

Основное состояние модели Френкеля–Конторовой

© А.Ю. Бабушкин¹, А.К. Абкарян¹, Б.С. Добронец¹, В.С. Красиков¹, А.Н. Филонов²

¹ Сибирский федеральный университет,
Институт космических и информационных технологий,
Красноярск, Россия

² Институт цветных металлов им. М.И. Калинина,
Красноярск, Россия

E-mail: abab@front.ru

(Поступила в Редакцию 2 сентября 2015 г.

В окончательной редакции 25 февраля 2016 г.)

С использованием симметричного алгоритма численного моделирования проверяется континуальное приближение основного состояния дискретной модели Френкеля–Конторовой. Обнаружен „эффект калейдоскопа“: кривые зависимостей относительного растяжения N -атомной цепочки с увеличением N меняются периодически. Методом „выделенных каналов“ анализируются лестницы структурных переходов ($N \gg 1$) с аппроксимацией ($N = \infty$). Построены изображения соразмерных и несоизмерных структур. Переходы соразмерная–несоразмерная фаза скачкообразны.

1. Введение

Базовым элементом рассматриваемых далее моделей является модель (цепочка) Гука¹ (МГ). В [1] в континуальном приближении описано однодислокационное решение модели Френкеля–Конторовой² (ФК) для $\beta = 1$ и $N = \infty$ с очевидным основным состоянием. Если периоды цепочки и потенциала не совпадают, то возникают вопросы относительно внутреннего содержания и характеристик лестниц структурных переходов основного состояния. Многие вопросы, обозначенные в [2–12], выходят за рамки континуального приближения. На них до сих пор не получено убедительных ответов.

Одновременно с ФК-моделью [2,3] изучалась модель Гука³ (РМГ) с внешним прямоугоньно-периодическим потенциалом [4–9]. Оказалось, что решения для основного состояния РМГ имеют более простой вид, чем решения ФК-модели [3]. Для РМГ в континуальном приближении получен ряд важных аналитических результатов, но остались сомнения в правомерности самого приближения.

Получить точные решения дискретных моделей позволили современная компьютерная техника и алгоритм численного расчета общего вида [10,11]. Эксперименты показали хорошее совпадение [11] с теоретическими предсказаниями [4–9]. Но для ФК-модели совпали только области основной соразмерной фазы, в области несоизмерной фазы совпадений с [3] не обнаружено. ФК-модель и РМГ имеют общую историю и формулировку, поэтому логично предположить, что в алгоритме [10,11]

¹ Модель Гука — упруго-периодическая цепочка атомов с периодом β .

² Модель Френкеля–Конторовой — N -атомная цепочка Гука, погруженная во внешний моногармонический потенциал с периодом 1 и амплитудой V_0 .

³ Развитая модель Гука — N -атомная цепочка Гука, погруженная во внешний мультигармонический потенциал с периодом 1 и амплитудой V_0 .

есть неточность, которую следует устранить с помощью независимого алгоритма.

В [11] при использовании общего, хотя и трудоемкого алгоритма численного расчета обнаружен следующий экспериментальный факт: сумма координат противоположных атомов цепочки в основном состоянии равняется целому числу. Это указывает на P -инвариантность основного состояния и свидетельствует о фиксированном положении центра масс цепочки. Возникла идея включить найденную симметрию в новый алгоритм расчета и проверить результаты [11].

Описание симметричного алгоритма начнем с МГ. Положение центра масс МГ-цепочки зависит от четности N . Если N нечетное ($N = 2K + 1$), то центр масс совпадает со средним атомом цепочки. Если N четное ($N = 2K$), то центр масс лежит посередине между двумя центральными атомами цепочки. Таким образом, вся цепочка в основном состоянии разбивается на две P -инвариантно-тождественные половинки.

Решаем вопрос, в какой точке внешнего потенциала находится центр МГ-цепочки. Для этого погружаем ее в симметричный моно- или мультигармонический потенциал $V(x)$: $V(-x) = V(x)$, $V(x + 1) = V(x)$, $V(0) = -V_0$. Выбранный потенциал имеет две точки на периоде для осей четной симметрии: $x = 0$ и 0.5 , так как $V(-x) = V(x)$ и $V(x + 0.5) = V(-x + 0.5)$. Поэтому в основном состоянии центр масс цепочки может находиться только в одной из этих двух точек.

2. Основное состояние ФК-модели и РМГ. Симметричный алгоритм численного моделирования

Переменные [11] удобно заменить на более естественные, а положения атомов в пространстве — задавать вектором $\mathbf{X} = (x_{-K}, \dots, x_K) = \mathbf{X}_K\{x_i\}$, где x_i — координата i -го атома. Потенциальная энергия ФК-модели

и РМГ, в которых упругая константа выбрана равной единице, имеет вид

$$U = \sum_{i=-K}^{K-1} \left[\frac{1}{2} (x_{i+1} - x_i - \beta)^2 + V(x_i) \right] + V(x_K). \quad (1)$$

Легко видеть, что в основном состоянии $U(\beta)$ — периодическая функция с периодом 1. С учетом P -симметрии $x_{-i} = -x_i$, $U(\beta)$ — четная функция относительно $\beta = 0$ и $\beta = 0.5$. Параметрами являются: 1) N — число атомов в цепочке; 2) четность числа N ; 3) амплитуда V_0 потенциала $V(x)$; 4) количество гармоник потенциала $V(x)$; 5) β — период и параметр несоизмерности цепочки, лежащий в интервале $[0, 0.5]$. В обозначениях [11] δ соответствует β из данной работы.

Основное состояние описывается зависимостями относительного удлинения x_K/K и потенциальной энергии U от β . Известно [11], что характеристики этих зависимостей являются функцией критического значения параметра несоизмерности β_c :

$$\beta_c = \int_0^1 \sqrt{2(V(\phi) - V_{min})} d\phi. \quad (2)$$

Вводим укороченный вектор $\tilde{\mathbf{X}} = (x_0, x_1, x_2, \dots, x_K) = \{x_i\}$, $i = 0, \dots, K$ и функцию U_0

$$U_0 = \sum_{i=1}^K \left[(x_i - x_{i-1})^2 + 2V(x_i) \right] - 2\beta x_K. \quad (3)$$

Для нечетных N ($K \approx \infty$) координата центра масс МГ для всех β $x_C = 0$:

$$\tilde{\mathbf{X}} = (0, x_1, x_2, \dots, x_K), \quad U = U_0 + V(0). \quad (4)$$

Условие равновесия $U'_{x_i} = 0$ приводит к системе нелинейных уравнений, позволяющих выразить вектор $\tilde{\mathbf{X}}$ и потенциальную энергию U через x_1 :

$$\begin{aligned} 2x_i - x_{i+1} - x_{i-1} + V'(x_i) &= 0, & 0 < i < K, \\ x_K - x_{K-1} - \beta + V'(x_K) &= 0, & i = K. \end{aligned} \quad (5)$$

Из (3)–(5) находим β и U как функции x_1

$$\beta = x_K - x_{K-1} + V'(x_K) = \beta(x_1), \quad U = U(x_1). \quad (6)$$

Поиск значения x_1 с абсолютным минимумом потенциальной энергии $U(\tilde{x}_1) = \min$ при условии $\beta(\tilde{x}_1) = \beta$ проводится на отрезке $[0, 0.5]$. Уравнения (5), (6) являются базовыми при построении графиков основного состояния.

Для четных N ($K \approx \infty$) положение центра масс цепочки меняется в зависимости от параметра β . Если $-1/2 + 2n \leq \beta \leq 1/2 + 2n$, $n = 0, 1, \dots$, то $x_C = 0$. Центр масс переходит в положение $x_C = 0.5$, если $1/2 + 2n \leq \beta \leq 3/2 + 2n$. Ввиду того что для значений β , находящихся в интервале $[0, 0.5]$, $x_C = 0$, в (4) следует сделать замену $x_0 = -x_1$: $\tilde{\mathbf{X}} = (-x_1, x_1, x_2, \dots, x_K)$ и $U = U_0 - 2x_1^2$ с соответствующими уравнениями равновесия (5), (6).

Заметим, что чем меньше K , тем больший энергетический вклад в основное состояние вносят граничные атомы с особыми уравнениями равновесия (5). Поэтому для малых K необходимо учесть возможность перескоков центра масс цепочки с изменением β . Для этого в численный алгоритм добавляется вторая ось симметрии $x = 0.5$, что увеличивает в 2 раза общий объем вычислений.

