

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации  
Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого  
Физико-механический институт  
Высшая школа теоретической механики и математической физики

Работа допущена к защите  
Директор ВШТМиМФ,  
д.ф.-м.н., чл.-корр. РАН  
\_\_\_\_\_ А. М. Кривцов  
«\_\_» \_\_\_\_\_ 2023 г.

## **ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА БАКАЛАВРА**

**Моделирование тепловых процессов в карбине с помощью метода DFTB**

по направлению подготовки

01.03.03 «Механика и математическое моделирование»

направленность

01.03.03\_02 Биомеханика и медицинская инженерия

Выполнил

Студент гр. 5030103/90201

А. А. Кедров

Руководитель

профессор ВШТМиМФ, д.ф.-м.н.

В. А. Кузькин

Санкт-Петербург

2023

**САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ  
УНИВЕРСИТЕТ ПЕТРА ВЕЛИКОГО**  
**Физико-механический институт**  
**Высшая школа теоретической механики и математической физики**

УТВЕРЖДАЮ

Директор ВШТМиМФ

А.М. Кривцов

«\_\_»\_\_\_\_\_20\_\_г.

**ЗАДАНИЕ**

**на выполнение выпускной квалификационной  
работы**

студенту Кедрову Александру Алексеевичу, гр. 5030103/90201

1. Тема работы: Моделирование тепловых процессов в карбине с помощью метода DFTB
2. Срок сдачи студентом законченной работы: 05.06.2023
3. Исходные данные по работе: актуальные научные публикации по теме работы
4. Содержание работы (перечень подлежащих разработке вопросов): исследование равновесных положений карбина, исследование изменения кинетической температуры системы во времени при задании равномерного распределения кинетической энергии в начальный момент времени с помощью метода DFTB, сопоставление результатов моделирования с помощью DFTB с моделью гармонического кристалла.
5. Перечень графического материала (с указанием обязательных чертежей): графики изменения кинетической температуры во времени для рассматриваемых начальных условий, графики сопоставления изменения кинетической температуры во времени для различных рассмотренных моделей.
6. Консультанты по работе: Щербинин С.А., старший преподаватель ВШТМиМФ, к.ф.-м.н.
7. Дата выдачи задания: 27.02.2023

Руководитель ВКР \_\_\_\_\_ Кузькин В.А., профессор ВШТМиМФ,  
д.ф.-м.н.

Задание принял к исполнению 27.02.2023

Студент \_\_\_\_\_ Кедров А.А., гр. 5030103/90201

## РЕФЕРАТ

На 34 с., 13 рисунков

### ГАРМОНИЧЕСКИЙ КРИСТАЛЛ, ТЕОРИЯ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ, УГЛЕРОДНАЯ ЦЕПОЧКА, ПЕРЕХОДНЫЕ ПРОЦЕССЫ В ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ С КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРОЙ

Работа посвящена исследованию тепловых процессов в углеродных цепочках кумулена и полиина с помощью моделирования на основе квантово-механического метода «Density functional based tight binding». Данный метод является аппроксимацией «Density functional theory» (DFT) и позволяет значительно ускорять расчёты, достигая при этом точности, сравнимой с точностью оригинальной DFT. В ходе выполнения работы были исследованы равновесные состояния рассматриваемых углеродных цепочек, построены дисперсионные соотношения для их продольных колебаний, а также исследовано изменение кинетической энергии (температуры) во времени для начальных условий, соответствующих мгновенному тепловому удару. Было проведено сравнение результатов прямых численных экспериментов с результатами, полученными на основе модели гармонического кристалла.

## THE ABSTRACT

34 p., 13 pictures

HARMONIC LATTICE, DENSITY FUNCTIONAL THEORY, CARBON CHAIN,  
TRANSIENT PROCESSES IN SOLIDS WITH A LATTICE STRUCTURE

Present work is devoted to the studying of thermal processes in the carbon chains of cumulene and polyne with the aid of quantum-mechanical method «Density functional based tight binding». This method represents an approximation of the «Density Functional Theory» (DFT) and allows to significantly speed up calculations maintaining accuracy compared to the original DFT. In this work we study equilibrium states of the aforementioned carbon chains and construct corresponding dispersion relations for the longitudinal atomic oscillations. Then we study the time evolution of the system kinetic energy (temperature) with initial conditions corresponding to instantaneous heat pulse. The results of direct DFTB simulations were compared with the analytical results obtained in framework of the harmonic lattice model.

## СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ . . . . .	5
ГЛАВА 1 ИССЛЕДОВАНИЕ РАВНОВЕСНЫХ СОСТОЯНИЙ УГЛЕ- РОДНОЙ ЦЕПОЧКИ . . . . .	8
1.1 Исследование соединения кумулена . . . . .	8
1.2 Исследование соединения полиина . . . . .	10
ГЛАВА 2 ИССЛЕДОВАНИЕ ЭВОЛЮЦИИ СИСТЕМЫ ВО ВРЕМЕНИ	14
2.1 Дисперсионные соотношения кумулена . . . . .	14
2.2 Дисперсионные соотношения полиина . . . . .	15
2.3 Стохастические начальные условия . . . . .	17
2.4 Исследование динамики кумулена при большом числе атомов . . . . .	21
2.5 Исследование динамики кулумена при малом числе атомов . . . . .	22
2.6 Исследование изменения кинетической температуры в полиине . . . . .	27
ЗАКЛЮЧЕНИЕ . . . . .	30
СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ . . . . .	32

## ВВЕДЕНИЕ

Известно, что перенос тепла на макроуровне является диффузионным и подчиняется закону Фурье. Используя этот закон как определяющее соотношение, можно решить широкий класс задач механики сплошных сред (см., например, [15]). Однако теоретические исследования [16] и эксперименты [1] показывают, что на микро- и наноуровне распространение тепла носит не диффузионный характер, а баллистический. В частности, отклонение от закона Фурье продемонстрировано в нанотрубках [1], кремниевых мембранах, кремниевых нанопроволоках, графене. Поэтому построение теорий, описывающих тепловые процессы на микро- и наномасштабах, необходимо, а также актуально в связи с инновационным развитием микро- и наноэлектроники.

На текущий момент было проведено множество исследований тепловых процессов в различных теоретических моделях: цепочка Гука [8—10] и кристалл FPU [4; 11; 13]. Целью же данной работы является исследование максимально приближенной к реальности модели конкретного материала и оценка применимости к нему теоретических результатов прошлых работ. В качестве такого материала была выбрана углеродная цепочка карбина. Для упрощения исследования рассматривались только продольные колебания, что позволило описать систему с помощью модели скалярного одномерного кристалла.

Несмотря на простоту соединения карбина, это соединение может существовать в двух состояниях: кумулена и полиина. Кумулен — соединение с одинаковым типом связей, вида  $\dots - C - C - \dots$ . Полиин — соединение с чередующимися связями вида  $\dots - C = C - C = C - \dots$ . Во втором случае элементарная ячейка состоит из 2-х атомов и описывается 2-мя степенями свободы. Эти сведения будут использованы в последующих исследованиях системы.

Другой важный вопрос – выбор подходящего метода исследования. В настоящее время наиболее точным способом моделирования материалов на атомарном уровне является Теория функционала плотности (Density functional theory — DFT) [7], обеспечивающая феноменальное согласие с экспериментальными исследованиями. Однако моделирование больших систем (больше ста атомов) на больших временах с использованием DFT занимает огромное

количество времени даже на мощных вычислительных кластерах. Использование же методов классической молекулярной динамики с использованием феноменологических потенциалов межчастичного взаимодействия (таких, как потенциалы Леннарда-Джонса [6], Морзе [14] и др.) даёт, как правило, низкое согласие с экспериментальными данными. Более предпочтительным методом моделирования многоатомных систем с точки зрения соотношения точности результата и вычислительных затрат является метод «Density Functional based Tight binding» (DFTB), являющийся аппроксимацией DFT, но значительно более эффективный за счёт применения суперпозиций электронных плотностей изолированных частей системы. Благодаря применению DFTB огромный объем исследований сложных и больших систем можно проводить на персональном компьютере.

Существует несколько программных пакетов, реализующих метод DFTB. В данной работе использовался программный пакет DFTB+ [3] с использованием параметров (предрасчитанных изолированных орбиталей атомов с помощью метода DFT) для углерода из работы [5]. Также в ходе выполнения работы было разработано ПО на языке Python для автоматизации взаимодействия с пакетом.

Данная работа посвящена сопоставлению и сравнению результатов моделирования тепловых процессов в карбине с результатами на основе прошлых работ Кузькина В. А. и Кривцова А. М., полученных для модели гармонического кристалла. В работе [9] представлен подход по изучению тепловых процессов в скалярных решетках общего типа, а [10] обобщает ее результаты, заменяя рассмотрение отдельных атомов элементарными ячейками, что позволяет рассматривать решетки с разными типами атомов. Такая модель, с разными типами атомов, использовалась в текущей работе при рассмотрении соединения полиина. Обе процитированные выше работы дают аналитические формулы, которые позволяют описывать тепловые процессы на основе известных дисперсионных соотношений системы. Совпадение результатов, полученных с помощью таких дисперсионных соотношений для модели гармонического кристалла и результатов, полученных с помощью прямых численных экспериментов на основе DFTB будет свидетельствовать о применимости модели гармонического кристалла, которая является более простой с точки зрения анализа и вычислений, для моделирования тепловых процессов

в реальных материалах.

Данная выпускная квалификационная работа организована следующим образом. Сначала проводится исследование равновесных состояний углеродной цепочки, затем строятся и исследуются дисперсионные соотношения (т.е. зависимости частоты плоских волн от их волнового числа) для продольных колебаний соединений кумулена и полиина с помощью метода DFTB. Далее на основе этих дисперсионных соотношений и аналитических выражений для температуры из [9; 10] исследуется изменение температуры в карбине и проводится сравнение с результатами прямого численного интегрирования уравнений динамики для рассматриваемых соединений с использованием потенциалов на основе DFTB.



