

Научная статья

1.3.8. Физика конденсированного состояния (физико-математические науки)

УДК 538.9

doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2025.02.006

ЩЕЛЕВОЙ ДИСКРЕТНЫЙ БРИЗЕР В БИАТОМНОМ КРИСТАЛЛЕ В2

Дина Ураулловна Абдуллина^{1,2}, Юрий Владимирович Бебихов², Мария Николаевна Семёнова²,
Евгений Константинович Наумов^{1,2}, Сергей Владимирович Дмитриев¹

¹Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН, 450075 Уфа, Россия

²Политехнический институт (филиал) в г. Мирном Северо-Восточного федерального университета, ул. Тихонова, 5/1, 678170, Мирный, Республика Саха (Якутия), Россия

¹ dina.abdullina25@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0001-6196-6093>

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

² mariya_semyonova86@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-7298-0226>

^{1,2} jjjjenia@mail.ru

¹ dmitriev.sergey.v@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-6744-4445>

Аннотация. Рассматривается биатомный кристалл со структурой В2 с межатомными взаимодействиями, описываемыми потенциалом β -Ферми-Паста-Улама-Цингу. Анализируется случай большой разницы в атомных массах компонентов, когда в фононном спектре кристалла возникает щель. Пространственно локализованная колебательная мода большой амплитуды, называемая дискретным бризером (ДБ), найдена путем применения функции локализации к делокализованной нелинейной колебательной моде (ДНКМ). ДНКМ и, следовательно, ДБ имеют частоты в щели фононного спектра.

Ключевые слова: кристаллическая решетка, биатомный кристалл, дискретный бризер, молекулярная динамика.

Благодарности. Работа была поддержана грантом Российского научного фонда, грант № 24-22-00092.

Для цитирования: Абдуллина Д.У., Бебихов Ю.В., Семенова М.Н., Наумов Е.К., Дмитриев С.В.. Щелевой дискретный бризер в биатомном кристалле В2. // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2025. Т. 22, № 2. С. 184-193. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2025.02.006.

Original article

GAP DISCRETE BREATHER IN B2 BIATOMIC CRYSTAL

Dina U. Abdullina^{1,2}, Yurii V. Bebikhov², Mariya N. Semenova², Evgeniy K. Naumov^{1,2},
Sergei V. Dmitriev¹

¹Institute of Molecule and Crystal Physics, Ural Federal Research Center, Russian Academy of Sciences, Ufa, 450075 Russia

²Polytechnic Institute (Branch) in Mirny, North-Eastern Federal University, Tikhonova St. 5/1, 678170 Mirny, Sakha Republic (Yakutiya), Russia

¹ dina.abdullina25@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0001-6196-6093>

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

² mariya_semyonova86@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-7298-0226>

^{1,2} jjjjenia@mail.ru

¹ dmitriev.sergey.v@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-6744-4445>

Abstract. The biatomic crystal with B2 structure is considered with the interatomic interactions described by the β -Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou potential. The case of a large difference in the atomic masses of the components is analyzed. The phonon spectrum of the crystal possesses a forbidden zone (gap). A spatially localized large-amplitude vibrational mode, called the discrete breather (DB), is found by applying a localization function to the delocalized nonlinear vibrational mode (DNVM). The DNVM and consequently the DB have frequencies in the gap of the phonon spectrum.

Keywords: crystal lattice, biatomic crystal, discrete breather, molecular dynamics.

Acknowledgments. The work was supported by a grant from the Russian Science Foundation, grant No. 24-22-00092.

For citation: Abdullina D.U., Bebikhov Yu.V., Semenova M.N., Naumov E.K. & Dmitriev S.V. (2025). Gap discrete breather in B2 biatomic crystal. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 22(2), 184-193. (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2025.02.006.

Введение

Долгов и, независимо от него, Сиверс и Такено обнаружили, что в бездефектных нелинейных цепочках могут существовать пространственно локализованные колебания частиц [1,2]. Такие локализованные возбуждения были названы либо дискретными бризерами (ДБ), либо внутренними локализованными модами. ДБ существуют потому, что они колеблются на частоте за пределами фононного спектра цепочки. Два необходимых условия для их существования – это дискретность среды, которая ограничивает фононный спектр решетки, и нелинейность, которая изменяет частоту колебаний ДБ, позволяя ей выйти из фононного спектра [3-5]. Биатомные решетки могут иметь щель в фононном спектре, и в этом случае возможны ДБ с мягкой или жесткой ангармоничностью с колебательными частотами в пределах щели [6,7]. В отсутствие щели могут существовать только ДБ с жесткой ангармоничностью с частотами выше фононного спектра.

Примерно через десятилетие после обнаружения ДБ в простых решетках внимание исследователей переключилось на кристаллы, поскольку для них выполняются оба необходимых условия существования ДБ [8]. В работе Киселева и др. [9] было доказано, что в биатомных цепочках с потенциалами Морзе или Леннарда-Джонса возможны только щелевые ДБ, но не ДБ с частотами выше фононного спектра. Поэтому в 1997 году методом молекулярной динамики было проведено первое исследование для кристалла NaI, имеющего щель в фононном спектре [10]. В 2009 году существование щелевых ДБ было экспериментально продемонстрировано [11]. Затем было показано, что результат, полученный в [9], верен для одномерных (1D) решеток, но в решетках более высокой размерности с морзовскими взаимодействиями возможны ДБ с частотой выше фононного спектра [12,13]. Впервые ДБ с жесткой ангармоничностью были численно обнаружены

в Ni и Nb [14], а затем и во многих других кристаллах, например, в алмазе [15], альфа-уране [16], упорядоченных сплавах [17-20], бислоиных металлах V, Fe и W [21], а также в трехмерных решетках с потенциалом β -Ферми-Паста-Улама-Цингу (β -ФПУЦ) [22,23].

