реальных кристаллов и неупорядоченных систем* (М.: Наука, 1987)
10. Овчинников А А *ЖЭТФ* **57** 263 (1969); Ovchinnikov A A *Sov. Phys. JETP* **30** 147 (1970)
11. Овчинников А А, Эрихман Н С *УФН* **138** 289 (1982); Ovchinnikov A A, Erikhman N S *Sov. Phys. Usp.* **25** 738 (1982)
12. MacKay R S, Aubry S *Nonlinearity* **7** 1623 (1994)
13. Bambusi D *Nonlinearity* **9** 433 (1996)
14. Livi R, Spicci M, MacKay R S *Nonlinearity* **10** 1421 (1997)
15. Alfimov G L, Brazhnyi V A, Konotop V V *Physica D* **194** 127 (2004)
16. Yoshimura K, in *Proc. of the Intern. Symp. on Nonlinear Theory and its Applications, NOLTA2015, Hong Kong, China, December 1–4, 2015*, p. 902
17. Yoshimura K *AIP Conf. Proc.* **1474** 59 (2012)
18. Адлер В Э *ТМФ* **181** (2) 276 (2014); Adler V E *Theor. Math. Phys.* **181** 1367 (2014)
19. Адлер В Э, Бобенко А И, Сурис Ю Б *Функц. анализ и его прил.* **43** 3 (2009); Adler V E, Bobenko A I, Suris Yu B *Funct. Anal. Appl.* **43** 3 (2009)
20. Suris Yu B, in *Encyclopedia of Mathematical Physics* Vol. 5 (Eds J-P Francoise, G L Naber, S T Tsou) (Amsterdam: Elsevier, 2006) p. 235
21. Suris Yu B *Lecture Notes Phys.* **644** 111 (2004)
22. Adler V E, Bobenko A I, Suris Yu B *Commun. Math. Phys.* **233** 513 (2003)
23. Dauxois T, Peyrard M, Ruffo S *Eur. J. Phys.* **26** S3 (2005)
24. Morse P M *Phys. Rev.* **34** 57 (1929)
25. Браун О М, Кившарь Ю С *Модель Френкеля – Конторовой. Концепции, методы, приложения* (М.: Физматлит, 2008)
26. Kevrekidis P G *The Discrete Nonlinear Schrödinger Equation. Mathematical Analysis, Numerical Computations and Physical Perspectives* (Springer Tracts in Modern Physics, Vol. 232) (Berlin: Springer, 2009)
27. Salerno M *Phys. Rev. A* **46** 6856 (1992)
28. Ablowitz M J, Ladik J F *J. Math. Phys.* **16** 598 (1975)
29. Dutta O et al. *Rep. Prog. Phys.* **78** 066001 (2015)
30. Eisenberg H S et al. *Phys. Rev. Lett.* **81** 3383 (1998)
31. Christodoulides D N, Efremidis N K *Opt. Lett.* **27** 568 (2002)
32. Fleischer J W et al. *Nature* **422** 147 (2003)
33. Eiermann B et al. *Phys. Rev. Lett.* **92** 230401 (2004)
34. Trias E, Mazo J J, Orlando T P *Phys. Rev. Lett.* **84** 741 (2000)
35. Binder P et al. *Phys. Rev. Lett.* **84** 745 (2000)
36. Mazo J J, Orlando T P *Chaos* **13** 733 (2003)
37. Palmero F et al. *Phys. Rev. E* **84** 026605 (2011)
38. English L Q et al. *Phys. Rev. Lett.* **108** 084101 (2012)
39. Sato M et al. *Phys. Rev. Lett.* **90** 044102 (2003)
40. Wiersig J, Flach S, Ahn K H *Appl. Phys. Lett.* **93** 222110 (2008)
41. Sato M et al. *Phys. Rev. E* **87** 012920 (2013)
42. Sato M et al. *Phys. Rev. Lett.* **107** 234101 (2011)
43. Sato M et al. *Chaos* **25** 013103 (2015)
44. Flach S, Willis C R *Phys. Rep.* **295** 181 (1998)
45. Flach S, Gorbach A V *Phys. Rep.* **467** 1 (2008)
46. Swanson B I et al. *Phys. Rev. Lett.* **82** 3288 (1999)
47. Voulgarakis N K et al. *Phys. Rev. B* **64** 020301(R) (2001)
48. Kalosakas G, Bishop A R, Shreve A P *Phys. Rev. B* **66** 094303 (2002)
49. Campbell D K, Flach S, Kivshar Yu S *Phys. Today* **57** (1) 43 (2004)
