

12,14,19

Теплопроводность цепочки ротаторов с двухбарьерным потенциалом взаимодействия

© А.П. Клинов, М.А. Мазо, В.В. Смирнов

Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семёнова РАН,
Москва, Россия

E-mail: artemklinov@gmail.com

Поступила в Редакцию 29 января 2021 г.

В окончательной редакции 20 марта 2021 г.

Принята к публикации 21 марта 2021 г.

Представлены результаты численного моделирования теплопроводности одномерной цепи ротаторов с двухбарьерным потенциалом взаимодействия ближайших соседей. Показано, что величина „внутреннего“ барьера, разделяющего топологически неэквивалентные вырожденные состояния, существенным образом влияет на температурную зависимость теплопроводности цепи. При малых высотах этого барьера в области низких температур основной вклад в рост теплопроводности вносят нелинейные нормальные моды. С увеличением температуры рост теплопроводности ограничивается появлением локальных надбарьерных переходов, препятствующих переносу энергии вдоль цепи. При увеличении высоты „внутреннего“ барьера вклад нелинейных нормальных мод в процесс переноса энергии снижается и система демонстрирует температурное поведение, характерное для систем обычных ротаторов.

Ключевые слова: моделирование, одномерные системы, модель ротаторов, теплопроводность, ДНК-подобные полимеры.

DOI: 10.21883/FTT.2021.07.51051.016

1. Введение

Проблема переноса тепла в твердых диэлектриках в течение долгого времени была и, по-видимому, будет оставаться вызовом для специалистов, занимающихся физикой твердого тела. Даже в случае бездефектных монокристаллических образцов расчеты коэффициента теплопроводности не являются тривиальной задачей [1].

Первые численные эксперименты Э. Ферми, выполненные совместно с Д. Паста, С. Уламом и М. Тсингоу более полувека назад [2], положили начало новой междисциплинарной нелинейной науке [3]. Эти эксперименты привели к открытию новых типов волнового движения в одномерных системах — локализованным нормальным модам, играющим большую роль в современной картине физических явлений. В последние десятилетия эти скорее теоретические конструкции в виде нелинейных одномерных цепочек получили неожиданное практическое приложение после открытия одно- и двумерных наноструктур — углеродных нанотрубок и графена [4,5].

Однако надо отметить, что задолго до этих революционных открытий нелинейные одномерные решетки использовались как модели для описания сильно анизотропных систем — полимерных кристаллов гибкоцепных полимеров, а также в приложении к исследованию ферромагнетиков [6]. Исследования в этой области привели к открытию ряда фундаментальных явлений [7], тем не менее проблема теплопроводности даже в одномерных модельных системах остается открытой. Этой проблеме посвящено множество статей и обзоров [8–10], в

которых были исследованы различные типы взаимодействия частиц и/или различные граничные условия. Еще в первых численных экспериментах было показано, что коэффициент теплопроводности одномерных цепочек с ангармоническим потенциалом взаимодействия зависит от температуры и длины цепи и, как правило, расходится в пределе бесконечно длинных цепей. В центре внимания исследований находился вопрос о том, какой потенциал взаимодействия частиц приводит к конечной теплопроводности цепочки. Было показано, что цепочки с локальным потенциалом взаимодействия (потенциалом взаимодействия с подложкой) в большинстве случаев обладают конечной теплопроводностью [9]. В случае систем без локального потенциала ограниченность или асимметрия потенциалов взаимодействия не играют принципиальную роль в сходимости коэффициента теплопроводности с ростом числа частиц — важно, чтобы потенциал допускал определенные локальные возбуждения цепи, вызывающие рассеяние проходящих фононов.

Примерами такого рода возбуждений являются ротобризеры в цепочке ротаторов [11,12] или локальные растяжения связей в случае цепочки частиц с леннард-джонсовским потенциалом взаимодействия [13]. Некоторые исследователи также дополняют указанный список систем с конечной теплопроводностью цепочками β -ФПУ с двухъямным потенциалом взаимодействия [14]. Несмотря на то, что расчеты с помощью неравновесной молекулярной динамики указывают скорее на медленный рост коэффициента теплопроводности в области температур вблизи барьера [14–16], переходы между двумя ямами, по-видимому, вызывают сильное рассеяние

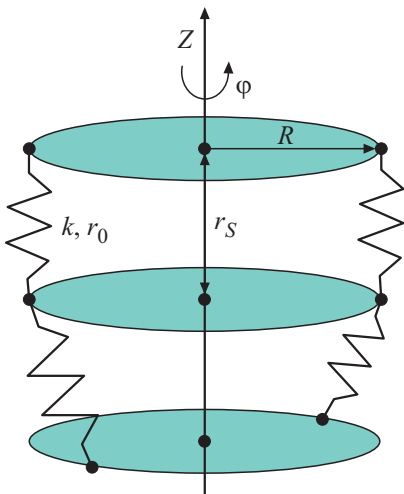


Рис. 1. Модель взаимодействующих дисков.

