

# Гиросолитоны и винтовая серфинг-диффузия примесных атомов в топливных реакторных материалах

О. А. Дубовский, В. А. Семенов, А. В. Орлов<sup>1)</sup>

Физико-энергетический институт им. Лейпунского, 249033 Обнинск, Россия

Поступила в редакцию 1 апреля 2015 г.

После переработки 30 июня 2015 г.

Методом компьютерного моделирования микродинамики высокоамплитудных атомных колебаний в топливных реакторных материалах типа  $\text{UO}_2$  и  $\text{PuO}_2$  обнаружены принципиально новые гиросолитоны с винтовыми траекториями движения. Как и в гиротропных материалах, в фононных спектрах наноструктур присутствуют квазиоптические ветви с разнознаковой линейной дисперсией. На фазовой плоскости в спектральной плотности колебаний обнаружены соответствующие ветви гиросолитонов. Наблюдался основной динамический акт кинетического процесса винтовой серфинг-диффузии примесных атомов на гиросолитонах.

DOI: 10.7868/S0370274X15150084

В настоящее время методом нейтронной спектроскопии ведутся экспериментальные исследования микродинамики высокоамплитудных нелинейных колебаний кристаллических решеток топливных материалов  $\text{U}$ ,  $\text{UN}$ ,  $\text{UO}_2$ ,  $\text{PuO}_2$  при высоких температурах. В [1] в спектрах рассеяния нейтронов на  $\alpha$ -фазе урана при высокой температуре (500 К) был обнаружен новый резонансный пик, не наблюдавшийся при более низких температурах. Авторы идентифицировали этот резонанс как связанный с генерацией нелинейной самолокализованной моды. В [2] было показано, что в кристаллах при большой энергии может генерироваться динамическая мультисолитонная суперрешетка. В [3] в спектрах рассеяния нейтронов на кристалле  $\text{NaI}$  при восстановлении спектров колебаний кристалла было со ссылкой на [2] обнаружено расщепление оптической ветви, фиксирующее генерацию сверхрешетки. В [4] представлена изготовленная по нанотехнологии перспективная двуокись  $\text{UO}_2$ . В ОИЯИ на нейтронном спектрометре ДИН-2ПИ при высоких температурах (до 1500 К) проводятся измерения спектров рассеяния нейтронов на топливных реакторных материалах и осуществляется восстановление спектров колебаний их кристаллических решеток для определения необходимых термодинамических характеристик материалов [5, 6].

Теория нелинейных акустических и инфракрасных оптических колебаний кристаллов [7–11], а также нейтронные и оптические эксперименты показыва-

ли, что не учитываемая ранее в полном объеме нелинейность колебаний в рамках квантовой теории является причиной не только фонон-фононного рассеяния в ансамбле диссоциированных многофононных состояний, но и появления принципиально новых связанных многофононных состояний. В квантовом подходе это связанные бифононы, трифононы, квартафононы и пентафононы [8–11], а в классическом подходе – нелинейные волны различного типа (солитоны, бризеры и т.д. [12]). Трифононы [9] впоследствии наблюдались и экспериментально [13] в спектрах рассеяния нейтронов на гидриде титана. В последнее время были обнаружены и новые типы нелинейных волн: ондуляторные солитоны, определяющие микродинамику структурных фазовых переходов [14], бисолитоны со слабой [15] и сильной [16] связью солитонов. Генетически близкие гирационные эффекты вращения плоскости поляризации электромагнитного излучения экситонов гиротропных материалов представлены в [17]. В [18, 19] в феноменологическом подходе и в [20] при микроскопическом подходе исследовались поверхностные волны на границе контактирующих энантиоморфных гиротропных материалов.

На рис. 1а представлена общая 3D-структура расположения атомов урана и кислорода (закрытые и открытые кружки) в базовом кубике аналогичных кристаллов двуокиси  $\text{UO}_2$  и  $\text{PuO}_2$  с гранецентрированной кубической решеткой. Выделена одна пространственная диагональ с двумя атомами  $\text{U}$  в углах кубика и двумя ближайшими к ним атомами  $\text{O}$ . На периодическом продолжении этой диагонали

<sup>1)</sup>e-mail: orlovav@obninsk.ru

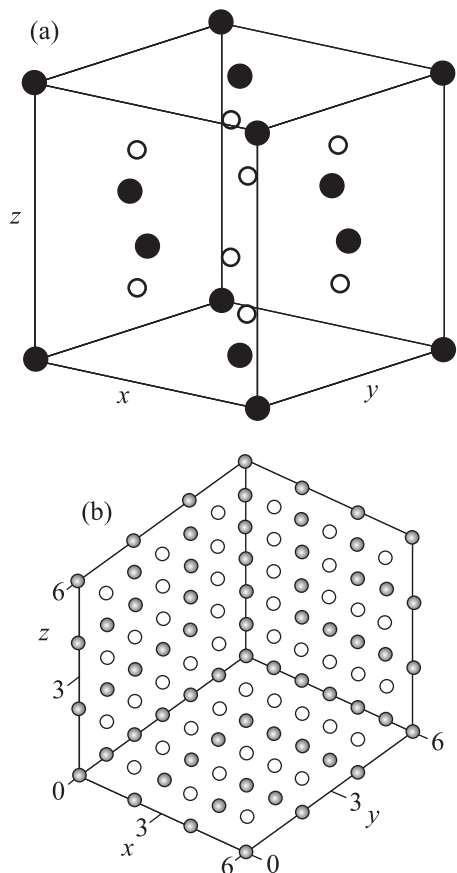


Рис. 1. Кристаллическая структура  $UO_2$ . (a) – Элементарный кубик с атомами U (закрытые кружки) и O (открытые кружки). (b) – Кубик Рубика из элементарных кубиков с панели а с пространственной диагональю, ортогональной плоскости рисунка

