

Научная статья

1.3.8. Физика конденсированного состояния (физико-математические науки)

УДК 537.86, 530.182

doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2023.03.002

ДИСКРЕТНЫЕ БРИЗЕРЫ В КВАДРАТНОЙ РЕШЕТКЕ ОСНОВАННЫЕ НА ДЕЛОКАЛИЗОВАННЫХ МОДАХ

Евгений Константинович Наумов^{1†}, Юрий Владимирович Бебихов²,
Сергей Владимирович Дмитриев³

^{1,3} Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, ул. Степана Халтурина, 39450001, Уфа, Россия

² Северо-Восточный федеральный университет, Политехнический институт (филиал) в Мирном, ул. Тихонова, 5/1, 678170, Мирный, Саха (Якутия), Россия

³ Институт физики молекул и кристаллов, Уфимский федеральный исследовательский центр РАН, пр. Октября, 71, 450054, Уфа, Россия

[†] naumov@kristallcom.ru[†], <https://orcid.org/0000-0002-0320-2797>

² bebikhov.yura@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-8366-4819>

³ dmitriev.sergey.v@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-6744-4445>

Аннотация. Интерес к нелинейным колебаниям решетки возрос в последние десятилетия из-за того, что кристаллические материалы подвергаются высокоамплитудным воздействиям во многих сферах деятельности человека. Один из эффектов нелинейности в дискретных периодических структурах заключается в возможности существования локализованных в пространстве колебаний большой амплитуды, называемых дискретными бризерами (ДБ) (или собственными локализованными модами). Довольно просто решается задача поиска ДБ в нелинейных цепочках, то есть, в одномерных кристаллах, поскольку разнообразие возможных ДБ в этом случае невелико. Однако для кристаллических решеток высокой размерности до сих пор не было разработано общих подходов к поиску ДБ. Такой подход появился благодаря работам Чечина и Сахненко с соавторами, где была разработана теория бушей нелинейных нормальных мод, которые позже, применительно к кристаллам, стали называть делокализованными нелинейными колебательными модами (ДНКМ). Относительно недавно было замечено, что все известные ДБ могут быть получены наложением локализующих функций на ДНКМ с частотой вне фононного спектра решетки. Поскольку теория Чечина и Сахненко позволяет найти все возможные ДНКМ, рассматривая симметрию решетки, появилась возможность постановки задачи нахождения всех возможных ДБ в заданной решетке. Данный подход был недавно с успехом применен к поиску ДБ в двумерной треугольной решетке. Изучение и описание ДБ в двумерной квадратной кристаллической решетке, полученных при помощи локализованной функции, является предметом представленной статьи. В результате были получены новые типы ДБ квадратной решетки, включая одномерные, то есть локализованные лишь в одном из двух ортогональных направлений, так и нульмерные, то есть локализованные в двух направлениях.

Ключевые слова: дискретный бризер, кристаллическая решётка, локализованные колебания, амплитуда колебаний.

Благодарности: Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, грант № 21-12-00229.

Для цитирования: Наумов Е.К., Бебихов Ю.В., Дмитриев С.В. Дискретные бризеры в квадратной решетке основанные на делокализованных модах // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2023. Т. 20, № 3. С. 299–307. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2023.03.002.

Original article

DISCRETE BREATHERS IN A SQUARE LATTICE BASED ON DELOCALIZED MODES

Evgeniy K. Naumov^{1†}, Yurii V. Bebikhov², Sergey V. Dmitriev³^{1,3} Institute for Metals Superplasticity Problems of RAS, Khalturin Str., 39, Ufa, 450001, Russia² Polytechnic Institute (Branch) in Mirny, North-Eastern Federal University, Tikhonova Str., 5/1, Mirny, Sakha Republic (Yakutia), 678170, Russia³ Institute of Molecule and Crystal Physics, Ufa Federal Research Centre of RAS, Oktyabrya Pr., 71, Ufa, 450054, Russia[†] naumov@kristallcom.ru[†], <https://orcid.org/0000-0002-0320-2797>² bebikhov.yura@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-8366-4819>³ dmitriev.sergey.v@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-6744-4445>

Abstract. Interest in nonlinear lattice vibrations has increased in recent decades due to the fact that crystalline materials are subjected to high-amplitude effects in many areas of human activity. One of the effects of nonlinearity in discrete periodic structures is the possibility of the existence of large-amplitude oscillations localized in space, called discrete breathers (DBs) (or intrinsic localized modes). The problem of searching for DBs in nonlinear chains, that is, in one-dimensional crystals, is quite simply solved, since the variety of possible DBs in this case is small. However, for high-dimensional crystal lattices, no general approaches to the search for discrete breathers have been developed so far. This approach appeared due to the work of Chechin, Sakhnenko et al., where the theory of bushes of nonlinear normal modes was developed, which later, as applied to crystals, began to be called delocalized nonlinear vibrational modes (DNVM). Relatively recently, it was noticed that all known DBs can be obtained by superimposing localizing functions on DNVM with a frequency outside the phonon spectrum of the lattice. Since the Chechin and Sakhnenko theory makes it possible to find all possible DNVMs by considering the symmetry of the lattice, it became possible to formulate the problem of finding all possible DBs in a given lattice. This approach has recently been successfully applied to the search for DBs in a two-dimensional triangular lattice. The study and description of discrete breathers in a two-dimensional square crystal lattice obtained using a localized function is the subject of this article. As a result, new types of DBs of a square lattice were obtained, including one-dimensional, that is, localized only in one of two orthogonal directions, and zero-dimensional, that is, localized in two directions.

Keywords: discrete breather, crystal lattice, localized oscillations, oscillation amplitude.