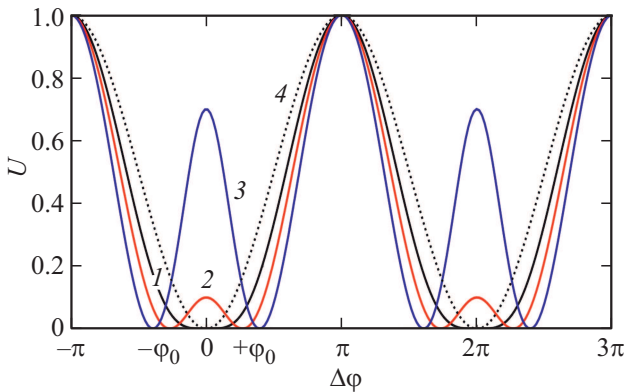


Рис. 2. Периодический двухбарьерный потенциал взаимодействия соседних мономеров при различных высотах внутреннего барьера, разделяющего вырожденные состояния $\pm\varphi_0$. Кривая 1 соответствует высоте внутреннего барьера $p = 0$, 2 — 0.1, 3 — 0.7. Кривая 4 показывает потенциал, соответствующий физическому маятнику $U(x) = (1 - \cos x)/2$. Топологически эквивалентными состояниями являются все состояния $+\varphi_0 \pm 2\pi n$ или $-\varphi_0 \pm 2\pi n$ ($n = 1, 2, \dots$).

фононов и замедляют рост коэффициента теплопроводности при увеличении длины цепи. Механизм снижения теплопроводности в системах с двухъямным потенциалом недостаточно изучен и представляет самостоятельную научную проблему.

Данная работа посвящена динамике одномерных цепей с периодическим двухбарьерным потенциалом. Как было показано в работе [12], именно цепочки ротаторов демонстрируют ограниченную теплопроводность в пределе бесконечно длинных цепей. Этим они отличаются от систем с неограниченными потенциалами и сохранением импульса (например, решетки ФПУ), в которых коэффициент теплопроводности обычно растет с увеличением длины цепи. С точки зрения приложений интересной является также возможность управления

характеристиками такой системы путем изменения граничных условий [17].

Выбор двухбарьерного потенциала в данной работе обусловлен двумя факторами. Во-первых, в настоящее время активно обсуждаются модели искусственных двухспиральных молекул (ксенонуклеиновые кислоты [18]), торсионная подвижность которых может быть в первом приближении представлена системой соосных дисков [17]. Взаимодействие между соседними дисками обеспечивается двумя пружинами (см. рис. 1). Если расстояние между соседними дисками меньше, чем длина пружин, то минимум потенциальной энергии соответствует относительному повороту дисков на некоторый угол $\Delta\varphi = \varphi_0$ (рис. 2). Высота барьера, разделяющего положения равновесия, зависит от отношения длины пружины к расстоянию между дисками. Таким образом, изменение данного параметра позволяет управлять динамическими характеристиками системы.

Важнейшим свойством гибкоцепных полимеров является их конформационная подвижность и наличие транс- и гош-конформаций. Однако большинство работ, описывающих нелинейную динамику полимерных цепей, было выполнено, фактически, в квазилинейном малоамплитудном приближении, в котором не учитываются различные устойчивые конформации цепи [19,20]. Очевидно, что при больших температурах такое приближение недостаточно, поскольку в системе с двойным вырождением основного состояния при конечных температурах должно наблюдаться разупорядочение цепи, что приводит к существенному изменению спектра. Таким образом, хотя в реальных полимерах транс- и гош-конформации энергетически не вырождены, наличие второго минимума должно существенным образом сказываться на динамике системы и, как следствие, на ее тепловых характеристиках.

