

Содержание

ВСЕРОССИЙСКАЯ НАУЧНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ 2018

Contents | Index | Search

Титульный

Естественные науки

Технические науки

Гуманитарные и социальные науки

Об Издании

Федеральное агентство по образованию
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Астраханский государственный технический университет»
Система менеджмента качества в области образования, воспитания, науки
и инноваций сертифицирована DQS по международному стандарту ISO 9001:2015

Наука и практика – 2018

Всероссийская междисциплинарная научная конференция

Астрахань, 18-23 июня 2018 года

Материалы

Астрахань
Издательство АГТУ
2018

EN 18:46 29.10.2018

А. М. Ерёмин, П. В. Захаров

Алтайский государственный гуманитарно-педагогический университет им. В. М. Шукшина

М. Д. Старостенков

Алтайский государственный технический университет им. И. И. Ползунова

СТАТИСТИЧЕСКОЕ СРАВНЕНИЕ ТОЧНЫХ ДИСКРЕТНЫХ БРИЗЕРОВ С КВАЗИ-БРИЗЕРНЫМИ МОДЕЛЬНЫМИ РЕШЕНИЯМИ КРИСТАЛЛА $Pt_{2}Al$

Введение

В последние годы большой интерес вызывает исследование дискретных бризеров в конденсированных средах. Дискретный бризер (ДБ) – это пространственно-локализованные, строго периодические колебательные моды большой амплитуды в нелинейных решёточных системах [1].

По характеру зависимости частоты от амплитуды, ДБ можно разделить на два типа: с мягким типом нелинейности и жестким типом нелинейности. У дискретных брызгов с мягким тип нелинейности частота уменьшается с увеличением амплитуды, и по этой причине, они могут существовать только в кристаллах, имеющих щель в фононном спектре. Для дискретных брызгов с жестким типом нелинейности имеет место обратная зависимость, то есть их частота увеличивается с увеличением амплитуды, при этом они могут иметь частоты, как в щели, так и выше фононного спектра. Дискретные брызги с мягким типом нелинейности могут возбуждаться в биатомных кристаллах, например, в щелочно-галогенных кристаллах со структурой NaCl [2], в упорядоченных сплавах с большой разницей атомных масс компонент, например, в PtAl [3–4], а также в графене

[Contents](#) | [Index](#) | [Search](#)

Технические науки

Квятковская А. Е.,

В отличие от точных дискретных бризеров, квази-бризеры являются не строго периодическими во времени динамическими объектами, хотя и локализованными в пространстве. Они возникают при любых достаточно малых отклонениях от точных бризерных решений в многомерном пространстве всех возможных начальных условий при решении задачи Коши для исходных дифференциальных уравнений, поскольку в этом случае не происходит полного подавления вкладов от колебаний периферийных частиц со своими собственными частотами. Таким образом, «ослабление диктатуры» со стороны ядра бризера (в случае рассматриваемого нами простейшего симметричного бризера, также ядро образует одна центральная частица, а в случае антисимметричного бризера – две его центральные частицы) приводит к наличию в бризерном решении малых вкладов, имеющих разные частоты. Эти малые вклады можно обнаружить в колебаниях всех частиц цепочки, в частности, и центральных. Если найти достаточно точно частоты колебаний всех частиц квази-бризера, вычисленные на некотором временном интервале вблизи $t = t_k$, то они не будут строго одинаковыми. В свете этого найдём среднеквадратичные отклонения $\eta(t_k)$ частоты колебаний различных частиц бризера от средней бризерной частоты ω :

$$\overline{\omega}(t_k) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \omega_i(t_k), \quad (1)$$

ВСЕРОССИЙСКАЯ НАУЧНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ 2018

Contents | Index | Search

- Титульный
 Естественные науки
 Технические науки
- Алексян А. И., Алексанян И. Ю., Нугманов А. Х.-Х.
 - Андреев А. И., Перекрестов А. П.
 - Андреев А. И., Перекрестов А. П.
 - Андреев О. П., Дорохов А. Ф., Рубан А. Р.
 - Байкасанов Д. К., Сулеев М. А.
 - Большаков Е. И., Семейкин В. Д.
 - Васильев В. Я.
 - Виноградов С. В., Хоанг Ч. Х., Игнатьев В. Н., Тожокин Н. В.
 - Власова Е. В., Бирбина К. А., Марченко А. Е.
 - Волкова Л. Б.
 - Воронов А. В.
 - Галимова Л. В., Веденева А. И.
 - Головки С. В., Надеев М. А.
 - Гостюнин Ю. А.
 - Гостюнина В. А.
 - Гостюнина В. А.
 - Григорьева И. Р.
 - Еремин А. М., Захаров П. В., Старостенков М. Д.**
 - Есауленко В. Н., Есауленко Н. В.
 - Жуков В. А., Яманин А. И.
 - Золотокопова С. В.
 - Миронова Д. А.
 - Золотокопов А. В.
 - Иванченко Р. Ю.
 - Ильин Р. А.
 - Ильясова А. К., Долганова Н. В.
 - Ильясова А. К., Долганова Н. В.
 - Исалиев В. А., Сазыкин Е. Н.
 - Калюжная Ю. С., Попов Г. А.
 - Каргин С. А.
 - Квятковская А. Е.

