

18,10

## ***Ab initio* моделирование щелевых дискретных бризеров в деформированном графене**

© И.П. Лобзенко<sup>1</sup>, Г.М. Чечин<sup>2</sup>, Г.С. Безуглова<sup>2</sup>, Ю.А. Баимова<sup>3,4</sup>,  
Е.А. Корзникова<sup>3</sup>, С.В. Дмитриев<sup>3,5</sup>

<sup>1</sup> Институт физики молекул и кристаллов УНЦ РАН,  
Уфа, Россия

<sup>2</sup> Южный федеральный университет,  
Ростов-на-Дону, Россия

<sup>3</sup> Институт проблем сверхпластичности металлов РАН,  
Уфа, Россия

<sup>4</sup> Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН,  
Екатеринбург, Россия

<sup>5</sup> Национальный исследовательский Томский государственный университет,  
Томск, Россия

E-mail: ivanlobzenko@gmail.com

(Поступила в Редакцию 14 июля 2015 г.)

Впервые для моделирования дискретных бризеров в графене использованы методы теории функционала плотности. Показана возможность существования бризеров с частотами, лежащими в щели фононного спектра, индуцированной одноосным растяжением монослойного листа графена в направлении „зигзаг“ (ось  $X$ ), поляризованных в направлении „кресло“ (ось  $Y$ ). Найденные щелевые бризеры являются сильно локализованными динамическими объектами, ядро которых образуют два соседних атома углерода, лежащие на оси  $Y$ . Окружающие ядро атомы совершают колебания со значительно меньшими амплитудами вдоль обеих осей ( $X$  и  $Y$ ). Найдена зависимость частоты этих бризеров от амплитуды, которая демонстрирует мягкий тип нелинейности. Бризеров такого типа в щели, индуцированной растяжением вдоль оси  $Y$ , не обнаружено. Показана возможность аппроксимации бризерных колебаний осцилляторами Морзе, параметры которых определены из *ab initio* расчетов. Полученные результаты имеют принципиальное значение, поскольку молекулярно-динамические расчеты, основанные на эмпирических потенциалах, не могут служить надежным доказательством существования бризеров в кристаллах.

Л.И.П., Ч.Г.М. благодарят за финансовую поддержку РФФ (грант № 14-13-00982), Б.Ю.А. благодарит за поддержку стипендией Президента РФ молодым ученым и аспирантам СП-4037.2015.1, К.Е.А. благодарит за поддержку грантом Президента для молодых ученых РФ МК-5283.2015.2, Д.С.В. благодарит РФФИ (грант № 14-02-97029 р\_поволжье\_a).

### **1. Введение**

Локализованные динамические объекты в нелинейных дискретных системах, обладающих трансляционной симметрией, впервые были рассмотрены в работе Овчинникова [1]. В [2] Долгов с помощью рядов Фурье исследовал периодические во времени симметричные и антисимметричные локализованные решения нелинейных уравнений для цепочки Ферми–Пасты–Улама типа  $\beta$ . Работа Сиверса и Такено [3] привлекла внимание широкой научной общественности к изучению подобных объектов, которые позже стали называть дискретными бризерами (ДБ). По определению они представляют собой локализованные в пространстве и периодические во времени колебания в однородных (без примесей и дефектов) гамильтоновых решетках. В мезоскопических системах возможно непосредственное наблюдение дискретных бризеров, следствием чего является их обнаружение в целом ряде таких систем различной физической природы [4]. В частности, они были найдены в цепочках сверхпроводящих контактов Джозефсона [5], в массивах

оптических волноводов [6] и механических микроантилеверов [7], в гранулированных кристаллах [8] и т. д.

С другой стороны, экспериментальные исследования ДБ в реальных кристаллах [9–14] наталкиваются на серьезные технические трудности [15], в силу чего особое значение приобретают методы математического (компьютерного) моделирования. С их помощью удалось предсказать возможность существования ДБ в щелочно-галоидных кристаллах [16–18], металлах Ni и Nb [19], V, Fe и W [20], полупроводниках Si и Ge [21], упорядоченном сплаве Pt<sub>3</sub>Al [22] и деформированном графене [23–25].

В подавляющем большинстве работ математическое моделирование ДБ проводилось методами молекулярной динамики, рассматривающей кристалл как систему материальных точек, взаимодействие между которыми описывается с помощью некоторых феноменологических потенциалов (МТ-модели). Принципиально важным при таком подходе к изучению ДБ является выбор адекватных потенциалов межатомного взаимодействия. При моделировании бризеров в кристаллах различной

физической природы различные авторы использовали различные виды таких потенциалов от простейших парных потенциалов типа Леннарда–Джонса, Морзе, Борна–Майера до сложных многочастичных потенциалов Бреннера, Терсоффа, AIREBO и т.д. Выбор феноменологического потенциала при исследовании динамики конкретных кристаллических структур нередко является сложной задачей. Примером сравнительного анализа корректности различных эмпирических потенциалов может служить работа [26], в которой рассматриваются ДБ в ковалентных кристаллах Si и Ge.