Выделим теоретические, гипотетические, экспериментальные результаты, ранее полученные в [2–9], проверке которых посвящена настоящая работа. Центральным утверждением всех теорий несоизмерной фазы ФК-модели и РМГ в континуальном приближении является следующее: при $\beta < \beta_c$ $x_K < 1$; при $\beta > \beta_c$ x_K с ростом β быстро растет. Поэтому в диапазоне значений β в первую очередь следует определить точку $\beta = \beta_c$, и тогда диапазон значений разбивается на два участка: $[0, 0.5] = [0, \beta] + [\beta_c, 0.5]$.

В дальнейшем появились гипотезы [3–9], что вблизи некоторых точек с дробно-рациональными значениями $\beta = m/n$ на зависимостях $(x_K/K)(\beta)$ существуют дополнительные горизонтальные отрезки, связанные с выделением подрешеток в системах ФК-модели и РМГ. Например, если $\beta = 1/2$, то энергия U РМГ ($N = \infty$) с двумя подрешетками имеет вид

$$\begin{aligned} U &= \left[2 \left(x_1 - \frac{1}{4} \right)^2 + V(x_1) \right] N, \\ 4x_1 - 1 + V'(x) &= 0. \end{aligned} \quad (7)$$

Если $\beta = 1/3$, то для системы с тремя подрешетками имеем

$$\begin{aligned} U &= \frac{1}{3} \left[V(0) + 2V(x_1) + 3 \left(x_1 - \frac{1}{3} \right)^2 \right] N, \\ 3x_1 - 1 + V'(x_1) &= 0. \end{aligned} \quad (8)$$

В [3] для ФК-модели приведена аналитическая оценка размера $\beta_{c,2}$ горизонтального отрезка на кривой $(x_K/K)(\beta)$ ($K = \infty$) вблизи $\beta = 1/2$:

$$\beta_{c,2} \approx \beta_c^2. \quad (9)$$

Для РМГ [4] оценка $\beta_{c,2}$ сильно отличается от (9)

$$\beta_{c,2} \approx \beta_c / \sqrt{2}. \quad (10)$$

Формулы, аналогичные (9), (10), можно получить и для общего случая $\beta = m/n$. Однако большое отличие ФК-модели от РМГ сохраняется по причине высокой симметричности потенциала ФК-модели $V''(x) = -V(x)$. Из-за этой симметрии на зависимостях $U(\beta)$ значения локальных минимумов в точках $\beta = 1/2$, $\beta = 1/3$ и т.д. имеют следующий порядок малости по V_0 в сравнении с аналогичными минимумами РМГ. Это обстоятельство делает ФК-модель очень интересным объектом для исследования.

Общая цель изучения ФК-модели и РМГ — построение зависимостей $(x_K/K)(\beta)$ и $U(\beta)$ на базе P -симметричных решений уравнений (5), (6), обеспечивающих абсо-

лютный минимум потенциальной энергии (1). Попытки экспериментальных проверок перечисленных выше результатов были предприняты в [10,11]. Как оказалось, экспериментальные значения β_c с большой степенью точности совпадают с (2). Все графики основного состояния РМГ также удовлетворительно соответствуют теории. Остался единственный непонятный момент — практически полное отсутствие на графиках основного состояния ФК-модели ступеней, так как полученное в [11] экспериментальное значение $\beta_{c,2} \ll \beta_c^2$. В связи с этим возникла задача выяснить причину расхождения теории с экспериментом и устранить ее.

Первой проверке новым алгоритмом подверглась РМГ. Оказалось, что ее график из пятидесяти точек, построенный с помощью общего алгоритма [10,11], удовлетворительно совпадает с результатами для симметричного алгоритма (5), (6). Но последним за несколько секунд в автоматическом режиме получено пятьсот точек РМГ ($N = 31$, $V_0 = 0.01$). В [11] изучение РМГ-систем завершается следующим выводом: в численных экспериментах не обнаружено существенных отклонений точных решений от континуального приближения [4–9].

Зависимости, полученные в ФК-модели, имеют лестничный вид (рис. 1), но многое в характеристиках лестниц оставалось неизвестным: количество и длины ступеней, их внутренняя природа, расположение, форма и т.д. Благодаря исследованиям [3,11] надежно установлено, что параметр несоизмерности $\beta_c = 4\sqrt{V_0}/\pi \approx 1.27\sqrt{V_0}$ играет фундаментальную роль в описании основных состояний ФК-модели.

Из сравнения рис. 1 с графиком РМГ [11] ($V_0 = 0.01$) следует неприменимость простой интерпретации лестниц ФК-модели, так как размеры ступеней на рис. 1 почти в 10 раз меньше, чем полученные в РМГ. В дальнейшем выяснилось, что эти размеры пропорциональны V_0 , поэтому удобно использовать амплитуду V_0 в качестве „увеличительного стекла“. Для максимально полного ответа на вопросы работ [2–12] потребовалось с

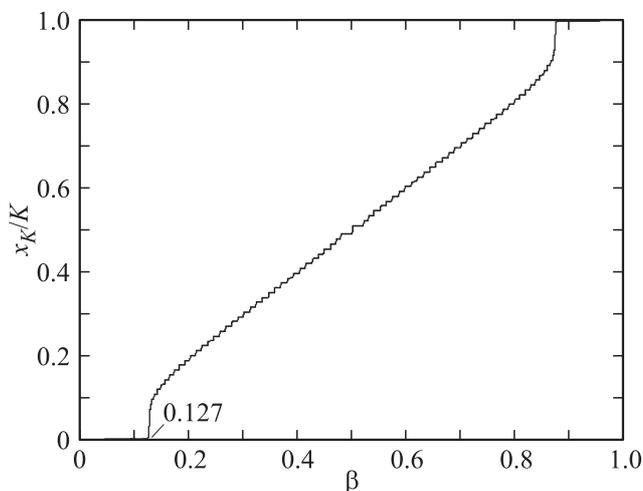


Рис. 1. Зависимость относительного удлинения x_K/K от β для основного состояния ФК-модели ($V_0 = 0.01$, $N = 89$).

помощью алгоритма, основанного на (5), (6), построить несколько десятков графиков и таблиц.

3. Основное состояние ФК-модели. „Эффект калейдоскопа“

Потенциальная энергия (1) для ФК-модели принимает вид

$$U = \sum_{i=-K}^{K-1} \left[\frac{1}{2} (x_{i+1} - x_i - \beta)^2 - V_0 \cos 2\pi x_i \right] - V_0 \cos 2\pi x_K, \quad (11)$$

где x_i — координата i -го атома цепочки, $i = -K, \dots, K$. Вектор $\mathbf{X}_K \{x_i\}$ определяется системой нелинейных уравнений

$$\begin{aligned} x_0 &= -x_1 (N = 2K), & x_0 &= 0 (N = 2K + 1); \\ x_{i+1} &= 2x_i - x_{i-1} + 2\pi V_0 \sin 2\pi x_i, & 0 < i < K; \\ \beta &= x_K - x_{K-1} + 2\pi V_0 \sin 2\pi x_K. \end{aligned} \quad (12)$$

Диапазон изменений β и x_1 — $[0, 0.5]$. Смена координаты центра масс цепочки с $x_C = 0$ на $x_C = 0.5$ означает замену в алгоритме вычислений V_0 на $-V_0$.

Теоретический анализ ФК-модели, ранее представлявшийся очень трудной задачей [2,12], значительно упростился после обнаружения в решениях основного состояния P -инвариантной симметрии [11], позволившей в автоматическом режиме с произвольной степенью точности находить $\mathbf{X}\{x_i\}$. Теоретически с помощью (5), (6) при использовании машинных вычислений можно построить графики основных состояний ФК-модели для любого N . Технически за разумное время это сделать затруднительно, если $N \gg 1$. Время построения начальных зависимостей ($K > 15$) занимает несколько секунд, но с увеличением K оно растет пропорционально q^K , где $q = 2 + 4\pi^2 V_0$ [11].