Проведено довольно много экспериментальных исследований ДБ, направленных на определение их влияния на макроскопические свойства кристаллов [24]. Наибольшее внимание было уделено ионному кристаллу NaI [11,25-27], поскольку ДБ в этом кристалле были предсказаны теоретически [10]. Фононные колебательные спектры были измерены методами рентгеновского и нейтронного рассеяния, чтобы определить влияние ДБ на механические свойства α -урана [28-30]. Измерения нейтронного рассеяния фононов в PbSe показали возбуждение ДБ при высоких температурах, и этот факт помогает объяснить прекрасные термоэлектрические свойства халькогенидов свинца [31].

В последнее время интерес к нелинейной динамике ОЦК решетки привлекает внимание исследователей, поскольку многие металлы имеют такую структуру [21,32]. В частности, были найдены делокализованные нелинейные колебательные моды (ДНКМ) ОЦК решетки [22] и использованы для тестирования и улучшения межатомных потенциалов для вольфрама [33-35]. Отметим, что ДНКМ – это точное решение уравнений движения для решетки, найденное путем анализа только симметрии решетки [36]. В действительности, ДНКМ – это ещё один термин для более общего понятия кустов нелинейных нормальных мод [36], которое может быть применено не только к кристаллам, но и к молекулам [37]. Хаотические ДБ в ОЦК решетке были изучены численно [38,39]. Описаны ДБ в квадратной решетке β -ФПУЦ, возникающие при внешнем воздействии в пределах фононного спектра [40].

Строго говоря, ДБ – это точное решение уравнений движения частиц нелинейной решетки; все частицы в таком ДБ колеблются с

одинаковой частотой. Не все решетки, даже относительно простые, допускают такие решения. Гораздо чаще встречаются пространственно локализованные колебательные решения, которые медленно излучают волны малой амплитуды и поэтому имеют большое время жизни. В работе Чечина и др. такие решения было предложено называть квазибризерами (КБ) [41]. ДБ как точные решения очень важны для теории, но в физике реальных кристаллов, где неизбежно присутствуют различные возмущения, а межатомные силы известны лишь в некотором приближении, понятие КБ выходит на первый план. В данной работе изучаются именно КБ, но по традиции они называются ДБ.

Подвижные ДБ представляют особый интерес, поскольку они способствуют переносу энергии в кристаллической решетке [12,42]. Движущиеся ДБ взаимодействуют с дефектами и стимулируют их движение [43-45] или отжиг [46]. Движущиеся ДБ экспериментально наблюдались в цепи магнитных маятников [47], в массиве микроантенн [48,49], в одномерных гранулированных средах [50], и в цепи масс, соединенных пружинами [51]. Точные решения для движущихся ДБ были получены в работе [52]. Установлены условия гладкого распространения ДБ [53-55].

Не существует строгих математических методов для нахождения точных ДБ в двумерных и трехмерных решетках. Однако для поиска КБ был разработан плодотворный подход, основанный на использовании ДНКМ. Все ДНКМ, поддерживаемые кристаллической решеткой данной симметрии, могут быть определены с помощью теории групп, как показано в работах Чечина и Сахненко [36], а также Щербинина [22,23,56] и Рябова [57]. Следующим шагом является нахождение частотных характеристик для всех ДНКМ. До этого момента анализ основывается на известной теории, но последний шаг – это, по сути, метод проб и ошибок применения функции локализации к ДНКМ с частотами вне фононного спектра решетки. Во многих случаях удается получить долгоживущие КБ [22,23], но их нахождение не гарантировано.

В настоящей работе рассматривается биатомный кристалл со сверхструктурой В2 типа CsCl, в котором разница в атомных массах компонентов достаточно велика, чтобы открылась щель в фононном спектре. Основным ре-

зультатом является обнаружение щелевого ДБ в кристалле этого типа.

Компьютерная модель

Структура CsCl показана на рис. 1(а). Параметр решетки равен a , а атомы двух типов имеют массы m_1 и m_2 .

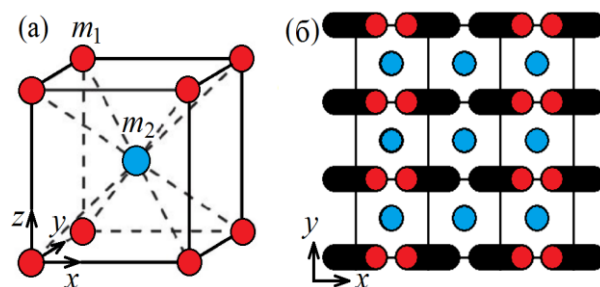


Рис.1. (а) Кристалл со структурой CsCl с атомами двух типов, которые отличаются только массами, а межатомные взаимодействия одинаковы и описываются потенциалом β -ФПУЦ, см. уравнение (2). Параметр решетки равен a . (б) Делокализованная нелинейная колебательная мода с (100) атомными плоскостями, колеблющимися в противофазе с соседними плоскостями. Колеблются только атомы одной подрешетки, в то время как атомы другой подрешетки находятся в состоянии покоя.