Насколько нам известно, первой работой, в которой при моделировании ДБ в кристаллах была сделана попытка выхода за пределы изучения МТ-моделей, была [27]. В этой работе дискретные бризеры в графене (полностью гидрогенизированном графене) исследовались с помощью *ab initio* расчетов, основанных на теории функционала плотности, и при этом был получен ряд результатов, которые качественно отличаются от найденных ранее в [28] с помощью некоторой МТ-модели.

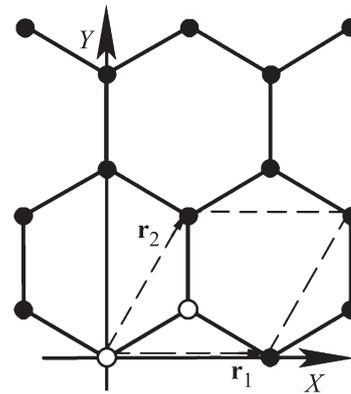
В отличие от классических методов молекулярной динамики в рамках теории функционала плотности учитывается наличие у атомов электронных оболочек. При этом для электронной подсистемы решаются квантово-механические уравнения Кона–Шэма, а движение ионов подчиняется классическим уравнениям в поле, создаваемом электронной плотностью, быстро подстраивающейся под это движение (приближение Борна–Оппенгеймера). Существенным моментом при таком подходе к изучению ДБ является учет поляризации электронных оболочек атомов в процессе бризерных колебаний, поскольку этим эффектом полностью пренебрегают в МТ-моделях.

Целью настоящей работы являются исследование возможности существования ДБ в одноосно деформированном графене и изучение их свойств методами теории функционала плотности. Полученные данные сопоставляются с результатами молекулярно-динамических расчетов из работы [23].

Для численного моделирования нами использовался программный комплекс ABINIT [29–31] с учетом ряда характерных для практического применения теории функционала плотности приближений. В частности, использовались приближение локальной плотности (LDA), метод псевдопотенциалов (потенциалы Troullier–Martins), базис плоских волн при решении уравнений Кона–Шэма (с константой „обрезания“ по энергии, равной 1361 eV) и т.д.

## 2. Исследования дискретных бризеров в графене методами молекулярной динамики

Хорошо известно [4], что необходимым условием возможности существования ДБ является отсутствие резонанса бризерных колебаний с делокализованными



**Рис. 1.** Фрагмент гексагональной решетки графена. В ромбическую примитивную ячейку входят два атома. Угол между векторами трансляции  $r_1$  и  $r_2$  равен  $60^\circ$ .

нормальными колебаниями кристаллической решетки. Отсюда следует, что частота ДБ должна лежать вне фононного спектра кристалла. При этом она может или быть больше максимальной частоты нормальных колебаний, или лежать в щелях фононного спектра.

Электронный и фононный спектры недеформированного графена являются бесщелевыми. Однако одноосное растяжение монослойного листа графена приводит к перестройке этих спектров, поскольку две углеродные подрешетки (соответствующие двум атомам углерода в примитивной ячейке) в результате такого растяжения становятся неэквивалентными друг другу. В свою очередь эта перестройка может привести к кардинальному изменению электронных и оптических свойств графена. В литературе имеется значительное число работ, в которых такие изменения исследуются с помощью различных экспериментальных и теоретических методов (см., например, [32–34]).

Наиболее часто рассматриваются два типа одноосной деформации графена: вдоль направления „зигзаг“ или вдоль направления „кресло“. Этим двум взаимно ортогональным направлениям на рис. 1, где изображены три соседние шестиугольные ячейки решетки графена, отвечают оси X и Y соответственно. При одноосном растяжении листа графена в любом из указанных направлений в фононном спектре открывается щель, ширина которой зависит от величины деформации. Заметим, что графен выдерживает довольно большие степени упругой деформации, по крайней мере до 20% (в работах [35,36] рассматривается даже возможность деформации величиной 40%). Очевидно, что физические свойства графена при растяжении вдоль осей X и Y должны быть различными. Детальную информацию о характере изменений электронного и фононного спектров деформированного графена можно найти, например, в работе [34].

Фононный спектр характеризует свойства колебаний кристаллической решетки в гармоническом приближении, т.е. колебаний с маленькими амплитудами. Хорошо известно, что в таком приближении в решетке без

дефектов и примесей локализация энергии невозможна. С другой стороны, дискретным бризерам отвечают осцилляции с достаточно большими амплитудами, когда существенным образом проявляется такая характерная черта нелинейной динамики, как зависимость частоты колебаний от амплитуды, что и обеспечивает возможность локализации энергии в однородной кристаллической решетке.

Ряд работ [23,37,38] был посвящен исследованию возможности существования ДБ в монослойном графене при нулевой температуре ( $T = 0$  К) с помощью методов математического моделирования. Во всех этих работах использовались различные МТ-модели, а динамика описывалась классическими уравнениями Ньютона. В статье [37] для случая недеформированного графена исследовались бризероподобные динамические объекты в МТ-модели с потенциалом Бреннера [39], которые возбуждались за счет смещения двух ближайших атомов углерода (они расположены на оси  $Y$ ) на равные расстояния навстречу друг другу. При достаточно больших амплитудах такого смещения имела место сильная локализация энергии в небольшой окрестности начального возбуждения (ядра бризера), по мере удаления от этого ядра амплитуды колебаний атомов быстро уменьшались. Получаемый таким образом локализованный динамический объект, не обладая строгой периодичностью во времени, не является точным дискретным бризером. Время его жизни составляло около 26 „периодов“, а основная частота лежала выше верхней границы фононного спектра.