в ближайшем окружении каждого атома U будут находиться два атома O, составляя в комбинации линейную “квазимолекулу”  $UO_2$ . Период 3D кристаллической решетки этой группы  $Fm\bar{3}m$  равен  $r = 5.47 \text{ \AA}$ . Расстояние между атомом урана и атомом кислорода в квазимолекуле  $a = \sqrt{3}r/4 = 2.37 \text{ \AA}$ . Проведено компьютерное моделирование нанокристалла из 27 кубиков с рис. 1a, составленных при соответствующих смещениях на постоянную решетки в кубик Рубика. На рис. 1b в 3D-пространстве представлен полученный нанокристалл в проекции, при которой пространственная диагональ кубиков с рис. 1a направлена по нормали к плоскости рисунка. На нем видна стандартная 2D-структура гексагональной плотной упаковки атомов с поверхностными атомами кислорода и урана. Компьютерное вращение осей показало, что за каждым атомом на рис. 1b находится 1D кристаллическая цепочка квазимолекул, ортогональная поверхности рисунка. В [4] представле-

ны результаты материаловедческих работ по изготовлению диоксида урана с использованием нанотехнологии. Полученные материалы демонстрируют существенно улучшенные характеристики. Поэтому на начальном этапе исследования динамических и спектральных характеристик системы с рис. 1 представляет интерес изучение этих характеристик для нанокристалла – элементарного блока гексагональной плотной упаковки (рис. 1b). Этот блок представлен на рис. 2 правильной трехгранной призмой из трех

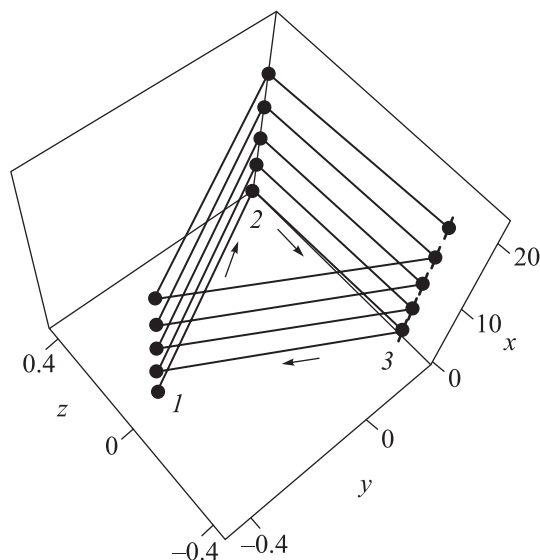


Рис. 2. Элементарный нанокристалл гексагональной плотной упаковки с рис. 1b из 1D кристаллических цепочек 1, 2, 3, сдвинутых по ломаной винтовой линии в направлении стрелок

1D кристаллических цепочек квазимолекул. Атомы урана в соответствии с массой показаны более жирными точками, чем атомы кислорода. Исследование динамических и спектральных характеристик такого нанокристалла представляет и самостоятельный интерес, поскольку его результаты могут быть использованы и применительно к более сложным нанотрубкам, в которых были обнаружены сдвиговые и продольные кольцевые солитоны [21]. Этот нанокристалл в проекции рис. 1b представляется элементарным треугольником справа и сверху от центральной точки. Цепочки 1, 2, 3, вытянутые в направлении оси  $x$  на рис. 2, в этом треугольнике на рис. 1b соответствуют нумерации от центральной точки по часовой стрелке. Отметим, что в 1D кристаллической цепочке 2 все атомы в положительном направлении диагонали (оси  $x$  на рис. 2) смещены относительно атомов цепочки 1 на расстояние  $(4/3)a$ , а атомы цепочки 3 смещены относительно атомов цепочки 2 на такое же

расстояние  $(4/3)a$ . При дальнейшем смещении атомов цепочки 3 на ту же величину  $(4/3)a$  с переходом к ребру 1 призмы цепочка 3 совместится с цепочкой 1. Таким образом, ось призмы является осью локального левостороннего вращения 3-го порядка, указанное стрелками вдоль ломаной “винтовой” линии на рис. 2, проведенной по атомам U.

Как известно, Ферми, Паста и Улам [27] при изучении нелинейных высокоамплитудных продольных колебаний в кристаллических системах из 32 и 64 связанных нелинейных осцилляторов обнаружили принципиально новый эффект возврата. Следуя этому методу, на первом этапе мы изучали солитонную микродинамику представленного на рис. 2 кристалла с числом атомов  $N = 90$  и 126. Исследовались продольные коллективные колебания атомов вдоль оси нанокристалла, т.е. в направлении пространственной диагонали. Например, при генерации энергии на одной стороне пластины с пространственной диагональю, ортогональной плоскости пластины, и сьеме энергии на другой стороне теплоперенос и массоперенос осуществляются именно этими колебаниями.

Использовались следующие потенциалы Леннарда–Джонса взаимодействия двух атомов, U и O, на расстоянии  $r_{UO}$ , двух атомов O на расстоянии  $r_{OO}$  и двух атомов U на расстоянии  $r_{UU}$ :

$$\begin{aligned} V_{UO}(r_{UO}) &= (\varepsilon/12) [(a/r_{UO})^{12} - 2(a/r_{OO})^6], \\ V_{OO}(r_{UO}) &= (\varepsilon/12) [(2a/r_{OO})^{12} - 2(2a/r_{OO})^6], \\ V_{UU}(r_{UU}) &= (\varepsilon/12) [(r_{UU}^{(0)}/r_{UU})^{12} - 2(r_{UU}^{(0)}/r_{UU})^6], \end{aligned} \quad (1)$$

где  $r_{UU}^{(0)} = \sqrt{\beta}a$  ( $\beta = 8/3$ ) – расстояние между ближайшими атомами U в равновесном состоянии. Эти потенциалы, в отличие от других часто используемых в нелинейной теории колебаний потенциалов, имеют корректные асимптотики при предельно больших и предельно малых межатомных расстояниях, необходимые при изучении высокоамплитудных колебаний. В (1) константа  $\varepsilon$  определяет энергии связанных равновесных состояний, при которых  $dV(r) = dr = 0$ . Согласование с экспериментальными данными [6] определило значение  $\varepsilon = 12.5$  эВ. Граничные подвижные атомы при тех же потенциалах взаимодействуют с неподвижными “вмороженными” атомами обязательной прочной оболочки топливных материалов. Подробная детализация потенциалов не проводилась во избежание излишней параметризации. Пробное введение отличающихся констант связи одного порядка не изменило результаты.