На первом этапе изучались основные состояния ФК-модели со следующими параметрами:

- 1) $V(x) = -V_0 \cos 2\pi x$, $V_0 = 0.04$ ($\beta_c = 0.255$, $\beta_c^2 = 0.065$);
- 2) шаг разбиения $\beta = 10^{-3}$;
- 3) N лежит в интервале [30,50].

На рис. 2,3 приведены результаты начального этапа исследований. Видна калейдоскопическая изменчивость картины основного состояния, которая ранее [2] рисовалась статической.

На рис. 2,3 хорошо различимы ступени соразмерных областей вблизи $\beta = 1/2$, $\beta = 1/3$. При этом исключена вероятность ошибки, например, случайным попаданием на локальный минимум возбужденного состояния, как это произошло ранее. Экспериментальные результаты [11] для ФК-модели в области $\beta > \beta_c$ следует признать ошибочными.

Укажем на причину ошибки. В численный алгоритм [10,11] заложено совпадение положений локальных минимумов кривых $U(\beta)$ с дробно-рациональными значениями β . На рис. 2,3 вблизи $\beta = 1/2$, $\beta = 1/3$ точки локальных минимумов $U(\beta)$ сильно смещены от рациональных значений из-за влияния граничного атома

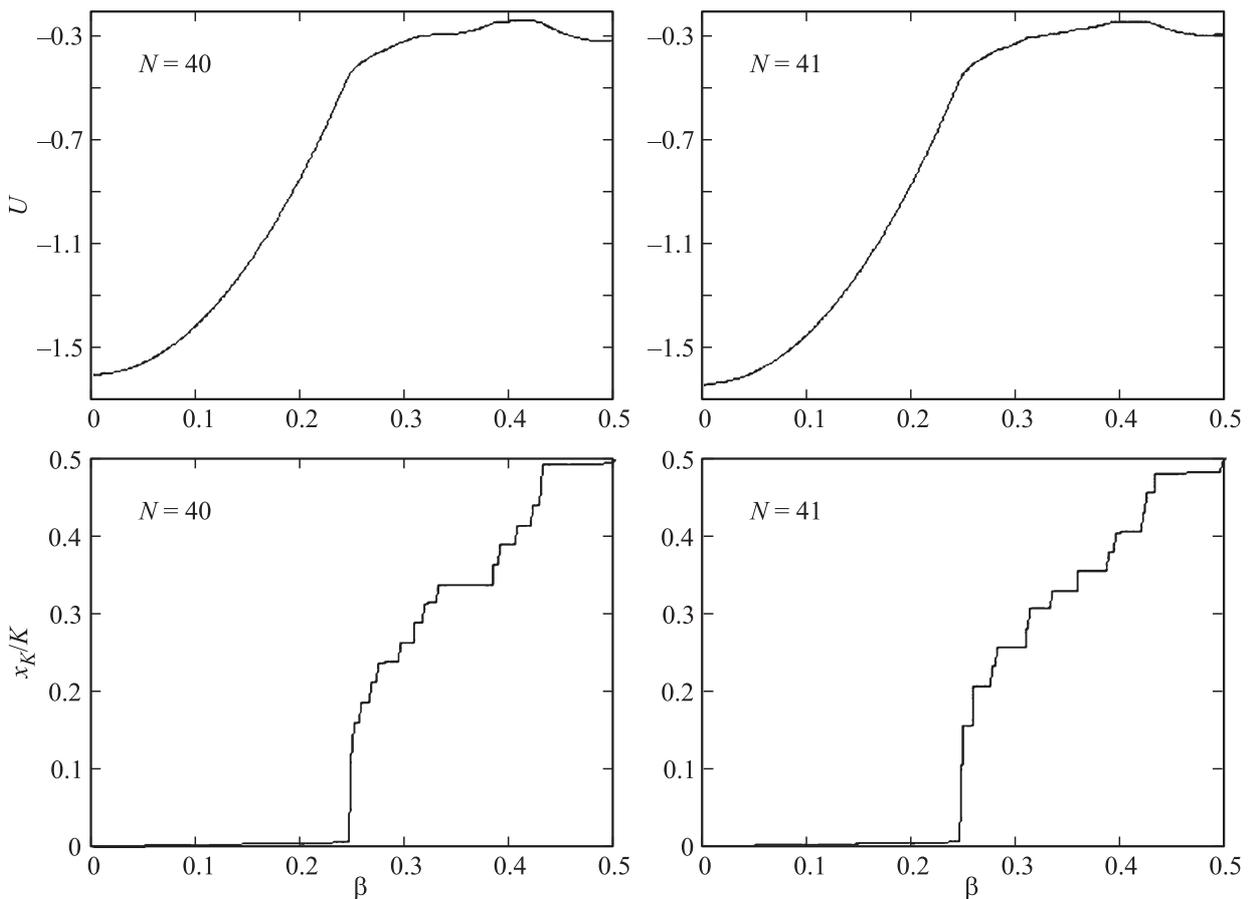


Рис. 2. Зависимости $(x_K/K)(\beta)$, $U(\beta)$ для основных состояний ФК-модели ($V_0 = 0.04$). $N < 100$.

и медленно стремятся к ним в пределе $N \rightarrow \infty$. Именно поэтому в [11] были пропущены все лестничные ступени. Локальный минимум в точке $\beta = 1/2$ на самом деле соответствовал минимуму не основного, а возбужденного состояния ФК-модели, основное состояние имеет в этой точке локальный максимум, если $K \neq \infty$. РМГ оказалась менее чувствительной к этой ошибке.

Ревизия [11] алгоритмом (5), (6) привела к устранению ошибочных утверждений для ФК-модели и открытию „эффекта калейдоскопа“ — периодического качественного изменения основного состояния при изменении длины цепочки вследствие дискретности и граничных условий. На исследуемом интервале через $\Delta N = 12$ наблюдались серии похожих кривых $(x_K/K)(\beta)$ (рис. 3) с повторяющимися качественными характеристиками — размерами горизонтальных отрезков вблизи дробно-рациональных β . В пределе $N = \infty$ полученные результаты качественно имеют вид

$$[0, 0.5] = [0, \tilde{\beta}_c] + \left[\tilde{\beta}_c, \frac{1}{3} - \tilde{\beta}_{c,3} \right] + \left[\frac{1}{3} - \tilde{\beta}_{c,3}, \frac{1}{3} + \tilde{\beta}_{c,3} \right] + \left[\frac{1}{3} + \tilde{\beta}_{c,3}, \frac{1}{2} - \tilde{\beta}_{c,2} \right] + \left[\frac{1}{2} - \tilde{\beta}_{c,2}, \frac{1}{2} \right], \quad (13)$$

где $[1/2 - \tilde{\beta}_{c,2}, 1/2]$ — горизонтальный отрезок зависимости $(x_K/K)(\beta)$ ($K = \infty$) вблизи $\beta = 1/2$,

$[1/3 - \tilde{\beta}_{c,3}, 1/3 + \tilde{\beta}_{c,3}]$ — горизонтальный отрезок вблизи $\beta = 1/3$ ($\tilde{\beta}_c = 0.246$, $\tilde{\beta}_{c,2} = 0.070$, $2\tilde{\beta}_{c,3} = 0.070$).

Перепишем (13) в цифровом виде

$$[0, 0.5] = [0, 0.246] + [0.246, 0.32] + [0.32, 0.39] + [0.39, 0.43] + [0.43, 0.5]. \quad (14)$$

По результатам начального этапа исследований имеем следующее.

1. На отрезке $[0, 0.246]$ на рис. 2, имеем длину β_c , находится основная соразмерная фаза, для которой $\beta \cdot 4^{-K} < x_1 < \beta \cdot 3^{-K}$, $x_K < \beta$. Отрезок $[0, 0.246]$ общий для всех зависимостей на рис. 2, 3, на остальных участках реализуется „калейдоскоп“ отличий.

2. Отрезки $[0.32, 0.39]$ и $[0.43, 0.5]$ с длинами β_c^2 отвечают соразмерным фазам с подрешетками для $\beta = 1/3$ (8) и $\beta = 1/2$ (7) соответственно.

3. Отрезки $[0.246, 0.32]$ и $[0.39, 0.43]$ — области несооразмерных фаз.