Как известно, для построения идеального ДБ необходим очень точный подбор начальных смещений не только атомов его ядра, но и всех периферийных атомов бризера (см., например, [4,40,41]). В случае недостаточной идеальности выбора такого начального профиля локализованного возбуждения можно рассчитывать лишь на построение некоторого квазibriзера. Это понятие и ряд числовых характеристик „степени квазibriзерности“ были введены в [41]. Строгая периодичность ДБ предполагает полную синхронизацию колебаний всех атомов решетки [42]. Такая синхронизация для динамических объектов, найденных в [37], не проводилась, но была осуществлена для аналогичных возбуждений при  $T = 0$  К в деформированном графене [38]. В последней работе использовалась та же МТ-модель с потенциалом Бреннера, что и в [37], но лист графена подвергался одноосному растяжению вдоль оси  $Y$  (направление „кресло“). Такое растяжение (вплоть до 10% от размера ячейки недеформированного графена) моделировалось выбором соответствующих фиксированных граничных условий вдоль оси  $Y$ . При этом в силу эффекта Пуассона происходило некоторое небольшое сжатие листа графена вдоль перпендикулярной оси  $X$ .

Для построения достаточно точных ДБ авторы работы [38] использовали определенный вариант метода спуска в многомерном пространстве начальных смещений некоторой совокупности атомов в области локализации бризера. В результате время жизни полученных

ими динамических объектов достигало 500 периодов колебаний. Частота построенных таким образом ДБ, как и в [37], лежала выше верхней границы фононного спектра деформированного графена. Последнее обстоятельство свидетельствует о жестком типе нелинейности (увеличение частоты ДБ с увеличением его амплитуды).

С помощью метода Флоке в работе [38] подробно исследована устойчивость найденных ДБ, в результате чего оказалось, что все они являются неустойчивыми динамическими объектами по отношению к малому возмущению своего начального профиля.

Принципиально иной тип дискретных бризеров в деформированном графене был исследован в работе [23]. Как уже отмечалось, при одноосной деформации и вдоль направления „кресло“, и вдоль направления „зигзаг“ в фононном спектре графена открывается щель. В такой ситуации возникает принципиальная возможность существования щелевых ДБ. Частота таких динамических объектов лежит внутри щели фононного спектра и при этом имеет место мягкий тип нелинейности, т.е. уменьшение частоты ДБ с уменьшением его амплитуды.

Для построения щелевых дискретных бризеров авторами работы [23] использовалась МТ-модель, в которой взаимодействие между атомами описывалось феноменологическим потенциалом, предложенным в [43] (утверждается, что этот потенциал лучше воспроизводит дисперсионные кривые графена, чем потенциал Бреннера, который был использован в [37,38]). Возбуждение щелевых бризероподобных объектов достигалось за счет такого же, как и в [37,38], смещения лишь двух ближайших атомов углерода на равные расстояния навстречу друг другу,<sup>1</sup> и, таким образом, бризерные колебания были поляризованы вдоль оси  $Y$  (направление „кресло“). При этом растяжение монослойного листа графена проводилось не вдоль той же самой оси  $Y$ , как это делалось в процессе моделирования в [37,38], а вдоль перпендикулярной оси  $X$  (направление „зигзаг“). Поскольку уточнение начального профиля таких бризероподобных объектов не проводилось, в результате описанного выше возбуждения получались некоторые квазibriзеры. Однако они оказались близкими к точным ДБ, о чем свидетельствуют данные рис. 4 из работы [23] и тот факт, что время их жизни составляло около 1000 периодов. Построенные щелевые ДБ демонстрируют мягкий тип нелинейности и являются достаточно устойчивыми динамическими объектами. Таким образом, в [23] в рамках используемой МТ-модели была впервые показана возможность возбуждения в монослойном графене при  $T = 0$  К щелевых ДБ.

В настоящей работе для исследования щелевых ДБ в растянутом вдоль направления „зигзаг“ (ось  $X$ ) монослое графена использовались *ab initio* расчеты на основе методов теории функционала плотности. Исходя из общих физических соображений ясно, что такие расчеты

<sup>1</sup> При этом для соответствующей „раскачки“ колебаний атомов использовалось искусственное приложение к ним некоторой периодической силы.