# ГЛАВА 1 ИССЛЕДОВАНИЕ РАВНОВЕСНЫХ СОСТОЯНИЙ УГЛЕРОДНОЙ ЦЕПОЧКИ

В данном разделе будут рассмотрены характеристики исследуемых систем, которые можно получить без явного моделирования ее динамики. Такими характеристиками являются зависимость потенциальная энергии от параметров системы, силы, действующие на атомы, и равновесные состояния системы.

## 1.1 ИССЛЕДОВАНИЕ СОЕДИНЕНИЯ КУМУЛЕНА

Для моделирования соединения кумулена предполагалась элементарная ячейка, состоящая из 1 атома углерода. Поэтому для поиска равновесного положения системы и исследования изменения потенциальной энергии использовалась следующая постановка задачи: 1 атом углерода расположен в точке с координатами  $x = 0$ . Граничные условия предполагались периодическими:  $f(x) = f(x + D)$ , где  $f(x)$  – любая функция, описывающая рассматриваемую цепочку, а  $D$  — размер элементарной ячейки, являющийся одновременно и длиной связи т.е. расстоянием между двумя ближайшими атомами.

Необходимое условие равновесия системы имеет вид:

$$\frac{d}{dD} \Pi(D_{eq}) = 0, \quad (1)$$

где  $\Pi(D)$  — потенциальная энергия системы, а  $D_{eq}$  – равновесный размер элементарной ячейки. С помощью методов численной оптимизации [17] была решена задача (1) и получено значение  $D_{eq} = 1.296875 \text{ \AA}$ . Стоит отметить, что также было проведено сравнение изменения потенциальной энергии в зависимости от  $D$  относительно  $D = D_{eq}$  для методов DFT и DFTB. Результаты представлены на Рис. 1.1. Как можно видеть из графика, изменение потенциальной энергии для системы, полученное с помощью DFTB, очень близко к результатам DFT.

Также было проведено исследование устойчивости положения равновесия для систем с конечным числом атомов. Достаточное условие устойчивости заключается в том что матрица Гессе  $\mathbf{H}$  потенциальной энергии: системы

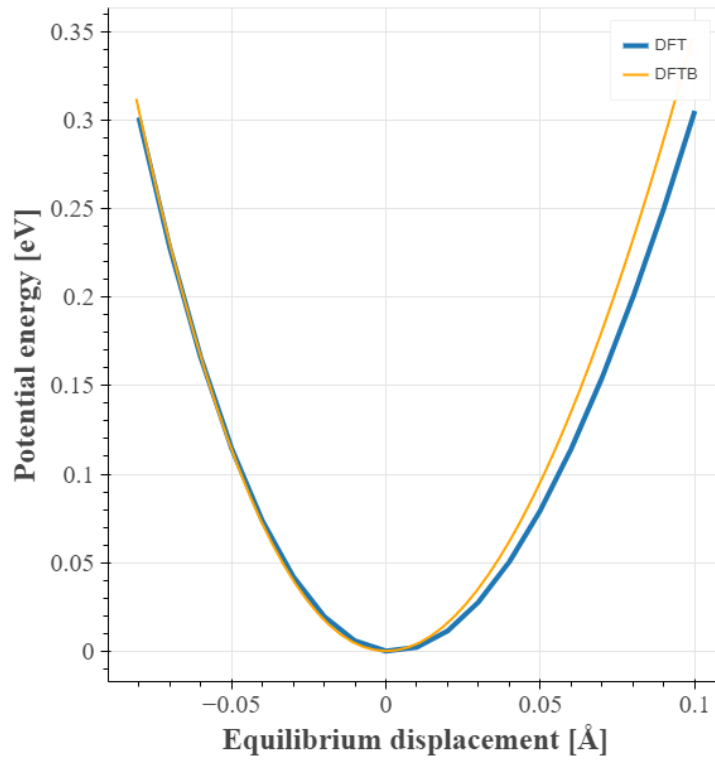


Рис. 1.1. Сравнение зависимости потенциальной энергии 1 частицы в зависимости от размера периодической ячейки для DFT и DFTB

должна быть положительно определенной. Эта матрица имеет следующий вид:

$$\mathbf{H} = \nabla \nabla \Pi_{\Sigma}(\vec{x}) \quad (2)$$

где  $\Pi_{\Sigma}$  — потенциальная энергия всей системы,  $x_i$  — координата атома под номером  $i$ ,  $\nabla = \frac{\partial}{\partial x_i} \vec{e}_i$ .

Матрица Гессе была рассчитана с помощью численного дифференцирования потенциальной энергии, рассчитанной на основе DFTB-моделирования. Для проверки на положительную определенность численно вычислялись собственные значения матрицы  $\lambda_i$ . Критерием положительной определенности матрицы было:

$$\forall i \quad \lambda_i > 0 \quad (3)$$

Достаточное условие устойчивости выполнялось для нечетного числа атомов равного 27. Если число атомов было 29 и более, то положение равновесия становилось неустойчивым.

## 1.2 ИССЛЕДОВАНИЕ СОЕДИНЕНИЯ ПОЛИИНА

Аналогичные исследование были проведены для соединения полиина. В этом случае элементарная ячейка с периодом  $D$  состояла из 2-х атомов с координатами  $x = 0$  и  $x = D_n$ . Для такой системы необходимые условия равновесия принимают следующий вид:

$$\begin{cases} \frac{d}{dD} \Pi(D_{eq}, D_{n,eq}) = 0 \\ \frac{d}{dD_n} \Pi(D_{eq}, D_{n,eq}) = 0 \end{cases} \quad (4)$$

С помощью численных методов оптимизации [17] были получены следующие параметры равновесия системы:  $D_{n,eq} = 1.24443744 \text{ \AA}$  и  $D_{eq} = 2.60077837 \text{ \AA}$ . На Рис. 1.2 представлена зависимость потенциальной энергии от расстояния между 2 атомами в периодической ячейки фиксированного размера  $D_{eq}$ . За 0 потенциальной энергии принято минимальное значение потенциальной энергии в данной конфигурации. Как можно видеть из графика, точка экстремума при  $1.29 \text{ \AA}$  и соответствующая  $D_{eq}$  для соединения кумулена не является точкой локального минимума в рассматриваемой конфигурации и не будет устойчивым.

В работе [2] были получены схожие результаты зависимости потенциальной энергии от расстояния между атомами на основе метода DFT, но только для растянутой углеродной цепочки, т.е. при размере ячейки  $D > D_{eq}$ . В случае нерастянутой цепочки положения равновесия полиина с помощью метода DFT получено не было. Это существенное различие DFTB и DFT, которое было обнаружено в текущем исследовании.

Также было произведено вычисление коэффициентов линейной жесткости при малых отклонениях атомов из положений равновесия. Рассмотрим следующие законы динамики, справедливые для гармонической системы, со-

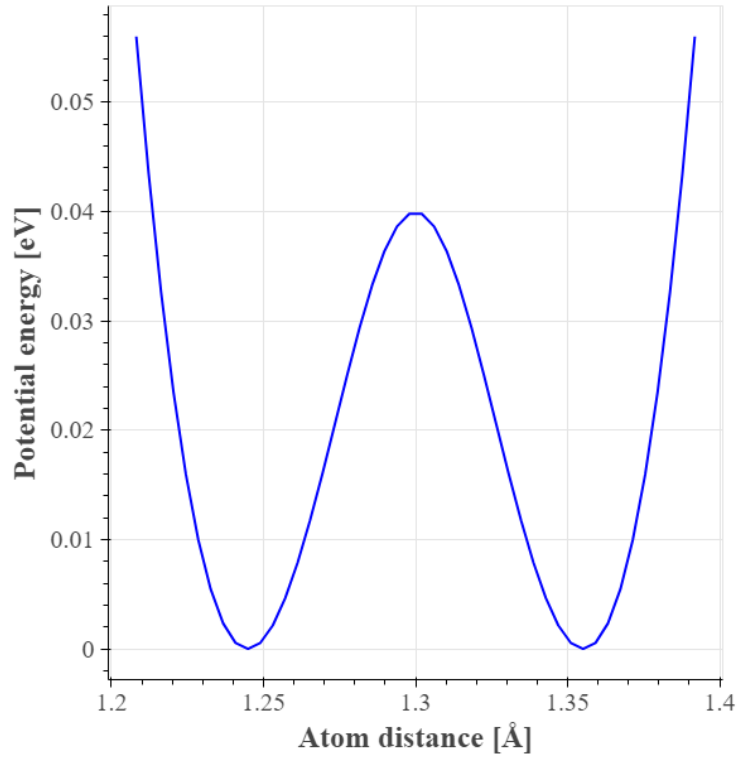


Рис. 1.2. Зависимость потенциальной энергии от расстояния между 2 атома в периодической ячейки размера  $D_{eq}$

стоящей из  $N$  частиц:

$$\left\{ \begin{array}{l} f_{1i} = m\ddot{u}_{1i} = C_{11k}u_{1,i+k} + C_{12k}u_{2,i+k} \\ f_{2i} = m\ddot{u}_{2i} = C_{21k}u_{1,i+k} + C_{22k}u_{2,i+k} \\ C_{110} = - \sum_{j \neq 0} (C_{11j} + C_{12j}) \\ C_{210} = - \sum_{j \neq 0} (C_{21j} + C_{22j}) \end{array} \right. \quad k, i \in \mathbb{Z}_N \quad (5)$$

где  $u_{1,i}$  — смещение первой частицы из положения равновесия в  $i$ -й элементарной ячейке,  $u_{2,i}$  — смещение второй частицы в этой же ячейке.