50. Manley M E et al. *Phys. Rev. B* **77** 214305 (2008)
51. Manley M E et al. *Phys. Rev. Lett.* **96** 125501 (2006)
52. Manley M E et al. *Phys. Rev. B* **79** 134304 (2009)
53. Kempa M et al. *J. Phys. Condens. Matter* **25** 055403 (2013)
54. Sievers A J et al. *Phys. Rev. B* **88** 104305 (2013)
55. Archilla J F R et al. *Physica D* **297** 56 (2015)
56. Kiselev S A, Sievers A J *Phys. Rev. B* **55** 5755 (1997)
57. Khadeeva L Z, Dmitriev S V *Phys. Rev. B* **81** 214306 (2010)
58. Кирсанова А А, Баимова Ю А, Дмитриев С В *Письма в ЖТФ* **38** (14) 72 (2012); Kistanov A A, Baimova Yu A, Dmitriev S V *Tech. Phys. Lett.* **38** 676 (2012)
59. Voulgarakis N K et al. *Phys. Rev. B* **69** 113201 (2004)
60. Yamayose Y et al. *Europhys. Lett.* **80** 40008 (2007)
61. Shimada T, Shirasaki D, Kitamura T *Phys. Rev. B* **81** 035401 (2010)
62. Shimada T et al. *Physica D* **239** 407 (2010)
63. Kinoshita Y et al. *Phys. Rev. B* **77** 024307 (2008)
64. Doi Y, Nakatani A *J. Sol. Mech. Mater. Eng.* **6** 71 (2012)
65. Haas M et al. *Phys. Rev. B* **84** 144303 (2011)
66. Hizhnyakov V et al. *Phys. Scripta* **89** 044003 (2014)
67. Savin A V, Kivshar Yu S *Phys. Rev. B* **85** 125427 (2012)
68. Хадеева Л З, Дмитриев С В, Кившарь Ю С *Письма в ЖЭТФ* **94** 580 (2011); Khadeeva L Z, Dmitriev S V, Kivshar Yu S *JETP Lett.* **94** 539 (2011)
69. Baimova J A, Dmitriev S V, Zhou K *Europhys. Lett.* **100** 36005 (2012)
70. Korznikova E A, Baimova J A, Dmitriev S V *Europhys. Lett.* **102** 60004 (2013)
71. Корзникова Е А и др. *Письма в ЖЭТФ* **96** 238 (2012); Korznikova E A et al. *JETP Lett.* **96** 222 (2012)
72. Liu B et al. *J. Phys. D* **46** 305302 (2013)
73. Chechin G M et al. *Phys. Rev. B* **90** 045432 (2014)
74. Медведев Н Н и др. *Письма о материалах* **3** (1) 34 (2013)
75. Захаров П В и др. *Фундаментальные проблемы современного материаловедения* **11** (2) 260 (2014)
76. Medvedev N N, Starostenkov M D, Manley M E *J. Appl. Phys.* **114** 213506 (2013)
77. Медведев Н Н и др. *Изв. вузов. Физика* (3) 92 (2014); Medvedev N N et al. *Russ. Phys. J.* **57** 387 (2014)
78. Дмитриев С В и др. *ФТТ* **52** 1398 (2010); Dmitriev S V et al. *Phys. Solid State* **52** 1499 (2010)
79. Захаров П В и др. *Фундаментальные проблемы современного материаловедения* **11** (4) 533 (2014)
80. Захаров П В и др. *ЖЭТФ* **148** 252 (2015); Zakharov P V et al. *JETP* **121** 217 (2015)
81. Медведев Н Н и др. *Письма в ЖТФ* **41** (20) 50 (2015); Medvedev N N et al. *Tech. Phys. Lett.* **41** 994 (2015)
82. Захаров П В и др. *Фундаментальные проблемы современного материаловедения* **12** (2) 146 (2015)
83. Царегородцев А И и др. *ФММ* **58** (2) 336 (1994)
84. Hizhnyakov V, Klopov M, Shelkan A *Phys. Lett. A* **380** 1075 (2016)
85. Баимова Ю А и др. *ЖЭТФ* **149** 1005 (2016); Baimova J A et al. *JETP* **122** (5) (2016)
86. Baimova J A et al. *Rev. Adv. Mater. Sci.* **42** 68 (2015)
87. Murzaev R T et al. *Comput. Mater. Sci.* **98** 88 (2015)
88. Семенов А С и др. *Фундаментальные проблемы современного материаловедения* **12** (1) 26 (2015)

