

**HIGH-AMPLITUDE OSCILLATIONS OF AN ATOMIC ROW
IN A MODEL CRYSTAL**

*Ivan Sergeevich Lutsenko ^{1a}, Vladislav Igorevich Baranov ¹,
Alexander Sergeevich Narseev ¹, Ustina Ildusovna Yankovskaya ¹,
Nikolai Nikolaevich Medvedev ²*

¹ Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, 29 Polytechnicheskaya st., 195251 St. Petersburg, Russia

² Biysk Technological Institute (branch) of the Altay State Technical University, 27 Geroi Sovetskogo Soyuza Trofimov st., 125993 Biysk, Russia

^a lucenko.iwan@yandex.ru

ABSTRACT

Localized excitations in discrete systems have a significant effect on their properties. At the same time, the conditions for the existence of such objects as discrete breathers, quasi-breathers, solitons can be very specific. In this paper, the behavior of atomic rows of various lengths that perform harmonic oscillations is considered using the molecular dynamics method. A crystal of stoichiometry A₃B is considered, in which the existence of discrete breathers is possible due to the presence of a forbidden zone in the phonon spectrum. The model was a crystal with a linear size from 5 to 75 unit cells. All atoms of the chain at the initial moment of time were disturbed from equilibrium by a value from 0.2 Å to 0.9 Å. The number of formed discrete breathers was calculated directly from the data obtained in the calculations, i.e. the frequency and amplitude of each atom of the chain were calculated, only oscillations with amplitudes above 0.3 Å were recognized as breathers. The dependences of the number of discrete breathers on the length of the initial chain of atoms and the magnitude of the initial disturbances were obtained.

KEYWORDS

Nonlinear mode; molecular dynamics; discrete breather; quasi-breather; computer simulation; LAMMPS.

**ВЫСОКОАМПЛИТУДНЫЕ КОЛЕБАНИЯ АТОМНОГО РЯДА
В МОДЕЛЬНОМ КРИСТАЛЛЕ**

*Иван Сергеевич Луценко ^{1a}, Владислав Игоревич Баранов ¹,
Александр Сергеевич Нарсеев ¹, Устина Ильдусовна Янковская ¹,
Николай Николаевич Медведев ²*

¹ Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Россия, 195251 Санкт-Петербург, ул. Политехническая, 29

² Бийский технологический институт (филиал) Алтайского государственного технического университета им. И.И. Ползунова, Россия, 125993 Бийск, ул. имени Героя Советского Союза Трофимова, 27

^a lucenko.iwan@yandex.ru

АННОТАЦИЯ

Локализованные возбуждения в дискретных системах оказывают существенное влияние на их свойства. В тоже время условия для существования таких объектов, как дискретные бризеры, квази-бризеры, солитоны, могут быть весьма специфичными. В данной работе методом молекулярной динамики рассмотрено поведение атомных рядов различной длины, осуществляющих гармонические колебания. Рассмотрен кристалл стехиометрии Al_3V , в котором возможно существование дискретных бризеров за счет наличия запрещенной зоны в фононном спектре. Модель представляла собой кристалл линейного размера от 5 до 75 элементарных ячеек. Все атомы цепочки в начальный момент времени выводились из равновесия на величину от $0,2\text{\AA}$ до $0,9\text{\AA}$. Расчет количества образованных дискретных бризеров производился непосредственно с данных, полученных при расчетах, т.е. рассчитывалась частота и амплитуда каждого атома цепочки, дискретным бризером признавались только колебания с амплитудами выше $0,3\text{\AA}$. Были получены зависимости количества дискретных бризеров от длины исходной цепи атомов и величины начальных возмущений.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА

Нелинейная мода; молекулярная динамика; дискретный бризер; квази-бризер; компьютерное моделирование; LAMMPS.

Введение

Кристаллы твердых тел являются одной из многочисленных сред в которых возможно существование солитонов. При этом применимо к кристаллам можно говорить как о топологических, так и динамических солитонах. К первым относят дефекты структуры, такие как дислокации или пары Френкеля [1, 2], динамические солитоны, в свою очередь, могут быть представлены дискретными бризерами (ДБ), которые также называют внутренними локализованными модами [3]. Перспективным представляется тот факт, что ДБ могут взаимодействовать с точечными дефектами структуры [4, 5], а также выступать генератором других процессов, таких как нелинейная супратрансмиссия [6].