являются значительно более точными, поскольку в отличие от МТ-моделей автоматически учитывают поляризацию электронных оболочек в процессе бризерных колебаний, а динамика электронной подсистемы описывается квантовыми уравнениями Кона–Шэма. О большей корректности таких моделей по сравнению с МТ-моделями свидетельствует работа [27] по исследованию ДБ в графене (полностью гидрогенизированном графене), где проведено сравнение результатов *ab initio* расчетов на основе методов теории функционала плотности и представленных в [23] расчетов в рамках МТ-модели с потенциалом AIREBO. При этом для такой важной характеристики ДБ, как зависимость частоты  $\nu$  бризера от его амплитуды  $A$ , было выявлено кардинальное отличие от указанной выше МТ-модели. Позднее в [44] было проведено уточнение начального профиля квазибризеров, возбуждаемых за счет простого смещения одного из атомов водорода, которое осуществлялось с помощью некоторого специального метода минимизации функции квазибризерности, характеризующей степень отклонения бризероподобного объекта от точного ДБ.

### 3. Фононный спектр графена

Фрагмент гексагональной структуры листа монослойного графена представлен на рис. 1. Расстояние между ближайшими атомами  $a = 1.42 \text{ \AA}$  [45]. В ходе расчета равновесного состояния графена нами было получено межатомное расстояние  $a = 1.415 \text{ \AA}$ , что отличается от экспериментального значения менее чем на 0.5%.

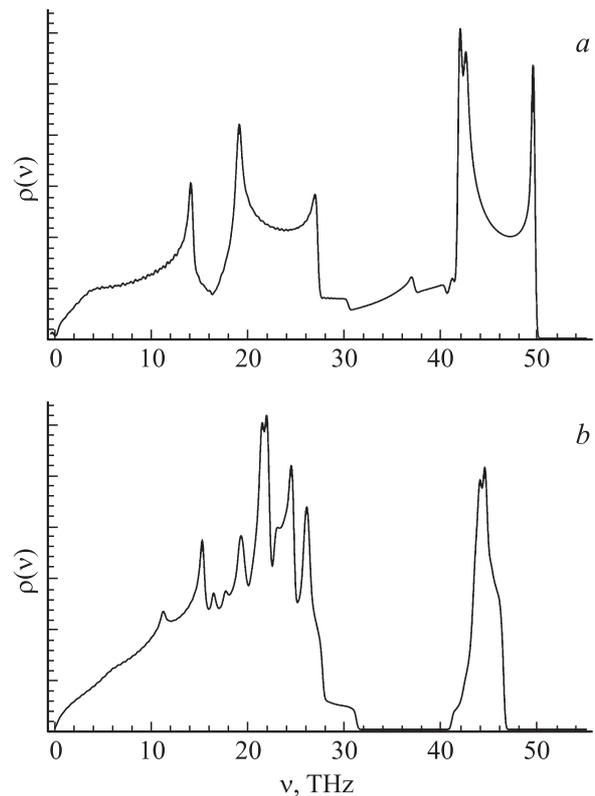
На рис. 2, *a* представлена найденная нами из *ab initio* расчетов плотность фононных состояний  $\rho(\nu)$  для недеформированного графена, а на рис. 2, *b* эта функция приведена для случая двадцатипроцентного упругого растяжения листа графена вдоль оси  $X$  ( $\epsilon_{xx} = 0.2$ ). Маленькая деформация сжатия вдоль оси  $Y$  ( $\epsilon_{yy} = -0.0244$ ) обусловлена эффектом Пуассона с коэффициентом, равным 0.122. Из этих рисунков видно, что спектр недеформированного графена является бесщелевым, а под действием указанной деформации в его спектре появляется щель в интервале частот от 32 до 40 ТГц.

### 4. Свойства ДБ в графене

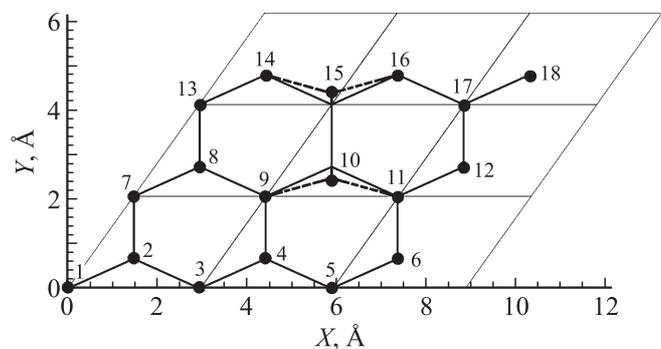
На рис. 3 показана использованная нами расчетная ячейка графена, содержащая 18 атомов, в которую входит девять примитивных ячеек, расположенных по три вдоль векторов трансляций  $\mathbf{r}_1$  и  $\mathbf{r}_2$ . На эту ячейку накладываются периодические граничные условия Борна–Кармана.

Для анализа влияния размера расчетной ячейки на точность получаемых результатов были проведены тестовые расчеты для большей ячейки, включающей 32 атома и состоящей из 16 примитивных ячеек.

Для возбуждения ДБ в деформированном графене два соседних атома углерода с номерами 10 и 15



**Рис. 2.** Плотность фононных состояний графена: без деформации (*a*) и под действием одноосного двадцатипроцентного растяжения вдоль оси  $X$  ( $\epsilon_{xx} = 0.2$ ), которое индуцирует щель в фононном спектре (*b*).