Для выяснения причины периодичности графиков основного состояния и периода их изменения $\Delta K = 6$ ищем решения уравнений (7), (8). Из (7) находим $x_1 = 0.191$, из (8) — $x_1 = 0.249$. Эти решения с хорошей степенью точности совпадают с экспериментальными значениями \bar{x}_1 : $\bar{x}_1 = 0.191$ вблизи $\beta = 1/2$ для четных N ,

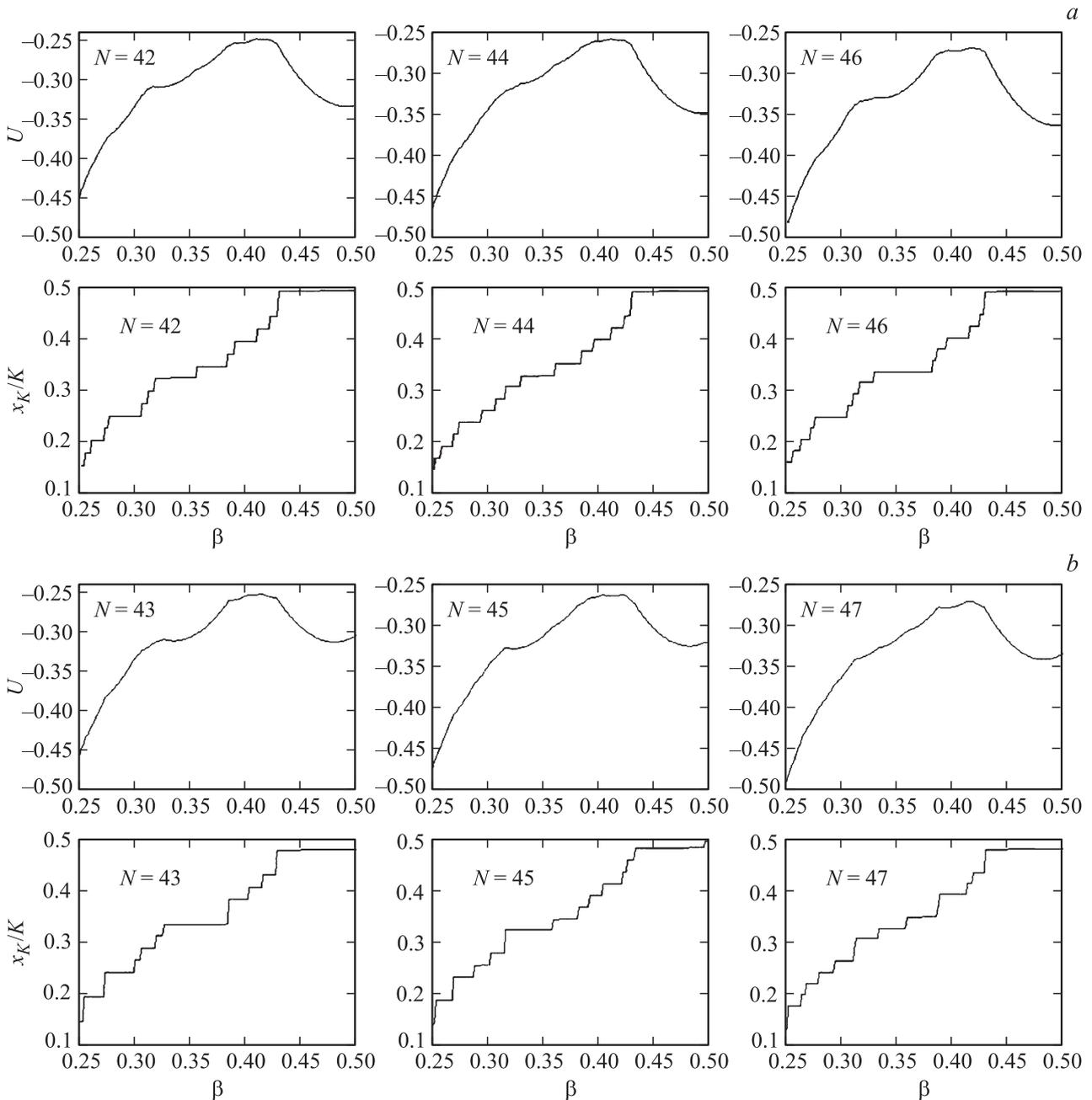


Рис. 3. Зависимости $(x_K/K)(\beta)$, $U(\beta)$ для лестниц ФК-модели ($N < 100$). $V_0 = 0.04$, $N = 2K$ (a) и $2K + 1$ (b).

$x_1 = 0.249$ вблизи $\beta = 1/2$ для нечетных N . Совпадения свидетельствуют о подрешетках в соответствующих областях. Особенно интересными оказались экспериментальные решения вблизи $\beta = 1/2$.

Для цепочек с нечетными K на отрезке β $[0.43, 0.5]$ реализуется структура с двумя подрешетками (7): $\tilde{x}_1 = 0.191$ (N четные); $[x_K] = (K - 1)/2$. При этом во всех, в том числе и в граничных, потенциальных ямах находится по два атома.

Для цепочек с четными K в граничных потенциальных ямах находится по одному атому и интервал $[0.43, 0.5]$ в (14) разбивается на два отрезка: $[0.43, 0.456]$

и $[0.456, 0.5]$. На отрезке $[0.456, 0.5]$ реализуется структура с двумя подрешетками: $\tilde{x}_1 = 0.18138$ (N четное), $[x_K] = K/2$, на отрезке $[0.43, 0.456]$ — однодислокационная структура с подрешетками: $\tilde{x}_1 = 0.19102$, $[x_K] = K/2 - 1$.

Таким образом, для четных K (N произвольной четности) верхняя ступень зависимости $(x_K/K)(\beta)$ на отрезке $[0.43, 0.5]$ расщепляется на две ступени с длинами 0.026 и 0.044, расстояние между которыми равно $1/K$.

Ясно, что механизм „эффекта калейдоскопа“ связан с дискретностью ФК-модели и граничными условиями. Предполагаем, что неспаренные атомы цепочки в

граничных потенциальных ямах создают поверхностное давление, уменьшающее интервал соразмерности. Аналогично можно объяснить расщепление ступени вблизи $\beta = 1/3$ на рис. 2, 3, которое зависит от степени наполненности граничных потенциальных ям частицами МГ-цепочки, причем в этом случае возможны три варианта заполнения граничных потенциальных ям: с одним, двумя или тремя атомами. Исходя из изложенного выше находим объяснение период „калейдоскопа“ графиков основных состояний $\Delta K = 6$ (т.е. $\Delta K = 3!$).

Обобщая результаты начального этапа исследований на произвольные значения V_0 , отметим следующее.

1. На зависимостях $(x_K/K)(\beta)$ ($K = \infty$) горизонтальные отрезки вблизи $\beta = 1/n$ ($n = 2, 3, \dots, n_{\max}$) имеют длины $2\beta_c^2/(n-1) \approx V_0$, а $n_{\max} = 1/\beta_c$.

2. Графики основного состояния ФК-модели при изменении K периодически меняются с периодом ΔK ($\Delta K = n_{\max}!$).

3. Различия основных состояний ФК-модели на периоде ΔK заключены в расщепляющихся ступенях зависимостей $(x_K/K)(\beta)$ и в различии несоизмерных фаз.

4. „Эффект калейдоскопа“ проявляется в основных состояниях РМГ, но носит менее выраженный, чем для ФК-модели, характер.

4. Соразмерные фазы ФК-модели

На рис. 4 изображены экспериментальные распределения атомов ($N = 87$) в соразмерных подрешетках вблизи $\beta = 1/2$ (a), $1/3$ (b) и $2/5$ (c).