2. Модель

Рассмотрим одномерную систему соосных дисков с радиусом R , расположенных с шагом r_s (см. рис. 1). Соседние диски связаны двумя гармоническими пружинами длиной $r_0 \geq r_s$ и жесткостью k . Каждый диск характеризуется углом поворота φ_k вокруг оси Z . Гамильтониан цепочки из N дисков может быть представлен в виде

$$H = \sum_{k=1}^N \frac{I}{2} \dot{\varphi}_k^2 + \sum_{k=1}^{N-1} U(\varphi_{k+1} - \varphi_k),$$

$$U(\Delta\varphi) = k \left(\sqrt{r_s^2 + 2R^2(1 - \cos(\Delta\varphi))} - r_0 \right)^2, \quad (1)$$

где I — момент инерции диска.

Потенциальная энергия взаимодействия двух соседних мономеров $U(\Delta\varphi)$ является 2π -периодической функцией и имеет два вырожденных положения равновесия при углах поворота $\Delta\varphi = \pm\varphi_0$, где $\varphi_0 = \arccos((2R^2 - r_0^2 + r_s^2)/2R^2)$. Поскольку переход

между этими положениями равновесия приводит к изменению конформации цепи, в дальнейшем мы будем говорить о них как о топологически неэквивалентных в отличие от положений равновесия, отличающихся на величину $\pm 2\pi n$, которые являются топологически эквивалентными (см. рис. 2). Выберем значение потенциальной энергии при $\Delta\varphi = 0$ (т. е., высоту барьера, разделяющего топологически неэквивалентные состояния) в качестве независимого параметра: $p = U(0)$. Полагая для удобства $U(\pm\pi) = 1$ и $U(\pm\varphi_0) = 0$, для параметров потенциала получим следующие соотношения:

$$r_0 = r_s + \sqrt{p/k},$$

$$R = \frac{1}{2\sqrt{k}} \sqrt{(\sqrt{U(\pi)} + \sqrt{p})(\sqrt{U(\pi)} + \sqrt{p} + 2r_s\sqrt{k})}.$$

Остальные параметры (r_s, k, I) положим равными единице. После подстановки этих соотношений гамильтониан принимает вид

$$H = \sum_{k=1}^N \frac{1}{2} \dot{\varphi}_k^2 + \sum_{k=1}^{N-1} U(\varphi_{k+1} - \varphi_k),$$

$$U(\Delta\varphi) = \left(\sqrt{1 + \frac{1}{2}(1 + \sqrt{p})(2 + \sqrt{p})(1 - \cos(\Delta\varphi))} - (1 + \sqrt{p}) \right)^2. \quad (2)$$

3. Методика расчетов

Рассмотрим цепь длины N_0, N_T крайних дисков которые (слева и справа, соответственно) помещены в термостаты Ланжевена с температурами $T_{\pm} = (1 \pm 0.1)T$. Зададим начальное условие, в котором положения частиц соответствуют одному из положений равновесия $\varphi_n(t=0) = (n-1) \cdot \varphi_0$, $n \in \overline{1, N_0}$, а распределение скоростей соответствует равновесному распределению при температуре T . Для крайних частиц системы предполагаем свободные граничные условия. Таким образом, динамика системы определяется следующими уравнениями движения

$$\begin{cases} \ddot{\varphi}_n = -\frac{\partial H}{\partial \varphi_n} - \gamma \dot{\varphi}_n + \sqrt{2\gamma k_B T_+} \eta_n(T), & n \in \overline{1, N_T}, \\ \ddot{\varphi}_n = -\frac{\partial H}{\partial \varphi_n}, & n \in \overline{N_T + 1, N_0 - N_T}, \\ \ddot{\varphi}_n = -\frac{\partial H}{\partial \varphi_n} - \gamma \dot{\varphi}_n + \sqrt{2\gamma k_B T_-} \eta_n(T), & n \in \overline{N_0 - N_T + 1, N_0}, \end{cases}$$

где γ — вязкость, константа Больцмана k_B полагается равной единице, а для случайного процесса $\eta_n(t)$ выполняются соотношения

$$\langle \eta_k(t) \rangle = 0, \quad \langle \eta_{k_1}(t_1) \eta_{k_2}(t_2) \rangle = \delta_{k_1, k_2} \delta(t_1 - t_2).$$

Для интегрирования уравнений движения использовался алгоритм Верле с шагом интегрирования 0.05 в безразмерных единицах времени. Продолжительность расчета составляла $10^8 - 3 \cdot 10^8$ шагов. В ходе расчета в системе устанавливается стационарное состояние, в котором средние по времени величины локальной температуры T_n и теплового потока J_n достигают постоянных значений

$$T_n = \langle \dot{\varphi}_n^2 \rangle,$$

$$J_n = -\left\langle \frac{1}{2} (\dot{\varphi}_n + \dot{\varphi}_{n-1}) \frac{\partial U}{\partial \varphi_n} \right\rangle.$$