89. Dmitriev S V, Chetverikov A P, Velarde M G *Phys. Stat. Solidi B* **252** 1682 (2015)
90. Hizhnyakov V et al. *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B* **303** 91 (2013)
91. Кистанов А А и др. *Письма в ЖЭТФ* **99** 403 (2014); Kistanov A A et al. *JETP Lett.* **99** 353 (2014)
92. Кистанов А А, Семенов А С, Дмитриев С В *ЖЭТФ* **146** 869 (2014); Kistanov A A, Semenov A S, Dmitriev S V *JETP* **119** 766 (2014)
93. Kistanov A A et al. *Eur. Phys. J. B* **87** 211 (2014)
94. Doi Y *Phys. Rev. E* **68** 066608 (2003)
95. Кистанов А А и др. *Письма в ЖТФ* **40** (15) 58 (2014); Kistanov A A et al. *Tech. Phys. Lett.* **40** 657 (2014)
96. Terentyev D A et al. *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* **23** 085007 (2015)
97. Manley M E et al. *Sci. Rep.* **1** 4 (2011)
98. Manley M E et al. *Phys. Rev. B* **89** 224106 (2014)
99. Kempa M et al. *Phys. Rev. B* **89** 054308 (2014)
100. Eleftheriou M, Flach S, Tsironis G P *Physica D* **186** 20 (2003)
101. Ivanchenko M V et al. *Physica D* **198** 120 (2004)
102. Eleftheriou M, Flach S *Physica D* **202** 142 (2005)
103. Eleftheriou M, Flach S *Low Temp. Phys.* **34** 554 (2008)
104. Farago J *Physica D* **237** 1013 (2008)
105. Khadeeva L Z, Dmitriev S V *Phys. Rev. B* **84** 144304 (2011)
106. Xiong D et al. *Phys. Rev. E* **85** 020102(R) (2012)
107. Xiong D, Zhang Y, Zhao H *Phys. Rev. E* **88** 052128 (2013)
108. Xiong D, Zhang Y, Zhao H *Phys. Rev. E* **90** 022117 (2014)
109. Xiong D *Europhys. Lett.* **113** 14002 (2016)
110. Gaveau B et al. *J. Luminescence* **92** 311 (2001)
111. Mihokova E, Schulman L S *J. Luminescence* **129** 1878 (2009)
112. Yu G, Wang X, Tao Z *Phys. Rev. E* **83** 026605 (2011)
113. Markovich T et al. *Phys. Rev. Lett.* **88** 195301 (2002)
114. Zhang L, Tang G, Ma X *Phys. Lett. A* **374** 2137 (2010)
115. Russell F M, Eilbeck J C *Europhys. Lett.* **78** 10004 (2007)
116. Russell F M *Nature* **216** 907 (1967)
117. Russell F M *Phys. Lett.* **25B** 298 (1967)
118. Russell F M *Phys. Lett. A* **130** 489 (1988)
119. Wallis R F, Mills D L, Boardman A D *Phys. Rev. B* **52** R3828 (1995)
120. Rakhmanova S, Mills D L *Phys. Rev. B* **54** 9225 (1996)
121. Lai R, Kiselev S A, Sievers A J *Phys. Rev. B* **54** 9225 (1996)
122. Kavitha L et al. *J. Magn. Magn. Mater.* **401** 394 (2016)
123. Pylypchuk R L, Zolotaryuk Y *Low Temp. Phys.* **41** (9) 733 (2015)
124. Sato M et al. *J. Appl. Phys.* **91** 8676 (2002)
125. Liang W, Vanacore G M, Zewail A H *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **111** 5491 (2014)
126. Chechin G M, Dzhelauhova G S, Mehonoshina E A *Phys. Rev. E* **74** 036608 (2006)
127. Malomed B A *Phys. Rev. B* **49** 5962 (1994)
128. Savin A V, Manevitch L I *Phys. Rev. B* **67** 144302 (2003)
129. Flach S, Kladko K, Willis C R *Phys. Rev. E* **50** 2293 (1994)