Дискретные бризеры в кристаллах подчиняются тем же принципам, что в других системах [7–18], однако их изучение значительно затрудняется двумя факторами. В случае экспериментального наблюдения [19–26] задача осложнена крайне малыми размерами и временем жизни, из-за чего о

существовании и влиянии ДБ приходится судить по косвенным признакам. При компьютерном моделировании возникает вторая сложность. Дискретный бризер – это строго периодическая мода, задание которой в хоть сколько-нибудь реалистичном кристалле чрезвычайно сложная задача из-за множества взаимовлияющих друг на друга частиц. Особенно сложной задача становится при работе с кластером ДБ. В связи с этим авторами [27] была введена концепция квазибризера – нестрого периодической колебательной моды. В дальнейшем, говоря о дискретных бризерах, мы будем подразумевать именно квазибризерные решения. Данная концепция так же обсуждалась в ряде работ, посвященных локализованным модам, в рассматриваемом нами кристалле [28, 29].

В данной работе методом молекулярной динамики рассматривается хорошо изученный на предмет существования ДБ интерметаллид Pt_3Al . Модельный кристалл данного сплава имеет щель в фононном спектре и поддерживает ДБ [3–33] как жесткого (частота растет с ростом амплитуды), так и мягкого

(частота снижается с ростом амплитуды) типов. Целью данной работы является рассмотрение поведения цепи ДБ в зависимости от длины цепи и амплитуды колебаний.

1. Модель и методика эксперимента

Моделирование производилось методом молекулярной динамики при помощи программного пакета LAMMPS [34].

Модель представляет собой кристалл Pt_3Al , размерами $10 \times 10 \times Z$ элементарных ячеек, где Z варьировалось от 5 до 75 ячеек (рис. 1, а), таким образом, количество частиц в модели составляло от 2×10^3 до 3×10^4 . Задание начальных колебаний производилось смещением одного ряда атомов Al вдоль направления 001, величина отклонения варьировалась от 0,1 до 0,9 Å (рис. 1, б). К кристаллу применены периодические граничные условия. Горизонтальные размеры ячейки позволяют исключить взаимовлияние исходных колебаний и их периодических копий друг на друга. Взаимодействие атомов определялось с помощью потенциала, полученного методом погруженного атома [35], являющегося более точным для описания

металлов, нежели парные потенциалы. Полная энергия E кристалла для данного потенциала может быть выражена как (1), где ϕ_{ij} представляет парную энергию между атомами i и j , отделенными друг от друга расстоянием r_{ij} , а F_i – энергия вложения, связанная с вложенным атомом i в локальном местоположении с электронной плотностью ρ_i . Потенциал, использованный в данной работе, уже применялся ранее для описания сплава Pt_3Al в работах [28, 29, 33].

$$E = \frac{1}{2} \sum_{i,j,i \neq j} \phi_{ij}(r_{ij}) + \sum_i F_i(\rho_i). \quad (1)$$

Для моделирования использовались предварительно отрелаксированные структуры, в которых непосредственно перед началом расчетов задавались стартовые отклонения. Далее проводилось моделирование с перебором амплитуд отклонений и размеров расчетного кристалла при начальной температуре 0 К и давлении 0 бар в рамках ансамбля nve. Шаг моделирования был задан в 0,002 фс, что позволило максимально точно определить периоды и амплитуды колебаний атомов.