Сместим первый атом из положения равновесия  $u_{10} = \varepsilon$ , а остальные атомы останутся в положении равновесия, и подставим в (5):

$$\left\{ \begin{array}{l} f_{1,i} = C_{11,-i}\varepsilon = C_{11,N-i}\varepsilon \\ f_{2,i} = C_{21,-i}\varepsilon = C_{21,N-i}\varepsilon \end{array} \right. \quad i \in \mathbb{Z}_N \quad (6)$$

Таким образом, зная силы, возникающие в системе (их можно вычислить с помощью DFTB), получим все коэффициенты  $C_{11,i}$  и  $C_{21,i}$ . Коэффициенты  $C_{21,i}$

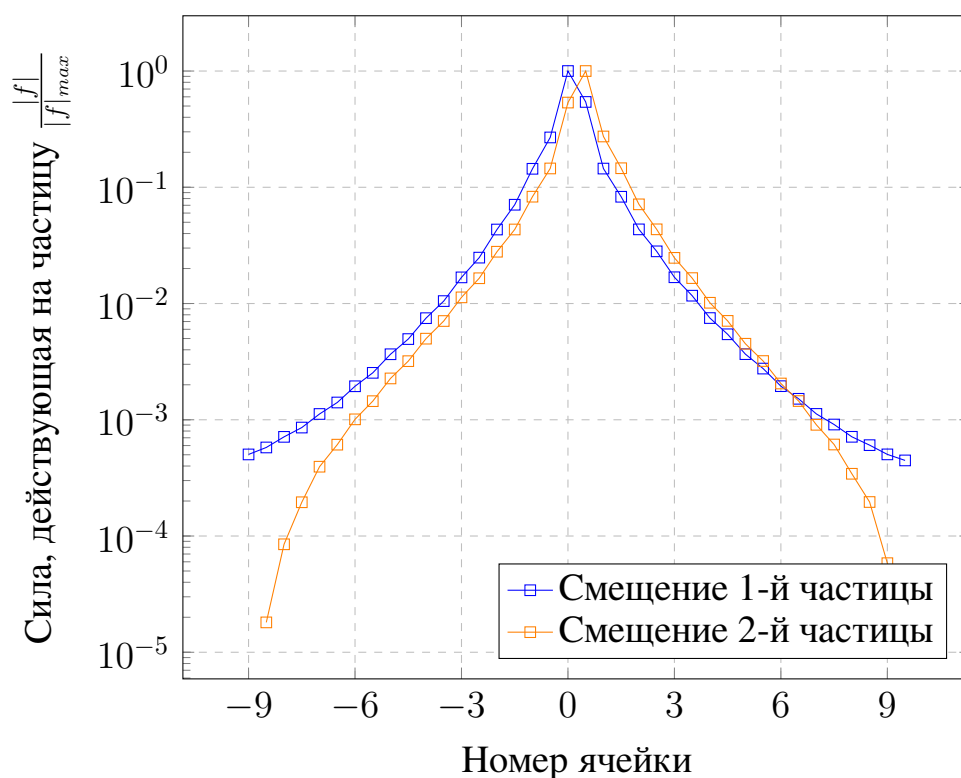


Рис. 1.3. Зависимость величины силы действующей на частицу от ее расстояния до смещенной частицы

и  $C_{22,i}$  можно получить, смещая второй атом элементарной ячейки  $u_{20} = \varepsilon$  из положения равновесия.

На Рис. 1.3 представлено, какие по модулю силы действуют на частицы системы при смещении 1-й или 2-й частицы элементарной ячейки по отдельности. Для наглядности на оси абсцисс отложен номер элементарной ячейки, но представлены не только целые, но также полуцелые значения. Целые значения соответствуют 1-му атому в каждой элементарной ячейке, полуцелые – второму. Было выяснено, что при  $i > 6$  модуль действующих сил падает примерно на 3 порядка по сравнению со своим максимальным значением и в дальнейшем принять их за 0. Таким образом, в линейном приближении, система является цепочкой с дальним действием, каждая ячейка, которой взаимодействует еще с 12 ближайшими ячейками-соседями.

Процедура описанная выше, позволяет получить линейную аналитически разрешимую систему дифференциальных уравнений. С ее использованием в данной работе были получены коэффициенты жесткостей для соединения полиина, которые в дальнейшем использовались в разделе 2.2 «Дисперсионные соотношения полиина» для нахождения дисперсионных соотношений

для продольных колебаний атомов этого соединения.

## ГЛАВА 2 ИССЛЕДОВАНИЕ ЭВОЛЮЦИИ СИСТЕМЫ ВО ВРЕМЕНИ

В этом разделе рассматриваются характеристики системы, зависящие от времени или полученные непосредственным интегрированием уравнений динамики системы.

Метод DFTB позволяет решить статическую задачу для текущего состояния системы. Из этого решения можно получить силы, действующие в системе и использовать уравнение динамики для вычисления следующего состояния. Для интегрирования уравнений динамики использовался симплектический метод Верле [18].

### 2.1 ДИСПЕРСИОННЫЕ СООТНОШЕНИЯ КУМУЛЕНА

В случае использования модели гармонического кристалла одной из важнейших характеристик являются его дисперсионные соотношения, а именно зависимость частоты от волнового числа  $\omega = \omega(k)$ . Поэтому в данном подразделе будет рассмотрено построение дисперсионных соотношений для соединения полиина с помощью численного интегрирования уравнений динамики. Другой способ получения дисперсионных соотношений будет рассмотрен для соединения полиина.

Рассмотрим линеаризованные уравнения динамики системы:

$$m\ddot{\mathbf{u}} = \mathbf{C}\mathbf{u} \quad (7)$$

где  $\mathbf{u}$  — вектор смещений каждого атома системы из положения равновесия,  $\mathbf{C}$  — матрица жесткостей. Одним из возможных решений такой системы является стоячая волна:

$$\begin{aligned} u_n &= A \left[ \cos(kx_n + \omega(k)t) + \cos(kx_n - \omega(k)t) \right] \\ &= 2A \cos(\omega(k)t) \cos(kx_n) \end{aligned} \quad (8)$$

где  $x_n = nD_{eq}$  и  $\omega(k)$  — искомое дисперсионное соотношение. Тогда для случая  $n = 0$ :

$$u_0 = 2A \cos(\omega(k)) \quad (9)$$

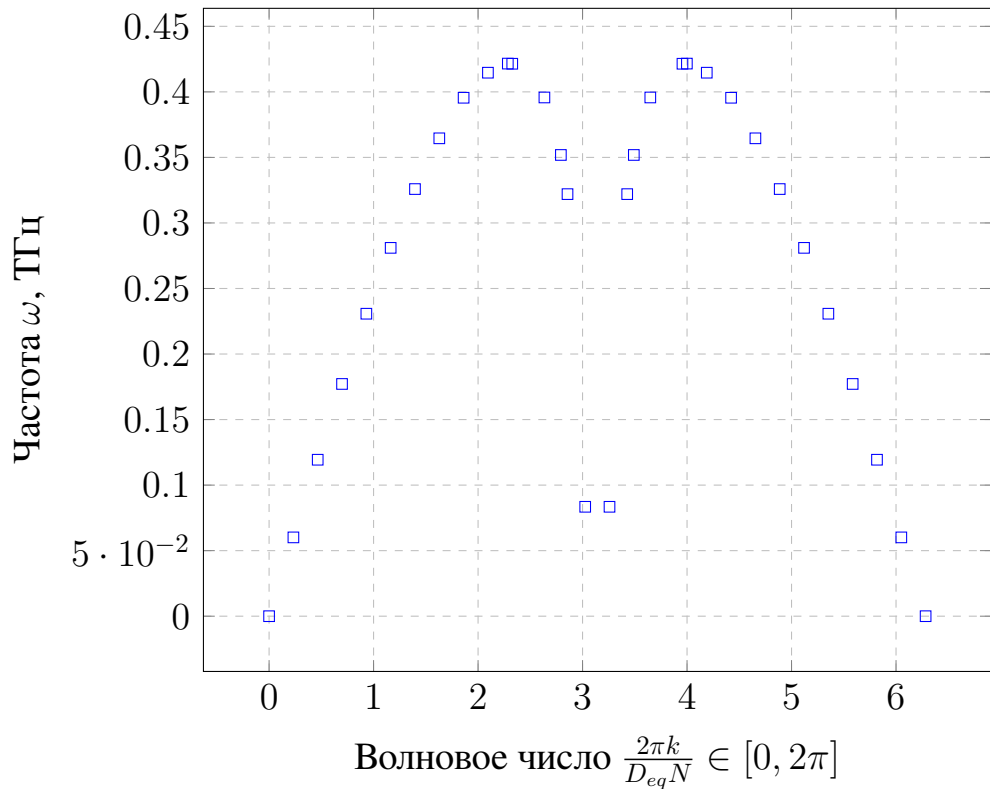


Рис. 2.1. Дисперсионное соотношение кумулена

В данной выпускной квалификационной работе использовался следующий алгоритм поиска  $\omega(k)$  при фиксированном  $k$ :

1. Задать начальные условия, соответствующие стоячей волне  $u_n = 2A \cos(kx_n)$  для  $\frac{A}{D_{eq}} \ll 1$ .
2. С помощью DFTB и метода Верле получить зависимость  $u_0 = u_0(t_k)$ .
3. Получить начальное приближение в виде  $\omega_0 = \max \left| \Phi [u_0(t_k)] \right|$ , где  $\Phi$  — дискретное преобразование Фурье по переменной  $t_k$  (37).
4. Выполнить оптимизацию с начальным приближением  $\omega_0$ :

$$\min_{\omega} \sum_k \left( u_0(t_k) - 2A \cos(\omega t_k) \right)^2 \quad (10)$$

Полученное дисперсионное соотношение представлено на Рис. 2.1.