Acknowledgements: The work was supported by the Russian Science Foundation, grant No. 21-12-00229.

For citation: Naumov, E. K., Bebikhov, Yu. V. & Dmitriev, S. V. (2023). Discrete breathers in a square lattice based on delocalized modes. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 20(3), 299–307. (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2023.03.002.

Введение

В дискретных нелинейных системах часто происходят пространственно – локализованные колебания большой амплитуды, называемые дискретными бризерами (ДБ) или внутренними локализованными модами. Сначала дискретные бризеры были обнаружены в нелинейных цепочках [1-3], а затем в решетках большей размерности [4, 5], а также в кристаллических решетках [6]. В решетках более высокой размерности могут существовать различные типы ДБ, и возникает проблема их поиска и классификации.

Делокализованные нелинейные колебательные моды (ДНКМ) [7-9], которые имеют частоты выше фононного спектра, помогают решить эту проблему. ДНКМ являются точными решениями уравнений движения частиц, ко-

торые могут быть найдены с учетом только симметрии решетки; первоначально они назывались бушами нелинейных нормальных мод [7-9]. В пределе малой амплитуды ДНКМ преобразуются в коротковолновые фононные моды. Поскольку, при выводе ДНКМ, рассматривается только симметрия решетки, они являются точными решениями независимо от типа межчастичных взаимодействий и для любой амплитуды. ДНКМ может иметь m компонентов, тогда он имеет m степеней свободы и может быть описан m связанными динамическими уравнениями.

Насколько нам известно, все ДБ, о которых сообщалось до сих пор, могут быть получены путем наложения функций локализации на ДНКМ, имеющие частоты выше фононного сектора. Этот факт говорит о том, что поиску ДБ должен предшествовать анализ ДНКМ в

рассматриваемой решетке. Этот подход был реализован для треугольной решетки, для которой все однокомпонентные и двухкомпонентные ДНКМ были проанализированы в [12]. Было показано, что три из них имеют частоты выше фононного спектра. Затем, в работе [11], были получены локализованные дискретные бризеры путем применения функций локализации к этим трем ДНКМ. Недавно Рябов и Чечин построили 16 однокомпонентных ДНКМ для квадратной решетки [13], используя теоретико-групповой подход, разработанный в [7-9]. Только две из них имеют частоты выше фононного спектра [13], что означает, что они могут быть использованы для получения пространственно локализованных колебательных мод путем применения локализирующих функций, и эта работа выполняется в настоящем исследовании.

Важно понимать мотивацию для поиска ДНКМ и ДБ в модельных решетках и в кристаллах. ДБ влияют на макроскопические свойства кристаллов [6, 15], рассеивают фононы и тем самым снижают теплопроводность [16], они так же могут инициировать образование и миграцию дефектов решетки [17-19]. ДНКМ и ДБ связаны друг с другом. ДНКМ использовались для поиска ДБ в скалярной квадратной решетке [20].

Моделирование локализованных дискретных бризеров

В ходе исследования [13] было получено две однокомпонентные моды квадратной кристаллической решетки с частотой колебания выше фононного спектра. Из этих двух мод было образовано одиннадцать возможных локализованных ДБ.

Подчеркнем, что начальные условия, используемые для возбуждения ДБ, не всегда дают точных пространственно локализованных решений, но позволяют получать долгоживущие квазибризеры. Часть энергии, первоначально переданной в локализованную колебательную моду, излучается, и после переходного периода, колебания стабилизируются. Параметры функции локализации выбираются таким образом, чтобы энергия, выделяемая во время стабилизации квазибризеров, была минимальной. Такой квазибризер является прототипом исследуемого локализованного дискретного бризера.

А. Стационарные одномерные дискретные бризеры

Одномерный ДБ локализован вдоль линии:

$$p_1 x + p_2 y + p_3 = 0, \quad (1)$$

что означает, что амплитуды колебаний частиц убывают экспоненциально с расстоянием от этой линии.

Это может быть достигнуто путем применения функции локализации:

$$a_{ij} = A / \cosh(\beta d_{ij}), \quad (2)$$

где a_{ij} – величина начального смещения частицы, имеющей положение решетки $\xi_{i,j}$, A – амплитуда ДНКМ, β – параметр локализации, d_{ij} – расстояние от точки решетки i, j до линии локализации, оно может быть найдено следующим образом:

$$d_{ij} = \frac{(|p_1 x_{ij} + p_2 y_{ij} + p_3|)}{\sqrt{p_1^2 + p_2^2}}. \quad (3)$$

Предполагается, что p_1 и p_2 не равны нулю одновременно, а начальные скорости всех частиц равны нулю.

Далее представлено описание полученных результатов.

На рисунках 1 и 2 показаны примеры одномерных ДБ на основе ДНКМ I. Разница в том, что на рис.1 линия локализации ДБ (показана красным цветом) параллельна направлению колебаний частиц, в то время как на рис.2 она перпендикулярна этому направлению.

На панелях (а) линия локализации ДБ проходит через ряд атомов четырехугольной кристаллической решетки, а на панелях (б) она находится посередине между ближайшими рядами атомов четырехугольной кристаллической решетки. Параметры уравнений (1) и (2) перечислены в подписях к рисункам. Панели (в) показывают временную эволюцию координат x частиц, окрашенных в красный цвет на панелях (а). Можно видеть, что частицы совершают периодическое движение с постоянными амплитудами. Как упоминалось выше, параметр локализации β выбирается из условия минимизации энергии, выделяемой при стабилизации квазибризера.