В области между термостатами устанавливается постоянный поток энергии J , не зависящий от номера частицы: $J = J_n$, $n \in \overline{N_T + 1, N_0 - N_T}$. Указанные выше величины используются для расчета коэффициента теплопроводности κ :

$$\kappa(N, T) = \frac{J(N-1)}{\Delta T},$$

где $\Delta T = T_{N_T+1} - T_{N_0-N_T+1}$ — изменение температуры в средней области, $N = N_0 - 2N_T$ — количество частиц между термостатами, T — полусумма температур левого и правого термостатов.

Важной характеристикой, непосредственно влияющей на теплопроводность, является удельная теплоемкость C :

$$C(T) = \frac{1}{N} \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T},$$

где N — длина цепи, $\langle E \rangle$ — средняя полная энергия.

4. Результаты и обсуждение

Результаты моделирования теплопроводности цепочки длиной 60 ротаторов с различными величинами барьеров показаны на рис. 3–7.

На рис. 3 показана зависимость коэффициента теплопроводности от температуры системы для потенциалов с различными величинами „внутреннего“ барьера, разделяющего состояния $\pm\varphi_0$. Видно, что поведение коэффициента теплопроводности при низких температурах ($T < 0.3$) существенно зависит от высоты барьера p . А именно, для малых величин p (< 0.05) эта зависимость носит немонотонный характер с максимумом при $T \sim 0.15$, тогда как при больших значениях p эта немонотонность практически не наблюдается. Более того, при отсутствии барьера ($p = 0$) теплопроводность такой системы стремится к нулю при $T \rightarrow 0$ в отличие от предельного случая гармонической цепи, где она неограниченно растет с уменьшением температуры.

Рассмотрим этот предельный случай подробнее (см. рис. 4). На первый взгляд потенциал (2) при $p = 0$ аналогичен исследованному в работе [21] потенциалу ротаторов $U(x) \sim 1 - \cos x$: система характеризуется

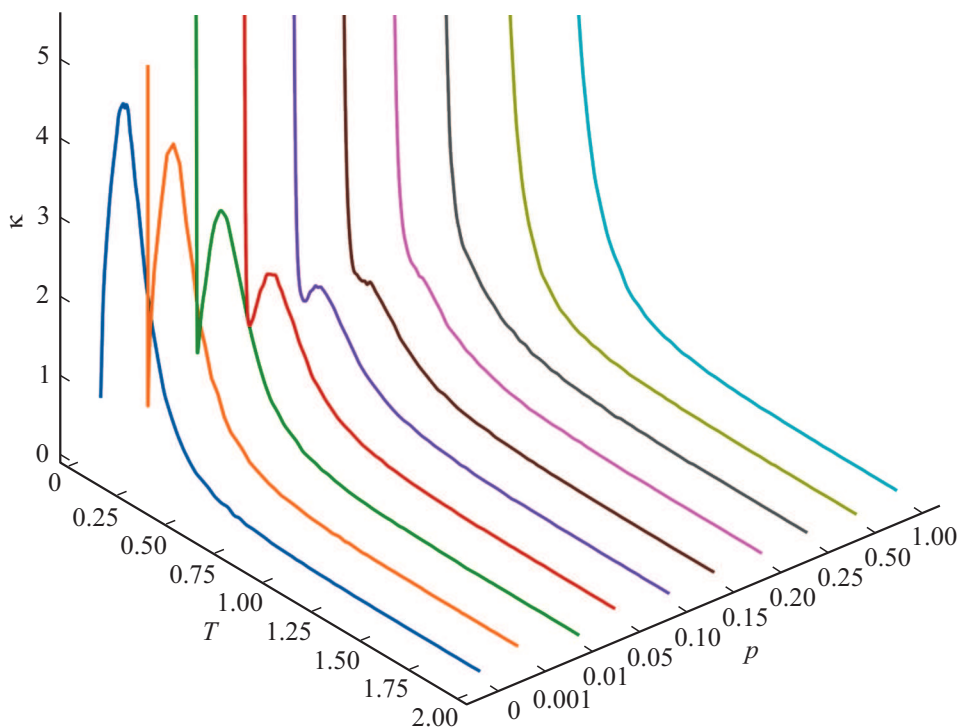


Рис. 3. Зависимость коэффициента теплопроводности κ от температуры T для различных величин высоты внутреннего барьера p .