Поскольку  $UO_2$  и  $PuO_2$  имеют одинаковые кристаллические структуры, для универсальности ис-

пользовались безразмерные переменные: координаты атомов  $x, y, z$  с измерением расстояний в единицах  $a$ , массы в единицах массы  $M$  урана или плутония и время  $\tau = t/t_c$  в единицах  $t_c = \sqrt{Ma^2/\varepsilon} = 1.06 \cdot 10^{-13}$  с. В этом представлении система динамических уравнений для координат атомов имеет следующий компактный общий вид:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 x_{n,1}^{(i,O)}}{d\tau^2} &= \mu \left[ - \frac{\partial}{\partial x_{n,1}^{(i,O)}} V_{OO}(x_{n,1}^{(i,O)} - x_{n-1,2}^{(i,O)}) - \right. \\ &\quad \left. - \frac{\partial}{\partial x_{n,1}^{(i,O)}} V_{UO}(x_{n,1}^{(i,O)} - x_n^{(i,U)}) \right], \\ \frac{d^2 x_{n,2}^{(i,O)}}{d\tau^2} &= \mu \left[ - \frac{\partial}{\partial x_{n,2}^{(i,O)}} V_{OO}(x_{n,2}^{(i,O)} - x_{n+1,1}^{(i,O)}) - \right. \\ &\quad \left. - \frac{\partial}{\partial x_{n,2}^{(i,O)}} V_{UO}(x_{n,2}^{(i,O)} - x_n^{(i,U)}) \right], \\ \frac{d^2 x_n^{(i,U)}}{d\tau^2} &= - \left[ \sum_{j=1,2} \frac{\partial}{\partial x_n^{(i,U)}} V_{UO}(x_n^{(i,U)} - x_{n,j}^{(i,O)}) \right] - \\ &\quad - \left[ \sum_{j \neq 1} \frac{\partial}{\partial x_n^{(i,U)}} V_{UU}(x_n^{(i,U)} - x_{n-m}^{(j,U)}) \right]. \end{aligned} \quad (2)$$

В (2) координаты  $x_{n,1}^{(i,O)}$  и  $x_{n,2}^{(i,O)}$  представляют позиции “левых” и “правых” атомов O относительно координаты  $x_n^{(i,U)}$  центрального в квазимолекуле атома U или Pu. Индекс  $i = 1, 2, 3$  указывает номер 1D кристаллической цепочки на рис. 2, а индекс “ $n$ ” – номер элементарной ячейки. В матрице  $m(i, j)$  отличны от нуля только  $m(1, 3) = 1$  и  $m(3, 1) = -1$ . Параметр  $\mu = M_U/M_O$  определяется отношением масс U и O.

Представляет интерес исследование спектра малоамплитудных фоновых колебаний такой системы. Поскольку в элементарной ячейке нанокристалла находятся 3 квазимолекулы и каждая из них включает три атома, в спектре будет присутствовать 9 отдельных ветвей. При выявлении принципиальных особенностей спектра на первом этапе не учитывались взаимодействия U–O и O–O. При этом в бесконечном нанокристалле (рис. 2) с тремя атомами в элементарной ячейке после разложения по малым амплитудам колебаний для волновых решений с волновым вектором  $k$  и частотой  $\omega$  соответствующее дисперсионное уравнение имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} (\omega^2 - 2B)^3 - 3(\omega^2 - 2B)B^2 + 2B^3 \cos(4k) &= 0, \\ B &= 4.2 \cdot 10^{-3}. \end{aligned} \quad (3)$$

Из (3) непосредственно определяется обратная дисперсионная зависимость:  $k = (1/4) \arccos\{[3B^2(\omega^2 - 2B) - (\omega^2 - 2B)^3]/2B^3\}$ .

Для частот кубическое по  $\omega^2$  уравнение (3) имеет следующие три решения:

$$\begin{aligned} \omega_k^{(1)} &= \sqrt{2B} \sqrt{1 - \cos(4k/3)}, \\ \omega_k^{(2,3)} &= \sqrt{2B} \sqrt{1 + \cos[(\pi \pm 4k)/3]}. \end{aligned} \quad (4)$$

Три дисперсионные зависимости (4) представлены на рис. 3 линиями 1, 2, 3. Обращает на себя вни-

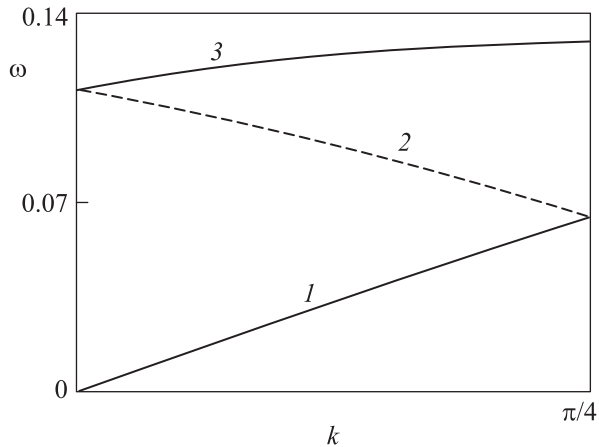


Рис. 3. Низкочастотные дисперсионные зависимости без учета атомов О. Квазиоптические ветви 2, 3 имеют характерную для гиротропных материалов отрицательную и положительную линейную по волновому вектору дисперсию