**Рис. 3.** Расчетная ячейка графена, содержащая  $3 \times 3$  ромбических примитивных ячеек и 18 атомов углерода. Цифрами обозначены номера атомов.

(составляющие ядро ДБ) в начальный момент времени выводятся из положений равновесия вдоль оси  $Y$  в противоположных направлениях на равную по абсолютному значению величину  $\delta$ . Остальные атомы в этот момент времени находятся в положениях равновесия, причем начальные скорости всех атомов решетки равны нулю. В силу симметрии начальных условий центр ДБ оказывается посередине между парой атомов 10 и 15.

Численное моделирование динамики решетки на основе теории функционала плотности показало, что на-

чальные отклонения атомов с номерами 10 и 15 можно подобрать таким образом, что в системе возникнет долгоживущий квазибризер, который далее для краткости будем называть просто ДБ. Существенно, что этот динамический объект оказывается сильно локализованным: по мере удаления от ядра ДБ амплитуды колебаний атомов быстро уменьшаются. Высокая степень пространственной локализации ДБ оправдывает использование малых расчетных ячеек (заметим, что использование периодических граничных условий фактически порождает массив периодически расположенных ДБ).

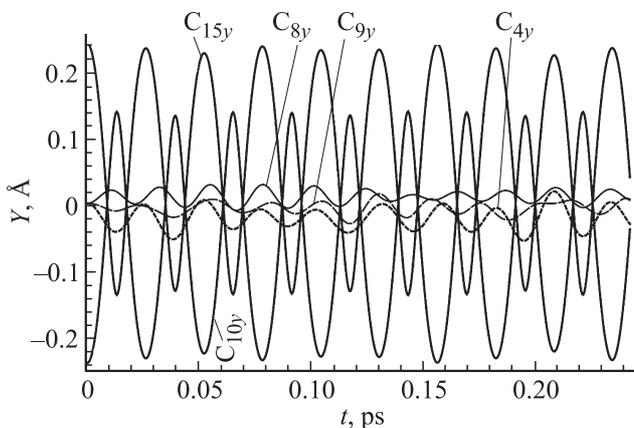
На рис. 4 показана временная эволюция  $Y$ -смещений атомов решетки, имеющих существенно отличные от нуля амплитуды колебаний для ДБ, возбужденного с  $\delta = 0.24 \text{ \AA}$ .

Из соображений симметрии ясно, что атомы ядра ДБ (они имеют номера 10 и 15) совершают колебания строго вдоль оси  $Y$ , в то время как у остальных атомов не равных нулю как  $Y$ -, так и  $X$ -компоненты перемещений (вдоль перпендикулярной плоскости листа графена оси  $Z$  колебаний не возникает).

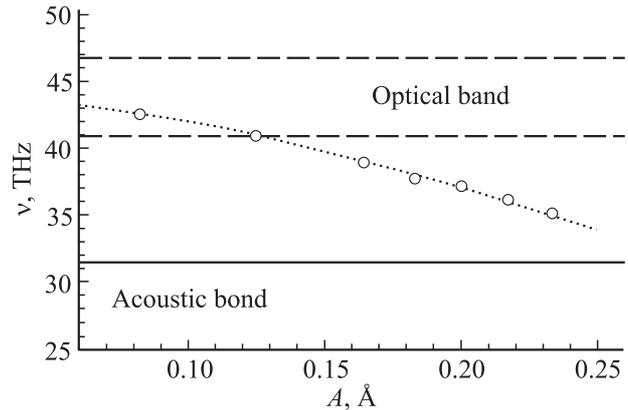
Время жизни построенных описанным выше способом ДБ составляет более ста периодов. Очевидно, что с помощью описанного в [44] метода уточнения начального профиля квазибризеров можно построить для графена более точные и более долгоживущие щелевые дискретные бризеры, как это было сделано в указанной выше работе для ДБ в графене.

Варьируя параметр начальных условий  $\delta$ , можно изменять амплитуду возбуждаемого ДБ. Будем определять амплитуду бризера по колебаниям одного из атомов его ядра в  $Y$ -направлении, усредняя по первым десяти периодам значения  $A = (y_{\max} - y_{\min})/2$  (здесь  $y_{\min}$  и  $y_{\max}$  — соответственно максимальное и минимальное значения координаты атома при его колебаниях вдоль оси  $Y$ ).

На рис. 5 представлена зависимость частоты от амплитуды  $\nu(A)$  для щелевых ДБ в деформированном графене



**Рис. 4.** Динамика атомов графена в окрестности ДБ, возбужденного с  $\delta = 0.24 \text{ \AA}$ . Показаны зависимости  $Y$ -компонент перемещения как функции времени для атомов с номерами 10, 15, 8, 9 и 4.



**Рис. 5.** Зависимость частоты ДБ от амплитуды  $\nu(A)$  в деформированном графене ( $\epsilon_{xx} = 0.2$ ,  $\epsilon_{yy} = -0.0244$ ). Точками показаны экспериментальные данные, пунктирная линия соответствует функции (2) с параметрами, подобранными для аппроксимации экспериментальных данных.