## 2.2 ДИСПЕРСИОННЫЕ СООТНОШЕНИЯ ПОЛИИНА

Соединение полиина в линейном приближении является цепочкой с чередующимися жесткостями. Элементарная ячейка такой системы состоит из



двух атомов. Поэтому дисперсионное соотношение для полиина будет иметь 2 ветви: оптическую и акустическую. По этой причине для исследования дисперсионных соотношений в полиине использовался способ, отличный от описанного в предыдущем разделе «Дисперсионные соотношения кумулена».

В разделе 1.2 «Исследование соединения полиина» была описана процедура составления матрицы жесткостей  $\mathbf{C}$ . В общем виде, это матрица размерности  $2N \times 2N$ . Однако из (6) можно заметить, что для описания системы достаточно матрицы размерности  $2 \times 24$ , где 2 — размер элементарной ячейки, 24 — число ближайших ячеек-соседей (12), с которыми взаимодействует текущая элементарная ячейка, умноженное на количество атомов в каждой из них.

$$\tilde{\mathbf{C}} = \begin{bmatrix} C_{11,-6} & C_{12,-6} & C_{11,-5} & C_{12,-5} & \dots & C_{11,6} & C_{12,6} \\ C_{21,-6} & C_{22,-6} & C_{21,-5} & C_{22,-5} & \dots & C_{21,6} & C_{22,6} \end{bmatrix} \quad (11)$$

$$\tilde{\mathbf{u}}_n = \left[ u_{1,n-6} \quad u_{2,n-6} \quad \dots \quad u_{1,n+6} \quad u_{2,n+6} \right]^T \quad (12)$$

$$m \begin{bmatrix} \ddot{u}_{1n} \\ \ddot{u}_{2n} \end{bmatrix} = \tilde{\mathbf{C}} \tilde{\mathbf{u}}_n \quad (13)$$

Уравнения можно в дальнейшем упростить, если применить дискретное преобразование Фурье (см. далее формулы (35) или (37)):

$$\begin{aligned} \hat{u}_{1q} &= \Phi \left[ u_{1n} \right] \\ \hat{u}_{2q} &= \Phi \left[ u_{2n} \right] \end{aligned} \quad (14)$$

Применим преобразование для всего уравнения (15):

$$m \begin{bmatrix} \ddot{\hat{u}}_{1q} \\ \ddot{\hat{u}}_{2q} \end{bmatrix} = \tilde{\mathbf{C}} \begin{bmatrix} e^{-6ik_q D_{eq}} & 0 & \dots & e^{6ik_q D_{eq}} & 0 \\ 0 & e^{-6ik_q D_{eq}} & \dots & 0 & e^{6ik_q D_{eq}} \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} \hat{u}_{1q} \\ \hat{u}_{2q} \end{bmatrix} \quad (15)$$

Введем обозначение  $\hat{\mathbf{C}}$  и  $\hat{\mathbf{u}}_q$ :

$$\hat{\mathbf{C}} = \tilde{\mathbf{C}} \begin{bmatrix} e^{-6ik_q D_{eq}} & 0 & \dots & e^{6ik_q D_{eq}} & 0 \\ 0 & e^{-6ik_q D_{eq}} & \dots & 0 & e^{6ik_q D_{eq}} \end{bmatrix}^T \quad (16)$$

$$\hat{\mathbf{u}}_q = \begin{bmatrix} \hat{u}_{1q} \\ \hat{u}_{2q} \end{bmatrix} \quad (17)$$

Размерность матрицы  $\hat{\mathbf{C}}$  будет  $2 \times 2$  и уравнения можно переписать в следующем виде:

$$m\ddot{\mathbf{u}}_q = \hat{\mathbf{C}}\hat{\mathbf{u}}_q. \quad (18)$$

Это уравнение гармонического осциллятора. Решение будем искать в виде  $\ddot{\mathbf{u}}_q = \mathbf{a}e^{i\omega t}$ . После подстановки в (17) получим следующую СЛАУ:

$$\left(m^{-1}\hat{\mathbf{C}} + \omega^2\mathbf{E}\right) \mathbf{a} = 0 \quad (19)$$

СЛАУ (19) имеет нетривиальное решение в случае, если определитель матрицы системы равен 0. Если ввести понятие динамической матрицы  $\Omega = m^{-1}\hat{\mathbf{C}}$ , то задача нахождения дисперсионных соотношений сводится к задаче нахождения собственных значений матрицы  $\Omega$ , которые, вообще говоря, зависят от  $q$ . Сопоставляя  $q$  безразмерное волновое число  $\tilde{k}_q = k_q D_{eq} = \frac{2\pi q}{N} \in [0, 2\pi)$ , получаем зависимость  $\omega(\tilde{k})$ .

Представленная выше процедура позволяет из матрицы жесткостей  $\mathbf{C}$ , полученной в 1.2 «Исследование соединения полиина», перейти к динамической матрице  $\Omega$ . Таким образом, в ходе работы была построена матрица  $\Omega$  для соединения полиина и найдены ее собственные значения с помощью численных методов нахождения собственных значений для эрмитовых матриц для разных значений  $\tilde{k}$ . Результаты изображены на Рис. 2.2.

### 2.3 СТОХАСТИЧЕСКИЕ НАЧАЛЬНЫЕ УСЛОВИЯ

Далее в работе исследовалось поведение системы при задании стохастических начальных условий, соответствующих мгновенному тепловому удару. Также вводится понятие кинетической температуры  $T$ , вычисляемое по следу-

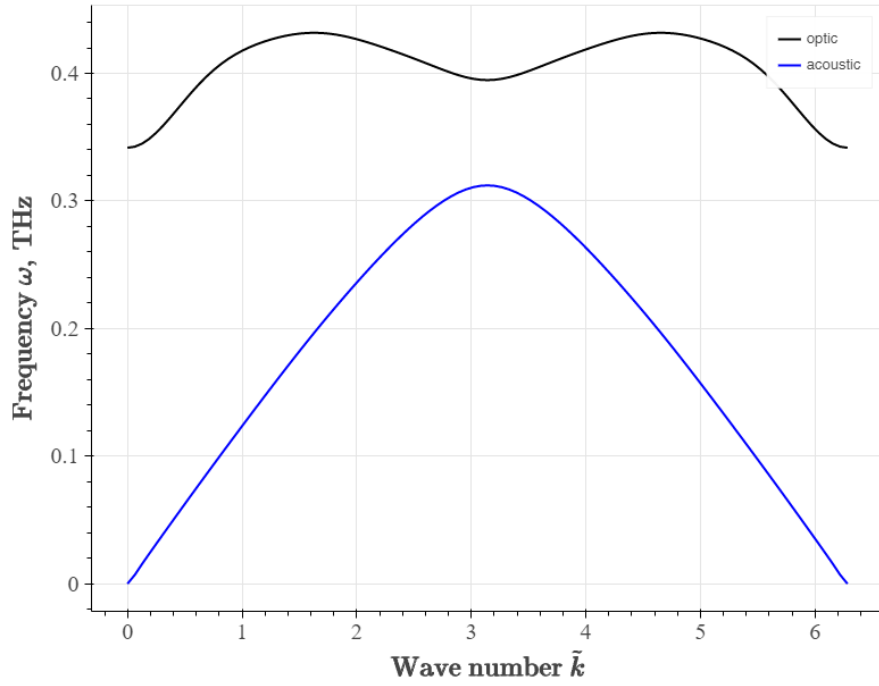


Рис. 2.2. Зависимость частоты от волнового числа для соединения полиина

ющей формуле:

$$T = 2k_b^{-1}\langle K \rangle \quad (20)$$

где  $\langle \dots \rangle$  — математическое ожидание по начальным условиям, в расчетах заменялось на среднее арифметическое по реализациям.  $K$  — средняя кинетическая энергия системы для 1 реализации,  $k_b$  — постоянная Больцмана.

Для модели гармонического кристалла поведение кинетической температуры однозначно определяется первыми и вторыми статическими моментами скоростей и перемещений в начальный момент времени. В этой работе рассматривались следующие начальные условия, соответствующие одинаковому распределению кинетической энергии по пространству в начальный момент времени:

$$\langle v_n \rangle = 0 \quad \langle v_n v_k \rangle = \frac{2K_0}{m} \delta_{kn} \quad u_n = 0 \quad (21)$$

где  $K_0$  — начальная кинетическая энергия 1-й частицы,  $\delta_{kn}$  — символ Кронекера.

Очевидно, что существует множество случайных распределений, которые удовлетворяют начальным условиям (21). В данной работе рассматривалось 2 таких способа.

Условиям (21) можно удовлетворить с помощью равномерного распре-

деления на следующем интервале:

$$v_n \in U \left[ -\sqrt{\frac{6K_0}{m}}, \sqrt{\frac{6K_0}{m}} \right]. \quad (22)$$

это было первым способом задания начальных условий.

Условию некоррелированности скоростей можно удовлетворить в случае задания стоячих волн с одинаковыми амплитудами. Похожий способ задания начальных условий использовался в работе [4], в которой было показано, что подобное распределение может обладать рядом удобных для исследования статистических свойств, например, неизменность кинетической энергии системы от реализации к реализации. Далее приводится математическая формулировка такого распределения и исследование его вторых статистических моментов:

$$v_n = \begin{cases} \pm A \pm A \cos(\pi n) + 2A \sum_{q=1}^{N/2-1} \cos\left(\frac{2\pi qn}{N} + \varphi_q\right) & \text{если } N \text{ четное} \\ \pm A + 2A \sum_{q=1}^{\lfloor N/2 \rfloor} \cos\left(\frac{2\pi qn}{N} + \varphi_q\right) & \text{если } N \text{ нечетное} \end{cases} \quad (23)$$

где  $\varphi_n \in U[0, 2\pi]$ . Знак  $\pm$  одинаков для всех  $n$  и меняется от реализации к реализации, подчиняясь распределению Бернулли (например, 0 — «+», 1 — «-»). Если положить  $\varphi_0, \varphi_{N/2} \in \{0, \pi\}$ , а  $\varphi_{N-q} = -\varphi_q$  для  $q > \lfloor N/2 \rfloor$  то (23) можно переписать следующим образом:

$$v_n = A \sum_{q=0}^{N-1} \exp\left(i\frac{2\pi qn}{N} + i\varphi_q\right) \quad (24)$$

в таком случае в силу независимости  $\varphi_q$ :

$$\begin{aligned} \langle v_n v_k \rangle &= \frac{A^2}{2\pi} \sum_{q=0}^{N-1} \int_0^{2\pi} \exp\left(i\frac{2\pi(n-k)q}{N}\right) d\varphi_q = A^2 \sum_{q=0}^{N-1} \exp\left(i\frac{2\pi(n-k)q}{N}\right) \\ &= NA^2 \delta_{n,k} \end{aligned} \quad (25)$$

Итого, для удовлетворения начальным условиям нужно положить  $A = \sqrt{\frac{2K_0}{mN}}$ .