мание тот факт, что наряду со стандартной акустической ветвью  $\omega_k^{(1)}$  в спектре присутствуют две квазиоптические ветви  $\omega_k^{(2,3)}$ , стыкующиеся при  $k = 0$  с линейными зависимостями частоты от  $k$ . При этом групповые скорости  $d\omega/dk$  данных ветвей противоположны по знаку. Указанные ветви совершенно аналогичны оптическим экситонным ветвям с линейными при  $k = 0$  дисперсионными зависимостями гиротропных оптических материалов, в которых происходит вращение плоскости поляризации напряженности электрического поля [17–20]. При этом если учесть возможность разделения зарядов в квазимолекулах  $UO_2$ , то колебания квазимолекул могут генерировать квадрупольное и дипольное излучение [6]. Отметим, что эффект пространственной дисперсии, пропорциональный первой производной по пространству, с частотой, линейной по  $k$ , в этих материалах более существенен, чем эффект второго порядка с квадратичной зависимостью  $\omega$  от  $k$ . Таким образом, присутствие стыкующихся ветвей с линейной при  $k = 0$  зависимостью от  $k$  является признаком существования возбуждений гирационного типа. При учете взаимодействий U–O и O–O решения системы

9 уравнений дали остальные согласующиеся с экспериментом дисперсионные ветви в интервале энергий до 0.1 эВ.

Для представленных на рис. 2 позиций атомов правые части системы (2) тождественно равны нулю. Для дополнительной проверки устойчивости этой кристаллической структуры было проведено компьютерное решение (2) без каких-либо начальных смещений и скоростей. На первом этапе для выяснения основных динамических и спектральных характеристик рассматривалась только система из 17 атомов урана в структуре с рис. 2 без учета потенциалов  $V_{OO}$ ,  $V_{UO}$ . На рис. 4а представлена зависимость

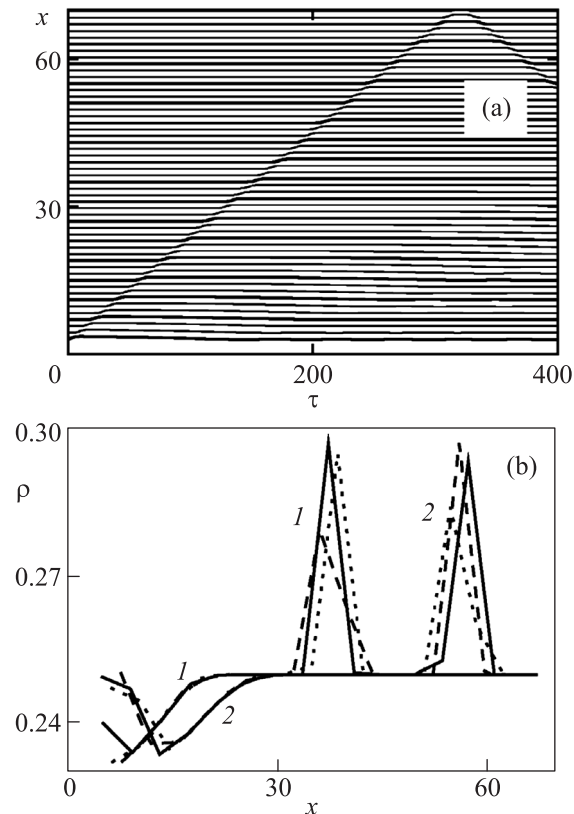


Рис. 4. Динамические зависимости смещений атомов от времени, демонстрирующие распространение гиролитона по атомам U без учета атомов О (а). Пространственные зависимости микроплотности от координаты, демонстрирующие смещение гиролитонных горбов плотности сжатия и провалов разрежения от 1 при  $\tau = 164$  к 2 при  $\tau = 252$  (б). Сплошные, точечные и штриховые линии – микроплотности по 1D-цепочкам 1, 2 и 3

смещений всех атомов от времени при начальной скорости атома урана  $v_0 = 0.1$  с наименьшей стартовой  $x$ -координатой. Видно, что по кристаллу с постоянной скоростью  $v = 0.22$  движется солитонная волна

со сложной внутренней структурой. За ней также виден слабый, но заметный след второго возбуждения, движущегося с меньшей скоростью. Детали этих возбуждений проявляются при рассмотрении изменения со временем пространственной зависимости микроплотности  $\rho_n^{(i)}(\tau) = (x_n^{(i)}(\tau) - x_{n-1}^{(i)}(\tau))^{-1}$  от координаты  $R_n^{(i)}(\tau) = 0.5(x_n^{(i)}(\tau) + x_{n-1}^{(i)}(\tau))$  в каждой 1D-цепочке с номером  $i = 1, 2, 3$ . Эта зависимость была представлена в виде анимационного видеоклипа. На рис. 4б показаны два совмещенных кадра видеоклипа: в момент времени  $\tau = 164$  с группой 1 из трех близких зависимостей и в момент  $\tau = 252$  с такой же группой 2. В каждой группе сплошной линией представляется микроплотность в 1D-цепочке 1, точечной – в цепочке 2 и штриховой – в цепочке 3. Высокоскоростной солитон представляется горбом сжатия с увеличенной плотностью, смещающимся со временем со скоростью  $v = 0.22$  в размерных величинах  $v = 0.4 \cdot 10^5$  см/с. Низкоскоростной солитон представляется смещающимся со временем со скоростью  $v = 0.06$  провалом разрежения, следующим за солитоном сжатия.