при  $\delta \in [0.18, 0.45] \text{ \AA}$  для случая одноосного двадцати-процентного растяжения вдоль оси  $X$  (направление „зигзаг“). Из этого рисунка видно, что функция  $\nu(A)$  монотонно убывает с увеличением амплитуды, что свидетельствует о мягком типе нелинейности исследованных нами ДБ. Время жизни этих сильно локализованных динамических объектов (точными бризерами они не являются!) существенным образом зависит от того, лежит ли соответствующий участок кривой  $\nu(A)$  внутри щели фонового спектра или он выходит в область оптической зоны. В первом случае оно достигает сотен периодов колебаний, а во втором не превосходит двух-трех десятков периодов, что связано с постоянной потерей энергии на излучение фононов.

Сравнивая полученные в настоящей работе данные с результатами расчетов методами молекулярной динамики, опубликованными ранее [23], отметим, что они находятся в качественном согласии. Оба метода позволяют получить дискретные бризеры, сильно локализованные на двух атомах углерода, частота которых лежит в щели фонового спектра и монотонно убывает с ростом амплитуды ДБ. Напомним, что для щелевых бризеров в графене *ab initio* расчеты [27] дали качественно иную зависимость  $\nu(A)$  по сравнению с результатами, полученными методом молекулярной динамики [28].

График функции  $\nu(A)$  для деформированного графена, изображенный на рис. 5, весьма напоминает соответствующий график для щелевых дискретных бризеров в графене, который представлен в нашей работе [27] на рис. 3: в щели фонового спектра оба этих графика являются практически прямолинейными.<sup>2</sup>

<sup>2</sup> Заметим, что первый из этих графиков соответствует пространственно локализованным колебаниям атомов в плоскости графена, а второй — локализованным колебаниям, которые происходят в перпендикулярном углеродной плоскости  $Z$ -направлении (возбуждение таких квазибризеров достигалось за счет смещения вдоль оси  $Z$  одного из атомов водорода).

Для выяснения физического смысла такого рода функции в работе [27] была предложена модель, представляющая собой классический одномерный осциллятор с потенциалом Морзе, параметры которого определялись по данным *ab initio* расчетов. Аналогичная процедура была нами осуществлена и для функции  $v(A)$ , характеризующей ДБ в деформированном графене. Соответствующий „эффективный“ осциллятор Морзе определяется уравнениями

$$m\ddot{y} = -\frac{\partial U}{\partial y}, \quad U(y) = D(1 - e^{-\alpha y})^2,$$

где  $m$  — приведенная масса двух атомов углерода,  $m = 9.965 \cdot 10^{-27}$  kg,  $\alpha = 1.502 \text{ \AA}^{-1}$ ,  $D = 10.466$  eV (величина  $D$  определяет глубину потенциальной ямы, а  $\alpha$  — ее полуширину, равную  $\frac{1.76275}{\alpha} = 1.1736 \text{ \AA}$ ).

Для осциллятора Морзе можно найти аналитический вид функции  $v(A)$

$$v(A) = \frac{\alpha}{\pi} \sqrt{\frac{D}{2m}} \operatorname{sech}(\alpha A). \quad (2)$$

На рис. 5 функция  $v(A)$ , задаваемая формулой (2), изображена пунктирной линией (при этом полагалось, что  $A = (y_{\max} - y_{\min})/2$ ).

Возможность приведенной выше интерпретации бризерных колебаний в деформированном графене связана с их сильной пространственной локализацией в окрестности ядра бризера, поскольку это ядро, состоящее из двух атомов, вносит основной вклад в энергию ДБ.

## 5. Заключение

В настоящей работе с помощью численного моделирования методами теории функционала плотности найдены щелевые дискретные бризеры (точнее, квазibriзеры) в монослойном листе графена, одноосно деформированном вдоль оси  $X$  (направление „зигзаг“). Атомные колебания в построенных ДБ поляризованы вдоль перпендикулярной оси  $Y$  (направление „кресло“). Эти бризеры демонстрируют мягкий тип нелинейности, а зависимость частоты от амплитуды  $v(A)$  представляет собой практически прямолинейный отрезок, расположенный в щели фононного спектра.

Исследованные нами ДБ являются сильно локализованными динамическими объектами: существенные амплитуды колебаний имеют лишь два ближайших друг к другу атома углерода, лежащие на оси  $Y$  и образующие ядро бризера, а окружающие их атомы совершают колебания со значительно меньшими амплитудами. Атомы, образующие ядро, колеблются в противофазе, и эти колебания можно аппроксимировать осцилляциями одного нелинейного осциллятора с потенциалом Морзе.

Несмотря на то что возбуждение таких бризеров достигалось лишь за счет начального смещения атомов ядра на одинаковые расстояния в противоположных направлениях, полученные квазibriзеры оказываются

достаточно близкими к точным бризерам и имеют время жизни более ста периодов.