Движение N атомов в вычислительной ячейке определяется численным интегрированием уравнений вида

$$m_n \frac{d^2 \mathbf{r}_n}{dt^2} = \mathbf{F}_n, \quad \mathbf{F}_n = - \frac{dV}{d\mathbf{r}_n}, \quad n = 1, \dots, N, \quad (1)$$

где радиус-вектор $\mathbf{r}_n$ определяет положение n -го атома, m_n - масса атома, $\mathbf{F}_n$ - сила, действующая на атом со стороны соседей в четырех ближайших координационных оболочках, V - сумма потенциальных энергий межатомных связей. Независимо от типа взаимодействующих атомов, используется следующий потенциал β -ФПУЦ

$$\varphi_l(r) = \frac{c_l}{2} (r - \zeta_l)^2 + \frac{\beta_l}{4} (r - \zeta_l)^4, \quad l = 1, \dots, 4. \quad (2)$$

где φ - энергия взаимодействия, r - расстояние между двумя атомами, l - номер координационной оболочки, радиусы координационных оболочек $\zeta_1 = a\sqrt{3}/2$, $\zeta_2 = a$, $\zeta_3 = a\sqrt{2}$ и $\zeta_4 = a\sqrt{11}/2$, c_l и β_l - коэффициенты гармонической и ангармонической частей потенциала. Без потери общности $a=1$ и $c_1=1$ задаются путем нормировки

единиц расстояния и энергии, соответственно. Параметры потенциалов следующие $c_1=1.0$, $c_2=0.7$, $c_3=0.4$, $c_4=0.1$ $\beta_l=10.0$ c_l , $l=1, \dots, 4$ (3)

Параметры выбраны таким образом, чтобы более длинные связи были менее жесткими. Атомные массы составляют $m_1 = 3$ и $m_2 = 1$, причем последняя всегда может быть задана путем нормализации единицы времени.

В моделировании используются периодические граничные условия. Начальные условия, используемые для возбуждения ДБ, описаны ниже.

Метод возбуждения дискретных бризеров. Делокализованная нелинейная колебательная мода

В рассматриваемом кристалле может быть возбуждена ДНКМ, показанная на рис.1(б). В этой моде атомные плоскости (100) одной подрешетки колеблются вдоль оси x в противофазе с ближайшими соседями, а атомы другой подрешетки находятся в состоянии покоя. Эта мода представляет собой колебательную систему с одной степенью свободы, и, учитывая ее симметрию, можно записать соответствующее уравнение движения, которое в гармоническом приближении дает следующую частоту колебаний

$$\omega_1 = \sqrt{\frac{1}{m_1} \left(\frac{8}{3} c_1 + 4c_2 + 8c_3 + 8c_4 \right)}, \quad \omega_2 = \sqrt{\frac{m_1}{m_2}} \omega_1. \quad (4)$$

Частота $\omega_1=1.776$ реализуется для случая, когда мода возбуждается на атомах с массой m_1 , а когда колеблются атомы с массой m_2 , то частота колебаний составляет $\omega_2=3.077$.

Плотность фононных состояний

Решив задачу на собственные значения для линеаризованных уравнений движения для рассматриваемой решетки, можно найти для каждой точки первой зоны Бриллюэна шесть частот, соответствующих различным ветвям дисперсионных кривых. Частоты, рассчитанные для 10^5 случайно выбранных точек первой зоны Бриллюэна, объединены в гистограмму плотности фононных состояний, показанную на рис.2. Разница между массами m_1 и m_2 , рассматриваемыми в данной работе, достаточно велика, чтобы открыть щель в фононном спектре. Частота ω_1 является нижним краем щели, а частота ω_2 -

верхним краем фононного спектра, см. уравнение (4).

Список литературы

1. Долгов А. С. О локализации колебаний в нелинейной кристаллической структуре // Советская Физика - Твердого Тела – 1986. – Т. 28. – №. – С. 907.
2. Sievers A. J., Takeno S. Intrinsic localized modes in anharmonic crystals //Physical Review Letters. – 1988. – V. 61. – №. 8. – P. 970.
3. Page J. B. Asymptotic solutions for localized vibrational modes in strongly anharmonic periodic systems //Physical Review B. – 1990. – V. 41. – №. 11. – P. 7835.
4. Flach S., Willis C. Discrete breathers //Physics Reports. – 1998. – V. 295. – №. 5. – P. 181–264.
5. Flach S., Gorbach A. V. Discrete breathers—advances in theory and applications //Physics Reports. – 2008. – V. 467. – №. 1-3. – P. 1-116.
6. Ikeda K. et al. Chaotic breathers of two types in a two-dimensional Morse lattice with an on-site harmonic potential //Physica D: Nonlinear Phenomena. – 2007. – V. 225. – №. 2. – P. 184-196.
7. Doi Y., Nakatani A., Yoshimura K. Modulational instability of zone boundary mode and band edge modes in nonlinear diatomic lattices //Physical Review E—Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics. – 2009. – V. 79. – №. 2. – P. 026603.
8. Dmitriev S. V. et al. Discrete breathers in crystals //Physics-Uspekhi. – 2016. – V. 59. – №. 5. – P. 446.
9. Kiselev S. A., Bickham S. R., Sievers A. J. Anharmonic gap modes in a perfect one-dimensional diatomic lattice for standard two-body nearest-neighbor potentials //Physical Review B. – 1993. – V. 48. – №. 18. – P. 13508.
10. Kiselev S. A., Sievers A. J. Generation of intrinsic vibrational gap modes in three-dimensional ionic crystals //Physical Review B. – 1997. – V. 55. – №. 9. – P. 5755.
11. Manley M. E., Sievers A. J., Lynn J. W., Kiselev S. A., Agladze N. I., Chen Y., Llobet A., and Alatas A. Intrinsic localized modes observed in the high-temperature vibrational spectrum of NaI //Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics. – 2009. – V. 79. – №. 13. – P. 134304.
12. Kistanov A. A., Murzaev R. T., Dmitriev S. V., Dubinko V. I., and Khizhnyakov V. V. Moving discrete breathers in a monoatomic two-dimensional crystal //JETP letters. – 2014. – V. 99. – P. 353-357.
13. Korznikova E. A., Fomin S. Y., Soboleva E. G., and Dmitriev S. V. Highly symmetric dis-

crete breather in a two-dimensional Morse crystal //JETP letters. – 2016. – V. 103. – P. 277-281.

14. Haas M., Hizhnyakov V., Shelkan A., Klopov M., and Sievers A. J. Prediction of high-frequency intrinsic localized modes in Ni and Nb //Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics. – 2011. – V. 84. – №. 14. – P. 144303.