Рассмотрим ковариации скоростей «по пространству» для одной реализации:

$$\begin{aligned} \langle v_n v_{n+j} \rangle_x &= \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} v_n v_{n+j} = \\ &= \frac{A^2}{N} \sum_{n=0}^{N-1} \left[ \sum_{q=0}^{N-1} \exp \left( i \frac{2\pi q n}{N} + i\varphi_q \right) \cdot \sum_{p=0}^{N-1} \exp \left( i \frac{2\pi p(n+j)}{N} + i\varphi_{n+j} \right) \right] = \quad (26) \\ &= \frac{A^2}{N} \sum_{q=0}^{N-1} \sum_{p=0}^{N-1} \sum_{n=0}^{N-1} \exp \left( i \frac{2\pi(q+p)n}{N} + i \frac{2\pi p j}{N} + i\varphi_q + i\varphi_p \right) \end{aligned}$$

Рассмотрим внутреннюю сумму:

$$\sum_{n=0}^{N-1} \exp \left( i \frac{2\pi(q+p)n}{N} + i \frac{2\pi p j}{N} + i\varphi_q + i\varphi_p \right) \quad (27)$$

Для случая  $q \neq N - p$  очевидно, что сумма равна 0. Для случая  $q = N - p$  получаем:

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{N-1} \exp \left( i \frac{2\pi(q+p)n}{N} + i \frac{2\pi p j}{N} + i\varphi_q + i\varphi_p \right) \Big|_{q=N-p} &= \\ \sum_{n=0}^{N-1} \exp \left( i \frac{2\pi p j}{N} \right) &= N \exp \left( i \frac{2\pi p j}{N} \right) \end{aligned} \quad (28)$$

Подставляем обратно в (26):

$$\langle v_n v_{n+j} \rangle_x = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} v_n v_{n+j} = A^2 \sum_{p=0}^{N-1} \exp \left( i \frac{2\pi p j}{N} \right) = N A^2 \delta_{n, n+j} \quad (29)$$

Из (25) и (26) можем заметить, что математическое ожидание по начальным условиям и математическое ожидание по «по пространству» совпадают для ковариаций скоростей с фиксированным сдвигом в начальный момент времени:

$$\langle v_n v_{n+j} \rangle = \langle v_n v_{n+j} \rangle_x \quad (30)$$

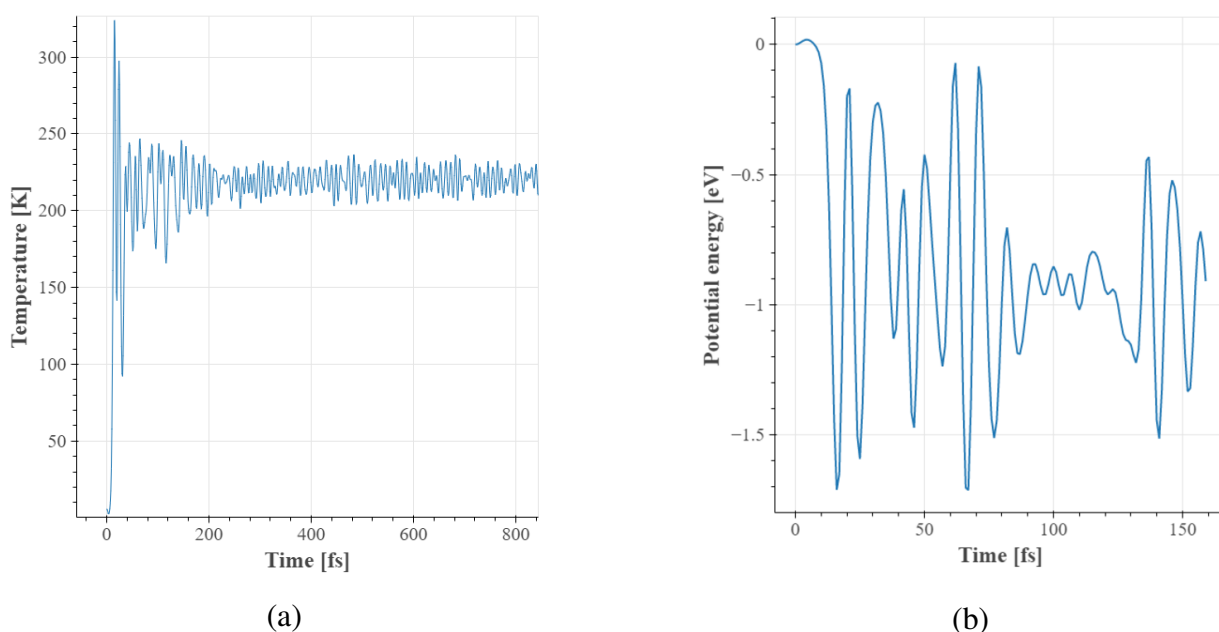


Рис. 2.3. Изменение кинетической температуры (a) и потенциальной энергии (b) системы с течением времени

Большой интерес представляют эргодичные системы, для которых знак равенства сохраняется также в процессе эволюции системы во времени. Таковыми системами являются системы, основанные на модели гармонического кристалла. При численном интегрировании уравнений динамики таких систем представленный способ задания начальных условий позволяет значительно сократить вычислительное время. Для получения эволюции кинетической температуры во времени достаточно получить зависимость средней кинетической энергии системы для одной реализации, которое будет равно математическому ожиданию кинетической энергии по начальным условиям.

## 2.4 ИССЛЕДОВАНИЕ ДИНАМИКИ КУМУЛЕНА ПРИ БОЛЬШОМ ЧИСЛЕ АТОМОВ

Как упоминалось ранее в разделе 1.1 «Исследование соединения кумулена», положение равновесия кумулена становится неустойчивым при числе атомов выше 27. Эти сведения, полученные с помощью анализа статической системы удалось подтвердить в результате численного моделирования динамики системы. Моделирование проводилось для 101 частицы с начальной температурой 5.83 К.

На Рис. 2.3 (a) можно наблюдать в начале резкий рост кинетической температуры до значения более 300 К, а затем постепенное затухание коле-

баний температуры на уровне около 215 К. Резкий рост можно объяснить, если взглянуть на Рис. 2.3 (b), где представлена временная эволюция потенциальной энергии для одной из реализаций (за ноль потенциальной энергии принято значение потенциальной энергии в начальный момент времени). Как видно из графика, в начальный момент времени потенциальная энергия не минимальная, и в ходе эволюции системы уменьшается. Это можно объяснить тем, что рассматриваемая углеродная цепочка неустойчива и даже при небольшом значении начальной кинетической температуры переходит в новое состояние.

Далее было исследовано новое состояние, в которое переходило цепочка. На Рис. 2.4 можно наблюдать, как изменяется расстояние между частицами с номерами 0 и 1, и 1 и 2. В начальный момент времени расстояние соответствовало равновесному положению кумулена: 1.29 Å. Однако в скором времени расстояние между ними изменилось до значений в районе 1.35 Å и 1.24 Å. Как было показано ранее в разделе 1.2 «Исследование соединения полиина», эти расстояния соответствуют равновесному положению полиина. Таким образом, система пытается перейти в более энергетически выгодное состояние соответствующее более устойчивому соединению. Можно также заметить, что в процессе временной эволюции расстояния между рассматриваемыми атомами чередовались друг с другом. Это можно объяснить тем, что система состояла из нечетного числа атомов, в которой соединение полиина в силу чередования связей не может полноценно реализоваться.

## 2.5 ИССЛЕДОВАНИЕ ДИНАМИКИ КУМУМЕНА ПРИ МАЛОМ ЧИСЛЕ АТОМОВ

При моделировании динамики системы из 25 атомов было обнаружено, что такая цепочка оказывается устойчивой, что также соответствует предварительному анализу системы из 1.1 «Исследование соединения кумулена». Было проведено несколько расчётов с использованием различных способов задания начальных условий, описанных в 2.3 «Стохастические начальные условия»: для больших амплитуд начальных скоростей (начальная температура системы 328 К), и для малых амплитуд (начальная температура 0.66 К).