Это проиллюстрировано на рис.3 для ДБ, показанного на рис.1а, путем построения графика временной эволюции полной энергии в системе, приведенной к энергии при $t = 0$. Полная энергия системы уменьшается со временем, поскольку энергия, излучаемая квазибризером, поглощается на границах вычислительной ячейки. После выделения части энергии ДБ

стабилизируется и колеблется с постоянной амплитудой, практически не излучая энергии. Наименьшие потери энергии наблюдаются при $\beta = 1,48$ и увеличиваются при отклонении от этого значения вверх или вниз. Обратим внимание, что общая потеря энергии составляет всего около 0,1 % от начальной энергии.

На рис.4 показаны ДБ на основе ДНКМ II. В этом случае одномерные ДБ, параллельные плотно упакованному направлению решетки, невозможны, но могут быть получены ДБ вдоль диагонального направления. На (а) линия локализации ДБ проходит через частицы, колеблю-

щиеся вдоль этой линии, а на (б) – вдоль частиц, колеблющихся в нормальном направлении. Параметры уравнений (1) и (2) перечислены в подписи к рисунку. На (в), приводится временная эволюция x – координаты частицы, окрашенной в красный и синий цвета на (б), они показаны как соответственно красной и синей линиями. Амплитуды колебаний не являются постоянными, и наблюдается квазипериодический обмен энергией между частицами, колеблющимися вдоль и перпендикулярно линии ДБ. Однако ДБ остается локализованным в течение длительного времени.

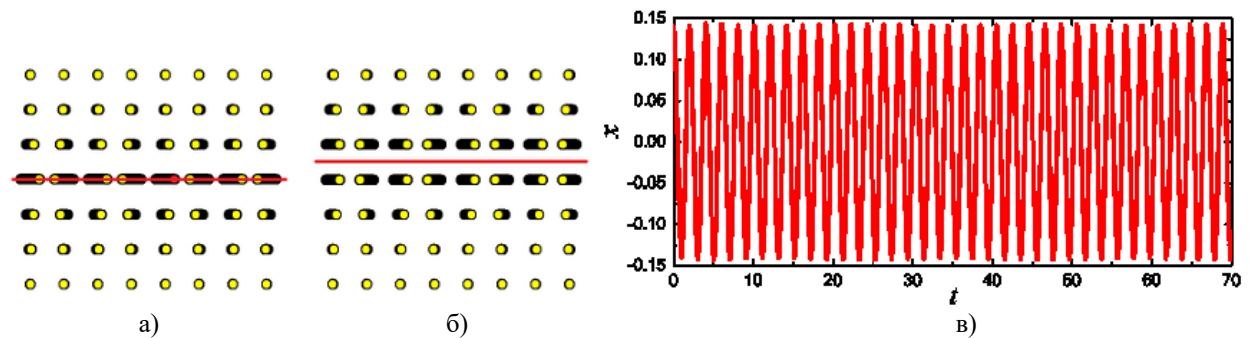


Рис.1. Стационарные одномерные ДБ, полученные путем наложения локализирующей функции (2) на ДНКМ I. Перемещения умножены на коэффициент 2. Параметры модели следующие: (а) $p_1 = 0, p_2 = 1, p_3 = 0, A = 0,14, \beta = 1,48$; для (б) $p_1 = 0, p_2 = 1, p_3 = h/2, A = 0,14, \beta = 1,45$. Линии локализации ДБ показаны красным цветом. На (в) представлена временная эволюция x -компоненты смещения частицы, окрашенной на (а) в красный цвет

Fig.1. Stationary one-dimensional DBs obtained by imposing the localizing function (2) on DNVMI. The displacements are multiplied by a factor of 2. The model parameters are as follows: (a) $p_1 = 0, p_2 = 1, p_3 = 0, A = 0.14, \beta = 1.48$; for (b) $p_1 = 0, p_2 = 1, p_3 = h/2, A = 0.14, \beta = 1.45$. DBs localization lines are shown in red. (c) shows the temporal evolution of the x -component of the displacement, which is colored red in (a)

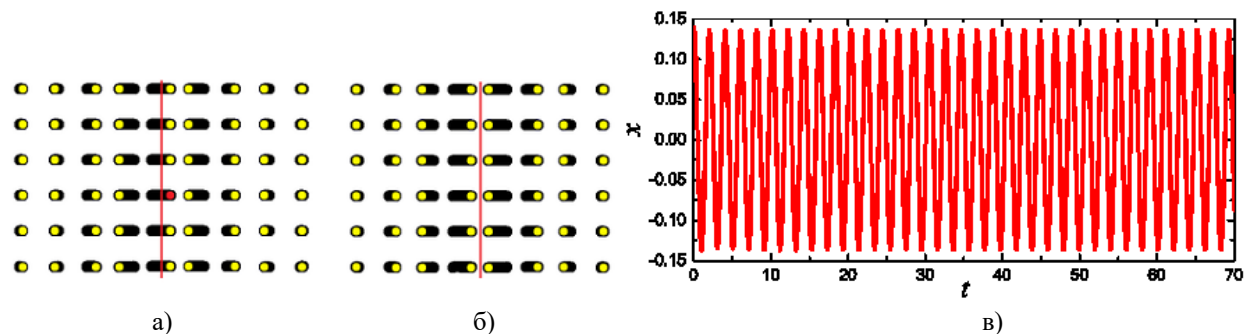


Рис.2. Стационарные одномерные ДБ, полученные путем наложения локализирующей функции (2) на ДНКМ I. Перемещения умножены на коэффициент 2. Параметры модели следующие: (а) $p_1 = 0, p_2 = 1, p_3 = 0, A = 0,14, \beta = 1,48$; для (б) $p_1 = 0, p_2 = 1, p_3 = h/2, A = 0,14, \beta = 1,45$. Линии локализации ДБ показаны красным цветом. На (в) представлена временная эволюция x -компоненты смещения частицы, окрашенной в красный цвет