130. Sandusky K W, Page J B *Phys. Rev. B* **50** 866 (1994)
131. Aubry S *Physica D* **103** 201 (1997)
132. Koukoulouyannis V, Ichtarioglou S *Physica D* **201** 65 (2005)
133. Flach S, Kladko K, MacKay R S *Phys. Rev. Lett.* **78** 1207 (1997)
134. Feng B-F, Kawahara T *Wave Motion* **45** 68 (2007)
135. Kastner M *Phys. Rev. Lett.* **92** 104301 (2004)
136. Kastner M *Nonlinearity* **17** 1923 (2004)
137. Kosevich Yu A *Phys. Lett. A* **173** 257 (1993)
138. Kosevich Yu A *Phys. Rev. B* **47** 3138 (1993)
139. Marin J L, Russell F M, Eilbeck J C *Phys. Lett. A* **248** 225 (1998)
140. Marin J L, Eilbeck J C, Russell F M *Lecture Notes Phys.* **542** 293 (2000)
141. Marin J L, Eilbeck J C, Russell F M *Phys. Lett. A* **281** 21 (2001)
142. Bajars J, Eilbeck J C, Leimkuhler B *Physica D* **301** – **302** 8 (2015)
143. Bajars J, Eilbeck J C, Leimkuhler B, in *Quodons in Mica. Nonlinear Localized Travelling Excitations in Crystals* (Springer Series in Materials Science, Vol. 221, Eds J F R Archilla et al.) (Heidelberg: Springer, 2015) p. 35
144. Кистанов А А, Дмитриев С В *Письма в ЖТФ* **39** (13) 78 (2013); Kistanov A A, Dmitriev S V *Tech. Phys. Lett.* **39** 618 (2013)
145. Dmitriev S V, Kistanov A A, Dubinko V I, in *Quodons in Mica. Nonlinear Localized Travelling Excitations in Crystals* (Springer Series in Materials Science, Vol. 221, Eds J F R Archilla et al.) (Heidelberg: Springer, 2015) p. 205
146. Kiselev S A, Bickham S R, Sievers A J *Phys. Rev. B* **48** 13508 (1993)
147. Корзникова Е А и др. *Письма в ЖЭТФ* **103** 303 (2016); Korznikova E A et al. **103** (4) (2016)
148. Timoshenko S P, Goodier J N *Theory of Elasticity* (New York: McGraw-Hill, 1970); Пер. на русск. яз.: Тимошенко С П, Гудьер Дж *Теория упругости* (М.: Наука, 1975)
149. Hirth J P, Lothe J *Theory of Dislocations* (New York: McGraw-Hill, 1968); Пер. на русск. яз.: Хирт Дж, Лоте И *Теория дислокаций* (М.: Атомиздат, 1972)
150. Бровман Е Г, Каган Ю М *УФН* **112** 369 (1974); Brovman E G, Kagan Yu M *Sov. Phys. Usp.* **17** 125 (1974)
151. Гуфан А Ю и др. *ФТТ* **54** 770 (2012); Gufan A Yu et al. *Phys. Solid State* **54** 820 (2012)
152. Daw M S, Baskes M I *Phys. Rev. B* **29** 6443 (1984)
153. Cuevas J et al. *Phys. Lett. A* **315** 364 (2003)
154. Cuevas J et al. *Physica D* **216** 115 (2006)
155. Cuevas J et al. *Discrete Contin. Dyn. Syst. S* **4** 1057 (2011)
156. de Andrade P C, Cândido L, Teixeira Rabelo J N *Phys. Lett. A* **379** 1833 (2015)
157. Ting J J-L, Peyrard M *Phys. Rev. E* **53** 1011 (1996)
158. Forinash K, Peyrard M, Malomed B *Phys. Rev. E* **49** 3400 (1994)
159. Thota M, Harne R L, Wang K W *J. Appl. Phys.* **117** 074505 (2015)
160. Schroder U, Bonart D, Mayer A P *Physica B* **219** – **220** 390 (1996)
161. Kivshar Yu S, Zhang F, Takeno S *Physica D* **119** 125 (1998)