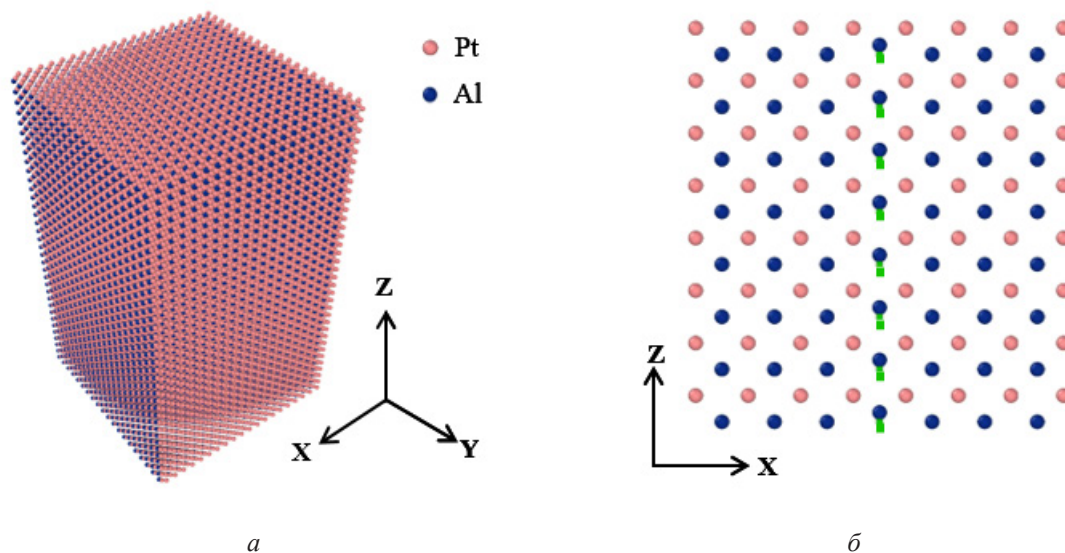


Рис. 1. Визуализация модельного кристалла (а) и начального смещения атомов (б)

Fig. 1. Preview of the model crystal (a) and the initial displacement of the atoms (b)

Для анализа использовалось собственное программное обеспечение, рассчитывающее амплитуду, период и частоту колебаний атомов по модельным данным. ДБ признавались колебания, чья амплитуда превышала $0,3 \text{ \AA}$, при этом из расчетов были исключены граничные слои атомов, что позволило избежать обнаружения ложных мод из-за перемещения атомов с одной стороны кристалла на другую, вызванных периодическими граничными условиями. Частота и амплитуда усреднялись по 5 полным колебаниям атома для большей достоверности результатов. Для упрощения анализа полученные данные группировались по частотам с шагом в $0,25 \text{ ТГц}$.

2. Результаты и обсуждение

Вне зависимости от размеров модельного кристалла запуск жизнеспособных ДБ происходил при амплитуде начальных отклонений выше $0,4 \text{ \AA}$. При амплитудах ниже, даже при попадании частот в запрещенную зону фононного спектра, энергии, сообщенной атомам, оказывалось недостаточно для преодоления влияния окружающих частиц и формирования устойчивой моды.

На рис. 2 представлено распределение дискретных бризеров по времени, данные приведены для кристалла размером $10 \times 10 \times 35$ элементарных ячеек и начальных отклонений от $0,4$ до $0,9 \text{ \AA}$. Изначально высокое количество ДБ соответствует периоду жизни всей запущенной цепи. В дальнейшем для всех рассмотренных случаев картина разрушения цепи схожа. Сначала происходит рассинхронизация мод и их распределение по нескольким частотным коридорам, затем в полученных «группах» начинается кратковременный процесс перекачки энергии между колебательными модами, в результате которого случается резкое снижение количества колеблющихся атомов. После чего скорость передачи энергии снижается и колебания постепенно приходят к некоторому равновесному количеству. Разделение мод по частотам для всех амплитуд от $0,6$ и выше происходит одновременно примерно спустя $3,8 \text{ пс}$ с момента старта, для меньших отклонений это время пропорционально увеличивается. При этом имеет место прямая зависимость времени жизни образованных частотных групп от размера кристалла, что может быть связано с количеством накопленной энергии (рис. 3).