15. Murzaev R. T., Bachurin D. V., Korznikova E. A., and Dmitriev S. V. Localized vibrational modes in diamond //Physics Letters A. – 2017. – V. 381. – №. 11. – P. 1003-1008.

16. Murzaev R. T., Babicheva R. I., Zhou K., Korznikova E. A., Fomin S. Y., Dubinko V. I., and Dmitriev S. V. Discrete breathers in alpha-uranium //The European Physical Journal B. – 2016. – V. 89. – P. 1-6.

17. Medvedev N. N., Starostenkov M. D., Potekaev A. I., Zakharov P. V., Markidonov A. V., and Eremin A. M. Energy Localization in the Ordered Condensed Systems: A₃B Alloys With L₁₂ Superstructure //Russian Physics Journal. – 2014. – V. 57. – P. 387-395.

18. Medvedev N. N., Starostenkov M. D., Zakharov P. V., and Pozidaeva O. V. Localized oscillating modes in two-dimensional model of regulated Pt₃Al alloy //Technical Physics Letters. – 2011. – V. 37. – P. 98-101.

19. Zakharov P. V. The effect of nonlinear supratransmission in discrete structures: A review //Comput. Res. Model. – 2023. – V. 15. – №. 3. – P. 599-617.

20. Medvedev N. N., Starostenkov M. D., Manley M. E. Energy localization on the Al sublattice of Pt₃Al with L12 order //Journal of Applied Physics. – 2013. – V. 114. – №. 21. – P. 213506

21. Murzaev R. T., Kistanov A. A., Dubinko V. I., Terentyev D. A., and Dmitriev S. V. Moving discrete breathers in bcc metals V, Fe and W //Computational Materials Science. – 2015. – V. 98. – P. 88-92.

22. Shcherbinin S. A., Bebikhov Y. V., Abdullina D. U., Kudreyko A. A., and Dmitriev S. V. Delocalized nonlinear vibrational modes and discrete breathers in a body centered cubic lattice //Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation. – 2024. – V. 135. – P. 108033.

23. Shcherbinin S. A., Kazakov A. M., Bebikhov Y. V., Kudreyko A. A., and Dmitriev S. V. Delocalized nonlinear vibrational modes and discrete breathers in β -FPUT simple cubic lattice //Physical Review E. – 2024. – V. 109. – №. 1. – P. 014215.

24. Manley M. E. Impact of intrinsic localized modes of atomic motion on materials properties //Acta Materialia. – 2010. – V. 58. – №. 8. – P. 2926-2935.

25. Manley M. E., Abernathy D. L., Agladze N. I., and Sievers A. J. Symmetry-breaking dynam-

ical pattern and localization observed in the equilibrium vibrational spectrum of NaI //Scientific Reports. – 2011. – V. 1. – №. 1. – P. 4.

26. Kempa M., Ondrejko P., Bourges P., Ollivier J., Rols S., Kulda J., Margueron S., and Hlinka J. The temperature dependence of the phononic band gap of NaI //Journal of Physics: Condensed Matter. – 2013. – V. 25. – №. 5. – P. 055403.

27. Kempa M., Ondrejko P., Bourges P., Marton P., and Hlinka J. Lattice dynamics of NaI studied by inelastic neutron scattering: Absence of thermally induced discrete breathers //Physical Review B. – 2014. – V. 89. – №. 5. – P. 054308.

28. Manley M. E., Alatas A., Trouw F., Leu B. M., Lynn J. W., Chen Y., and Hulst W. L. Intrinsic nature of thermally activated dynamical modes in α -U: Nonequilibrium mode creation by X-ray and neutron scattering //Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics. – 2008. – V. 77. – №. 21. – P. 214305.

29. Manley M. E., Yethiraj M., Sinn H., Volz H., Alatas A., Lashley J. C., Hulst W. L., Lander G. H., and Smith J. L. Formation of a new dynamical mode in α -uranium observed by inelastic X-ray and neutron scattering // Rev. Lett. – 2006. – V. 96. – P. 125501.

30. Manley M. E., Yethiraj M., Sinn H., Volz H. M., Alatas A., Lashley J. C., Hulst W. L., Lander G. H., Thoma D. J., and Smith J. L. Intrinsically localized vibrations and the mechanical properties of α -uranium //Journal of alloys and compounds. – 2007. – V. 444. – P. 129-132.

31. 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. Intrinsic anharmonic localization in thermoelectric PbSe //Nature communications. – 2019. – V. 10. – №. 1. – P. 1928.

32. Doi Y., Komiya T., Nagashima S., and Nakatani A. Search of nonlinear energy localized structure in bcc crystals //Zairyo/Journal of the Society of Materials Science, Japan. – 2021. – V. 70. – №. 4. – P. 330-335.

33. Kosarev I. V., Shcherbinin S. A., Kistanov A. A., Babicheva R. I., Korznikova E. A., and Dmitriev S. V. An approach to evaluate the accuracy of interatomic potentials as applied to tungsten //Computational Materials Science. – 2024. – V. 231. – P. 112597.

34. Kistanov A. A., Kosarev I. V., Shcherbinin S. A., Shapeev A. V., Korznikova E. A., and Dmitriev S. V. Unified approach to generating a training set for machine learning interatomic potentials: The case of BCC tungsten //Materials Today Communications. – 2025. – V. 42. – P. 111437.