близкостепенности частоты ω :

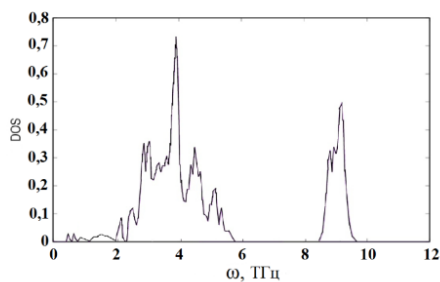
$$\bar{\omega}(t_k) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \omega_i(t_k), \quad (1)$$

$$\eta(t_k) = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (\omega_i(t_k) - \bar{\omega}(t_k))^2}{N(N-1)}}. \quad (2)$$

Чем больше величина $\eta(t_k)$, тем больше отличается квази-близкостепенное решение от точного близкостепенного решения, для которого $\eta(t_k)=0$ в любой момент времени t_k .

Результаты и обсуждение

Для существования квази-близкостепенного в первую очередь важно распределение фоновых мод, т.е. фоновый спектр кристалла. На рис. 1 показаны фоновые спектры ячейки кристалла Pt_3Al .

Рис. 1. Фоновый спектр кристалла Pt_3Al .

На рис. 2 приведена зависимость среднеквадратичного отклонения модельного квази-близкостепенного от времени его существования t_k (в пс).

Среднеквадратичное отклонение характеризует меру рассеяния данных. В нашем случае это отклонение от истинного значения частоты мод кристалла.

ВСЕРОССИЙСКАЯ НАУЧНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ 2018

[Contents](#) | [Index](#) | [Search](#)

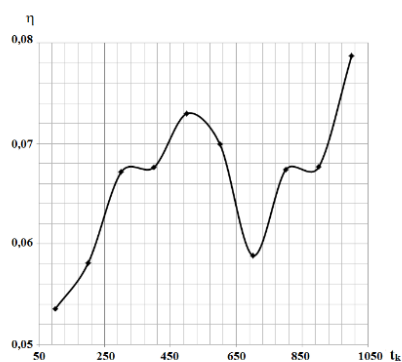
Титульный
Естественные науки
Технические науки

- Алексанян А. И., Алексанян И. Ю., Нугманов А. Х.-Х.
- Андреев А. И., Перекрестов А. П.
- Андреев А. И., Перекрестов А. П.
- Андреев О. П., Дорохов А. Ф., Рубан А. Р.
- Байкасанов Д. К., Сулеев М. А.
- Большаков Е. И., Семейкин В. Д.
- Васильев В. Я.
- Виноградов С. В., Хоанг Ч. Х., Игнатьев В. Н., Тожокин Н. В.
- Власова Е. В., Бирбина К. А., Марченко А. Е.
- Волкова Л. Б.
- Воронов А. В.
- Галимова Л. В., Веденева А. И.
- Головки С. В., Надеев М. А.
- Гостюнин Ю. А.
- Гостюнина В. А.
- Гостюнина В. А.
- Григорьева И. Р.
- Еремин А. М., Захаров П. В., Старостенков М. Д.**
- Есауленко В. Н., Есауленко Н. В.
- Жуков В. А., Яманин А. И.
- Золотокопова С. В., Миронова Д. А., Золотокопов А. В.
- Иванченко Р. Ю.
- Ильин Р. А.
- Ильясова А. К., Долганова Н. В.
- Ильясова А. К., Долганова Н. В.
- Исалиев В. А., Сазыкин Е. Н.
- Калюжная Ю. С., Попов Г. А.
- Каргин С. А.
- Квятковская А. Е.,

Рис. 1. Фононный спектр кристалла Pt3Al.

На рис. 2 приведена зависимость среднеквадратичного отклонения модельного квази-бризера η от времени его существования t_k (в пс).

Среднеквадратичное отклонение характеризует меру рассеяния данных. В нашем случае это отклонение частот периферийных атомов модельного квази-бризера от частоты ядра квази-бризера. Среднее квадратическое отклонение дает абсолютную оценку меры разброса.

Рис. 2. Зависимость $h(t_k)$.

Так же в рамках данной модели были рассчитаны следующие статистические характеристики и зависимости: группированный статистический ряд абсолютных частот, группированный статистический ряд относительных частот, полигон абсолютных частот, полигон относительных частот, гистограмма относительных частот, эмпирическая функция распределения, оценка математического ожидания, оценка дисперсии [9–10].