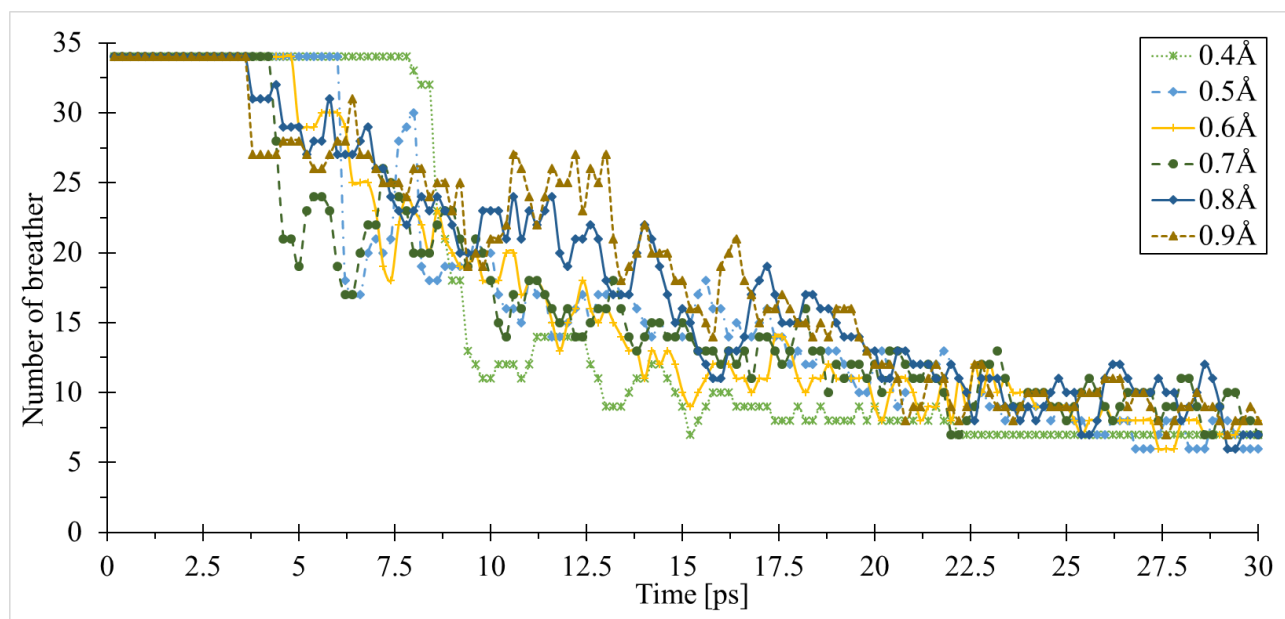


Рис. 2. Зависимость количества дискретных бризеров от времени для различных начальных отклонений

Fig. 2. Dependence of the number of discrete breathers on time for different initial deviations