Исходя из (7) плотность потенциальной энергии ФК-модели $U_{1/2}(N\infty)$ определяется уравнениями

$$2U_{1/2} = -2V_0 \cos 2\pi x_1 + \left(2x_1 - \frac{1}{2}\right)^2, \\ 4x_1 = 1 - 2\pi V_0 \sin 2\pi x_1. \quad (15)$$

Из (8) получаем для системы с тремя подрешетками

$$3U_1 = -V_0 2V_0 \cos 2\pi x_1 + 3 \left(x_1 - \frac{1}{3}\right)^2, \\ 3x_1 = 1 - 2\pi V_0 \sin 2\pi x_1. \quad (16)$$

Решения (15), (16) с большой точностью совпадают с экспериментальными величинами \tilde{x}_1 : имеет место их совпадение до 21-го знака после запятой. Предположив, что более мелким горизонтальным отрезкам $(x_K/K)(\beta)$ на рис. 2, 3 соответствуют дробно-рациональные значения β , обобщаем рис. 4 и уравнения (15), (16) на произвольные значения $\beta = m/n$:

$$n = 2k, \quad k = 2, 3, \dots, \\ nU_{m/n, n=2k} = -2V_0 \sum_{i=1}^k \cos 2\pi x_i + \sum_{i=2}^k (x_i - x_{i-1} - \beta)^2 \\ + \frac{1}{2} (2x_1 - \beta)^2 + \frac{1}{2} (m - 2x_k - \beta)^2, \\ \mathbf{A}_{kk} \cdot \mathbf{X}_k = \mathbf{C}_k, \quad (17)$$

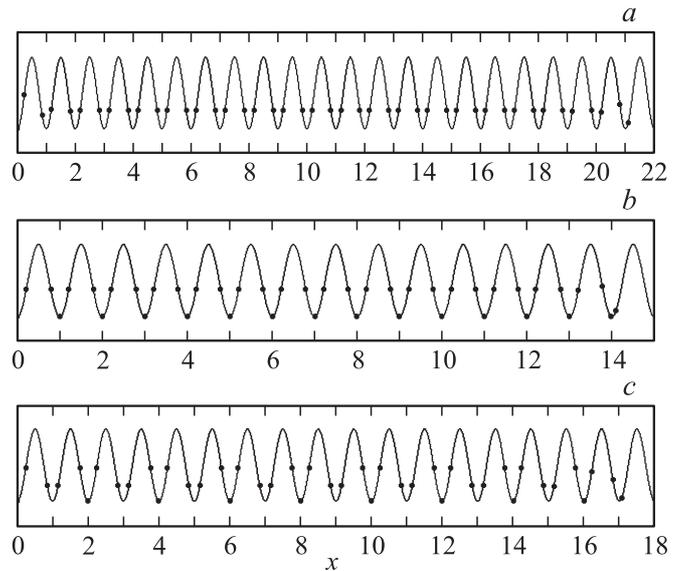


Рис. 4. Распределения атомов ФК-модели ($N = 87$) в соразмерных подрешетках с параметрами несоизмерности вблизи $\beta = 1/2$ (a), $1/3$ (b) и $2/5$ (c).

где

$$\mathbf{A}_{kk} = \begin{pmatrix} -3 & 1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & -3 \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{X}_k = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \dots \\ x_{k-2} \\ x_{k-1} \\ x_k \end{pmatrix}, \quad \mathbf{C}_k(m) = \begin{pmatrix} 2\pi V_0 \sin 2\pi x_1 \\ 2\pi V_0 \sin 2\pi x_2 \\ 2\pi V_0 \sin 2\pi x_3 \\ \dots \\ 2\pi V_0 \sin 2\pi x_{k-2} \\ 2\pi V_0 \sin 2\pi x_{k-1} \\ 2\pi V_0 \sin 2\pi x_k - m \end{pmatrix},$$

$$n = 2k + 1, \quad k = 2, 3, \dots,$$

$$nU_{m/n, n=2k+1} = -V_0 - 2V_0 \sum_{i=1}^k \cos 2\pi x_i \\ + \sum_{i=2}^k (x_i - x_{i-1} - \beta)^2 + (2x_1 - \beta)^2 + \frac{1}{2} (m - 2x_k - \beta)^2, \\ \mathbf{B}_{kk} \cdot \mathbf{X}_k = \mathbf{C}_k, \quad (18)$$

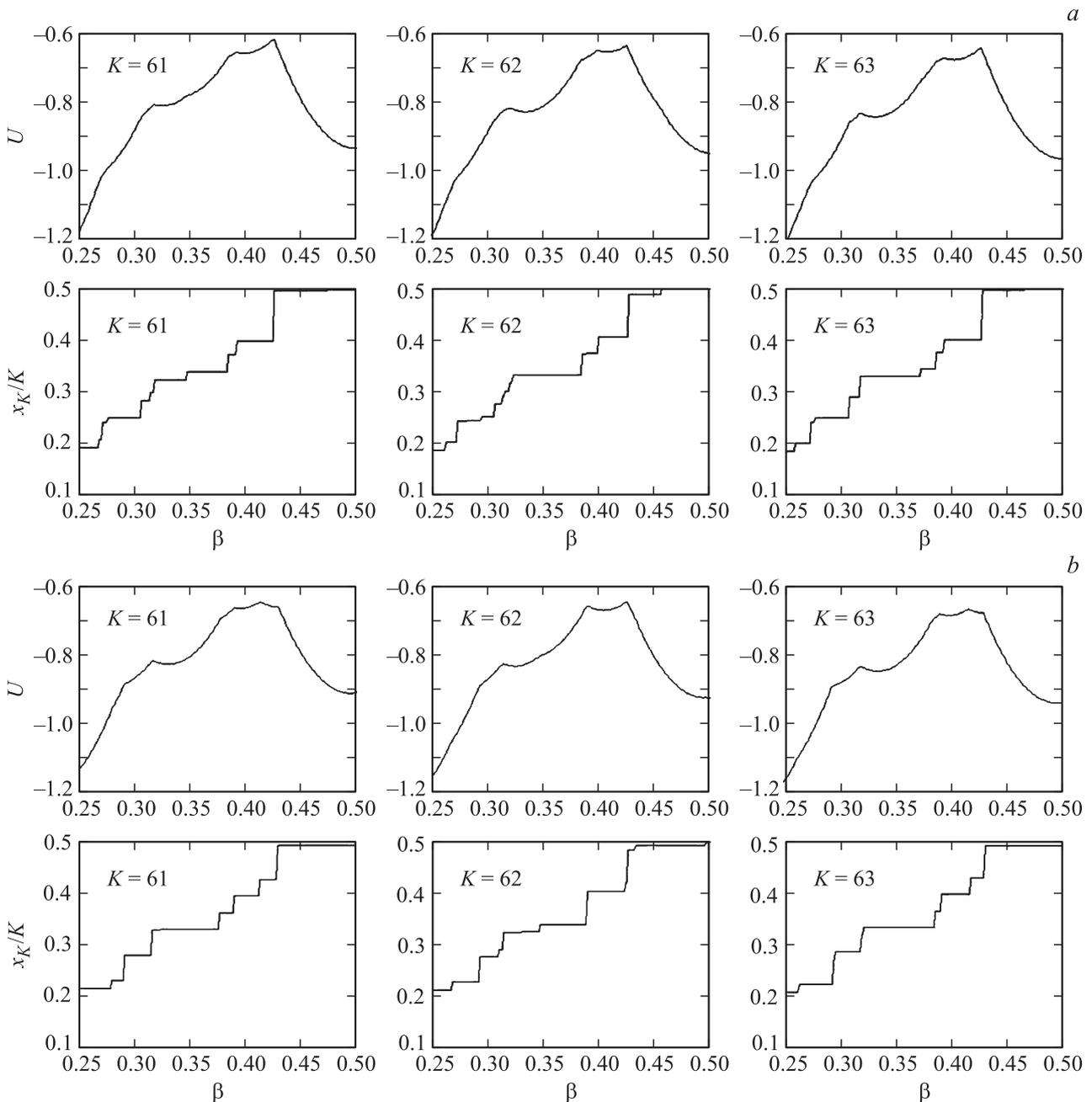


Рис. 5. Зависимости $(x_{K/K})(\beta)$, $U(\beta)$ для лестниц ФК-модели ($N > 100$). $V_0 = 0.04$. $N = 2K$ (a) и $2K + 1$ (b).