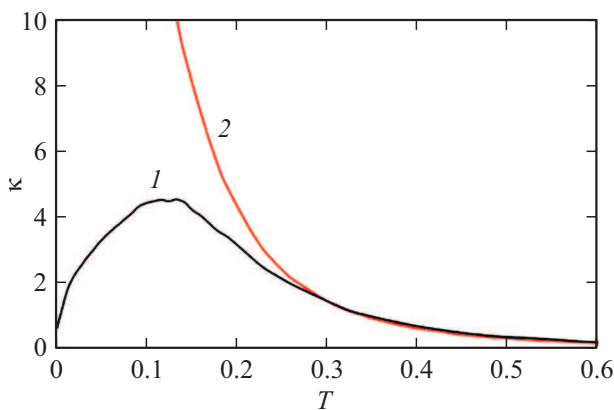


Рис. 4. Сравнение температурной зависимости коэффициента теплопроводности цепи с двумя различными потенциалами взаимодействия соседей. Кривая 1 соответствует модели двухбарьерных ротаторов при $p=0$, 2 — модели ротаторов $U(x) = (1 - \cos x)/2$.

единственным положением равновесия и потенциальная энергия ограничена сверху. Однако, в этой работе показано, что в пределе низких температур ($T \rightarrow 0$) коэффициент теплопроводности неограниченно растет, что соответствует предельному случаю системы связанных гармонических осцилляторов. В рассматриваемом нами случае теплопроводность стремится к нулю ($\lim_{T \rightarrow 0} \kappa = 0$), поскольку в системе с потенциалом (2) отсутствуют линейные элементарные возбуждения (фононы). Действительно, при $p=0$ разложе-

ние потенциала (2) начинается с четвертого порядка ($U \sim (\varphi_{j+1} - \varphi_j)^4$), поэтому в системе могут существовать только нелинейные волны (так называемый режим акустического вакуума). Специфика нелинейных элементарных возбуждений заключается в зависимости их частоты от амплитуды A (в пределе малых амплитуд $\omega \sim A$) [3]. Последнее обстоятельство приводит к тому, что групповая скорость, определяющая процесс переноса энергии, исчезает при $T \rightarrow 0$: $d\omega/dk \sim A \rightarrow 0$. Что же касается второй составляющей коэффициента теплопроводности — теплоемкости, то при нулевой температуре ее величина достигает некоторого значения несколько меньше единицы, как это показано на рис. 6 (кривая 1). Такое поведение также можно объяснить чисто нелинейным характером элементарных возбуждений. Действительно, полная энергия системы складывается из кинетической и потенциальной, средние значения которых в линейной системе равны. В рассматриваемом нами случае этот принцип нарушается и доминирует кинетическая энергия, поскольку ее величина пропорциональна квадрату смещения, а величина потенциальной энергии — только четвертой степени. Поэтому, несмотря на уменьшение частоты с понижением амплитуды колебаний, теплоемкость, как производная от полной энергии по температуре, оказывается меньше единицы ($C = \frac{dE}{dT} \leq 1$).

С повышением температуры наблюдается быстрый рост теплопроводности, который связан как с увеличением частоты нелинейных волн, так и с ростом их групповой скорости: при температуре $T \sim 0.15$ коэффициент