[Contents](#) | [Index](#) | [Search](#)

Технические науки

Квятковская А. Е.,

1. Flach S., Willis C.R. Discrete breathers // *Physics Reports*. – 1998. – Vol. 295. – pp. 181.
2. Дмитриев С.В., Хадеева Л.З. Характеристики шелевых дискретных бризеров в кристаллах со структурой NaCl // *Известия вузов. Прикладная нелинейная динамика*. – 2010. – Т. 18. – №6. – С. 85–92.
3. Захаров П.В., Старостенков М.Д., Ерёмин А.М., Корзникова Е.А., Дмитриев С.В. Возбуждение

Литература

 **Титульный**
 **Естественные науки**
 **Технические науки**

-  **Александр А. И.,** Александр А. И., Нуманов А. Х.-Х.
-  **Андреев А. И.,** Перекрестов А. П.
-  **Андреев А. И.,** Перекрестов А. П.
-  **Андреев О. П.,** Дорохов А. Ф., Рубан А. Р.
-  **Байкасанов Д. К.,** Сулеев М. А.
-  **Большаков Е. И.,** Семейкин В. Д.
-  **Васильев В. Я.,** Виноградов С. В., Хоанг Ч. Х., Игнатьев Н. Н., Тожикин Н. В.
-  **Власова Е. В.,** Бирбина К. А., Марченко А. Е.
-  **Волкова Л. Б.,** Воронов А. В.
-  **Галимова Л. В.,** Веденева А. И.
-  **Головкин С. В.,** Надеев М. А.
-  **Гостинин Ю. А.,** Гостинина В. А.
-  **Гостинина В. А.,** Григорьева И. Р.
-  **Еремин А. М.,** Захаров П. В., Старостенков М. Д.
-  **Есауленко В. Н.,** Есауленко Н. В.
-  **Жуков В. А.,** Яманин А. И.
-  **Золотоголопова С. В.,** Миронова Д. А., Золотоголова А. В.
-  **Иванченко Р. Ю.,** Ильин Р. А.
-  **Ильцова А. К.,** Долганова Н. В.
-  **Ильцова А. К.,** Долганова Н. В.
-  **Исалиев В. А.,** Сазыкин Е. Н.
-  **Калюжная Ю. С.,** Попов Г. А.
-  **Каргин С. А.,** Картковская А. Е.

1. Flach S., Willis C.R. Discrete breathers // *Physics Reports.* – 1998. – Vol. 295. – pp. 181.
2. Дмитриев С.В., Хадеева Л.З. Характеристики шелевых дискретных бризеров в кристаллах со структурой NaCl // *Известия вузов. Прикладная нелинейная динамика.* – 2010. – Т. 18. – №6. – С. 85–92.
3. Захаров П.В., Старостенков М.Д., Ерёмин А.М., Корзникова Е.А., Дмитриев С.В. Возбуждение шелевых дискретных бризеров в кристалле состава A3B потоком частиц // *Физика твердого тела.* – 2017. – Т. 59, № 2. – С. 217–222.
4. Захаров П.В., Дмитриев С.В., Старостенков М.Д., Ерёмин А.М., Корзникова Е.А. Стационарные квазibriзеры в монокристаллических металлах с ГЦК-структурой // *Журнал экспериментальной и теоретической физики.* – 2017. – Т. 152, вып. 5 (11). – С. 1073–1080.
5. Дмитриев С.В., Корзникова Е.А., Баймова Ю.А., Веларде М.Г. Дискретные бризеры в кристаллах // *Успехи физических наук.* – 2016. – Т. 186, №5. – С. 471–488.
6. Chechin G. M., Dzhelauhova G. S., and Mehonoshina E. A. Quasibreathers as a generalization of the concept of discrete breathers // *Phys. Rev. E.* – 2006. – Vol. 74. – P. 36608.
7. LAMMPS Molecular Dynamics Simulator [Офф. сайт], URL: <http://lammps.sandia.gov/> (дата обращения: 14.05.2018).
8. Zhou X. W., Johnson R. A., and Wadley H. N. G. Misfit-energy-increasing dislocations in vapor-deposited CoFe/NiFe multilayers // *Physical Review B.* – 2004. – Vol. 69. – P. 144113.
9. Ерёмин А.М., Захаров П.В., Старостенков М.Д. Статистические характеристики квази-бризера с мягким типом нелинейности в кристаллах стехиометрии A3B // *Химическая физика и мезоскопия.* – 2016. – Т. 18, № 4. – С. 565–573.
10. Zakharov P.V., Eremin A.M., Starostenkov M.D., Lucenko I.S. Analysis of Statistical Characteristics of Quasi-Breather with Soft-Type of Nonlinearity in the Crystals of A3B Stoichiometry // *Key Engineering Materials.* – 2017. – Vol. 743. – P. 86–90.