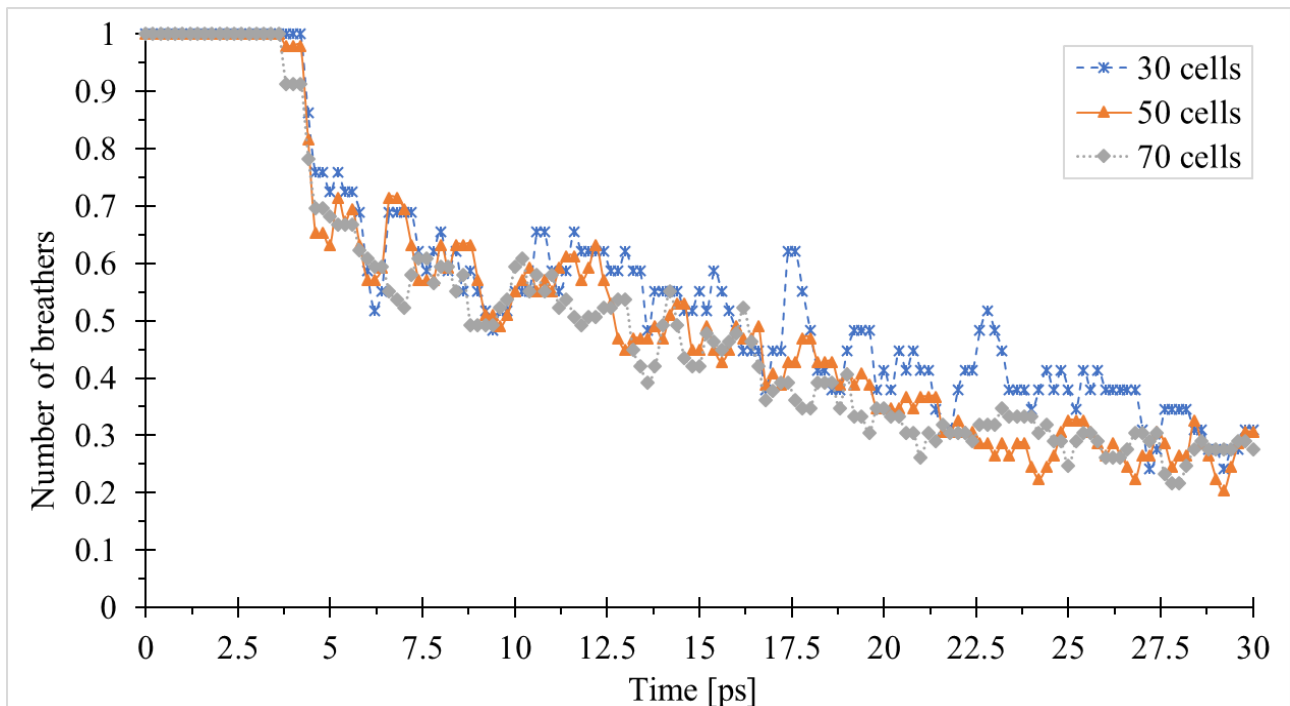


Рис. 3. Нормированное количество дискретных бризеров по времени для различных размеров цепи.
Пунктирной линии соответствует время разрушения цепи

Fig. 3. Normalized number of discrete breathers by time for different chain sizes.
The dotted line corresponds to the chain destruction time

Как было сказано, в итоговом случае количество ДБ стабилизируется на некотором значении, постоянном с течением времени вплоть до окончания их времени жизни. Как видно из рис. 2 и 3, данное количество слабо зависит от амплитуды исходных мод и составляет около 20–30% от длины цепи. ДБ, как образующие цепь, так и появляющиеся в процессе ее разрушения, имеют мягкий тип нелинейности. При этом с течением времени существенно меняются их амплитудно-частотные характеристики. Так, распад исходных колебаний происходит с расщеплением моды на несколько вторичных (как правило равновесных), часть из которых имеет частоты выше, а часть ниже начальной. Время жизни этих промежуточных мод крайне невелико, и они также разделяются на несколько каждая. По прошествии нескольких пикосекунд имеет место сплошная зона шириной около 2 ТГц, заполненная равномерно дискретными бризерами, общее число которых составляет приблизительно 60–70% от стар-

тового числа атомов, выведенных из положения равновесия. После распределения колебаний по частотам начинается последняя стадия процесса, а именно: формирование нескольких долгоживущих колебательных мод с частотами равными и выше исходных.

Выводы

В работе с помощью компьютерного моделирования изучена эволюция высокоамплитудных колебаний атомного ряда. Установлено, что на время жизни исходной цепи не влияет ее длина, а только энергия, сообщенная каждой частице. При этом, несмотря на то что моды с меньшей амплитудой колебаний дольше сохраняют изначальную конфигурацию, их разрушение происходит значительно быстрее, без образования вторичных кластеров. В тоже время итоговая конфигурация ДБ является более стабильной, что может быть обусловлено невозможностью массового перетока энергии между близко расположенными модами. Колебания

более длинных атомных рядов разрушаются более активно с образованием большего количества групп, причиной этого может выступать большее влияние окружающих частиц на колебательную моду. Однако для всех рассмотренных случаев имеет место приведение доли долгоживущих мод с течением времени к близким значениям, что позволяет судить об эффекте самоорганизации данных объектов с перераспределением энергии в пользу наиболее локализованных мод.

Благодарности / Acknowledgments

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-22-20038 (<https://rscf.ru/project/24-22-20038/>) и гранта Санкт-Петербургского научного фонда № 24-22-20038. Часть результатов работы была получена с использованием вычислительных ресурсов суперкомпьютерного центра Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого (www.scc.spbstu.ru).