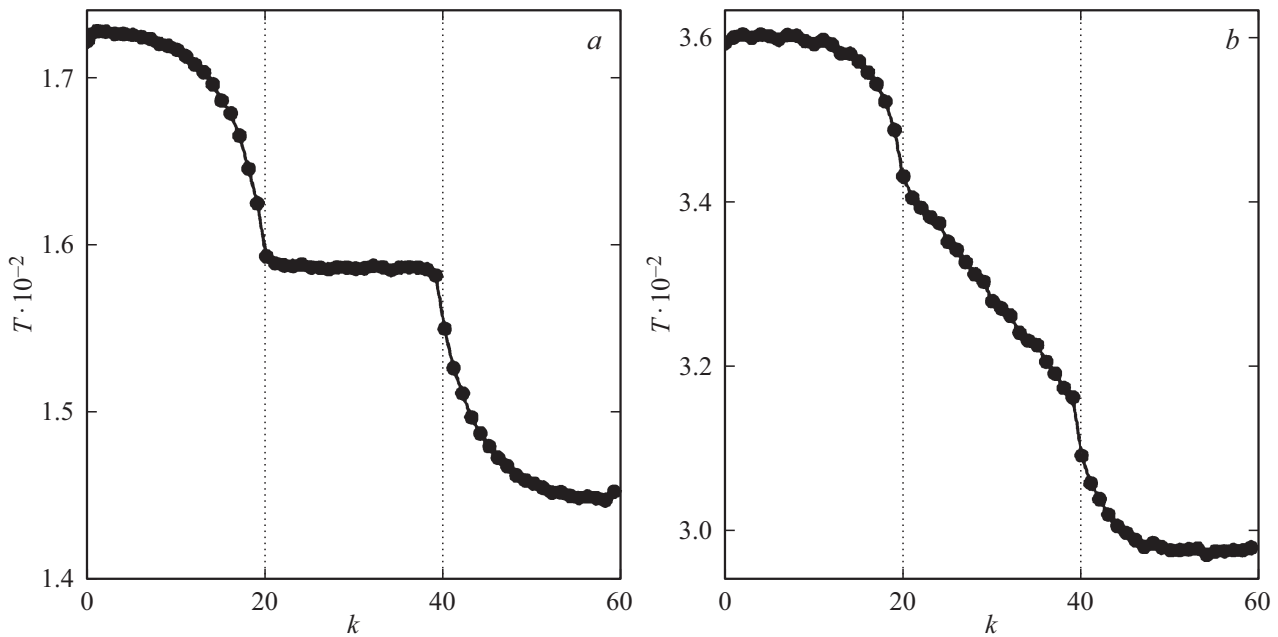


Рис. 5. Сравнение температурных профилей в (а) модели ротаторов $U(x) = (1 - \cos x)/2$ и (б) модели двухбарьерных ротаторов при $p = 0$.

теплопроводности достигает максимального значения, после чего начинается достаточно быстрое падение и при температурах $T \sim 0.3$ его значение достигает величин, характерных для системы ротаторов [21]. Отсюда следует, что $T \sim 0.3$ обозначает условную границу, где вращательные флуктуации начинают вносить заметный вклад в процесс передачи энергии.

Второй важной особенностью нелинейных волн является их взаимодействие между собой, что, с одной стороны, вызывает эффективное перераспределение энергии между ними, а с другой стороны, может приводить к формированию локализованных нелинейных возбуждений. Последние могут служить переносчиками энергии, что приводит к баллистическому характеру теплопроводности (подобные процессы предсказаны в углеродных нанотрубках [22]), либо, наоборот, являются эффективными центрами рассеяния фононов (ротобризеры в цепочке ротаторов [21]). В связи с этим интересно рассмотреть температурный профиль рассматриваемой нами системы при низких температурах. На рис. 5 показано сравнение распределения температуры вдоль цепи в цепочке ротаторов [21] (левая панель) и в рассматриваемой нами системе при $p = 0$ (правая панель). Видно, что для цепочки ротаторов это распределение аналогично распределению температуры в цепи гармонических осцилляторов, что обусловлено баллистическим переносом энергии линейными фононами в отсутствие каких-либо процессов рассеяния. Напротив, в рассматриваемой нами системе наблюдается практически линейное убывание температуры от более горячего термостата к более холодному. Это говорит о преимущественно диффузионном характере переноса

энергии, вызванном взаимодействием между нелинейными волнами. Поскольку при низких температурах появление ротобризеров практически исключено, можно утверждать, что вклад от локализованных нелинейных возбуждений несущественен.

Возвращаясь к анализу поведения теплопроводности при малых (но не нулевых) величинах барьера $0 < p < 0.05$ на рис. 3, можно видеть, что нелинейность переносчиков энергии оказывается доминирующей в диапазоне температур $0 < T < 0.5$, исключая только малый интервал непосредственно вблизи $T = 0$, где все-

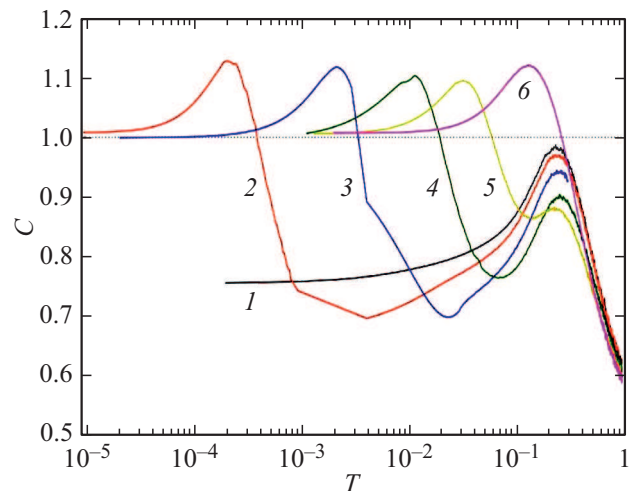


Рис. 6. Зависимость теплоемкости от температуры системы для различных величин барьера. Кривая 1 соответствует значению высоты внутреннего барьера $p = 0$, 2 — 0.001, 3 — 0.01, 4 — 0.05, 5 — 0.15, 6 — 0.5.