где

$$\mathbf{B}_{kk} = \begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & -3 \end{pmatrix}.$$

Уравнения (15)–(18) описывают цепочку из n атомов, центр масс которой находится в точке $x = 0$, со

средним расстоянием между атомами на m периодах потенциала, равным тождественно m/n . Зависимости плотности потенциальной энергии $U(\beta)/N$ ($N = \infty$) на ступенях соразмерных фаз с подрешетками, так же как на ступени основной соразмерной фазы ($\beta < \beta_c$), описываются параболой с вершинами $(m/n, U_{m/n})$

$$\frac{U(\beta)}{N} = U_{m/n} + \frac{(\beta - m/n)^2}{2}. \tag{19}$$

Сравнение x_1 в решениях (15)–(18) с экспериментальными значениями \tilde{x}_1 (рис. 2, 3) подтвердило пра-

вильность первоначальной гипотезы. Обнаружилось совпадение более чем трех цифр после запятой для всех пар чисел (\tilde{x}_1, x_1) . Таким образом, каждой ступени ФК-модели ($V_0 = 0.04$) соответствует дробно-рациональное значение с количеством таких ступеней более тридцати:

$$\beta = \frac{1}{2}, \frac{1}{3}, \frac{2}{6}, \frac{2}{5}, \frac{2}{7}, \dots, \frac{3}{10}, \frac{4}{14}, m\beta_c^2.$$

Зависимости на рис. 5 ($N > 100$) построены выделением конечного числа соразмерных подрешеток с решениями (15)–(18). На базе каждого из этих решений создавались функции основного состояния на полном интервале β , после чего все функции объединялись в одну исходя из условия минимума потенциальной энергии.

На рис. 5 наблюдалось следующее.

1. Выделилась третья ступень с локальным минимумом $U(\beta = 2/5)$.

2. Зависимости для цепочек с одинаковыми значениями K для четных N (рис. 5, *a*) и нечетных N (рис. 5, *b*) значительно более похожи друг на друга, чем на рис. 2, 3.

3. „Эффект калейдоскопа“ сохранился.

Отметим, что при $K = 82$ ($N = 165$) с изменением β прекратились перескоки центра масс цепочки между точками $x = 0$ и 0.5 вблизи $\beta = 1/2$, но вблизи $\beta = 1/3$ (четные N) перескоки остались. При сопоставлении расчетных значений локальных минимумов $U(\beta = 1/2)$, $U(\beta = 1/3)$ и $U(\beta = 2/5)$ предполагаем, что перескоки центра масс цепочки ФК-модели ($V_0 0.04, N$) прекратятся на всем интервале β при $N_c \approx 500$.

Лестницы $(x_K/K)(\beta)$ (рис. 1–5) описываются ступенями двух типов.

Ступени первого типа общим числом $\sim (0.5 - \beta_c - \beta_c^2)$ лежат на биссектрисе первого квадранта и соответствуют основным соразмерным структурам (15)–(18) с локальными минимумами $U(\beta)$.

Ступени второго типа описываются несоразмерными фазами. Они не имеют локальных минимумов $U(\beta)$.

Точное расположение ступеней на лестнице, их длины и количество следует искать с помощью численного анализа конечного числа решений для значений $\beta = m/n$, $n_{\max} = 1/\beta_c^2$, $m < n/2$.

При $K > K_c$, где $K_c = 1/\beta_c^4$, прекращаются перескоки центра масс цепочки на всем интервале β , что означает переход от поверхностно-объемной к объемной фазе ФК-модели.

5. Метод „выделенных каналов“. Несоразмерные фазы ФК-модели

Полностью автоматизированное исследование графиков основного состояния (на всем интервале x_1) проведено для $N \leq 48$ (рис. 2, 3). Графики с $N > 48$ (рис. 5) претерпели значительные изменения по мере уменьшения энергетического вклада граничных атомов. Оказа-

лось, что для $N < 100$ влияние граничных атомов столь велико, что не позволяет делать хорошо обоснованные асимптотические прогнозы для случая $K \approx \infty$. Полный анализ ФК-модели с $N > 100$ труден и способен занять неразумно большое время, что связано с малостью x_1 в соразмерной фазе ($\beta < \beta_c$), $x_1 < 2^{-K} \approx q^{-K}$. Исключив из рассмотрения область основной соразмерной фазы $\beta < \beta_c$, о которой известно все, мы облегчаем исследование оставшегося интервала $[\beta_c, 0.5]$. Однако мы лишь незначительно приближаемся к конечной цели — нахождению асимптотик $N \approx \infty$ для лестниц структурных переходов. Возникла потребность в дополнительном методе, кардинально уменьшающем объем вычислений. Чтобы его разработать и с его помощью строить графики для больших значений N , обратимся к фактам, следующим из рис. 1–3.

1. Функции $(x_K/K)(\beta)$ имеют лестничный вид и состоят из конечного числа ступеней — горизонтально-вертикальных отрезков разной длины. Всем ступеням соответствуют экспериментальные значения \tilde{x}_1 , лежащие в узких интервалах (каналах) $[\tilde{x}_1]_r$, где r — номер канала. С изменением K каналы периодически возникают, исчезают и вновь возникают.

2. Ступени как функции (V_0, K) делятся на два типа: ступени первого типа пересекаются с биссектрисой первого квадранта и с увеличением V_0 увеличиваются в размерах; ступени второго типа не пересекаются с биссектрисой и с увеличением K уменьшаются в размерах до исчезновения.

3. С увеличением K каналы основных ступеней сужаются, стремясь в пределе к решениям (15)–(18); ступени второго типа рассыпаются на более мелкие с высотами, равными $1/K$, и их каналы ветвятся.

4. Суммарная область, занимаемая всеми каналами $[\tilde{x}_1]_r$, уменьшается с ростом K пропорционально q^{-K} .

Исходя из изложенных выше фактов делаем следующий вывод: разумно искать решения (5), (6) не на полном интервале изменения $x_1 [0, 0.5]$, а внутри сужающихся отрезков конечного числа выделенных каналов. Метод „выделенных каналов“ является индуктивным алгоритмом: с помощью точных решений ФК-модели для основных состояний ($\leq K$) находится основное состояние для $K + 1$ с указанной далее последовательностью операций.

1. Из решений ($\leq K$) выделяются все возможные каналы решения для K . С этой целью в значениях \tilde{x}_1 каждого канала $[\tilde{x}_1]_r$ оставляют только цифры, совпадающие со значениями предыдущего решения для $K - 1$.

2. С помощью алгоритма (5), (6) на интервале, задаваемом последней значащей цифрой $[\tilde{x}_1]_r$, определяется основное состояние r -го канала на полном β -отрезке $[0, 0.5]$.

3. Функции основных состояний всех каналов объединяются в одну исходя из условия минимума потенциальной энергии.

4. Строится таблица каналов для $K + 1$ и т. д.

На примере поиска основного состояния ФК-модели ($V_0 = 0.04, N = 50$) иллюстрируем метод „выделенных каналов“.

1. Создается таблица из 31 канала для $V_0 = 0.04, N = 48$ на базе предыдущих решений:

$$\begin{aligned} [\tilde{x}_1]_0 &= 10^{-11}, \\ \dots \\ [\tilde{x}_1]_{29} &= 0.19102, \\ [\tilde{x}_1]_{30} &= 0.19138. \end{aligned}$$

2. Вариацией последних цифр каналов находится основное состояние для $V_0 = 0.04, N = 50$.

3. Создается следующая таблица каналов для $V_0 = 0.04, N = 50$

$$\begin{aligned} [\tilde{x}_1]_0 &= 10^{-12}, \\ \dots \\ [\tilde{x}_1]_{29} &= 0.19102, \\ [\tilde{x}_1]_{30} &= 0.191381. \end{aligned}$$

Зависимости на рис. 5 построены в предположении, что все ступени лестниц описываются решениями, близкими к (15)–(18). В областях несоизмерных фаз это предположение по определению ошибочно, так как фазы не могут быть одновременно соразмерными и несоизмерными подрешетками. Остановимся подробнее на классификации каналов. Существуют три типа каналов: 1) соразмерных фаз; 2) несоизмерных фаз; 3) однодислокационных фаз (расщепленных ступеней „эффекта калейдоскопа“). Выяснилось, что, хотя первые значащие цифры \tilde{x}_1 несоизмерных каналов близки к значениям x_1 соразмерных подрешеток, остальные цифры полностью отличаются от (15)–(18) вне зависимости от K . С увеличением K происходит отклонение \tilde{x}_1 от (15)–(18) и их ветвление, в результате чего области несоизмерных фаз зависимостей $(x_K/K)(\beta)$ ($K = \infty$) описываются кривыми линиями. В расчеты (рис. 5) полного комплекта несоизмерных каналов заложено не было, в результате на рис. 5 узкие области несоизмерных фаз ($\beta \in (0.25, 0.33) \cup (0.39, 0.40) \cup (0.42, 0.43)$) описаны неточно. Эти расчеты следовало бы перепроверить. Но, как выяснилось, значительно быстрее заново определить основное состояние ФК-модели с другими параметрами, чем перепроверять рис. 5.