Fig.2. Stationary one-dimensional DBs obtained by imposing the localizing function (2) on DNVMI. The displacements are multiplied by a factor of 2. The model parameters are as follows: (a) $p_1 = 0, p_2 = 1, p_3 = 0, A = 0.14, \beta = 1.48$; for (b) $p_1 = 0, p_2 = 1, p_3 = h/2, A = 0.14, \beta = 1.45$. DB localization lines are shown in red. (c) shows the time evolution of the x -component of the displacement of a red-colored particle

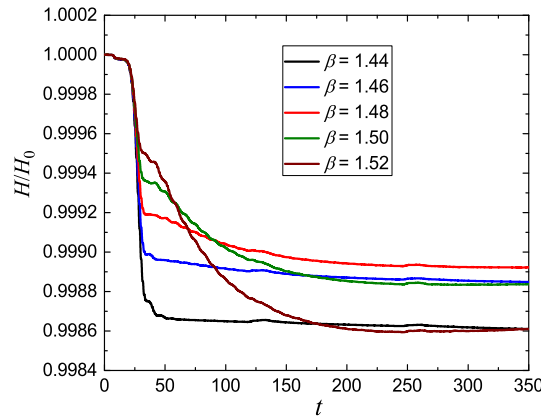


Рис.3. Полная энергия системы как функция времени, нормированная на начальную энергию, полученная для однокомпонентного ДБ, показанного на рис. 1а, с использованием различных значений параметра локализации β . Другими параметрами уравнений (1) и (2) являются $p_1 = 0, p_2 = 1, p_3 = 0$ и $A = 0,14$

Fig.3. The total energy of the system as a function of time, normalized to the initial energy, obtained for the one-component DB shown in Fig.1a using different values of the localization parameter β . The other parameters of equations (1) and (2) are $p_1 = 0, p_2 = 1, p_3 = 0$ и $A = 0.14$

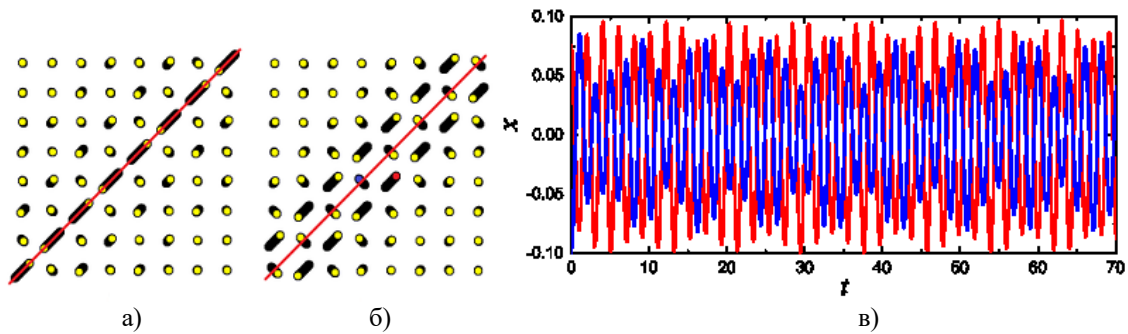


Рис.4. Стационарные одномерные ДБ, полученные путем наложения локализирующей функции (2) на ДНКМ II. Перемещения умножаются на коэффициент 2. Параметры моделей следующие: (а) $p_1 = -1, p_2 = 1, p_3 = 0, A = 0,14, \beta = 1,1$; (б) $p_1 = -1, p_2 = 1, p_3 = h, A = 0,14, \beta = 1,1$. Линии локализации ДБ показаны красным цветом. (в) – временная эволюция x -компоненты смещения частиц, окрашенных в красный и синий цвета на (б)

Fig.4. Stationary one-dimensional DB obtained by superimposing the localizing function (2) on DNVМ II. The displacements are multiplied by a factor of 2. The model parameters are as follows: (a) $p_1 = -1, p_2 = 1, p_3 = 0, A = 0.14, \beta = 1.1$; (b) $p_1 = -1, p_2 = 1, p_3 = h, A = 0.14, \beta = 1.1$. DBs localization lines are shown in red. (c) – time evolution of the x -component of the displacement of particles colored in red and blue in (b)

В. Стационарные и движущиеся нульмерные дискретные бризеры

Стационарный и движущийся нульмерный ДБ локализован в точке пересечения двух ортогональных линий:

$$p_1 x + p_2 y + p_3 = 0, \quad (4)$$

$$p_2 x - p_1 y + p_4 = 0, \quad (5)$$

где p_1 и p_2 не равны нулю одновременно.

Точка пересечения двух линий имеет координаты

$$x_0 = \frac{-p_1 p_3 - p_2 p_4}{p_1^2 + p_2^2}, \quad y_0 = \frac{-p_1 p_3 - p_2 p_4}{p_1^2 + p_2^2}. \quad (6)$$

Для построения нульмерных ДБ, локализирующая функция принимается в виде

$$a_{ij} = A/\cosh(\beta_1 d_{ij}) \cosh(\beta_2 f_{ij}), \quad (7)$$

где a_{ij} – величина начального смещения частицы, имеющей положение решетки $\zeta_{i,j}$, A – амплитуда ДНКМ, β_1 и β_2 – параметры локализации, d_{ij} – расстояние от точки решетки i, j – до линии (4), которое определяется уравнением (3), f_{ij} – расстояние от точки решетки i, j – до прямой (5), которое определяется как:

$$f_{ij} = \frac{(|p_2 x_{ij} + p_1 y_{ij} + p_4|)}{\sqrt{p_1^2 + p_2^2}}. \quad (8)$$