Существенно, что найденные щелевые бризеры поляризованы перпендикулярно оси деформации листа графена. Однако следует иметь в виду, что щель в его фононном спектре появляется не только при деформации вдоль направления „зигзаг“ (ось  $X$ ), но и вдоль направления „кресло“ (ось  $Y$ ). Дискретные бризеры в такой щели, построенные на основе возбуждения лишь двух ближайших атомов на оси  $Y$ , т.е. имеющие поляризацию вдоль направления одноосной деформации, нами обнаружены не были. Более того, в рамках *ab initio* расчетов нам не удалось обнаружить бризеры с жестким типом нелинейности, поляризованные вдоль оси  $Y$  (направление „кресла“), ни при одноосном растяжении вдоль оси  $X$ , ни при одноосном растяжении вдоль оси  $Y$  (бризеры такого типа были найдены в работе [38] с помощью МТ-модели с потенциалом Бреннера).

В связи с этим заметим, что свойства щелевых ДБ, исследованных в настоящей работе на основе методов теории функционала плотности, качественно согласуются с ранее найденными в [23] с помощью методов молекулярной динамики на основе модели с потенциалом из работы [43]. Это кардинальным образом отличается от описанного в [27] расхождения между дискретными бризерами в графене, полученными в [28] с использованием потенциала AIREBO, и *ab initio* расчетами. Упомянутое согласие свидетельствует о достаточной точности потенциала [43] при исследовании бризерных колебаний в графене.

В настоящей работе, как и в [23,38], рассматривались лишь бризероподобные объекты, которые возбуждались в графене за счет смещения навстречу друг другу ближайших атомов углерода. По-видимому, в гексагональной решетке графена можно возбудить ДБ и многих других типов. В связи с этим заметим, что в работе [46] были исследованы все различные по симметрии типы дискретных бризеров в плоской квадратной решетке. Аналогичная проблема для гексагональной решетки может быть также решена с помощью развитых в [46] теоретико-групповых методов.

Для всех квазibriзеров, которые могут быть найдены в графене при  $T = 0$  K, можно построить машинно-точные ДБ в соответствии с описанными в [44] численными методами. Влияние на динамику ДБ отличных от нуля температур требует отдельного исследования (оно также может быть осуществлено в рамках обсуждаемого *ab initio* подхода).

При моделировании дискретных бризеров с помощью методов теории функционала плотности явным образом учитывается изменение поляризации электронных оболочек атомов в процессе бризерных колебаний, которое приводит к соответствующим колебаниям дипольного момента системы. Исследование динамики этого момента позволяет учесть влияние на бризер переменного электрического поля, что в свою очередь может привести к созданию эффективного метода возбуждения ДБ.

В заключение отметим, что *ab initio* расчеты при исследовании свойств ДБ в реальных кристаллах все еще чрезвычайно редки, и их следует расширять, поскольку результаты, получаемые методами молекулярной динамики, зависят, и порой существенно, от используемых эмпирических межатомных потенциалов.