При просмотре видеofilма была видна и внутренняя структура солитона сжатия. На рис. 5 в большем масштабе для малых интервалов времени представлена динамика изменения внутренней структуры солитона сжатия. Видно, что при  $\tau = 163$  (рис. 5а) наибольшее значение микроплотности достигается на 1D-цепочке 1 рис. 2, при  $\tau = 169$  (рис. 5б) – на цепочке 2, при  $\tau = 176$  (рис. 5с) – на цепочке 3 и, наконец, при  $\tau = 182$  (рис. 5д) снова на цепочке 1. На видеоклипе видно, как происходит такое периодическое чередование. Рис. 5а–д и 4а демонстрируют движение гиросолитона (ГС) сжатия в направлении стрелок по ломаной винтовой линии рис. 2. Таков же характер движения и у ГС разрежения, следующего за ГС сжатия с меньшей скоростью.

Для исследования возможности генерации ГС в двуокисях рассматривалась система из 90 атомов U и O с полным учетом потенциалов  $V_{OO}$ ,  $V_{UO}$ . На рис. 6а представлена зависимость смещений всех атомов от времени при начальной скорости атома урана  $v_0 = 0.05$  в цепочке 1 с наименьшей стартовой  $x$ -координатой. Из рис. 6а видно, что по кристаллу с постоянной скоростью  $v = 0.19$  движется ГС-волна со сложной внутренней структурой. За ней также наблюдается след второго возбуждения с меньшей скоростью. На рис. 6б представлены два совмещенных кадра видеоклипа: в момент времени  $\tau = 102$  с группой 1 из трех близких зависимостей и в момент  $\tau = 168$  с такой же группой 2. Для простоты графики представляют только микроплотности по ато-

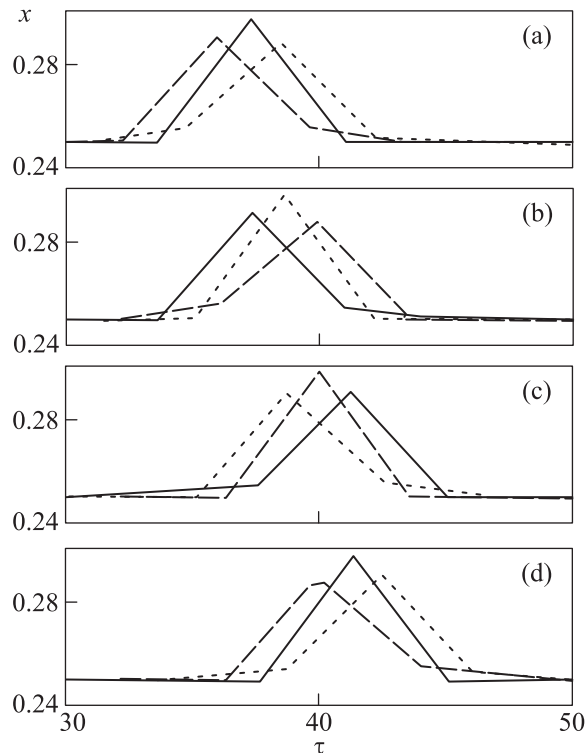


Рис. 5. Пространственные зависимости микроплотности от времени, демонстрирующие движение гиросолитона по винтовой линии. Максимумы микроплотности располагаются на цепочке 1 при  $\tau = 163$  (а), 2 при  $\tau = 169$  (б), 3 при  $\tau = 176$  (с) и снова 1 при  $\tau = 182$  (д)

мам урана. На рисунке использовалась та же система сплошных, точечных и штриховых линий, что и на рис. 4 и 5. Высокоскоростной ГС представляется смещающимся со временем со скоростью  $v = 0.19$  горбом сжатия с увеличенной плотностью. Низкоскоростной ГС представляется смещающимся со временем со скоростью  $v = 0.07$  провалом разрежения. Из рис. 4 и 6 видно, что атомы O сокращают расстояние между ГС сжатия и разрежения.

При детальном просмотре видеofilма видна внутренняя структура ГС сжатия. На рис. 7 в большем масштабе представлена динамика изменения внутренней структуры ГС-сжатия. Из рис. 7 видно, что при  $\tau = 103$  (рис. 7а) наибольшее значение микроплотности достигается на 1D-цепочке 1 рис. 2 при  $\tau = 111$  (рис. 7б) на цепочке 2, при  $\tau = 118$  (рис. 7с) на цепочке 3 и, наконец, при  $\tau = 126$  (рис. 7д) снова на цепочке 1.

При исследовании спектра колебаний, как и при исследовании фононного спектра, учитывалось только U–U-взаимодействие в нанокристалле со 126 атомами U. Для определения зависимости спектральной плотности  $\rho(k, \omega)$  использовалась процедура быстро-