Проблема метода „выделенных каналов“ заключается в большом числе каналов. Для ФК-модели при $V_0 = 0.04$ их больше 30. С увеличением V_0 количество ступеней уменьшается и одновременно с этим уменьшается число структурных каналов. Для ФК-модели с $V_0 = 0.06, K = 43$ ($N = 87, \beta_c = 0.311, \tilde{\beta}_c = 0.291$) методом „выделенных каналов“ построена зависимость $(x_K/K)(\beta)$ (рис. 6). Число каналов при этом оказалось меньше 20. Для уточнения понятия „несоразмерная фаза дискретной ФК-модели“ потребовалось полное структурное исследование ступеней на рис. 6.

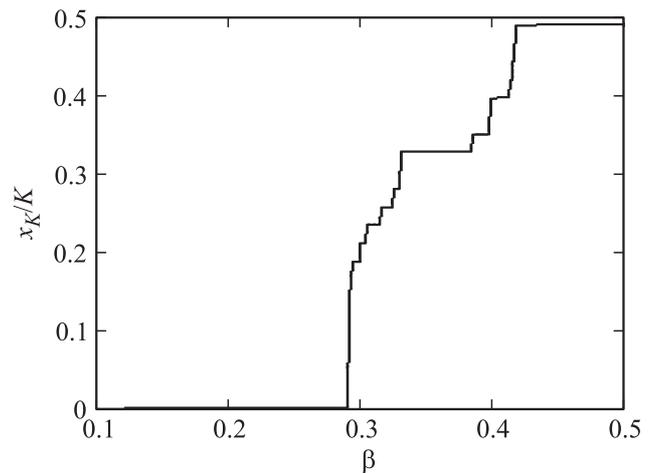


Рис. 6. Зависимость $(x_K/K)(\beta)$ для основного состояния ФК-модели ($V_0 = 0.06, N = 87$).

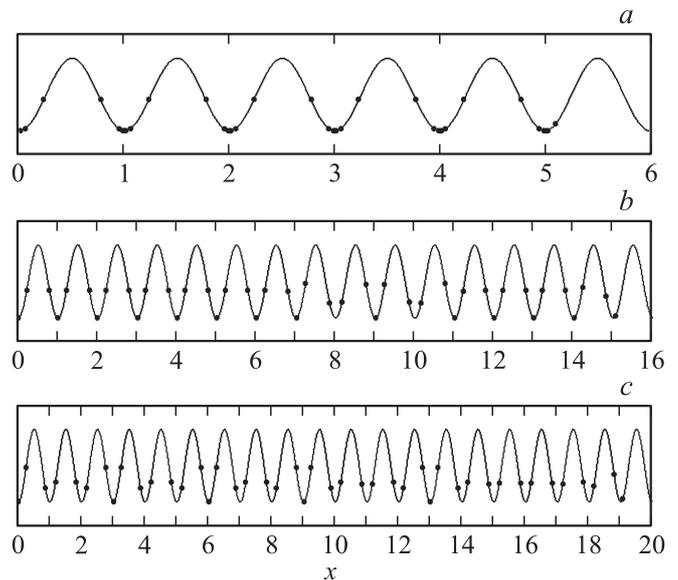


Рис. 7. Распределения атомов в неоднородных состояниях ФК-модели ($V_0 = 0.06, N = 87$) вблизи $\beta = \beta_c$ (a), вблизи $\beta = 1/3$ в случае однодислокационного канала „эффекта калейдоскопа“ (b) и в несоизмерной фазе вблизи $\beta = 1/2$ (c).

В результате построены изображения пространственных структур несоизмерных фаз с периодическими дислокационными лестницами (рис. 7). Типы дислокаций несоизмерных фаз различаются количеством атомов в минимумах потенциальных ям и на горбе потенциала.

6. Соразмерные и несоизмерные фазы ФК-модели ($N = \infty$)

Из общих соображений следует, что на графиках основного состояния ФК-модели ($N = \infty$) исчезнут различия между цепочками с четными и нечетными значениями N , все зависимости будут характеризоваться единым параметром K (рис. 5). Технически сложно

Таблица 1. Значения $-U_{m/n}(V_0)/V_0$

$\frac{m}{n}$	V_0								
	0.01	0.02	0.03	0.04	0.05	0.06	0.07	0.08	0.09
$\frac{1}{2}$	0.049	0.097	0.144	0.1882	0.230	0.269	0.305	0.338	0.369
$\frac{1}{3}$	0.035	0.074	0.116	0.160	0.203	0.246	0.286	—	—
$\frac{1}{4}$	0.050	0.100	—	—	—	—	—	—	—
$\frac{1}{5}$	0.071	—	—	—	—	—	—	—	—
$\frac{1}{6}$	0.096	—	—	—	—	—	—	—	—
$\frac{2}{5}$	0.027	0.056	0.089	0.127	0.169	0.211	—	—	—
$\frac{2}{7}$	0.043	0.080	—	—	—	—	—	—	—
$\frac{2}{9}$	0.059	—	—	—	—	—	—	—	—
$\frac{3}{7}$	0.026	0.054	0.087	—	—	—	—	—	—
$\frac{3}{8}$	0.029	0.059	—	—	—	—	—	—	—
$\frac{3}{10}$	0.038	—	—	—	—	—	—	—	—
$\frac{3}{11}$	0.043	—	—	—	—	—	—	—	—
$\frac{4}{9}$	0.0259	0.055	—	—	—	—	—	—	—
$\frac{4}{11}$	(0.030)	(0.060)	—	—	—	—	—	—	—

Примечание. Пропуск в ячейке означает отсутствие ступени на лестнице основного состояния для данных параметров. Скобки означают, что наличие данной ступени в работе не определено.

выйти на большие значения N ($K > K_c$), но аналитически можно уже сейчас ответить на некоторые вопросы относительно бесконечной цепочки. С помощью уравнений (15)–(18) несложно найти координаты локальных минимумов потенциала (11). Значения $U_{m/n}(V_0)/V_0$ (табл. 1) совпадают с координатами локальных мини-

мумов функции $U(\beta)/NV_0$ в точках $\beta = m/n$ ($n = \infty$). Хотя упорядочение атомов в подрешетках приводит к понижению полной энергии системы, не все подрешетки с дробно-рациональными значениями β присутствуют в основных состояниях ФК-модели.

При помощи уравнений соразмерных фаз (15)–(19) можно решить вопрос о критических для их существования значениях амплитуд V_0 (табл. 2). Наряду с упорядочением атомов в соразмерных подрешетках существует дислокационное упорядочение в периодических дислокационных лестницах несоразмерных фаз (рис. 7). Конкуренция между двумя типами упорядочения приводит к тому, что с увеличением V_0 более крупные ступени соразмерных фаз поглощают более мелкие (табл. 1, 2). Ступени вблизи $\beta = 0$, $\beta = 1/2$ существуют всегда.

В табл. 2 приведены значения критических амплитуд $V_0(m/n)$, выше которых ($V_0 > V_0(m/n)$) на зависимостях $(x_K/K)(\beta)$ отсутствуют ступени с подрешетками $\beta = m/n$. Критические амплитуды исчезающих ступеней найдены из равенства энергий соразмерных и несоразмерных фаз $\Delta U(m/n) = 0$:

$$\Delta U\left(\frac{m}{n}\right) = U_c\left(\frac{m}{n}\right) - U_I\left(\frac{m}{n}\right),$$

$$U_I\left(\frac{m}{n}\right) = U_c\left(\frac{mn \pm j}{n^2}\right) + \frac{j^2}{2n^4}, \quad j = 1, 2, \dots, m, \quad (20)$$

где $U_c(m/n) = U_{m/n}$ — плотность потенциальной энергии соразмерной фазы (15)–(18), $U_I(m/n)$ — плотность потенциальной энергии несоразмерной фазы, выраженная через энергию максимально близкой к значению m/n соразмерной подрешетки. Из решений системы нелинейных уравнений (20) выбирается минимальное значение V_0 .