Примеры нульмерных ДБ, возбуждаемых наложением функции локализации (7) на ДНКМ I и ДНКМ II, показаны на рисунках с 5 по 9. ДБ локализованы на пересечении двух красных линий. ДБ представлены с различным положением центра локализации. На рис.5 ДБ локализован (а) на узле решетки, (б) сдвинут на вектор $(h/2, 0)$ от узла решетки и (в) сдвинут на вектор $(0, h/2)$ от узла решетки. Если центр локализации находится в точке $(h/2, h/2)$, ДНКМ I создает ДБ, показанный на рис.6а, как если бы

использовался ДНКМ II. На рис.6 ДБ локализован (в) на узле решетки, (а, г) сдвинут на вектор $(h/2, h/2)$ от узла решетки и (б) сдвинут на вектор $(3h/2, h/2)$ от узла решетки. Панели (г) на рис.5 и (д) на рис.6 показывают эволюцию во времени x -компоненты смещения частицы, окрашенной в красный цвет на панели (а). Можно видеть, что стационарные ДБ с постоянной амплитудой колебаний формируются после переходного периода, составляющего около 20 единиц времени или десяти периодов колебаний.

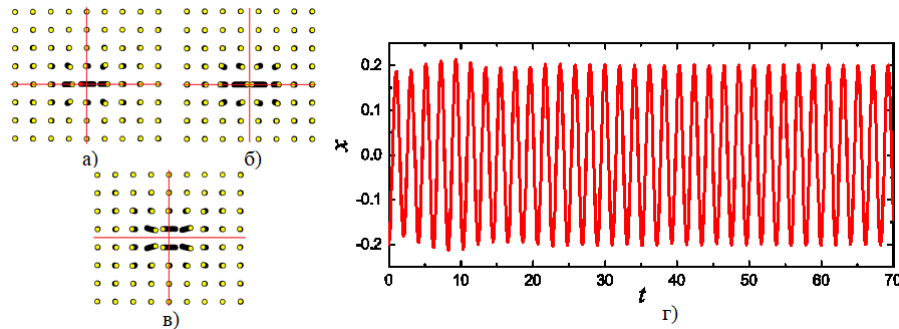


Рис.5. Стационарные нуль-мерные ДБ, полученные приложением локализующей функции (7) на ДНКМ I. Перемещения умножены на коэффициент 2. Параметры модели следующие: (а) $p_1 = 1, p_2 = 0, p_3 = 0, p_4 = 0, A = 0,2, \beta_1 = 1,05, \beta_2 = 1,5$; (б) $p_1 = 1, p_2 = 0, p_3 = h/2, p_4 = 0, A = 0,2, \beta_1 = 1,05, \beta_2 = 1,5$; (в) $p_1 = 1, p_2 = 0, p_3 = 0, p_4 = h/2, A = 0,25, \beta_1 = 1,05, \beta_2 = 1,5$. ДБ локализованы на пересечении красных линий.

На (г) показана временная эволюция x -компоненты смещения частицы, окрашенной в красный цвет на (а)

Fig.5. Stationary zero-dimensional DBs obtained by applying the localizing function (7) to DNVМ I. The displacements are multiplied by a factor of 2. The model parameters are as follows: (a) $p_1 = 1, p_2 = 0, p_3 = 0, p_4 = 0, A = 0,2, \beta_1 = 1,05, \beta_2 = 1,5$; (b) $p_1 = 1, p_2 = 0, p_3 = h/2, p_4 = 0, A = 0,2, \beta_1 = 1,05, \beta_2 = 1,5$; (c) $p_1 = 1, p_2 = 0, p_3 = 0, p_4 = h/2, A = 0,25, \beta_1 = 1,05, \beta_2 = 1,5$. DBs are localized at the intersection of the red lines. (d) shows the time evolution of the x -component of the displacement of the particle colored red in (a)

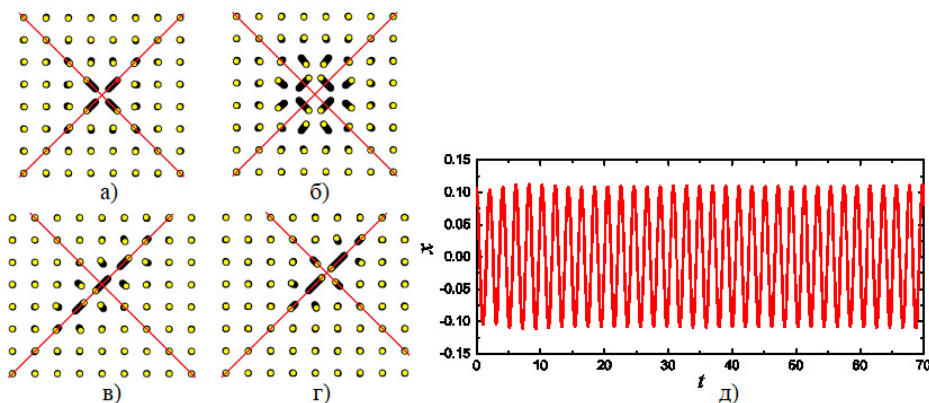


Рис.6. Стационарные нуль-мерные ДБ, полученные путем наложения локализующей функции (7) на ДНКМ II. Перемещения умножены на коэффициент 2. Параметры модели следующие: (а) $p_1 = -1, p_2 = 1, p_3 = 0, p_4 = h, A = 0,2, \beta_1 = \beta_2 = 1,11$; (б) $p_1 = -1, p_2 = 1, p_3 = h, p_4 = 0, A = 0,25, \beta_1 = \beta_2 = 1,12$. ДБ локализованы на пересечении красных линий; (в) $p_1 = -1, p_2 = 1, p_3 = 0, p_4 = 0, A = 0,2, \beta_1 = 1,3, \beta_2 = 1,12$; (г) $p_1 = -1, p_2 = 1, p_3 = 0, p_4 = h, A = 0,2, \beta_1 = 1,8, \beta_2 = 0,6$. В (д), показана временная эволюция x -компоненты смещения частицы, окрашенной в красный цвет для панели (а)