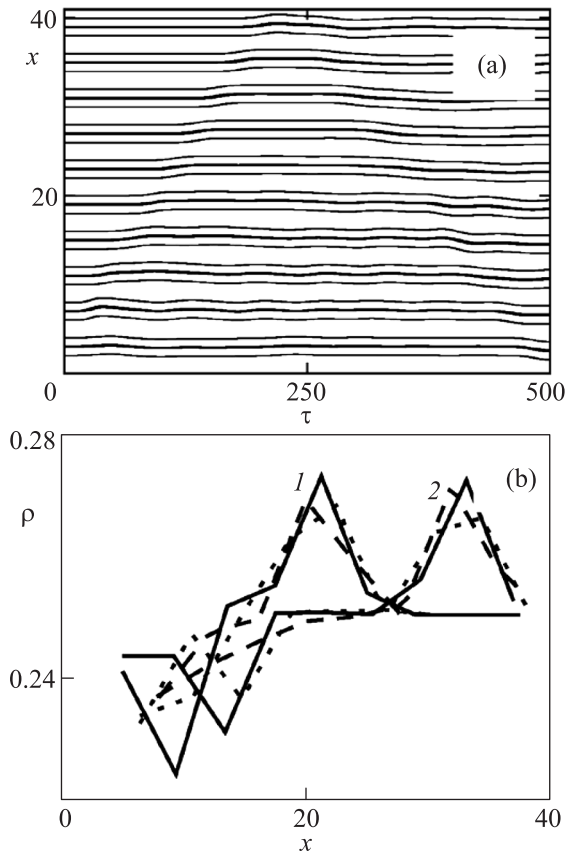


Рис. 6. Динамические зависимости смещений атомов от времени, демонстрирующие распространение гиросолитона по атомам U и O (a). Пространственные зависимости микроплотности по U от координаты, демонстрирующие смещение гиросолитонных горбов плотности сжатия и провалов разрежения от 1 при  $\tau = 102$  к 2 при  $\tau = 168$  (b)

го фурье-преобразования. На рис. 8 представлена эта 3D-зависимость. Ветвь 1 с фазовой скоростью 0.21 фиксирует спектрально ГС, представленный в динамических зависимостях с той же скоростью. Область 2 частот  $0 < \omega < 0.14$  представляет редуцированную систему ветвей фонового спектра рис. 3. Интересным представляется появление высокоскоростной ветви 3 со скоростью  $v_3 = 0.63$ . Оно может быть связано с гирацией.

Скорость смещения возбуждения по винтовой линии выше, чем линейная визуально определяемая по динамическим зависимостям скорость по оси, поскольку пройденная по винтовой линии за время, за которое возбуждение проходит по оси нанокристалла фиксированную длину, длина больше. В парциальных спектрах колебаний отдельных цепочек, как и у фононов, присутствуют низкочастотные ветви с отрицательной дисперсией.

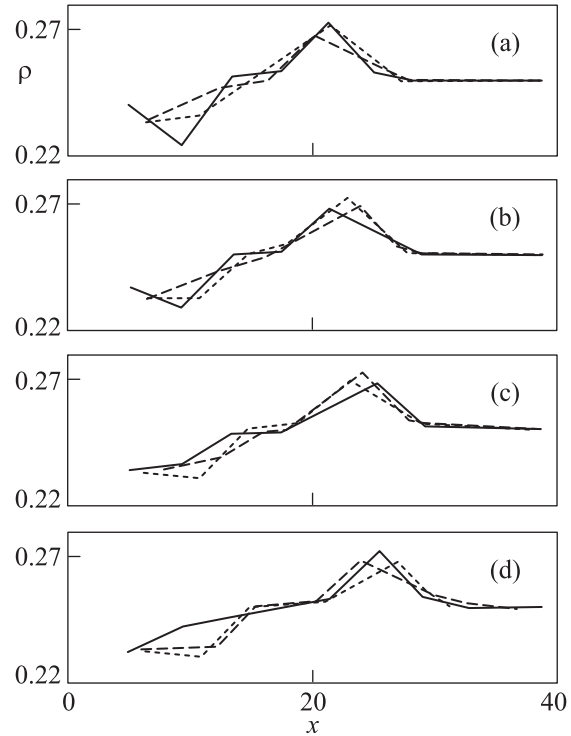


Рис. 7. Пространственные зависимости микроплотности от времени в нанокристалле с атомами U и O, демонстрирующие движение гиросолитона по винтовой линии. Максимумы микроплотности располагаются на цепочке 1 при  $\tau = 103$  (a), 2 при  $\tau = 111$  (b), 3 при  $\tau = 118$  (c) и снова 1 при  $\tau = 126$  (d)

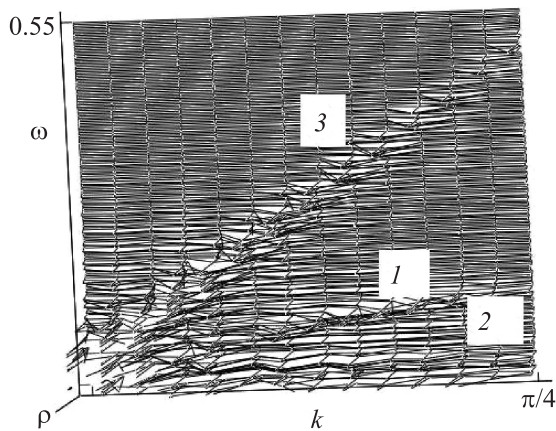


Рис. 8. 3D-зависимость спектральной плотности от волнового вектора и частоты, демонстрирующая высокочастотные ветви 1, 3 и низкочастотную структуру 2

Представляет интерес исследование возможности диффузионного массопереноса атомов на гиросолитонах по типу обнаруженной в [5] серфинг-диффузии легких атомов на солитонных волнах подрешетки тяжелых атомов. Исследовалась динамика подрешет-

ки атомов урана (рис. 2), в центре которой в стартовый момент на продольной оси находится “примесный” атом (ПА). В образцах двуоксида урана фиксировалась определенная нестехиометрия. Таким ПА считается “лишний” атом О. Система динамических уравнений в дополнение к (2) включала три уравнения для координат ПА  $x_p, y_p, z_p$ , первое из которых имеет вид

$$\frac{d^2 x_p}{d\tau^2} = \mu \sum_i \left\{ \frac{x_p - x_i}{[(x_p - x_i)^2 + (y_p - y_i)^2 + (z_p - z_i)^2]^{7/2}} - \frac{x_p - x_i}{[(x_p - x_i)^2 + (y_p - y_i)^2 + (z_p - z_i)^2]^4} \right\}, \quad (5)$$

где  $x_i, y_i, z_i$  – координаты атомов U на рис. 2. При этом в (2), как и ранее, обратное влияние легкого ПА-серфингиста на колебания основной подрешетки тяжелых атомов не учитывалось.