35. Ryabov D. S., Kosarev I. V., Xiong D., Kudreyko A. A., and Dmitriev S. V. Delocalized

- Nonlinear Vibrational Modes in Bcc Lattice for Testing and Improving Interatomic Potentials // *Computers, Materials & Continua*. – 2025. – V. 82. – №. 3. – P. 3797 – 3820.
36. Chechin G. M., Sakhnenko V. P. Interactions between normal modes in nonlinear dynamical systems with discrete symmetry. Exact results // *Physica D: Nonlinear Phenomena*. – 1998. – V. 117. – №. 1-4. – P. 43-76.
37. Chechin G., Ryabov D., Shcherbinin S. Nonlinear normal mode interactions in the SF 6 molecule studied with the aid of density functional theory // *Physical Review E*. – 2015. – V. 92. – №. 1. – P. 012907.
38. Bachurin D. V., Murzaev R. T., Abdullina D. U., Semenova M. N., Bebikhov Y. V., and Dmitriev S. V. Chaotic discrete breathers in bcc lattice: Effect of the first- and second-neighbor interactions // *Physica D: Nonlinear Phenomena*. – 2024. – V. 470. – P. 134344.
39. Kolesnikov I. D., Shcherbinin S. A., Bebikhov Y. V., Korznikova E. A., Shepelev I. A., Kudreyko A. A., and Dmitriev S. V. Chaotic discrete breathers in bcc lattice // *Chaos, Solitons & Fractals*. – 2024. – V. 178. – P. 114339.
40. Bebikhov Y. V., Naumov E. K., Semenova M. N., and Dmitriev S. V. Discrete breathers in a β -FPUT square lattice from in-band external driving // *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*. – 2024. – V. 132. – P. 107897.
41. Chechin G. M., Dzhelauhova G. S., Mehonoshina E. A. Quasibreathers as a generalization of the concept of discrete breathers // *Physical Review E—Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics*. – 2006. – V. 74. – №. 3. – P. 036608.
42. Bukhari M. A., Barry O. R., Vakakis A. F. Breather propagation and arrest in a strongly nonlinear locally resonant lattice // *Mechanical Systems and Signal Processing*. – 2023. – V. 183. – P. 109623.
43. Cuevas-Maraver J., S'anchez-Rey B., Eilbeck J. C., and Russell F. M. Interaction of moving discrete breathers with interstitial defects // *Discrete and Continuous Dynamical Systems - Series S*. – 2011. – V. 4. – №. 5. – P. 1057 – 1067.
44. Cuevas J., Katerji C., Archilla J. F. R., Eilbeck J. C., and Russell F. M. Influence of moving breathers on vacancies migration // *Physics Letters A*. – 2003. – V. 315. – №. 5. – P. 364-371.
45. Cuevas J., Archilla J. F. R., S'anchez-Rey B., and Romero F. R. Interaction of moving discrete breathers with vacancies // *Physica D: Nonlinear Phenomena*. – 2006. – V. 216. – №. 1. – P. 115-120.
46. Archilla J. F. R., Coelho S. M. M., Auret F. D., Dubinko V. I., and Hizhnyakov V. Long range annealing of defects in germanium by low energy plasma ions // *Physica D: Nonlinear Phenomena*. – 2015. – V. 297. – P. 56-61.
47. Russell F., Zolotaryuk Y., Eilbeck J., and Dauxois T. Moving breathers in a chain of magnetic pendulums // *Physical Review B*. – 1997. – V. 55. – №. 10. – P. 6304 – 6308.
48. Sato M., Sievers A. J. Visualizing intrinsic localized modes with a nonlinear micromechanical array // *Low Temperature Physics*. – 2008. – V. 34. – №. 7. – P. 543-548.
49. Sato M., Nakaguchi T., Ishikawa T., Shige S., Soga Y., Doi Y., and Sievers A. J. Supertransmission channel for an intrinsic localized mode in a one-dimensional nonlinear physical lattice // *Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science*. – 2015. – V. 25. – №. 10. – P. 103122.
50. Zhang Y., McFarland D. M., Vakakis A. F. Propagating discrete breathers in forced one-dimensional granular networks: theory and experiment // *Granular Matter*. – 2017. – V. 19. – №. 3. – P. 1-2259.
51. Watanabe Y., Nishida T., Doi Y., and Sugimoto N. Experimental demonstration of excitation and propagation of intrinsic localized modes in a mass-spring chain // *Physics Letters A*. – 2018. – V. 382. – №. 30. – P. 1957-1961.
52. Archilla J. F. R., Doi Y., Kimura M. Pterobreathers in a model for a layered crystal with realistic potentials: Exact moving breathers in a moving frame // *Physical Review E*. – 2019. – V. 100. – №. 2. – P. 022206.
53. Doi Y., Yoshimura K. Translational asymmetry controlled lattice and numerical method for moving discrete breather in four particle system // *Journal of the Physical Society of Japan*. – 2009. – V. 78. – №. 3. – P. 034401.
54. Yoshimura K., Doi Y. Moving discrete breathers in nonlinear lattice: Resonance and stability // *Wave Motion*. – 2007. – V. 45. – №. 1-2. – P. 83-99.
55. Doi Y., Yoshimura K. Symmetric potential lattice and smooth propagation of tail-free discrete breathers // *Physical Review Letters*. – 2016. – V. 117. – №. 1. – P. 014101.
56. Bachurina O. V., Murzaev R. T., Shcherbinin S. A., Kudreyko A. A., Dmitriev S. V., and Bachurin D. V. Multi-component delocalized nonlinear vibrational modes in nickel // *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. – 2023. – V. 31. – №. 7. – P. 075009.
57. Ryabov D. S., Chechin G. M., Upadhyaya A., Korznikova E. A., Dubinko V. I., and Dmitriev S. V. Delocalized nonlinear vibrational modes of triangular lattices // *Nonlinear Dynamics*. – 2020. – V. 102. – P. 2793-2810.
58. Page J. B. Asymptotic solutions for localized vibrational modes in strongly anharmonic periodic systems // *Physical Review B*. – 1990. – V. 41. – №. 11. – P. 7835.
59. Bingol S., Erdinc B., Akkus H. Electronic band structure, optical, dynamical and thermodynamic properties of cesium chloride (CsCl) from

first-principles //International Journal for Simulation and Multidisciplinary Design Optimization. – 2015. – V. 6. – P. A7.