162. Franchini A, Bortolani V, Wallis R F *Phys. Rev. B* **53** 5420 (1996)
163. Franchini A, Bortolani V, Wallis R F *Surf. Sci.* **502** – **503** 458 (2002)
164. Franchini A, Bortolani V, Wallis R F *J. Phys. Condens. Matter* **12** 1 (2000)
165. Kivshar Yu S, Zhang F, Takeno S *Physica D* **113** 248 (1998)
166. Savin A V, Kivshar Yu S *Phys. Rev. B* **81** 165418 (2010)
167. Tamm I *Phys. Z. Sowjetunion* **1** 733 (1932)
168. Shockley W *Phys. Rev.* **56** 317 (1939)
169. Zhu T, Li J *Prog. Mater. Sci.* **55** 710 (2010)
170. Ogata S et al. *Phys. Rev. B* **70** 104104 (2004)
171. Baimova J A et al. *Phys. Rev. B* **86** 035427 (2012)
172. Wang S *Phys. Lett. A* **191** 261 (1994)
173. Дмитриев С В, Бaimova Ю А *ЖТФ* **81** (11) 71 (2011); Dmitriev S V, Baimova Yu A *Tech. Phys.* **56** 1612 (2011)
174. Velarde M G *J. Comput. Appl. Math.* **233** 1432 (2010)
175. Brizhik L et al. *Phys. Rev. B* **85** 245105 (2012)
176. Chetverikov A P, Ebeling W, Velarde M G *Physica D* **240** 1954 (2011)
177. Velarde M G et al. *Europhys. Lett.* **106** 27004 (2014)
178. Chetverikov A P et al. *Eur. Phys. J. B* **87** 153 (2014)
179. Chetverikov A P, Ebeling W, Velarde M G *Eur. Phys. J. B* **85** 291 (2012)
180. Cisneros-Akea L A, Cruzeiro L, Velarde M G *Physica D* **306** 82 (2015)
181. Chetverikov A P et al., in *Quodons in Mica. Nonlinear Localized Travelling Excitations in Crystals* (Springer Series in Materials Science, Vol. 221, Eds J F R Archilla et al.) (Heidelberg: Springer, 2015) p. 267
182. Brizhik L S et al., in *Quodons in Mica. Nonlinear Localized Travelling Excitations in Crystals* (Springer Series in Materials Science, Vol. 221, Eds J F R Archilla et al.) (Heidelberg: Springer, 2015) p. 291
183. Chetverikov A P, Ebeling W, Velarde M G, in *Quodons in Mica. Nonlinear Localized Travelling Excitations in Crystals* (Springer Series in Materials Science, Vol. 221, Eds J F R Archilla et al.) (Heidelberg: Springer, 2015) p. 321
184. Muto V, Scott A C, Christiansen P L *Phys. Lett. A* **136** 33 (1989)
185. Marchesoni F, Lucheroni C *Phys. Rev. E* **44** 5303 (1991)
186. Chetverikov A P, Ebeling W, Velarde M G *Eur. Phys. J. B* **88** 202 (2015)
187. Manley M E *Acta Mater.* **58** 2926 (2010)
188. Rinaldi S, Turilli G *Phys. Rev. B* **31** 3051 (1985)
189. Burlakov V M, Kiselev S A, Rupasov V I *Phys. Lett. A* **147** 130 (1990)
190. Бурлаков В М, Киселев С А, Рупасов В И *Письма в ЖЭТФ* **51** 481 (1990); Burlakov V M, Kiselev S A, Rupasov V I *JETP Lett.* **51** 544 (1990)
191. Cretegy T et al. *Physica D* **121** 109 (1998)
192. Dauxois T et al. *Chaos* **15** 015110 (2005)
193. Kosevich Yu A, Corso G *Physica D* **170** 1 (2002)
194. Kosevich Yu A, Lepri S *Phys. Rev. B* **61** 299 (2000)
195. Ikeda K et al. *Physica D* **225** 184 (2007)