На Рис. 2.5 (a) можно видеть, что при различных способах задания

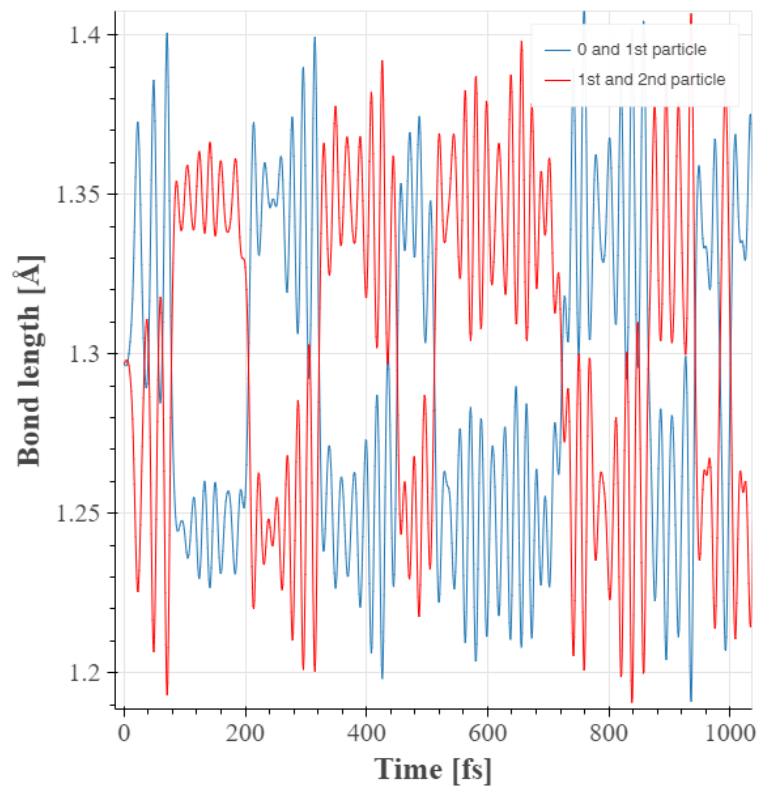


Рис. 2.4. Изменение расстояния между двумя соседними парами частиц с течением времени

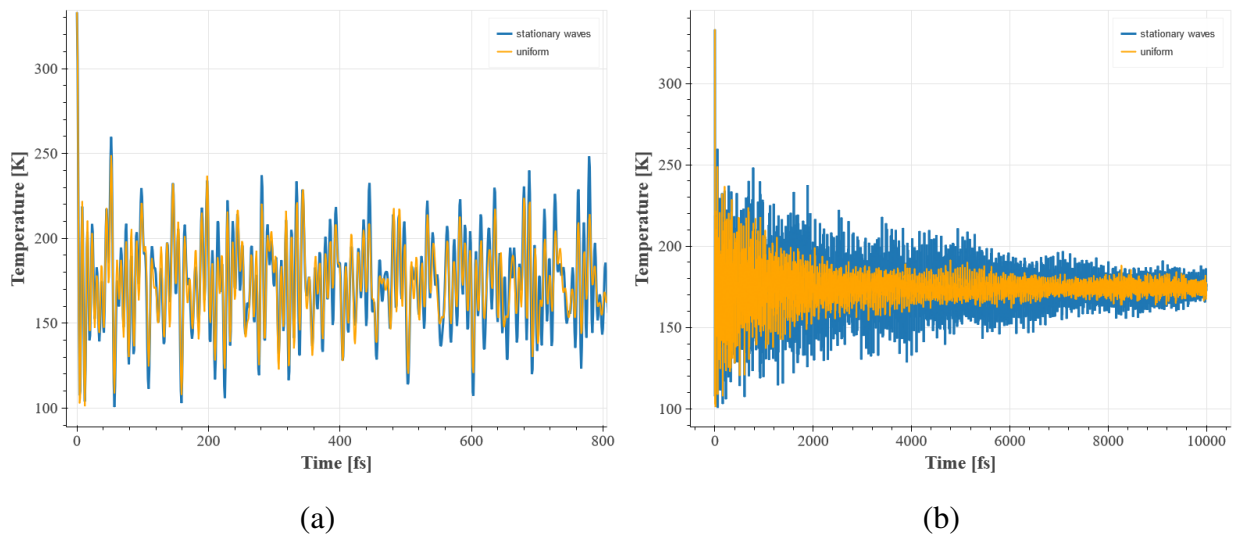


Рис. 2.5. Изменение кинетической температуры для больших амплитуд. Сравнение разных способов задания начальных условий на малых временах (a) и на больших временах (b)



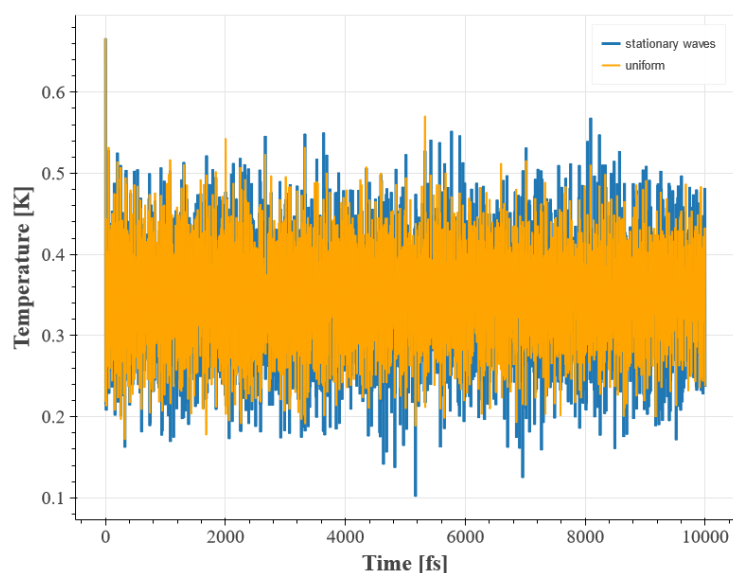


Рис. 2.6. Изменение кинетической температуры для малых амплитуд. Сравнение разных способов задания начальных условий

начальных условий кинетическая температура ведет себя приблизительно одинаково. На больших временах, как можно видеть из Рис. 2.5 (b), разница между способами задания начальных условий становится более заметной. Можно сделать вывод, что условия (21) не являются достаточными для рассматриваемой системы на больших амплитудах. Определение достаточных условий или определение дополнительных характеристик, которые влияют на изменение кинетической температуры, может быть предметом дальнейших исследований.

На Рис. 2.6 представлены результаты моделирования в случае задания малых возмущений скорости в начальный момент времени. Можно заметить отсутствие сильного затухания и большую схожесть решений для разных способов задания начальных условий в сравнении с большими возмущениями.

Дополнительно было проведено сравнение результатов, полученных посредством усреднения по реализациям с начальными условиями, сгенерированными согласно второму способу задания начальных условий, с результатами одной реализации, полученной аналогичным методом. Результаты сравнения можно видеть на Рис. 2.8. Как видно из графиков, для малых возмущений Рис. 2.8 (a) даже на больших временах результаты практически идентичны. Для больших возмущений Рис. 2.8 (b) результаты получились достаточно схожими. Таким образом, для оценки поведения кинетической температуры на начальных промежутках времени достаточно вычисления одной реализа-

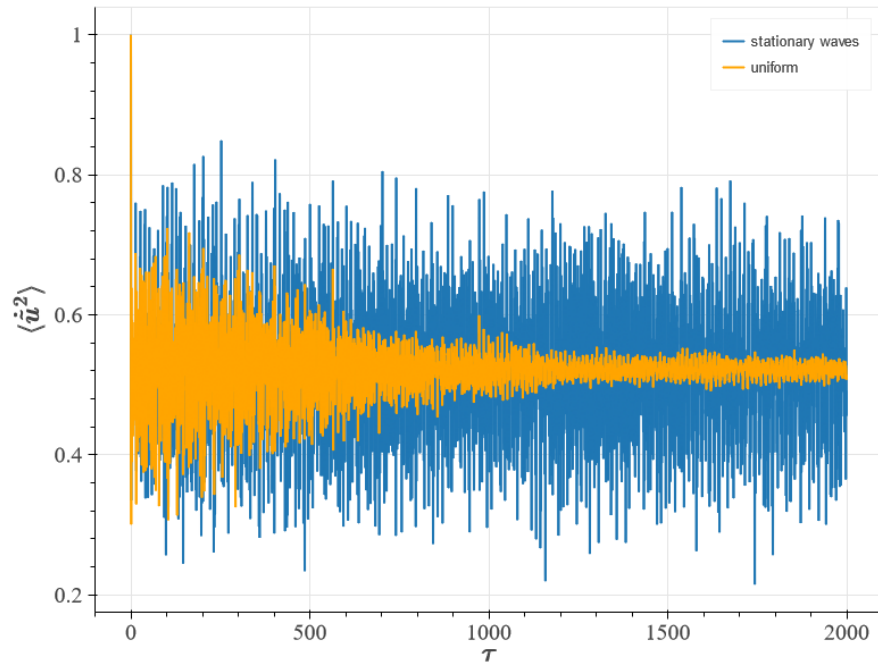


Рис. 2.7. Изменение второго статистического момента скоростей для цепочки  $\alpha$ -FPU при  $\alpha = 0.1$  и различных способах задания начальных условий

ции с начальными условиями, заданными вторым методом. Это позволяет значительно сократить время вычислений, что может быть критично при использовании ресурсоемких методов, таких как DFT и DFTB.

Также эффект различной скорости затухания кинетической температуры для разных способов задания начальных условий, как на Рис. 2.5, был обнаружен в цепочке  $\alpha$ -FPU из 25 частиц, определяемой следующими безразмерными динамическими уравнениями:

$$\ddot{\tilde{u}}_n = (\tilde{u}_{n+1} - 2\tilde{u}_n + \tilde{u}_{n-1}) + \alpha \left[ (\tilde{u}_{n+1} - \tilde{u}_n)^2 - (\tilde{u}_n - \tilde{u}_{n-1})^2 \right] \quad (31)$$

На Рис. 2.7 продемонстрированы результаты численного интегрирования уравнения (31) и вычисления дисперсии скоростей системы. Аналогично цепочке кумулена, в цепочке  $\alpha$ -FPU затухание кинетической энергии происходит быстрее для равномерного распределения. Это говорит о значительном влиянии нелинейных эффектов на динамику рассматриваемой углеродной цепочки. Таким образом, данный эффект можно в дальнейшем исследовать в рамках более простой модели  $\alpha$ -FPU.