Fig.6. Stationary zero-dimensional DBs obtained by superimposing the localizing function (7) on DNVМ II. The displacements are multiplied by a factor of 2. The model parameters are as follows: (a) $p_1 = -1, p_2 = 1, p_3 = 0, p_4 = h, A = 0,2, \beta_1 = \beta_2 = 1,11$; (b) $p_1 = -1, p_2 = 1, p_3 = h, p_4 = 0, A = 0,25, \beta_1 = \beta_2 = 1,12$. DBs are localized at the intersection of red lines; (c) $p_1 = -1, p_2 = 1, p_3 = 0, p_4 = 0, A = 0,2, \beta_1 = 1,3, \beta_2 = 1,12$; (d) $p_1 = -1, p_2 = 1, p_3 = 0, p_4 = h, A = 0,2, \beta_1 = 1,8, \beta_2 = 0,6$. In (e), the time evolution of the x -component of the displacement of a particle colored red for panel (a) is shown

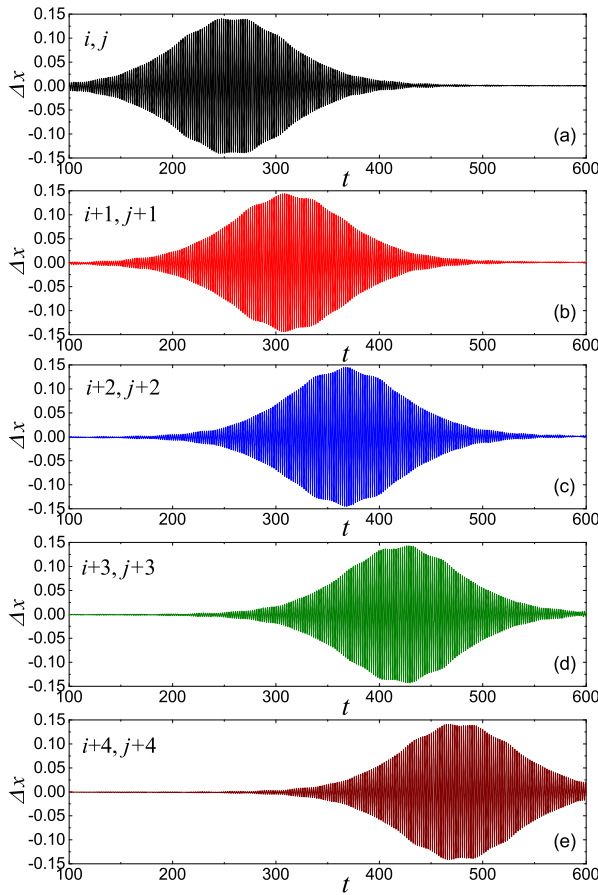


Рис.7. Перемещение нуль-мерного ДБ, полученного с помощью наложения функции локализации (7) на ДНКМ II. Показана временная эволюция x -компоненты смещения частиц, где: (а) i, j , (б) $i + 1, j + 1$, (в) $i + 2, j + 2$, (г) $i + 3, j + 3$, (д) $i + 4, j + 4$. Параметры модели следующие: $p_1 = -1, p_2 = 1, p_3 = 0, p_4 = h/2, A = 0,2, \beta_1 = 1,3, \beta_2 = 1,12$

Fig.7. Movement of a zero-dimensional DB obtained by imposing the localization function (7) on DNVM II.

The time evolution of the particle displacement x -component is shown, where: (a) i, j , (b) $i + 1, j + 1$, (c) $i + 2, j + 2$, (d) $i + 3, j + 3$, (e) $i + 4, j + 4$.

The model parameters are as follows: $p_1 = -1, p_2 = 1, p_3 = 0, p_4 = h/2, A = 0,2, \beta_1 = 1.3, \beta_2 = 1.12$

Стационарные ДБ получаются, когда центр локализации находится в высокосимметричном положении решетки. Если центр локализации смещен из высокосимметричного положения решетки, может образоваться движущийся ДБ.

Мы пробовали различные смещения центра локализация для всех полученных одномерных и нульмерных ДБ, и только в одном случае получили движущийся ДБ. Это случай ДБ, показанный на рис.6в, когда центр локализации смещен из положения решетки вдоль линии $y = x$. ДБ перемещается вдоль этой линии, как показано на рис.7, на котором представлена x -

составляющая смещения частиц (а) i, j , (б) $i + 1, j + 1$, (в) $i + 2, j + 2$, (г) $i + 3, j + 3$, (д) $i + 4, j + 4$.

Можно видеть, что ДБ проходит через эти частицы по очереди. ДБ, показанные на рис.6в и (г), представляют собой версии движущегося ДБ, локализованные на частице и между двумя соседними частицами, соответственно.

Заключение

В представленном исследовании нульмерные и одномерные ДБ в квадратной решетке β -FPUT построены путем наложения локализирующих функций к ДНКМ I и II. Эти две ДНКМ входят в число 16 однокомпонентных ДНКМ, полученных Рябовым и Чечиным в [13], и их отличительной особенностью является то, что они имеют частоты выше фононного спектра. Одномерные ДБ локализованы вдоль линии (1), в то время как амплитуды колебаний частиц экспоненциально уменьшаются с удалением от этой линии в соответствии с уравнением (2).