196. Kivshar Yu S, Peyrard M *Phys. Rev. A* **46** 3198 (1992)
197. Kavitha L et al. *J. Biol. Phys.* **39** 15 (2013)
198. Doi Y, Nakatani A *J. Phys. Soc. Jpn.* **81** 124402 (2012)
199. Geniet F, Leon J *Phys. Rev. Lett.* **89** 134102 (2002)
200. Kevrekidis P G et al. *Phys. Rev. E* **70** 066627 (2004)
201. Maniadis P, Kopidakis G, Aubry S *Physica D* **216** 121 (2006)
202. Медведев Н И и др. *Письма в ЖТФ* **37** (3) 7 (2011); Medvedev N N et al. *Tech. Phys. Lett.* **37** 98 (2011)
203. Rössler T, Page J B *Phys. Rev. B* **62** 11460 (2000)
204. Rössler T, Page J B *Phys. Lett. A* **204** 418 (1995)
205. Rössler T, Page J B *Physica B* **219–220** 387 (1996)
206. Flach S, Kladko K *Physica D* **127** 61 (1999)
207. Aubry S *Physica D* **216** 1 (2006)
208. Yoshimura K, Doi Y *Wave Motion* **45** 83 (2007)
209. Aubry S, Cretegny T *Phys. D* **119** 34 (1998)
210. Zueco D et al. *Phys. Rev. E* **71** 036613 (2005)
211. Sato M et al. *Chaos* **25** 103122 (2015)
212. Hizhnyakov V et al., in *Quodons in Mica. Nonlinear Localized Travelling Excitations in Crystals* (Springer Series in Materials Science, Vol. 221, Eds J F R Archilla et al.) (Heidelberg: Springer, 2015) p. 229
213. Susanto H et al. *Phys. Rev. Lett.* **99** 214103 (2007)
214. Kosevich Yu A, Manevitch L I, Savin A V *Phys. Rev. E* **77** 046603 (2008)
215. Albiez M et al. *Phys. Rev. Lett.* **95** 010402 (2005)
216. Archilla J F R et al. *Phys. Rev. E* **91** 022912 (2015)
217. Kosevich Yu A *Phys. Rev. Lett.* **71** 2058 (1993)
218. Kosevich Yu A, Khomeriki R, Ruffo S *Europhys. Lett.* **66** 21 (2004)
219. Chechin G M, Lobzenko I P *Письма о материалах* **4** 226 (2014)
220. Лобзенко И П и др. *ФТТ* **58** 616 (2016); Lobzenko I P et al. *Phys. Solid State* **58** 633 (2016)
221. Lebedieva T et al. *Nanoscale Res. Lett.* **10** 287 (2015)
222. Bezuglova G S, Chechin G M, Goncharov P P *Phys. Rev. E* **84** 036606 (2011)
223. Chechin G M, Zhukov K G *Phys. Rev. E* **73** 036216 (2006)
224. Chechin G M, Ryabov D S, Shcherbinin S A *Письма о материалах* **6** 9 (2016)
225. Bishop A R et al. *Phys. Rev. B* **81** 064106 (2010)
226. Macutkevicius J et al. *Phys. Rev. B* **83** 184301 (2011)
227. Glensk A et al. *Phys. Rev. X* **4** 011018 (2014)
228. Archilla J F R et al. *J. Phys. Chem. B* **110** 24112 (2006)
229. Dubinko V I, Selyshchev P A, Archilla J F R *Phys. Rev. E* **83** 041124 (2011)
230. Dubinko V I, Archilla J F R, Dmitriev S V, Hizhnyakov V, in *Quodons in Mica. Nonlinear Localized Travelling Excitations in Crystals* (Springer Series in Materials Science, Vol. 221, Eds J F R Archilla et al.) (Heidelberg: Springer, 2015) p. 381
231. Dubinko V I, Dubinko A V *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B* **303** 133 (2013)
232. Dubinko V I, Guglya A G, Donnelly S E *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B* **269** 1634 (2011)
233. Dubinko V I, Russell F M J *Nucl. Mater.* **419** 378 (2011)
234. Дубинко В И и др. *ФТТ* **54** 2314 (2012); Dubinko V I et al. *Phys. Solid State* **54** 2442 (2012)
235. Дубинко В И, Дубинко А В, Дмитриев С В *Письма о материалах* **3** 239 (2013)
236. Карасев В С, Гриник Э У *Атомная энергия* **54** 177 (1983); Grinik É U, Karasev V S *Sov. Atom. Energy* **54** 184 (1983)
237. Dubinko V, Shapovalov R, in *Localized Excitations in Nonlinear Complex Systems. Current State of the Art and Future Perspectives* (Nonlinear Systems and Complexity, Vol. 7, Eds R Carretero-González et al.) (Berlin: Springer, 2014) p. 265
238. Dubinko V *Письма о материалах* **4** 283 (2014)
239. Дмитриев С В и др. *Изв. вузов. Физика* **51** (8) 73 (2008); Dmitriev S V et al. *Russ. Phys. J.* **51** 858 (2008)
240. Manevitch L I, Savin A V, Lamarque C-H *Phys. Rev. B* **74** 014305 (2006)
241. Manevitch L I, Savin A V, Lamarque C-H *Physica D* **237** 600 (2008)