## Список литературы

- [1] А.А. Овчинников. ЖЭТФ **51**, 263 (1969).
- [2] А.С. Долгов. ФТТ **28**, 907 (1986).
- [3] A. Sievers, S. Takeno. Phys. Rev. Lett. **61**, 970 (1988).
- [4] S. Flach, A. Gorbach. Phys. Rep. **467**, 1 (2007).
- [5] P. Binder, D. Abraimov, A.V. Ustinov, S. Flach, Y. Zolotaryuk. Phys. Rev. Lett. **84**, 745 (2000).
- [6] R. Morandotti, U. Peschel, J.S. Aitchison, H.S. Eisenberg, Y. Silberberg. Phys. Rev. Lett. **83**, 2726 (1999).
- [7] M. Sato, B.E. Hubbard, A. Sievers. Rev. Mod. Phys. **78**, 137 (2006).
- [8] N. Boechler, G. Theocharis, S. Job, P.G. Kevrekidis, M.A. Porter, C. Daraio. Phys. Rev. Lett. **104**, 244 302 (2010).
- [9] B.I. Swanson, J.A. Brozik, S.P. Love, G.F. Strouse, A.P. Shreve, A.R. Bishop, W.-Z. Wang, M.I. Salkola. Phys. Rev. Lett. **82**, 3288 (1999).
- [10] G. Kalosakas, A.R. Bishop, A.P. Shreve. Phys. Rev. B **66**, 094 303 (2002).
- [11] D.K. Campbell, S. Flach, Y.S. Kivshar. Phys. Today **57**, 43 (2004).
- [12] M.E. Manley, A. Alatas, F. Trouw, B.M. Leu, Y.W. Lynn, Y. Chen, W.L. Hults. Phys. Rev. B **77**, 214 305 (2008).
- [13] M.E. Manley, A.J. Sievers, J.W. Lynn, S.A. Kiselev, N.I. Agladze, Y. Chen, A. Llobet, A. Alatas. Phys. Rev. B **79**, 134 304 (2009).
- [14] M. Kempa, P. Ondrejovic, P. Bourges, Y. Ollivier, S. Rols, Y. Kuldā, S. Marguerou, Y. Hlinka. J. Phys.: Condens. Matter **25**, 055 403 (2013).
- [15] A.J. Sievers, M. Sato, J.B. Page, T. Rossler. Phys. Rev. B **88**, 104 305 (2013).
- [16] S.A. Kiselev, A.J. Sievers. Phys. Rev. B **55**, 5755 (1997).
- [17] L.Z. Khadeeva, S.V. Dmitriev. Phys. Rev. B **81**, 214 306 (2010).
- [18] Ю.А. Баймова, С.В. Дмитриев, А.А. Кистанов, А.И. Потекаев. Изв. вузов. Физика **56**, 2, 60 (2013).
- [19] M. Haas, V. Hizhnyakov, A. Shelkan, M. Klopov, A.Y. Sievers. Phys. Rev. B **84**, 144 303 (2011).
- [20] R.T. Murzaev, A.A. Kistanov, V.I. Dubinko, D.A. Terentyev, S.V. Dmitriev. Comput. Mater. Sci. **98**, 88 (2015).
- [21] T. Dauxois, A. Litvak-Hinenzon, R. MacKay, A. Spanoudaki. Adv. Ser. Nonlinear Dynamics **22**, 329 (2000).
- [22] N.N. Medvedev, M.D. Starostenkov, M.E. Manley. J. Appl. Phys. **114**, 213 506 (2013).
- [23] Л.З. Хадеева, С.В. Дмитриев, Ю.С. Кившарь. Письма в ЖЭТФ **97**, 7, 580 (2011).
- [24] Е.А. Корзникова, Ю.А. Баймова, С.В. Дмитриев. Europhys. Lett. **102**, 60 004 (2013).
- [25] J.A. Baimova, S.V. Dmitriev, K. Zhou. Europhys. Lett. **100**, 36 005 (2012).
- [26] N.K. Voulgarakis, G. Hadjisavvas, P.C. Kelires, G.P. Tsironis. Phys. Rev. B **69**, 113 201 (2004).
- [27] G.M. Chechin, S.V. Dmitriev, I.P. Lobzenko, D.S. Ryabov. Phys. Rev. B **90**, 045 432 (2014).
- [28] B. Liu, J.A. Baimova, S.V. Dmitriev, X. Wang, H. Zhu, K. Zhou. J. Phys. D **46**, 305 302 (2013).
- [29] W. Kohn. Nobel Lecture. Rev. Mod. Phys. **71**, 5, 1253 (1999).
- [30] X. Gonze, B. Amadon, P.-M. Anglade, J.-M. Beuken, F. Bottin, P. Boulanger, F. Bruneval, D. Caliste, R. Caracas, M. Côte, T. Deutsch, L. Genovese, Ph. Ghosez, M. Giantomassi, S. Goedecker, D.R. Hamann, P. Hermet, F. Jollet, G. Jomard, S. Leroux, M. Mancini, S. Mazevet, M.J.T. Oliveira, G. Onida, Y. Pouillon, T. Rangel, G.-M. Rignanese, D. Sangalli, R. Shaltaf, M. Torrent, M.J. Verstraete, G. Zarah, J.W. Zwanziger. Comput. Phys. Commun. **180**, 2582 (2009).
- [31] www.abinit.org
- [32] Z.H. Ni, T. Yu, Y.H. Lu, Y.Y. Wang, Y.P. Feng, Z.X. Shen. ACS Nano **2**, 2301 (2008).
- [33] R.M. Ribeiro, V.M. Pereira, N.M.R. Peres, P.R. Briddon, A.H. Castro Neto. New J. Phys., **11**, 115 002 (2009).
- [34] M. Mohr, K. Papagelis, J. Maultzsch, C. Thomsen. Phys. Rev. B **80**, 205 410 (2009).
- [35] F. Liu, P. Ming, L. Li. Phys. Rev. B **76**, 064 120 (2007).
- [36] J.A. Baimova, S.V. Dmitriev, K. Zhou, A.V. Savin. Phys. Rev. B **86**, 035 427 (2012).
- [37] Y. Yamayose, Y. Kinoshita, Y. Doi, A. Nakatani, T. Kitamura. Europhys. Lett. **80**, 40 008 (2007).
- [38] Y. Doi, A. Nakatani. J. Solid Mach. Mater. Eng. **6**, 71 (2012).
- [39] D.W. Brenner. Phys. Rev. B **42**, 9458 (1990).
- [40] J.L. Marin, S. Aubry. Nonlinearity **9**, 1501 (1996).
- [41] G.M. Chechin, G.S. Dzhelauhova, E.A. Mehonoshina. Phys. Rev. E **74**, 036 608 (2006).
- [42] G.M. Chechin, G.S. Dzhelauhova. J. Sound Vib. **322**, 490 (2009).
- [43] A.V. Savin, Yu.S. Kivshar, B. Hu. Phys. Rev. B **82**, 195 422 (2010).
- [44] G.M. Chechin, I.P. Lobzenko. Lett. Mater. **4**, 4, 226 (2014).
- [45] A.H. Castro Neto, F. Guinea, N.M.R. Peres, K.S. Novoselov, A.K. Geim. Rev. Mod. Phys. **81**, 109 (2009).
- [46] G.S. Bezuglova, G.M. Chechin, P.P. Goncharov. Phys. Rev. E **84**, 036 606 (2011).