Нульмерные ДБ экспоненциально локализованы на пересечении двух ортогональных линий (4), (5) в соответствии с уравнением (7). Стационарные ДБ получаются путем выбора точки локализации в высокосимметричных точках решетки. Параметры, определяющие степень пространственной локализации, выбираются таким образом, чтобы минимизировать энергию, излучаемую ДБ в течение переходного периода (см. рис.3). Были получены четыре одномерных ДБ на основе ДНКМ I, два из них параллельны линии $x = \text{const}$, а два других параллельны линии $y = \text{const}$. Были получены два одномерных ДБ на основе ДНКМ II, параллельные линии $y = x$, см. рис.4. Были получены три нульмерных ДБ на основе ДНКМ I, локализованные на пересечении линий $x = \text{const}$ и $y = \text{const}$ (см. рис.5). Были получены четыре нульмерных ДБ на основе ДНКМ II, локализованных на пересечении линий $y = x$ и $y = -x$ (см. рис.6).

Если центр локализации ДБ смещен из высокосимметричного положения решетки, может образоваться движущийся ДБ. Нам удалось привести в движение только один ДБ, показанный на рис.6в, сдвинув точку локализации из положения решетки вдоль линии $y = x$.

В целом, в этом исследовании были представлены следующие новые результаты. Впервые метод построения дискретных бризеров был применен к квадратной решетке. В результате впервые были описаны одномерные дис-

кретные бризеры в квадратной решетке. Также было построено несколько новых нульмерных ДБ, включая движущийся ДБ.

Наша работа демонстрирует, что долгоживущие квазибризеры могут быть легко получены путем наложения локализирующих функций к ДНКМ, которые имеют частоты за пределами фононного спектра. Этот метод может быть применен и к трехмерным решеткам.

Список литературы

1. Dolgov A.S. On localization of oscillations in nonlinear crystal structure // *Sov. Phys. Solid State*. 1986. V. 28. P. 907.
2. Sievers A.J., Takeno S. Intrinsic localized modes in anharmonic crystals // *Phys. Rev. Lett.* 1988. V. 61. P. 970.
3. Page J.B. Asymptotic solutions for localized vibrational modes in strongly anharmonic periodic systems // *Phys. Rev. B*. 1990. V. 41. P. 7835.
4. Flach S., Willis C.R. Discrete breathers // *Phys. Rep.* 1998. V. 295. P. 181–264.
5. Flach S., Gorbach A.V. Discrete breathers – Advances in theory and applications // *Phys. Rep.* 2008. V. 467, Is. 1–3. P. 1–116.
6. Dmitriev S.V., Korznikova E.A., Baimova J.A., Velarde, M.G. Discrete breathers in crystals // *Phys.* 2016. *Usp.* V. 59. P. 446.
7. Sakhnenko V.P., Chechin G.M. Symmetrical selection rules in nonlinear dynamics of atomic systems // *Phys. Dokl.* 1993. V. 38. P. 219.
8. Sakhnenko V.P., Chechin G.M. Bushes of modes and normal modes for nonlinear dynamical systems with discrete symmetry // *Phys. Dokl.* V. 1994. V. 39. P. 625.
9. Chechin G.M., Sakhnenko V.P. Interactions between normal modes in nonlinear dynamical systems with discrete symmetry. Exact results // *Physica D*. 1998. V. 117. P. 43.
10. Krylova K.A., Lobzenko I.P., Semenov A.S., Kudreyko A.A., Dmitriev S.V. Spherically localized discrete breathers in bcc metals V and Nb // *Comp. Mater. Sci.* 2020. V. 180. P. 109695.
11. Babicheva R.I., Semenov A.S., Soboleva E.G., Kudreyko A.A., Zhou K., Dmitriev S.V. Discrete breathers in a triangular β -Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou lattice // *Phys. Rev. E*. 2021. V. 103. P. 052202.
12. Ryabov D.S., Chechin G.M., Upadhyaya A., Korznikova E.A., Dubinko V.I., Dmitriev S.V. Delocalized nonlinear vibrational modes of triangular lattices // *Nonlinear Dyn.* 2020. V. 102. P. 2793–2810.
13. Ryabov D.S., Chechin G.M., Naumov E.K., Bebikhov Yu.V., Korznikova E.A., Dmitriev S.V. One-component delocalized nonlinear vibrational modes of square lattices // *Nonlinear Dyn.* 2023. V. 111. P. 8135–8153.
14. Chechin G.M., Dzhelauhova G.S., Mehonoshina E.A. Quasibreathers as a generalization of the concept of discrete breathers // *Phys. Rev. E*. 2006. V. 74. P. 036608.
15. Manley M.E. Impact of intrinsic localized modes of atomic motion on materials properties // *Acta. Mater.* 2010. V. 58. P. 2926–2935.
16. Xiong D., Wang J., Zhang Y., Zhao H. Nonuniversal heat conduction of one-dimensional lattices // *Phys. Rev. E*. 2012. V. 85. P. 020102(R).
17. Cuevas J., Archilla J.F.R., S'anchez-Rey B., Romero F.R. Interaction of moving discrete breathers with vacancies // *Physica D*. 2006. V. 216. P. 115–120.
18. Shimada T., Shirasaki D., Kitamura T.: Stone-Wales transformations triggered by intrinsic localized modes in carbon nanotubes // *Phys. Rev. B*. 2010. V. 81. P. 035401.
19. Terentyev D.A., Dubinko A.V., Dubinko V.I., Dmitriev S.V., Zhurkin, E.E., Sorokin, M.V.: Interaction of discrete breathers with primary lattice defects in bcc Fe // *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* 2015. V. 23. P. 085007.
20. Bezuglova G.S., Chechin G.M., Goncharov P.P. Discrete breathers on symmetry-determined invariant manifolds for scalar models on the plane square lattice // *Phys. Rev. E*. 2011. V. 84. P. 036606.