На рис. 9а представлены полученные при решении системы уравнений (2), (5) динамические зависимости

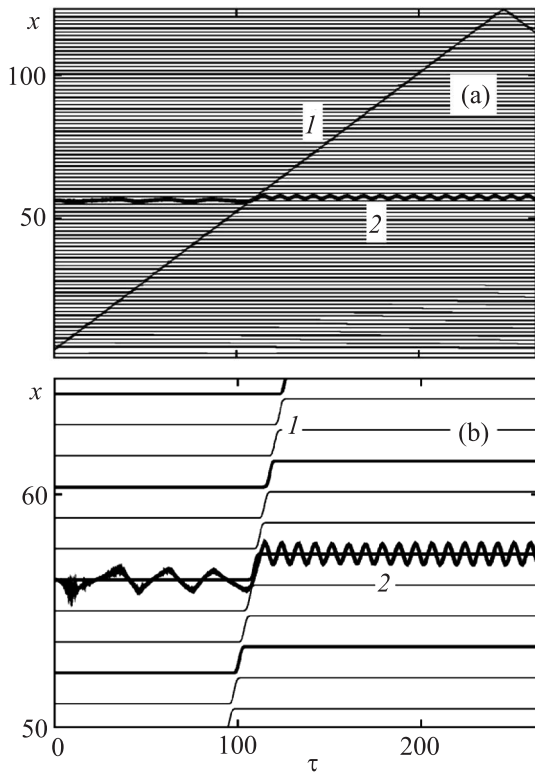


Рис. 9. Динамические зависимости смещений атомов нанокристалла и ПА от времени, демонстрирующие траектории движения гиросолитона (1) и ПА (2) с их пересечением (а). Увеличенная область пересечения траекторий солитона и ПА с рис. 9а, демонстрирующая увлечение ПА гиросолитоном и увеличение частоты колебаний ПА после их встречи

симости  $x$ -координат атомов U и ПА с начальными условиями  $x_p = 25$  и стартовой скоростью первого

атома U  $v_0 = 0.4$ . На рис. 9а видна траектория ГС 1. Зависимость 2 представляет траекторию ПА. Видно, что в результате взаимодействия с ГС ПА смещается вслед за ГС в область больших координат  $x$ . На рис. 9б, где в большем масштабе представлена область встречи ГС и ПА, прослеживается смещение ПА за ГС. При этом частота колебаний ПА  $\omega = 0.3$  после встречи с ГС возрастает в 4 раза.

Динамика движения ПА в виде 3D точечной зависимости  $x_p = x_p(y_p, z_p)$  представлена на рис. 10. Видеоклип показал, что до встречи с ГС ПА блуж-

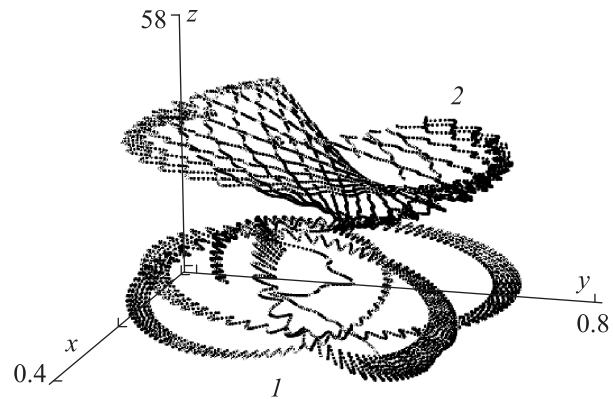


Рис. 10. 3D-представление траектории движения ПА внутри нанокристалла: 1 – область блужданий ПА внутри нанокристалла с элементами вращения до встречи с гиросолитоном, 2 – траектория выраженного вращательного движения и увлечения ПА за гиросолитоном

дает с элементами вращения внутри призмы рис. 2 в области 1 рис. 10. После встречи с ГС ПА переходит в фиксированное по направлению ГС вращение вокруг оси с подъемом на уровень больших  $x$ -координат в область 2 рис. 10. В [5] было показано, что при стохастической генерации энергии на одной границе кристалла и съеме энергии на другой из-за взаимодействия ПА с солитонами происходят стохастические смещения ПА в разных направлениях (серфинг-диффузия) с массопереносом в одном направлении. На рис. 10 представлен основной динамический акт кинетического процесса серфинг-диффузии ПА на ГС. При стохастической генерации энергии будет наблюдаться последовательность таких актов – диффузионный массоперенос на ГС.

Представляет интерес исследование возможности генерации гиросолитонов в кристаллических системах большего размера. Следующим по величине и сложности элементом гексагональной кристаллической структуры  $UO_2$  с плотной упаковкой в плоскости рисунка является приведенный на рис. 11 шестиугольник атомов с седьмым атомом в центре.

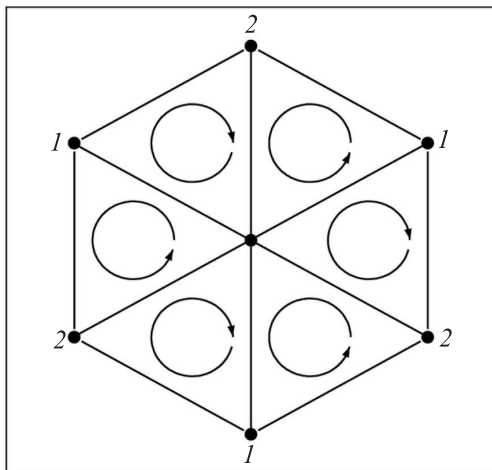


Рис. 11. Гиросолитоны в группе из шести нанотрубок, составляющих шестигранную призму

Каждый элементарный треугольник является проекцией рассмотренной выше призмы с 1D-кристаллами  $\text{UO}_2$ . Число атомов в каждом 1D-кристалле,  $N = 100$ , существенно увеличено по сравнению с ранее использованным. При этом соседние треугольники с одной общей стороной имеют противоположные по знаку направления винтового вращения – правовинтовые и левовинтовые. Незамкнутые окружности со стрелками внутри каждого элементарного треугольника представляют направления такого вращения при ортогональном смещении. Цифры 1 и 2 условно указывают призмы с этими противоположными вращениями. Отметим, что на общих сторонах двух соседних треугольников направления вращения совпадают.