60. Gao H. X., Peng L. M. Debye–Waller factors of compounds with the caesium chloride structure //Foundations of Crystallography. – 2000. – V. 56. – №. 6. – P. 519-524.

61. Durukan İ. K., Çiftci Y. DFT analysis of mechanical and dynamic properties of CuBe //Gazi University Journal of Science. – 2022. – V. 35. – №. 4. – P. 1652-1663

Информация об авторах

Абдуллина Дина Ураловна, младший научный сотрудник ИФМК УФИЦ РАН, <https://orcid.org/0000-0001-6196-6093>, dina.abdullina25@gmail.com

Бебихов Юрий Владимирович, д.ф.-м.н., доцент, зав. кафедрой Электроэнергетика и автоматизация промышленного производства МПТИ (филиал) СВФУ, <https://orcid.org/0000-0002-8366-4819>, bebikhov.yura@mail.ru

Семёнова Мария Николаевна, к.ф.-м.н., доцент каф. Фундаментальной и прикладной математики, МПТИ (филиал) СВФУ, <https://orcid.org/0000-0002-7298-0226>, mariya_semyonova86@mail.ru

Наумов Евгений Константинович, аспирант Института проблем сверхпластичности металлов РАН, jijjenia@mail.ru

Дмитриев Сергей Владимирович, д.ф.-м.н., профессор, заведующий лабораторией ИФМК УФИЦ РАН, <https://orcid.org/0000-0002-6744-4445>, dmitriev.sergey.v@gmail.com

References

1. Dolgov A. S. On localization of oscillations in nonlinear crystal structure //Sov.Phys. Solid State.– 198. – V. 28. – №. – P. 907.

2. Sievers A. J., Takeno S. Intrinsic localized modes in anharmonic crystals //Physical Review Letters. – 1988. – V. 61. – №. 8. – P. 970.

3. Page J. B. Asymptotic solutions for localized vibrational modes in strongly anharmonic periodic systems //Physical Review B. – 1990. – V. 41. – №. 11. – P. 7835.

4. Flach S., Willis C. Discrete breathers //Physics Reports. – 1998. – V. 295. – №. 5. – P. 181–264.

5. Flach S., Gorbach A. V. Discrete breathers—advances in theory and applications //Physics Reports. – 2008. – V. 467. – №. 1-3. – P. 1-116.

6. Ikeda K. et al. Chaotic breathers of two types in a two-dimensional Morse lattice with an on-site harmonic potential //Physica D: Nonlinear Phenomena. – 2007. – V. 225. – №. 2. – P. 184-196.

7. Doi Y., Nakatani A., Yoshimura K. Modulational instability of zone boundary mode and band edge modes in nonlinear diatomic lattices //Physical Review E—Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics. – 2009. – V. 79. – №. 2. – P. 026603.

8. Dmitriev S. V. et al. Discrete breathers in crystals //Physics-Uspekhi. – 2016. – V. 59. – №. 5. – P. 446.

9. Kiselev S. A., Bickham S. R., Sievers A. J. Anharmonic gap modes in a perfect one-dimensional diatomic lattice for standard two-body nearest-neighbor potentials //Physical Review B. – 1993. – V. 48. – №. 18. – P. 13508.

10. Kiselev S. A., Sievers A. J. Generation of intrinsic vibrational gap modes in three-dimensional ionic crystals //Physical Review B. – 1997. – V. 55. – №. 9. – P. 5755.

11. Manley M. E., Sievers A. J., Lynn J. W., Kiselev S. A., Agladze N. I., Chen Y., Llobet A., and Alatas A. Intrinsic localized modes observed in the high-temperature vibrational spectrum of NaI //Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics. – 2009. – V. 79. – №. 13. – P. 134304.

12. Kistanov A. A., Murzaev R. T., Dmitriev S. V., Dubinko V. I., and Khizhnyakov V. V. Moving discrete breathers in a monoatomic two-dimensional crystal //JETP letters. – 2014. – V. 99. – P. 353-357.

13. Korznikova E. A., Fomin S. Y., Soboleva E. G., and Dmitriev S. V. Highly symmetric discrete breather in a two-dimensional Morse crystal //JETP letters. – 2016. – V. 103. – P. 277-281.

14. Haas M., Hizhnyakov V., Shelkan A., Klopov M., and Sievers A. J. Prediction of high-frequency intrinsic localized modes in Ni and Nb //Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics. – 2011. – V. 84. – №. 14. – P. 144303.