Discrete breathers in crystals

S.V. Dmitriev. Institute for Metals Superplasticity Problems, Russian Academy of Sciences, ul. Khalturina 39, 450001 Ufa, Russian Federation;
Research Laboratory for Mechanics of New Nanomaterial, Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, ul. Politekhicheskaya 29, 195251 St. Petersburg, Russian Federation
E-mail: dmitriev.sergey.v@gmail.com

E.A. Korznikova. Institute for Metals Superplasticity Problems, Russian Academy of Sciences, ul. Khalturina 39, 450001 Ufa, Russian Federation
E-mail: elena.a.korznikova@gmail.com

J.A. Baimova. Institute for Metals Superplasticity Problems, Russian Academy of Sciences, ul. Khalturina 39, 450001 Ufa, Russian Federation;
M.N. Mikheev Institute of Metal Physics, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, ul. S. Kovalevskoi 18, 620990 Ekaterinburg, Russian Federation
E-mail: julia.a.baimova@gmail.com

M.G. Velarde. Instituto Pluridisciplinar, Universidad Complutense, Paseo Juan XXIII, 1, 28040 Madrid, Spain
E-mail: mgvelarde@pluri.ucm.es

It is well known that periodic discrete defect-containing systems, in addition to traveling waves, support vibrational defect-localized modes. It turned out that if a periodic discrete system is nonlinear, it can support spatially localized vibrational modes as exact solutions even in the absence of defects. Since the nodes of the system are all on equal footing, it is only through the special choice of initial conditions that a group of nodes can be found on which such a mode, called a discrete breather (DB), will be excited. The DB frequency must be outside the frequency range of the small-amplitude traveling waves. Not resonating with and expending no energy on the excitation of traveling waves, a DB can theoretically conserve its vibrational energy forever provided no thermal vibrations or other perturbations are present. Crystals are nonlinear discrete systems, and the discovery in them of DBs was only a matter of time. Experimental studies of DBs encounter major technical difficulties, leaving atomistic computer simulations as the primary investigation tool. Despite the definitive evidence for the existence of DBs in crystals, their role in solid state physics still remains unclear. This review addresses some of the problems that are specific to real crystal physics and which went undiscussed in the classical literature on DBs. In particular, the interaction of a moving DB with lattice defects is examined, how elastic lattice deformations influence the properties of DBs and the possibility of their existence is discussed, recent studies of the effect of nonlinear lattice perturbations on the crystal electron subsystem are presented, etc.

Keywords: crystal lattice, nonlinear oscillations, discrete breather, crystal lattice defect

PACS numbers: **05.45.–a**, **05.45.Yv**, **63.20.–e**

Bibliography — 241 references

Uspekhi Fizicheskikh Nauk **186** (5) 471–488 (2016)

DOI: 10.3367/UFNr.2016.02.037729

Received 27 July 2015, revised 30 January 2016

Physics – Uspekhi **59** (5) (2016)