The study was supported by a grant from the Russian Science Foundation No. 24-22-20038 (<https://rscf.ru/project/24-22-20038/>) and a grant from the St. Petersburg Science Foundation No. 24-22-20038. The part of the results of the work were obtained using computational resources of Peter the Great Saint Petersburg Polytechnic University Supercomputing Center (www.spbstu.ru).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Rajaraman R. Solitons and instantons in quantum field theory: monograph. / Translated from English. Ed. by O.A. Khrustalev. Moscow: Mir, 1985. 416 p. (In Russian) [Раджараман Р. Солитоны и инстантоны в квантовой теории поля: монография. / Пер. с англ. под ред. О.А. Хрусталева. М.: Мир, 1985. 416 с.].
2. Schwartz A.S. Quantum field theory and topology. Moscow: Nauka, 1989. 400 p. (In Russian) [Шварц А.С. Квантовая теория поля и топология. М.: Наука, 1989. 400 с.].
3. Sievers A.J., Takeno S. Intrinsic localized modes in anharmonic crystals // Physical Review Letters. 1988. Vol. 61(8). P. 970.
4. Zakharov P.V., Starostenkov M. D., Eremin A. M., Markidonov A. V. Behavior of a nonlinear localized mode near vacancy complexes in a Pt3Al crystal // Fundamental'nye Problemy Sovremennogo Materialovedeniya. 2014. Vol. 11(2). P. 260–265. (In Russian) [Захаров П.В., Старостенков М.Д., Еремин А.М., Маркидонов А.В. Поведение нелинейной локализованной моды вблизи комплексов вакансий в кристалле Pt3Al // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2014. Т. 11(2). С. 260–265].
5. Zakharov P., Eremin A., Starostenkov M., Markidonov A. Computer simulation of nonlinear localized vibrational modes of large amplitude in the crystal Pt3Al with bivacancies Pt // Computer Research and Modeling. 2015. Vol. 7. P. 1089–1096. DOI: 10.20537/2076-7633-2015-7-5-1089-1096.
6. Zakharov P.V., Starostenkov M.D., Eremin A.M., Lutsenko I.S. Effect of nonlinear supratransmission in a Pt3Al crystal // Fundamental'nye Problemy Sovremennogo Materialovedeniya. 2018. Vol. 15(2). P. 289–293. [Захаров П.В., Старостенков М.Д., Еремин А.М., Луценко И.С. Эффект нелинейной супратрансмиссии в кристалле Pt3Al // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2018. Т. 15(2). С. 289–293]. DOI: 10.25712/ASTU.1811-1416.2018.02.018.
7. Trias E., Mazo J.J., Orlando T.P. Discrete breathers in nonlinear lattices: Experimental detection in a Josephson array // Physical Review Letters. 2000. Vol. 84. P. 741–744. DOI: 10.1103/PhysRevLett.84.741.
8. Binder P., Abraimov D., Ustinov A.V., Flach S., Zolotaryuk Y. Observation of breathers in Josephson ladders // Physical Review Letters. 2000. Vol. 84. P. 745–748. DOI: 10.1103/PhysRevLett.84.745.
9. Russell F.M., Zolotaryuk Y., Eilbeck J.C., Dauxois T. Moving breathers in a chain of magnetic pendulums // Physical Review B. 1997. Vol. 55. P. 6304–6308. DOI: 10.1103/PhysRevB.55.6304.
10. Sato M., Hubbard B.E., Sievers A.J., Ilic B., Czaplewski D.A., Craighead H.G. Observation of locked intrinsic localized vibrational modes in a micromechanical oscillator array // Physical Review Letters. 2003. Vol. 90. Art. 044102. DOI: 10.1103/PhysRevLett.90.044102.
11. Sato M., Hubbard B.E., Sievers A.J., Ilic B., Craighead H.G. Optical manipulation of intrinsic localized vibrational energy in cantilever arrays // EPL. 2004. Vol. 66. P. 318–323. DOI: 10.1209/epl/i2003-10224-x.
12. Sato M., Hubbard B.E., Sievers A.J. Nonlinear energy localization and its manipulation in micromechanical oscillator arrays // Reviews of Modern Physics. 2006. Vol. 78. P. 137–157. DOI: 10.1103/RevModPhys.78.137.
13. Cuevas J., English L.Q., Kevrekidis P.G., Anderson M. Discrete breathers in a forced-damped array of

coupled pendula: Modeling, computation, and experiment // *Physical Review Letters*. 2009. Vol. 102. Art. 224101. DOI: 10.1103/PhysRevLett.102.224101.