15. Murzaev R. T., Bachurin D. V., Korznikova E. A., and Dmitriev S. V. Localized vibrational modes in diamond // *Physics Letters A*. – 2017. – V. 381. – №. 11. – P. 1003-1008.
16. Murzaev R. T., Babicheva R. I., Zhou K., Korznikova E. A., Fomin S. Y., Dubinko V. I., and Dmitriev S. V. Discrete breathers in alpha-uranium // *The European Physical Journal B*. – 2016. – V. 89. – P. 1-6.
17. Medvedev N. N., Starostenkov M. D., Potekaev A. I., Zakharov P. V., Markidonov A. V., and Eremin A. M. Energy Localization in the Ordered Condensed Systems: A_3B Alloys With L_{12} Superstructure // *Russian Physics Journal*. – 2014. – V. 57. – P. 387-395.
18. Medvedev N. N., Starostenkov M. D., Zakharov P. V., and Pozidaeva O. V. Localized oscillating modes in two-dimensional model of regulated Pt_3Al alloy // *Technical Physics Letters*. – 2011. – V. 37. – P. 98-101.
19. Zakharov P. V. et al. The effect of nonlinear supratransmission in discrete structures: A review // *Comput. Res. Model.* – 2023. – V. 15. – №. 3. – P. 599-617.
20. Medvedev N. N., Starostenkov M. D., Manley M. E. Energy localization on the Al sublattice of Pt_3Al with L_{12} order // *Journal of Applied Physics*. – 2013. – V. 114. – №. 21. – P. 213506
21. Murzaev R. T., Kistanov A. A., Dubinko V. I., Terentyev D. A., and Dmitriev S. V. Moving discrete breathers in bcc metals V, Fe and W // *Computational Materials Science*. – 2015. – V. 98. – P. 88-92.
22. Shcherbinin S. A., Bebikhov Y. V., Abdullina D. U., Kudreyko A. A., and Dmitriev S. V. Delocalized nonlinear vibrational modes and discrete breathers in a body centered cubic lattice // *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*. – 2024. – V. 135. – P. 108033.
23. Shcherbinin S. A., Kazakov A. M., Bebikhov Y. V., Kudreyko A. A., and Dmitriev S. V. Delocalized nonlinear vibrational modes and discrete breathers in β -FPUT simple cubic lattice // *Physical Review E*. – 2024. – V. 109. – №. 1. – P. 014215.
24. Manley M. E. Impact of intrinsic localized modes of atomic motion on materials properties // *Acta Materialia*. – 2010. – V. 58. – №. 8. – P. 2926-2935.
25. Manley M. E., Abernathy D. L., Agladze N. I., and Sievers A. J. Symmetry-breaking dynamical pattern and localization observed in the equilibrium vibrational spectrum of NaI // *Scientific Reports*. – 2011. – V. 1. – №. 1. – P. 4.
26. Kempa M., Ondrejko P., Bourges P., Ollivier J., Rols S., Kulda J., Margueron S., and Hlinka J. The temperature dependence of the phononic band gap of NaI // *Journal of Physics: Condensed Matter*. – 2013. – V. 25. – №. 5. – P. 055403.
27. Kempa M., Ondrejko P., Bourges P., Marton P., and Hlinka J. Lattice dynamics of NaI studied by inelastic neutron scattering: Absence of thermally induced discrete breathers // *Physical Review B*. – 2014. – V. 89. – №. 5. – P. 054308.
28. Manley M. E., Alatas A., Trouw F., Leu B. M., Lynn J. W., Chen Y., and Hulth W. L. Intrinsic nature of thermally activated dynamical modes in α -U: Nonequilibrium mode creation by X-ray and neutron scattering // *Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics*. – 2008. – V. 77. – №. 21. – P. 214305.
29. Manley M. E., Yethiraj M., Sinn H., Volz H., Alatas A., Lashley J. C., Hulth W. L., Lander G. H., and Smith J. L. Formation of a new dynamical mode in α -uranium observed by inelastic X-ray and neutron scattering // *Rev. Lett.* – 2006. – V. 96. – P. 125501.
30. Manley M. E., Yethiraj M., Sinn H., Volz H. M., Alatas A., Lashley J. C., Hulth W. L., Lander G. H., Thoma D. J., and Smith J. L. Intrinsically localized vibrations and the mechanical properties of α -uranium // *Journal of alloys and compounds*. – 2007. – V. 444. – P. 129-132.
31. 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. Intrinsic anharmonic localization in thermoelectric PbSe // *Nature communications*. – 2019. – V. 10. – №. 1. – P. 1928.
32. Doi Y., Komiya T., Nagashima S., and Nakatani A. Search of nonlinear energy localized structure in bcc crystals // *Zairyo/Journal of the Society of Materials Science, Japan*. – 2021. – V. 70. – №. 4. – P. 330-335.
33. Kosarev I. V., Shcherbinin S. A., Kistanov A. A., Babicheva R. I., Korznikova E. A., and Dmitriev S. V. An approach to evaluate the accu-