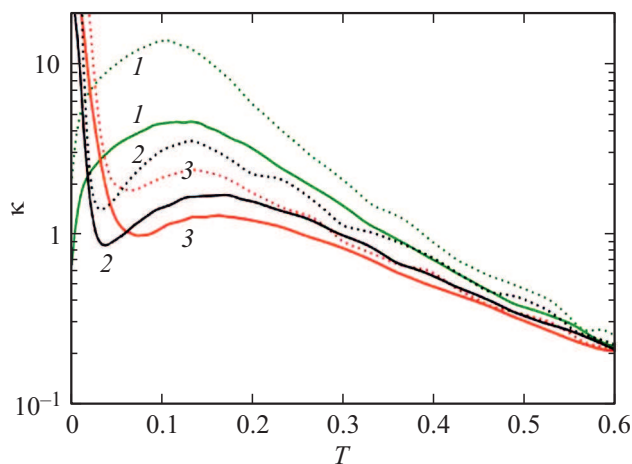


Рис. 7. Зависимость коэффициента теплопроводности от температуры для цепей с различными длинами и высотой внутреннего барьера. Кривые 1 соответствуют высоте внутреннего барьера $p = 0$, 2 — 0.05, 3 — 0.1. Сплошные линии соответствуют коротким цепям ($N = 60$), пунктирные — длинным ($N = 600$).

таки присутствуют линейные фононы. О доминировании нелинейных процессов в данном диапазоне высот барьера, разделяющего топологически неэквивалентные состояния, говорит и поведение теплоемкости на рис. 6, где хорошо видно, что при малых значениях p теплоемкость системы падает приблизительно до одного и того же значения $C \sim 0.75$, характерного для потенциала с $p = 0$.

При больших значениях высоты барьера линейные или квазилинейные фононы доминируют в области малых температур, обеспечивая рост коэффициента теплопроводности при $T \rightarrow 0$ (рис. 3). При более высоких температурах существенную роль начинают играть процессы надбарьерных переходов, а затем и локальные (но не локализованные) вращательные флуктуации. В пределе высоких температур ($T > 1$) большая часть цепочки переходит во вращательное движение, блокируя тем самым перенос тепла.

В заключение следует отметить, что основные результаты остаются верны как в случае фиксированных граничных условий, так и при увеличении длины цепи до $N = 600$ (см. рис. 7). При этом разница между минимальным и максимальным значением κ несколько увеличивается с ростом длины цепи.

Таким образом, результаты моделирования показывают, что в рассмотренной системе при малых значениях внутреннего барьера, разделяющего топологически неэквивалентные состояния, определяющую роль играют нелинейные волны. Их взаимодействие обеспечивает практически диффузионный процесс переноса энергии, что приводит к линейному профилю распределения температур вдоль цепи. При ненулевых значениях высоты барьера линейные и квазилинейные фононы также не вносят заметного вклада в процесс теплопроводности,

исключая малый интервал температур непосредственно вблизи $T = 0$. В области промежуточных и высоких температур на процессы переноса тепла эффективно влияют надбарьерные переходы, что приводит к уменьшению теплопроводности цепи.

5. Заключение

В настоящей работе рассмотрена механическая модель для описания процессов переноса энергии в полимерных системах, в которых вращательное движение мономеров играет существенную роль. Примерами таких систем являются изолированные цепочки полиэтилена в вытянутом состоянии [23], отдельные молекулы парафинов в кристалле [24], а также супрамолекулярные структуры [25]. В отличие от большинства предыдущих работ [19–21], в модели учитывается топология конформационной подвижности, то есть наличие нескольких устойчивых состояний. Показано, что наличие двух минимумов в периодическом потенциале взаимодействия соседей приводит к немонотонной зависимости теплоемкости цепи и коэффициента теплопроводности от температуры в том случае, когда высоты барьеров, разделяющих топологически эквивалентные и неэквивалентные состояния, различаются более чем в пять раз. При больших значениях высоты внутреннего барьера наблюдается монотонное уменьшение коэффициента теплопроводности, характерное для одномерных систем с ограниченными потенциалами взаимодействия. Сравнение результатов со случаем, когда внутренний барьер отсутствует (при котором реализуется режим акустического вакуума), указывает на преобладающий характер нелинейных волн по сравнению с линейными фононами. Вследствие этого при небольшой высоте внутреннего барьера наблюдается рост коэффициента теплопроводности.