Далее было произведено сравнение результатов с моделью гармонического кристалла. Для этого были получены дисперсионные соотношения для системы аналогичные 2.1 «Дисперсионные соотношения кумулена». Затем

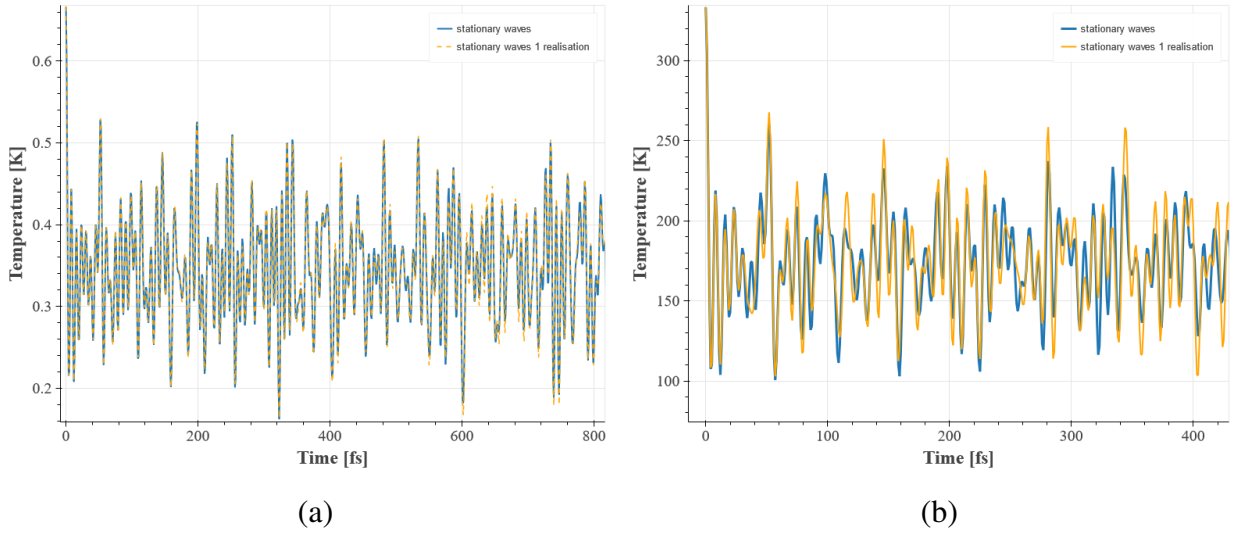


Рис. 2.8. Изменение кинетической температуры. Сравнение среднего результата всех реализаций с одной реализацией, полученной вторым методом задания начальных условий для малых (а) и больших (б) возмущений скоростей

были использованы результаты работ [9; 10], вводящих понятие обобщенной кинетической энергии  $\kappa$ :

$$\kappa(x, y) = \frac{m}{2} \langle v(x)v(y) \rangle \quad (32)$$

В работах [9; 10] было показано, что для рассматриваемой модели, обобщенная кинетическая энергия зависит только от разницы  $x - y$ :

$$\kappa(x, y) = \kappa(x - y) \quad (33)$$

Вводя дискретное преобразование Фурье  $\kappa$  по переменной  $x - y$  можно получить следующее аналитическое выражение для образа обобщенной кинетической энергии:

$$\hat{\kappa}(k) = \Phi \left[ \kappa(x - y) \right] = \frac{1 - 2 \cos 2\omega(k)t}{M} \quad (34)$$

В оригинальной работе использовалось дискретное преобразование Фурье для бесконечной последовательности определяемое следующими соотношениями:

$$\Phi \left[ f(x_n) \right] = \sum_{n=-\infty}^{\infty} f(x_n) \exp(-ikx_n) \quad (35)$$

$$\Phi^{-1}[\hat{f}(k)] = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \hat{f}(k) \exp(ikx) dk \quad (36)$$

В данной работе цепочка конечная, поэтому было использовано дискретное преобразование Фурье для последовательности из  $N$  элементов:

$$\Phi[f(x_n)] = \sum_{n=0}^{N-1} f(x) \exp(-ikx_n) \quad (37)$$

$$\Phi^{-1}[\hat{f}(k_q)] = \frac{1}{N} \sum_{q=0}^{N-1} \hat{f}(k_q) \exp(ik_q x_n) dk \quad (38)$$

Тогда выражение для эволюции кинетической температуры во времени можно получить по следующим формулам:

$$T(t) = \frac{1}{2} M \kappa(0) \quad (39)$$

$$\kappa(x - y) = \Phi^{-1} \left( \frac{1 - 2 \cos 2\omega(k)t}{M} \right) \quad (40)$$

На Рис. 2.9 представлены результаты временной эволюции кинетической энергии для модели гармонического кристалла и результатов, полученных с помощью DFTB при равномерном распределении начальных скоростей. Возмущения системы малые. С помощью обеих моделей удалось получить схожие результаты на малых временах. Различие результатов может быть обусловлено погрешностями при вычислении дисперсионных соотношений кумулена.

## 2.6 ИССЛЕДОВАНИЕ ИЗМЕНЕНИЯ

### КИНЕТИЧЕСКОЙ ТЕМПЕРАТУРЫ В ПОЛИИНЕ

В 2.2 «Дисперсионные соотношения полиина» была получена зависимость  $\omega(k)$  для этого соединения. Полученные дисперсионные соотношения, благодаря выражениям (39), (40), можно использовать для исследования изменения кинетической температуры в системе.

В данном случае будем рассматривать бесконечную систему, поэтому преобразование Фурье и обратное преобразование Фурье определяются соотношениями (35) и (36) соответственно.

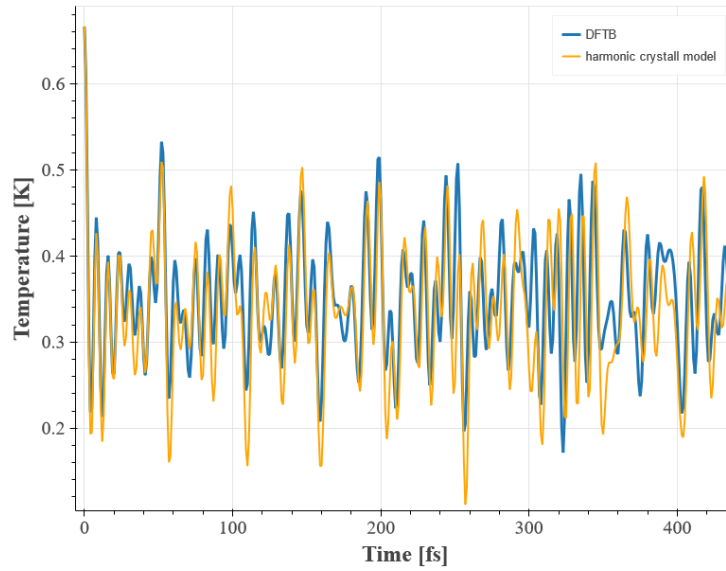


Рис. 2.9. Изменение кинетической температуры для малых амплитуд. Сравнение результатов на основе DFTB и модели гармонического кристалла

Итоговое выражение для кинетической температуры в случае некоррелированности скоростей внутри одной элементарной ячейки (т.е.  $\langle v_{1n}v_{2n} \rangle = 0$ ) можно записать в виде суммы трех слагаемых:

$$T(t) = \frac{T_0}{2} + T_{ac}(t) + T_{opt}(t) \quad (41)$$

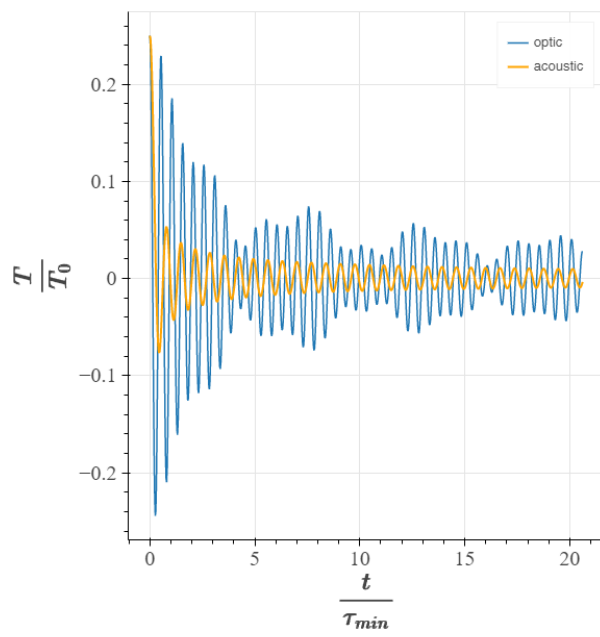
где  $T_{ac}$ ,  $T_{opt}$  — вклады акустической и оптической ветви в изменение кинетической температуры соответственно, определяемые следующими формулами:

$$T_{ac} = \frac{1}{8\pi} \int_0^{2\pi} \cos(2\omega_{ac}(\tilde{k})t) d\tilde{k} \quad (42)$$

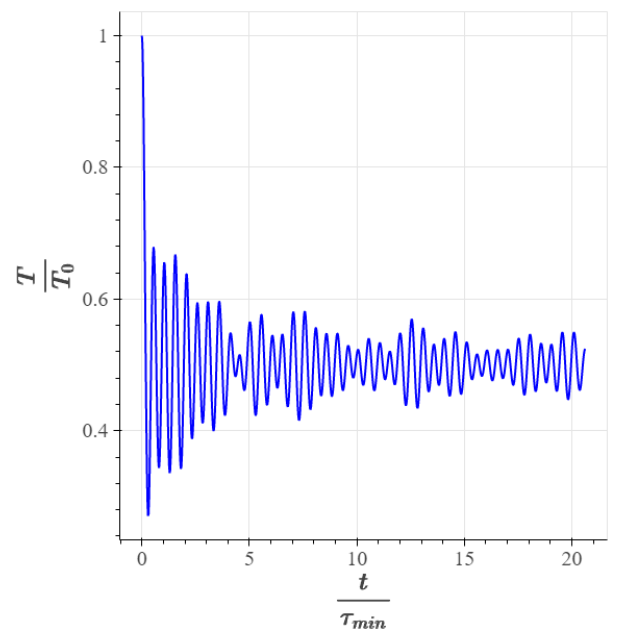
$$T_{opt} = \frac{1}{8\pi} \int_0^{2\pi} \cos(2\omega_{opt}(\tilde{k})t) d\tilde{k} \quad (43)$$

Вычисление интегралов производилось численно с помощью метода интегрирования быстро осциллирующих функций, описанного в [12]. На Рис. 2.10 (а) представлена временная эволюция вклада оптической и акустической ветви в кин. температуру. На Рис. 2.10 (б) представлено итоговое изменение кинетической температуры системы во времени.