С целью сохранения симметрии как начальное условие полагалось, что граничный атом 1D-кристалла, находящегося в центре шестиугольника на рис. 11, имеет в начальный момент безразмерную стартовую скорость  $v = 0.6$ . Расчет зависимостей смещений атомов от времени проводился в интервале  $0 < \tau < T = 1200$  с разбиением  $T$  на  $M = 1.2 \cdot 10^5$  интервалов. Эти зависимости приведены на рис. 12. Отметим, что вследствие симметрии рис. 11 наблюдалось соответствующее вырождение. Из рис. 12 видно, что движение первичного солитона со скоростью  $v = 0.6$  сопровождается движением конечной дискретной серии вторичных солитонов с убывающими по величине скоростями. Как и в кристалле меньшего размера, для первичного солитона наблюдалось чередование максимумов плотности на последовательных по кругу 1D-кристаллах. Это свидетельствует о винтовом движении, условно представленном на рис. 11 стрелками.

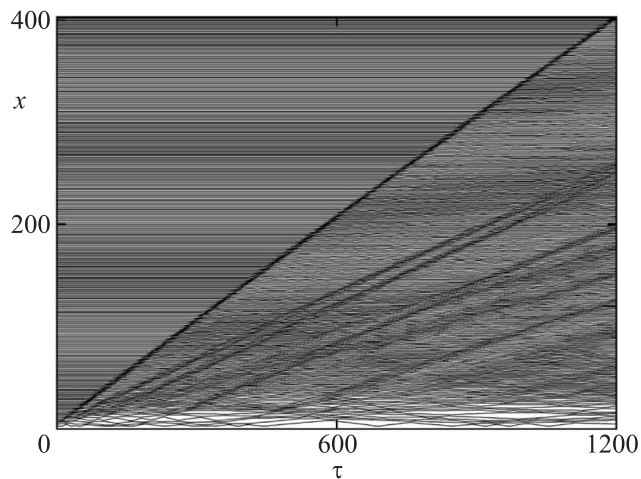


Рис. 12. Зависимости смещений атомов от времени в группе нанотрубок, составляющих шестигранную призму

Исследования проведены при финансовой поддержке РФФИ и правительства Калужской области (грант # 14-48-03080).

1. M. E. Manley, M. Yethirag, H. Sinn, H. M. Volz, A. Alatas, J. C. Lashley, W. L. Hults, G. H. Lander, and J. L. Smith, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 125501 (2006).
2. О. А. Дубовский, А. В. Орлов, *ФТТ* **52**, 846 (2010).
3. M. E. Manley, M. L. Abernathy, N. I. Agladze, and A. J. Sievers, *Sci. Rep.* **1**, 1 (2011).
4. И. С. Курина, В. В. Попов, В. Н. Харитонов, *Атомная энергия* **101**, 802 (2006).
5. О. А. Дубовский, В. А. Семенов, А. В. Орлов, В. В. Сударев, *ФТТ* **56**, 1779 (2014).
6. О. А. Дубовский, В. А. Семенов, А. В. Орлов, В. В. Сударев, *ФТТ* **57**, 1383 (2015).
7. M. Toda, *Theory of Nonlinear Lattices*, Springer-Verlag, Berlin (1981), 262 p.
8. V. M. Agranovich and O. A. Dubovskiy, *Optical Properties of Mixed Crystals*, North-Holland, Amsterdam (1988), 437 p.
9. V. M. Agranovich, O. A. Dubovskiy, and A. V. Orlov, *Phys. Lett. A* **119**, 83 (1986).
10. В. М. Агранович, О. А. Дубовский, А. В. Орлов, *ФТТ* **32**, 2387 (1990).
11. О. А. Дубовский, А. В. Орлов, *ФТТ* **32**, 2407 (1990).
12. R. K. Dodd, J. C. Eilbeck, J. D. Gibbon, and H. C. Morris, *Solitons and Nonlinear equations*, Academic Press, Inc., N.Y. (1988), 694 p.
13. A. I. Kolesnikov, M. Prager, J. Tomkinson, I. O. Bashkin, V. Yu. Malyshev, and E. G. Ponyatovskii, *J. Phys.: Cond. Mat.* **3**, 5927 (1991).
14. О. А. Дубовский, А. В. Орлов, *ФТТ* **55**, 1590 (2013).



15. О. А. Дубовский, А. В. Орлов, Письма в ЖЭТФ **96**, 509 (2012).
16. О. А. Дубовский, А. В. Орлов, Письма в ЖЭТФ **87**, 482 (2008).
17. В. М. Агранович, В. Л. Гинзбург, *Кристаллооптика с учетом пространственной дисперсии и теория экситонов*, Наука, М. (1965), 374 с.
18. В. М. Агранович, О. А. Дубовский, Письма в ЖЭТФ **26**, 641 (1977).
19. В. М. Агранович, О. А. Дубовский, ФТТ **20**, 3237 (1978).
20. О. А. Дубовский, А. В. Орлов, ФТТ **41**, 337 (1999).
21. O. A. Dubovskiy and A. V. Orlov, Crystallography Rep. **56**, 42 (2011).