Теоретически, такое поведение может служить основой для управления теплопроводностью цепи, если с помощью внешнего воздействия удастся изменять относительные высоты барьеров.

Благодарности

Авторы благодарят Ю.А. Косевича за участие в плодотворных обсуждениях.

Финансирование работы

Научно-исследовательская работа выполнена за счет субсидии, выделенной ФИЦ ХФ РАН на выполнение государственного задания, тема 0082-2014-0013 (номер АААА544 А17-117042510268-5) и при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта 20-33-90165. Вычислительные ресурсы предоставлены межведомственным суперкомпьютерным центром РАН.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] T.M. Tritt. Thermal Conductivity: Theory, properties and applications. Springer US (2004). 290 с.
- [2] E. Fermi, J. Pasta, S. Ulam. LASL Rep. LA-1940 (1955).
- [3] A. Scott. Nonlinear Science Emergence and Dynamics of Coherent Structures. Oxford University Press (2003). 504 с.
- [4] S. Iijima. Nature **354**, 6348, 56 (1991).
- [5] A.K. Geim, K.S. Novoselov. Nature Mater. **6**, 3, 183 (2007).
- [6] O.M. Braun, Y.S. Kivshar. The Frenkel-Kontorova Model. Springer-Verlag (2004). 472 с.
- [7] G.M. Sagdeev, R.Z. Usikov, D.A. Zaslavsky. Nonlinear Physics — From the Pendulum to Turbulence and Chaos. Harwood Academic (1990). 675 с.
- [8] S. Lepri, R. Livi, A. Politi. Phys. Rep. **377**, 1, 1 (2003).
- [9] A. Dhar. Adv. Phys. **57**, 5, 457 (2008).
- [10] S. Lepri, R. Livi, A. Politi. PRL **125**, 4, 040604 (2020).
- [11] C. Giardiná, R. Livi, A. Politi, M. Vassalli. PRL **84**, 10, 2144 (2000).
- [12] O.V. Gendelman, A.V. Savin. PRL **84**, 11, 2381 (2000).
- [13] A.V. Savin, Y.A. Kosevich. Phys. Rev. E **89**, 3, 032102 (2014).
- [14] D. Xiong. J. Status Mech. Theory Exp. **2016**, 4, 043208 (2016).
- [15] D. Roy. Phys. Rev. E **86**, 4, 041102 (2012).
- [16] G.R. Archana, D. Barik. Phys. Rev. E **99**, 2, 022103 (2019).
- [17] A.V. Savin, O.V. Gendelman. Phys. Rev. E **89**, 1, 012134 (2014).
- [18] V.B. Pinheiro, P. Holliger. Curr. Opin. Chem. Biol. **16**, 3–4, 245 (2012).
- [19] S. Homma, S. Takeno. Prog. Theor. Phys. **72**, 4, 679 (1984).
- [20] S. Takeno, M. Peyrard. Phys. D **92**, 3–4, 140 (1996).
- [21] A.B. Савин, О.В. Гендельман. ФТТ **43**, 2, 341 (2001).
- [22] C. Yu, L. Shi, Z. Yao, D. Li, A. Majumdar. Nano Lett. **5**, 9, 1842 (2005).
- [23] N.I. Rubtsova, C.M. Nyby, H. Zhang, B. Zhang, X. Zhou, J. Jayawickramarajah, A.L. Burin, I.V. Rubtsov. J. Chem. Phys. **142**, 21, 212412 (2015).
- [24] M.A. Kovaleva, V.V. Smirnov, L.I. Manevitch. Mater. Phys. Mech. **35**, 1, 80 (2018).
- [25] A.V. Gorbunov, T. Putzeys, I. Urbanavičiūtė, R.A.J. Janssen, M. Wübbenhorst, R.P. Sijbesma, M. Kemerink. Phys. Chem. Chem. Phys. **18**, 34, 23663 (2016).

Редактор Т.Н. Василевская