Можно заметить, что вклад оптической ветви затухает медленнее вклада акустической ветви. Это явление требует дополнительного анализа асимптотики, например, с помощью метода стационарной фазы.



(a)



(b)

Рис. 2.10. Сравнение вкладов акустической и оптической ветви в изменение кинетической температуры полиина (а). Суммарное изменение кинетической температуры во времени (b)

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной выпускной квалификационной работе с помощью моделирования на основе метода Density Functional based Tight Binding (DFTB) было проведено исследование тепловых процессов в углеродных цепочках кумулена и полиина.

В ходе выполнения работы были изучены равновесные состояния рассматриваемых углеродных цепочек, соответствующие соединениям кумулена и карбина. Было произведено сравнение результатов с оригинальным, более ресурсоемким, методом Density functional theory (DFT). С помощью DFTB-моделирования были получены дисперсионные соотношения для продольных колебаний кумулена и полиина. Полученные дисперсионные соотношения были затем использованы для изучения временной эволюции кинетической температуры в рамках подхода, описанного в работах [9] и [10].

С помощью численного интегрирования уравнений динамики углеродной цепочки, силы в которых на каждом шаге интегрирования рассчитываются методом DFTB, были получены зависимости кинетической температуры от времени для различных способов задания начальных условий. Эти зависимости были сравнены с результатами, рассчитанными в рамках модели гармонического кристалла с помощью полученных дисперсионных соотношений. В результате было установлено, что модель гармонического кристалла достаточно хорошо описывает поведение кинетической температуры, полученное прямым DFTB-моделированием динамики углеродной цепочки, на малых временах и/или при малых начальных скоростях. Было проведено сравнение временной эволюции кинетической температуры для двух различных способов задания начальных условий. Оказалось, что поведение кинетической температуры зависит от способа задания начальных условий. Данный эффект был воспроизведен на более простой модели  $\alpha$ -FPU.

Кроме этого, на языке Python был разработан ряд компьютерных программ для исследования углеродных цепочек на основе DFTB-моделирования. Эти программы, среди прочего, позволяют определять коэффициенты жесткости и дисперсионные соотношения для продольных колебаний углеродной цепочки в гармоническом приближении.

Полученные результаты можно использовать в дальнейшем для изуче-

ния осцилляций кинетической температуры при задании пространственно-неоднородного начального профиля кинетической энергии, явления баллистического резонанса, т.е. перехода колебаний температуры в механические колебания [9; 11], и других тепловых и термомеханических явлений.

Также в качестве одного из направлений дальнейшего исследования, помимо тех, что уже были обозначены в работе, можно указать уточнение решений для кинетической температуры с помощью использования ренормализованных дисперсионных соотношений, учитывающих нелинейность рассматриваемой системы.



## СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Chang C.-W. Experimental Probing of Non-Fourier Thermal Conductors // Thermal Transport in Low Dimensions: From Statistical Physics to Nanoscale Heat Transfer / под ред. S. Lepri. — Cham : Springer International Publishing, 2016. — С. 305—338. — ISBN 978-3-319-29261-8. — DOI: 10.1007/978-3-319-29261-8\_8. — URL: [https://doi.org/10.1007/978-3-319-29261-8\\_8](https://doi.org/10.1007/978-3-319-29261-8_8).
2. Chechin G., Usoltsev O., Sizintsev D. On stability of nonlinear atomic vibrations in strained carbon chains // Письма о материалах. — 2016. — Т. 6, № 4. — С. 309—316. — DOI: 10.22226/2410-3535-2016-4-309-316. — URL: <https://lettersonmaterials.com/ru/Readers/Article.aspx?aid=1126>.
3. DFTB+, a software package for efficient approximate density functional theory based atomistic simulations / В. Hourahine [и др.] // The Journal of Chemical Physics. — 2020. — Март. — Т. 152, № 12. — ISSN 0021-9606. — DOI: 10.1063/1.5143190. — eprint: [https://pubs.aip.org/aip/jcp/article-pdf/doi/10.1063/1.5143190/16711771/124101\\\_\\_1\\\_\\_online.pdf](https://pubs.aip.org/aip/jcp/article-pdf/doi/10.1063/1.5143190/16711771/124101\__1\__online.pdf). — URL: <https://doi.org/10.1063/1.5143190> ; 124101.
4. Equilibration of sinusoidal modulation of temperature in linear and nonlinear chains / E. A. Korznikova [и др.] // Phys. Rev. E. — 2020. — Дек. — Т. 102, вып. 6. — С. 062148. — DOI: 10.1103/PhysRevE.102.062148. — URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.102.062148>.
5. Gaus M., Goez A., Elstner M. Parametrization and Benchmark of DFTB3 for Organic Molecules // Journal of Chemical Theory and Computation. — 2013. — Т. 9, № 1. — С. 338—354. — DOI: 10.1021/ct300849w. — eprint: <https://doi.org/10.1021/ct300849w>. — URL: <https://doi.org/10.1021/ct300849w> ; PMID: 26589037.
6. Jones J. E., Chapman S. On the determination of molecular fields.—I. From the variation of the viscosity of a gas with temperature // Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character. — 1924. — Т. 106, № 738. — С. 441—462. — DOI: 10.1098/rspa.1924.0081. — eprint: <https://royalsocietypublishing.org/doi/pdf/10.1098/rspa.1924.0081>. — URL: <https://royalsocietypublishing.org/doi/abs/10.1098/rspa.1924.0081>.

7. Kohn W. Nobel Lecture: Electronic structure of matter—wave functions and density functionals // *Rev. Mod. Phys.* — 1999. — Окт. — Т. 71, вып. 5. — С. 1253—1266. — DOI: 10.1103/RevModPhys.71.1253. — URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.71.1253>.
8. Krivtsov A. M. Dynamics of matter and energy // *ZAMM - Journal of Applied Mathematics and Mechanics / Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik.* — 2023. — Т. 103, № 4. — e202100496. — DOI: <https://doi.org/10.1002/zamm.202100496>. — eprint: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/zamm.202100496>. — URL: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/zamm.202100496>.
9. Kuzkin V. A., Krivtsov A. M. Fast and slow thermal processes in harmonic scalar lattices // *Journal of Physics: Condensed Matter.* — 2017. — Ноябрь. — Т. 29, № 50. — С. 505401. — DOI: 10.1088/1361-648X/aa98eb. — URL: <https://dx.doi.org/10.1088/1361-648X/aa98eb>.
10. Kuzkin V. A. Thermal equilibration in infinite harmonic crystals // *Continuum Mechanics and Thermodynamics.* — 2019. — Сентябрь. — Т. 31, № 5. — С. 1401—1423. — ISSN 1432-0959. — DOI: 10.1007/s00161-019-00758-2. — URL: <https://doi.org/10.1007/s00161-019-00758-2>.
11. Kuzkin V. A., Krivtsov A. M. Ballistic resonance and thermalization in the Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou chain at finite temperature // *Physical Review E.* — 2020. — Апрель. — Т. 101, № 4. — DOI: 10.1103/physreve.101.042209. — URL: <https://doi.org/10.1103/physreve.101.042209>.
12. Levin D. Procedures for Computing One- and Two-Dimensional Integrals of Functions with Rapid Irregular Oscillations // *Mathematics of Computation.* — 1982. — Т. 38, № 158. — С. 531—538. — ISSN 00255718, 10886842. — URL: <http://www.jstor.org/stable/2007287> (дата обр. 06.06.2023).
13. Liazhkov S. D. Energy supply into a semi-infinite  $\beta$ -Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou chain by periodic force loading. — 2023. — arXiv: 2212.09441v2 [cond-mat.stat-mech].
14. Morse P. M. Diatomic Molecules According to the Wave Mechanics. II. Vibrational Levels // *Phys. Rev.* — 1929. — Июль. — Т. 34, вып. 1. —

- C. 57—64. — DOI: 10.1103/PhysRev.34.57. — URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.34.57>.
15. Rickert W., Vilchevskaya E., Mueller W. A note on Couette flow of micropolar fluids according to Eringen's theory // *Mathematics and Mechanics of Complex Systems*. — 2019. — Апр. — Т. 7. — С. 25—50. — DOI: 10.2140/memocs.2019.7.25.
  16. Rieder Z., Lebowitz J., Lieb E. Properties of a Harmonic Crystal in a Stationary Nonequilibrium State // *Journal of Mathematical Physics*. — 1967. — Май. — Т. 8. — С. 1073—1078. — DOI: 10.1063/1.1705319.
  17. SciPy 1.0: Fundamental Algorithms for Scientific Computing in Python / P. Virtanen [и др.] // *Nature Methods*. — 2020. — Т. 17. — С. 261—272. — DOI: 10.1038/s41592-019-0686-2.
  18. Verlet L. Computer "Experiments" on Classical Fluids. I. Thermodynamical Properties of Lennard-Jones Molecules // *Phys. Rev.* — 1967. — Июль. — Т. 159, вып. 1. — С. 98—103. — DOI: 10.1103/PhysRev.159.98. — URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.159.98>.