14. Chong C., Porter M.A., Kevrekidis P.G., Daraio C. Nonlinear coherent structures in granular crystals // *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2017. Vol. 29. Art. 413003. DOI: 10.1088/1361-648X/aa7672.

15. Vorotnikov K., Starosvetsky Y., Theocharis G., Kevrekidis P.G. Wave propagation in a strongly nonlinear locally resonant granular crystal // *Physica D: Nonlinear Phenomena*. 2018. Vol. 365. P. 27–41. DOI: 10.1016/j.physd.2017.10.007.

16. Watanabe Y., Nishida T., Doi Y., Sugimoto N. Experimental demonstration of excitation and propagation of intrinsic localized modes in a mass-spring chain // *Physics Letters A*. 2018. Vol. 382. P. 1957–1961. DOI: 10.1016/j.physleta.2018.04.055.

17. Palmero F., English L.Q., Chen X.-L., Li W., Cuevas-Maraver J., Kevrekidis P.G. Experimental and numerical observation of dark and bright breathers in the band gap of a diatomic electrical lattice // *Physical Review E*. 2019. Vol. 99. Art. 032206. DOI: 10.1103/PhysRevE.99.032206.

18. Gomez-Rojas A., Halevi P. Discrete breathers in an electric lattice with an impurity: Birth, interaction, and death // *Physical Review E*. 2018. Vol. 97. Art. 022225. DOI: 10.1103/PhysRevE.97.022225.

19. Manley M.E., Yethiraj M., Sinn H., Volz H.M., Alatas A., Lashley J.C., Hults W.L., Lander G.H., Smith J. Formation of a new dynamical mode in α -uranium observed by inelastic X-ray and neutron scattering // *Physical Review Letters*. 2006. Vol. 96. Art. 125501. DOI: 10.1103/PhysRevLett.96.125501.

20. Mihaila B., Opeil C.P., Drymiotis F.R., et al. Pinning frequencies of the collective modes in α -uranium // *Physical Review Letters*. 2006. Vol. 96. Art. 076401. DOI: 10.1103/PhysRevLett.96.076401.

21. Manley M.E., Yethiraj M., Sinn H., Volz H.M., Alatas A., Lashley J.C., Hults W.L., Lander G.H., Thoma D.J., Smith J.L. Intrinsically localized vibrations and the mechanical properties of α -uranium // *Journal of Alloys and Compounds*. 2007. Vol. 444–445. P. 129–132. DOI: 10.1016/j.jallcom.2006.09.137.

22. Manley M.E., Alatas A., Trouw F., Leu B.M., Lynn J.W., Chen Y., Hults W.L. Intrinsic nature of thermally activated dynamical modes in α -U: Nonequilibrium mode creation by X-ray and neutron scattering // *Physical Review B*. 2008. Vol. 77. Art. 214305. DOI: 10.1103/PhysRevB.77.214305.

23. Manley M.E., Lynn J.W., Chen Y., Lander G.H. Intrinsically localized mode in α -U as a precursor to a solid-state phase transition // *Physical Review B*. 2008. Vol. 77. Art. 052301. DOI: 10.1103/PhysRevB.77.052301.

24. Manley M.E., Sievers A.J., Lynn J.W., Kiselev S.A., Agladze N.I., Chen Y., Llobet A., Alatas A. Intrinsic localized modes observed in the high-temperature vibrational spectrum of NaI // *Physical Review B*. 2009. Vol. 79. Art. 134304. DOI: 10.1103/PhysRevB.79.134304.

25. Manley M.E., Abernathy D.L., Agladze N.I., Sievers A.J. Symmetry-breaking dynamical pattern and localization observed in the equilibrium vibrational spectrum of NaI // *Scientific Reports*. 2011. Vol. 1. Art. 4. DOI: 10.1038/srep00004.