Таблица 2. Значения критических амплитуд $V_0(m/n)$, выше которых на зависимостях $(x_K/K)(\beta)$ ($K = \infty$) отсутствуют подрешетки $\beta = m/n$

$\frac{m}{n}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{5}$	$\frac{1}{6}$	$\frac{1}{7}$	$\frac{1}{8}$	$\frac{1}{9}$	$\frac{1}{10}$
$(\frac{m_1}{n_1}, \frac{m_2}{n_2})$	—	$(0, \frac{1}{2})$	$(0, \frac{1}{3})$	$(0, \frac{1}{4})$	$(0, \frac{1}{5})$	$(0, \frac{1}{6})$	$(0, \frac{1}{7})$	$(0, \frac{1}{8})$	$(0, \frac{1}{9})$
$V_0(\frac{m}{n})$	—	*0.0712	*0.0294	*0.0164	*0.0105	*0.0072	*0.0052	*0.0039	*0.0030
$\frac{m}{n}$	$\frac{2}{5}$	$\frac{2}{7}$	$\frac{2}{9}$	$\frac{2}{11}$	$\frac{3}{7}$	$\frac{3}{8}$	$\frac{3}{10}$	$\frac{3}{11}$	$\frac{3}{13}$
$(\frac{m_1}{n_1}, \frac{m_2}{n_2})$	$(\frac{1}{3}, \frac{1}{2})$	$(\frac{1}{4}, \frac{1}{3})$	$(\frac{1}{5}, \frac{1}{4})$	$(0, \frac{1}{6})$	$(\frac{2}{5}, \frac{1}{2})$	$(\frac{1}{3}, \frac{2}{5})$	$(\frac{2}{7}, \frac{1}{3})$	$(\frac{2}{7}, \frac{3}{10})$	$(\frac{2}{9}, \frac{1}{4})$
$V_0(\frac{m}{n})$	*0.0657	0.0220*	*0.0115	*0.007	0.03745*	*0.0289	*0.017	*0.013	*0.0085
$\frac{m}{n}$	$\frac{4}{9}$	$\frac{4}{11}$	$\frac{4}{13}$	$\frac{5}{11}$	$\frac{5}{12}$	$\frac{5}{13}$	$\frac{5}{14}$	$\frac{6}{13}$	$\frac{7}{15}$
$(\frac{m_1}{n_1}, \frac{m_2}{n_2})$	$(\frac{3}{7}, \frac{1}{2})$	$(\frac{1}{5}, \frac{3}{8})$	$(\frac{3}{10}, \frac{1}{3})$	$(\frac{4}{9}, \frac{1}{2})$	$(\frac{2}{5}, \frac{3}{7})$	$(\frac{3}{8}, \frac{2}{5})$	$(\frac{1}{3}, \frac{4}{11})$	$(\frac{5}{11}, \frac{1}{2})$	$(\frac{6}{13}, \frac{1}{2})$
$V_0(\frac{m}{n})$	0.025*	< *0.025	< 0.017*	< 0.025*	< *0.016	< 0.015*	< *0.015	< 0.025*	< 0.025*

Примечание. $(m_1/n_1, m_2/n_2)$ — ступени, между которыми находится поглощаемая ступень m/n ($m_1/n_1 < m/n < m_2/n_1$). Звездочка слева от числа означает, что данная ступень поглощается левым соседом ($-j$ в формуле (20)), звездочка справа — правым соседом ($+j$ в формуле (20)). Знак меньше перед числом означает, что определена только максимально возможная величина критического параметра.

Анализ последней строки табл. 2 позволяет сделать следующий вывод: в бесконечномерной табл. 1 (количество рациональных чисел бесконечно) не полностью определены только два первых столбца.

7. Обсуждение результатов

Остановимся на основных результатах, полученных в настоящей работе.

1. Положения атомов на рис. 4 с большой точностью соответствуют аналитическим формулам (15)–(18).

2. Внутреннее содержание несоизмерных фаз определяется периодическими дислокационными лестницами (рис. 7).

3. На рис. 1, 2, 6 в точке $\beta = \tilde{\beta}_c$ выделяется скачок граничного атома из основной соизмерной фазы ($x_K \approx 0$) в дислокационное состояние (рис. 7, а) ($x_K = (\beta_c/q)K \xrightarrow{V_0 > 0.02} \approx \beta_c^2 K$). Зависимость $u = U/N$ от $z = x_K/K$ в точке $\beta = \beta_c$ имеет вид [11]

$$u = \beta_c z - \frac{q}{2} z^2 + a z^3 + \dots, \quad (21)$$

где $\beta_c = 4\sqrt{V_0}/\pi$, $q = 2 + 4\pi^2 V_0$, a — параметр. При $V_0 \ll 1$ величина $z \ll 1$ — скачок плотности дислокаций оценивается как $\Delta z \approx \beta_c/q$, что совпадает с данными [10,11] и экспериментальными данными для $V_0 < 0.02$. С увеличением V_0 величина скачка меняется и стремится к $\Delta z \approx \beta_c^2$.

4. Дислокации на рис. 7, а ($V_0 = 0.06$) различаются количеством атомов в минимумах потенциальных ям. С увеличением β их число уменьшается с 6 до 1. На горбе потенциала находятся два атома, расстояние между которыми примерно равно 0.55. При уменьшении количества атомов дислокации на горбе потенциала увеличивается, для $V_0 = 0.01$ их число равно шести, а их распределение становится похожим на дислокацию ФК-модели в континуальном приближении [1].

5. Рис. 7, б демонстрирует пространственную структуру однодислокационного канала „эффекта калейдоскопа“ (расщепление ступени $\beta = 1/3$, рис. 6).

6. Переходы на краях исчезающих ступеней $\beta = 0$ и $\beta = 1/2$ скачкообразны.

7. Структурные переходы соизмерная–несоизмерная фаза на краях ступеней промежуточных соизмерных фаз асимметричны: с левого края скачкообразны, с правого — непрерывны. Похожая картина имеет место в модели двух взаимодействующих упругих цепочек [6].

8. Заключение

К настоящему времени метод „выделенных каналов“ не автоматизирован (задача ближайшего времени), поэтому не удалось провести исследований объемных фаз ($K > K_c$) для малых амплитуд ($V_0 < 0.08$).

В будущем существует вероятность уточнения аппроксимации $N = \infty$, но не ожидается изменения главного вывода: внутреннее содержание лестниц модели Френкеля–Конторовой — соизмерные подрешетки и дислокационные несоизмерные фазы.

В результате проведенных исследований доказана ошибочность первоначального названия лестниц ФК — модели „The Devil’s Staircase“ [12], неправильно отражающего их внутреннее содержание. Предлагаем новое название — „лестницы НГУ“ (большинство авторов, обнаруживших ошибку, — выпускники НГУ).

Авторы выражают глубокую благодарность М.В. Носкову и В.Е. Шапиро за обсуждение работы.

Список литературы

- [1] Я.И. Френкель, Т. Конторова. ЖЭТФ **8**, 1340 (1938).
- [2] O.M. Braun, Y.S. Kivshar. The Frenkel–Kontorova model. Springer, Berlin (2004). 536 p.
- [3] В.Л. Покровский, А.Л. Талапов. ЖЭТФ **75**, 1156 (1978).
- [4] А.Н. Филонов. ФТТ **25**, 2524 (1983).
- [5] А.Н. Филонов. К вопросу о лестнице фазовых переходов в несоизмерных структурах. Препринт ИЯФ СО АН СССР № 89-18. Новосибирск (1989). 18 с.
- [6] А.Н. Филонов. ФТТ **30**, 28 (1988).
- [7] А.Н. Филонов. Точно решаемые модели с приложениями. LAP LAMBERT Academic Publ., M. (2012). 103 с.
- [8] А.Н. Филонов. Исследовано в России. Электрон. журн. **22**, 261 (2008).
- [9] А.Н. Филонов, Б.С. Добронец, Л.И. Квеглис. Исследовано в России. Электрон. журн. **44**, 511 (2008).
- [10] Б.С. Добронец, А.Н. Филонов. Журн. СФУ. Математика и физика **6**, 279 (2013).
- [11] А.К. Абкарян, А.Ю. Бабушкин, Б.С. Добронец, В.С. Красиков, А.Н. Филонов. ФТТ **58**, 336 (2016).
- [12] S. Aubry. In: Lecture notes in mathematics. V. 925 / Eds D. Chudnovsky, G. Chudnovsky. Springer-Verlag, Berlin (1982). P. 221.