- racy of interatomic potentials as applied to tungsten //Computational Materials Science. – 2024. – V. 231. – P. 112597.
34. Kistanov A. A., Kosarev I. V., Shcherbinin S. A., Shapeev A. V., Korznikova E. A., and Dmitriev S. V. Unified approach to generating a training set for machine learning interatomic potentials: The case of BCC tungsten //Materials Today Communications. – 2025. – V. 42. – P. 111437.
35. Ryabov D. S., Kosarev I. V., Xiong D., Kudreyko A. A., and Dmitriev S. V. Delocalized Nonlinear Vibrational Modes in Bcc Lattice for Testing and Improving Interatomic Potentials //Computers, Materials & Continua. – 2025. – V. 82. – №. 3. – P. 3797 – 3820.
36. Chechin G. M., Sakhnenko V. P. Interactions between normal modes in nonlinear dynamical systems with discrete symmetry. Exact results //Physica D: Nonlinear Phenomena. – 1998. – V. 117. – №. 1-4. – P. 43-76.
37. Chechin G., Ryabov D., Shcherbinin S. Nonlinear normal mode interactions in the SF 6 molecule studied with the aid of density functional theory //Physical Review E. – 2015. – V. 92. – №. 1. – P. 012907.
38. Bachurin D. V., Murzaev R. T., Abdullina D. U., Semenova M. N., Bebikhov Y. V., and Dmitriev S. V. Chaotic discrete breathers in bcc lattice: Effect of the first-and second-neighbor interactions //Physica D: Nonlinear Phenomena. – 2024. – V. 470. – P. 134344.
39. Kolesnikov I. D., Shcherbinin S. A., Bebikhov Y. V., Korznikova E. A., Shepelev I. A., Kudreyko A. A., and Dmitriev S. V. Chaotic discrete breathers in bcc lattice //Chaos, Solitons & Fractals. – 2024. – V. 178. – P. 114339.
40. Bebikhov Y. V., Naumov E. K., Semenova M. N., and Dmitriev S. V. Discrete breathers in a β -FPUT square lattice from in-band external driving //Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation. – 2024. – V. 132. – P. 107897.
41. Chechin G. M., Dzhelauhova G. S., Mehonoshina E. A. Quasibreathers as a generalization of the concept of discrete breathers //Physical Review E—Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics. – 2006. – V. 74. – №. 3. – P. 036608.
42. Bukhari M. A., Barry O. R., Vakakis A. F. Breather propagation and arrest in a strongly nonlinear locally resonant lattice //Mechanical Systems and Signal Processing. – 2023. – V. 183. – P. 109623.
43. Cuevas-Maraver J., S´anchez-Rey B., Eilbeck J. C., and Russell F. M. Interaction of moving discrete breathers with interstitial defects //Discrete and Continuous Dynamical Systems - Series S. – 2011. – V. 4. – №. 5. – P. 1057 – 1067.
44. Cuevas J., Katerji C., Archilla J. F. R., Eilbeck J. C., and Russell F. M. Influence of moving breathers on vacancies migration //Physics Letters A. – 2003. – V. 315. – №. 5. – P. 364-371.
45. Cuevas J., Archilla J. F. R., S´anchez-Rey B., and Romero F. R. Interaction of moving discrete breathers with vacancies //Physica D: Nonlinear Phenomena. – 2006. – V. 216. – №. 1. – P. 115-120.
46. Archilla J. F. R., Coelho S. M. M., Auret F. D., Dubinko V. I., and Hizhnyakov V. Long range annealing of defects in germanium by low energy plasma ions //Physica D: Nonlinear Phenomena. – 2015. – V. 297. – P. 56-61.
47. Russell F., Zolotaryuk Y., Eilbeck J., and Dauxois T. Moving breathers in a chain of magnetic pendulums //Physical Review B. – 1997. – V. 55. – №. 10. – P. 6304 – 6308.
48. Sato M., Sievers A. J. Visualizing intrinsic localized modes with a nonlinear micromechanical array //Low Temperature Physics. – 2008. – V. 34. – №. 7. – P. 543-548.
49. Sato M., Nakaguchi T., Ishikawa T., Shige S., Soga Y., Doi Y., and Sievers A. J. Supertransmission channel for an intrinsic localized mode in a one-dimensional nonlinear physical lattice //Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science. – 2015. – V. 25. – №. 10. – P. 103122
50. Zhang Y., McFarland D. M., Vakakis A. F. Propagating discrete breathers in forced one-dimensional granular networks: theory and experiment //Granular Matter. – 2017. – V. 19. – №. 3. – P. 1-2259.
51. Watanabe Y., Nishida T., Doi Y., and Sugimoto N. Experimental demonstration of excitation and propagation of intrinsic localized modes in a mass-spring chain //Physics Letters A. – 2018. – V. 382. – №. 30. – P. 1957-1961.

52. Archilla J. F. R., Doi Y., Kimura M. Pterobreathers in a model for a layered crystal with realistic potentials: Exact moving breathers in a moving frame //Physical Review E. – 2019. – V. 100. – №. 2. – P. 022206.
53. Doi Y., Yoshimura K. Translational asymmetry controlled lattice and numerical method for moving discrete breather in four particle system //Journal of the Physical Society of Japan. – 2009. – V. 78. – №. 3. – P. 034401.
54. Yoshimura K., Doi Y. Moving discrete breathers in nonlinear lattice: Resonance and stability //Wave Motion. – 2007. – V. 45. – №. 1-2. – P. 83-99.
55. Doi Y., Yoshimura K. Symmetric potential lattice and smooth propagation of tail-free discrete breathers //Physical Review Letters. – 2016. – V. 117. – №. 1. – P. 014101.
56. Bachurina O. V., Murzaev R. T., Shcherbinin S. A., Kudreyko A. A., Dmitriev S. V., and Bachurin D. V. Multi-component delocalized nonlinear vibrational modes in nickel //Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering. – 2023. – V. 31. – №. 7. – P. 075009.
57. Ryabov D. S., Chechin G. M., Upadhyaya A., Korznikova E. A., Dubinko V. I., and Dmitriev S. V. Delocalized nonlinear vibrational modes of triangular lattices //Nonlinear Dynamics. – 2020. – V. 102. – P. 2793-2810.
58. Page J. B. Asymptotic solutions for localized vibrational modes in strongly anharmonic periodic systems //Physical Review B. – 1990. – V. 41. – №. 11. – P. 7835.
59. Bingol S., Erdinc B., Akkus H. Electronic band structure, optical, dynamical and thermodynamic properties of cesium chloride (CsCl) from first-principles //International Journal for Simulation and Multidisciplinary Design Optimization. – 2015. – V. 6. – P. A7.
60. Gao H. X., Peng L. M. Debye–Waller factors of compounds with the caesium chloride structure //Foundations of Crystallography. – 2000. – V. 56. – №. 6. – P. 519-524.
61. Durukan İ. K., Çiftci Y. DFT analysis of mechanical and dynamic properties of CuBe //Gazi University Journal of Science. – 2022. – V. 35. – №. 4. – P. 1652-1663.

Information about the authors

D. U. Abdullina – Junior Researcher, Institute of Molecule and Crystal Physics, Ufa Federal Research Center, dina.abdullina25@gmail.com.

Yu. V. Bebikhov – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor, Head of the Department «Electric power engineering and automation of industrial production», Polytechnic Institute (branch) in Mirny, North-Eastern Federal University, bebikhov.yura@mail.ru.

M. N. Semenova, Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor, Department of Fundamental and Applied Mathematics, MPTI (branch), SVFU, mari-ya_semyonova86@mail.ru

E. K. Naumov, postgraduate student, Institute for Problems of Superplasticity of Metals, Russian Academy of Sciences, jjjjenia@mail.ru

S. V. Dmitriev – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Head of the Laboratory, Institute of Molecule and Crystal Physics, Ufa Federal Research Center, dmitriev.sergey.v@gmail.com.

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

Статья поступила в редакцию 23.04.2025; одобрена после рецензирования 22.04.2025; принята к публикации 05.05.2025.

The article was received by the editorial board on 23 Apr. 2024; approved after reviewing 22 Apr. 2025; accepted for publication 05 May 2025.