Информация об авторах

Е. К. Наумов – аспирант Института проблем сверхпластичности металлов РАН.

Ю. В. Бебихов – кандидат физико-математических наук, доцент Политехнического института (филиала) в г. Мирном, Северо-Восточный федеральный университет.

С. В. Дмитриев – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий лабораторией «Нелинейная динамика молекул и кристаллов» Института физики молекул и кристаллов Уфимского федерального исследовательского центра.

References

1. Dolgov, A. S. (1986). On localization of oscillations in nonlinear crystal structure. *Sov. Phys. Solid State*, (28), 907.

2. Sievers, A. J. & Takeno, S. (1988). Intrinsic localized modes in anharmonic crystals. *Phys. Rev. Lett.*, (61), 970.
3. Page, J. B. (1990). Asymptotic solutions for localized vibrational modes in strongly anharmonic periodic systems. *Phys. Rev. B*, (41), 7835.
4. Flach, S. & Willis, C. R. (1998). Discrete breathers. *Phys. Rep.*, (295), 181–264.
5. Flach, S. & Gorbach, A. V. (2008). Discrete breathers – Advances in theory and applications. *Phys. Rep.*, (467), 1–116.
6. Dmitriev, S. V., Korznikova, E. A., Baimova, J. A. & Velarde, M. G. (2016). Discrete breathers in crystals. *Phys. Usp.*, (59), 446.
7. Sakhnenko, V. P. & Chechin, G. M. (1993). Symmetrical selection rules in nonlinear dynamics of atomic systems. *Phys. Dokl.*, (38), 219.
8. Sakhnenko, V. P. & Chechin, G. M. (1994). Bushes of modes and normal modes for nonlinear dynamical systems with discrete symmetry. *Phys. Dokl.*, (39), 625.
9. Chechin, G. M. & Sakhnenko, V. P. (1998). Interactions between normal modes in nonlinear dynamical systems with discrete symmetry. Exact results. *Physica D*, (117), 43.
10. Krylova, K. A., Lobzenko, I. P., Semenov, A. S., Kudreyko, A. A. & Dmitriev, S. V. (2020). Spherically localized discrete breathers in bcc metals V and Nb. *Comp. Mater. Sci.*, (180), 109695.
11. Babicheva, R. I., Semenov, A. S., Soboleva, E. G., Kudreyko, A. A., Zhou, K. & Dmitriev, S. V. (2021). Discrete breathers in a triangular β -Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou lattice. *Phys. Rev. E*, (103), 052202.
12. Ryabov, D. S., Chechin, G. M., Upadhyaya, A., Korznikova, E. A., Dubinko, V. I. & Dmitriev, S. V. (2020). Delocalized nonlinear vibrational modes of triangular lattices. *Nonlinear Dyn.*, (102), 2793–2810.
13. Ryabov, D. S., Chechin, G. M., Naumov, E. K., Bebikhov, Yu. V., Korznikova, E. A. & Dmitriev, S. V. (2023). One-component delocalized nonlinear vibrational modes of square lattices. *Nonlinear Dyn.*, (111), 8135–8153.
14. Chechin, G. M., Dzhelauhova, G. S. & Mehonoshina, E. A. (2006). Quasibreathers as a generalization of the concept of discrete breathers. *Phys. Rev. E*, (74), 036608.
15. Manley, M. E. (2010). Impact of intrinsic localized modes of atomic motion on materials properties. *Acta Mater.*, (58), 2926–2935.
16. Xiong, D., Wang, J., Zhang, Y. & Zhao, H. (2012). Nonuniversal heat conduction of one-dimensional lattices. *Phys. Rev. E*, (85), 020102(R).
17. Cuevas, J., Archilla, J. F. R., S´anchez-Rey, B. & Romero, F. R. (2006). Interaction of moving discrete breathers with vacancies. *Physica D*, (216), 115–120.
18. Shimada, T., Shirasaki, D. & Kitamura, T. (2010). Stone-Wales transformations triggered by intrinsic localized modes in carbon nanotubes. *Phys. Rev. B*, (81), 035401.
19. Terentyev, D. A., Dubinko, A. V., Dubinko, V. I., Dmitriev, S. V., Zhurkin, E. E. & Sorokin, M. V. (2015). Interaction of discrete breathers with primary lattice defects in bcc Fe. *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, (23), 085007.
20. Bezuglova, G. S., Chechin, G. M. & Goncharov, P. P. (2011). Discrete breathers on symmetry-determined invariant manifolds for scalar models on the plane square lattice. *Phys. Rev. E*, (84), 036606.

Information about the authors

E. K. Naumov – Graduate-Student, Institute for Metals Superplasticity Problems of RAS.

Yu. V. Bebikhov – Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor, Polytechnic Institute (branch) in Mirny, North-Eastern Federal University.

S. V. Dmitriev – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Head of the Laboratory «Nonlinear Dynamics of Molecules and Crystals», Institute of Molecule and Crystal Physics, Ufa Federal Research Center.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.
The authors declare that there is no conflict of interest.

Статья поступила в редакцию 21.06.2023; одобрена после рецензирования 03.07.2023; принята к публикации 17.07.2023.

The article was received by the editorial board on 21 June 23; approved after reviewing 03 July 23; accepted for publication 17 July 23.