26. Manley M.E., Hellman O., Shulumba N., May A.F., Stonaha P.J., Lynn J.W., Garlea V.O., Alatas A., Hermann R.P., Budai J.D., Wang H., Sales B.C., Minnich A.J. Intrinsic anharmonic localization in thermoelectric PbSe // *Nature Communication*. V. Vol. 10. Art. 1928. DOI: 10.1038/s41467-019-09921-4.

27. Chechin G.M., Dzhelauhova G.S., Mehonoshina E.A. Quasibreathers as a generalization of the concept of discrete breathers // *Physical Review E*. 2006. Vol. 74(3). Art. 036608.

28. Eremin A.M., Zakharov P.V., Manakov N.A., Starostenkov M.D. On the question on the statistical comparison of the accurate discrete breezers with quasibreezer model solutions of A3B stehometry crystal // *Vestnik of the Orenburg State University*. 2018. Vol. 5(217). P. 113–120. (In Russian) [Еремин А.М., Захаров П.В., Манаков Н.А., Старостенков М.Д. К вопросу о статистическом сравнении точных дискретных бризеров с квази-бризерными модельными решениями кристалла стехиометрии A3B // *Вестник Оренбургского государственного университета*. 2018. Т. 5(217). С. 113–120]. DOI: 10.25198/1814-6457-217-113.

29. Zakharov P.V., Eremin A.M. Starostenkov M.D. Stationary quasi-breathers in monatomic FCC metals // *Journal of Experimental and Theoretical Physics*. 2017. Vol. 125(5). P. 913–919. DOI: 10.1134/S1063776117100181.

30. Starostenkov M.D., Zakharov P.V., Medvedev N.N. Study of the possibility of existence of nonlinear localized oscillations at the boundary of Pt-Al bimetal using a two-dimensional model // *Fundamental'nye Problemy Sovremennogo Materialovedenia*. 2011. Vol. 8(4). P. 40–44. (In Russian) [Старостенков М.Д., Захаров П.В., Медведев Н.Н. Изучение посредством двумерной модели возможности существования нелинейных локализованных колебаний на границе биметалла Pt-Al // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2011. Т. 8(4). С. 40–44.].

31. Starostenkov M.D., Potekaev A.I., Dmitriev S.V., Zakharov P.V., Eremin A.M., Kulagina, V.V. Dynamics of discrete breathers in a Pt₃Al crystal // *Russian Physics Journal*. 2016. Vol. 58(9). P. 1353–1357. DOI: 10.1007/s11182-016-0654-6.

32. Markidonov A.V., Zakharov P.V., Starostenkov M.D., Medvedev N.N. Mechanisms of cooperative behavior of atoms in crystals: monograph. Novokuznetsk: T.F. Gorbachev State Technical University (Novokuznetsk Branch), 2016. 219 p. (In Russian) [Механизмы кооперативного поведения атомов в кристаллах: монография. Новокузнецк: Кузбасский государственный технический университет им. Т.Ф. Горбачева (филиал в г. Новокузнецке), 2016. 219 с.].

33. Zakharov P.V., Dmitriev S.V., Starostenkov M.D., Eremin A.M., Korznikova E.A. Stationary quasi-breathers in monatomic FCC metals // Zhurnal Eksperimental'noj i

Teoreticheskoy Fiziki. 2017. Vol. 152(5). P. 1073–1080. (In Russian) [Захаров П.В., Дмитриев С.В., Старостенков М.Д., Ерёмин А.М., Корзникова Е.А. Стационарные квазибризеры в моноатомных металлах с ГЦК-структурой // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 2017. Т. 152(5). С. 1073–1080. DOI: 10.7868/S0044451017110220.

34. LAMMPS Molecular Dynamics Simulator. URL: <http://lammps.sandia.gov/>.

35. Daw M.S., Foiles S.M., Baskes M.I. The embedded-atom method: A review of theory and applications // Materials Science Reports. 1993. Vol. 9. P. 251–310. DOI 10.1016/0920-2307(93)90001-U.