

Научная статья

1.3.8. Физика конденсированного состояния (физико-математические науки)

УДК 538.913

doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2026.03.007

ТОЧЕЧНЫЕ ДЕФЕКТЫ В КРИСТАЛЛАХ СИСТЕМЫ Pt–Al: ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ И ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ С УЕДИНЁННЫМИ ВОЛНАМИ НЕЛИНЕЙНОЙ СУПРАТРАНСМИССИИ

Андрей Сергеевич Кочкин¹, Михаил Дмитриевич Старостенков²,
Кирилл Алексеевич Теников³

¹ Алтайский государственный университет, пр. Ленина, 61, 656049, Барнаул, Россия

^{2,3} Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова, пр. Ленина, 46, 656038, Барнаул, Россия

¹ andre211@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0004-4009-2250>

² genphys@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-6326-7613>

³ gugolpleks@mail.ru

Аннотация. Реальные кристаллы всегда содержат точечные дефекты, однако их взаимодействие с уединёнными волнами нелинейной супратрансмиссии — рассеяние волн дефектами и способность волн инициировать миграцию дефектов — оставалось количественно не охарактеризованным. Методами атомистического моделирования исследованы энергетические характеристики точечных дефектов в ГЦК-металлах Pt и Al и их взаимодействие с уединёнными волнами, возбуждаемыми в интерметаллиде Pt₃Al в режиме нелинейной супратрансмиссии. В рамках единого межатомного потенциала, построенного методом погружённого атома, вычислены энергии образования вакансий и межузельных атомов в конфигурации гантели $\langle 100 \rangle$. Барьеры миграции вакансий определены методом подталкиваемой упругой ленты и сопоставлены со справочными данными. Взаимодействие уединённых волн с дефектами исследовано в серии из шестнадцати молекулярно-динамических расчётов: три типа точечных дефектов и бездефектный контрольный расчёт при четырёх амплитудах гармонического возбуждения, от пороговой до надпороговых. Установлено, что точечные дефекты практически прозрачны для уединённых волн: коэффициент прохождения отличается от бездефектного случая не более чем на один процент. При этом дефект захватывает часть переносимой волной энергии. Величина разового захвата зависит от типа дефекта: она максимальна для вакансии Pt и составляет единицы сотых электронвольта, что существенно ниже барьеров миграции. Сделан вывод о необходимости многократного или резонансного воздействия для инициирования перестройки дефектной подсистемы уединёнными волнами. Результаты применимы при анализе переноса энергии в упорядоченных сплавах при интенсивных внешних воздействиях.

Ключевые слова: молекулярная динамика, нелинейная супратрансмиссия, уединённая волна, точечный дефект, вакансия, межузельный атом, энергия образования, энергия миграции, метод подталкиваемой упругой ленты, интерметаллид Pt₃Al, метод погружённого атома, перенос энергии

Для цитирования: Кочкин А.С., Старостенков М.Д., Теников К.А. Точечные дефекты в кристаллах системы Pt–Al: энергетические характеристики и взаимодействие с уединёнными волнами нелинейной супратрансмиссии // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2026. Т. 23, № 3. С. 342-349. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2026.03.007.

Original article

POINT DEFECTS IN Pt–Al CRYSTALS: ENERGY CHARACTERISTICS AND INTERACTION WITH SOLITARY WAVES OF NONLINEAR SUPRATRANSMISSION

Andrey S. Kochkin¹, Mikhail D. Starostenkov², Kirill A. Tenikov³

¹ Altai State University, Lenin Pr., 61, Barnaul, 656049, Russia

^{2,3} Polzunov Altai State Technical University, Lenin Pr., 46, Barnaul, 656038, Russia

¹ andre211@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0004-4009-2250>

² genphys@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-6326-7613>

³ gugolpleks@mail.ru

Abstract. Real crystals always contain point defects, yet their interaction with solitary waves of nonlinear supratransmission — wave scattering by defects and possible wave-induced migration — has remained quantitatively uncharacterized. Energy characteristics of point defects in fcc Pt and Al and their interaction with solitary waves excited in the Pt₃Al intermetallic are studied by atomistic simulation. Within a single embedded-atom potential, the formation energies of vacancies and $\langle 100 \rangle$ dumbbell interstitials are calculated. Vacancy migration barriers are obtained by the nudged elastic band method and compared with reference data. The wave–defect interaction is examined in sixteen molecular dynamics runs: three defect types and a defect-free control at four driving amplitudes, from threshold to above-threshold. Point defects are found to be almost transparent to solitary waves: the transmission coefficient deviates from the defect-free value by no more than one percent. Nevertheless, a defect captures part of the transported energy. The single-pass capture is maximal for the Pt vacancy and amounts to a few hundredths of an electronvolt, well below the migration barriers. Multiple or resonant wave action is therefore required to initiate rearrangement of the defect subsystem. The results apply to the analysis of energy transport in ordered alloys under intense external excitations.

Keywords: molecular dynamics, nonlinear supratransmission, solitary wave, point defect, vacancy, interstitial atom, formation energy, migration energy, nudged elastic band method, Pt₃Al intermetallic, embedded atom method, energy transfer.

For citation: Kochkin A. S., Starostenkov M.D. & Tenikov K.A. (2026). Point defects in Pt–Al crystals: energy characteristics and interaction with solitary waves of nonlinear supratransmission. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 23(3), 342-349 (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2026.03.007.

Введение

Нелинейная супратрансмиссия (НСТ) — пороговое проникновение энергии в дискретную решётку при гармоническом возбуждении её границы на частоте из запрещённой зоны спектра — с момента открытия на модельных цепочках [1, 2] превратилась в универсальный механизм, наблюдаемый в системах самой разной природы: от оптических волноводов и джозефсоновских контактов до механических метаматериалов [3]. Для кристаллических твёрдых тел возможность НСТ определяется строением фононного спектра: широкая запрещённая зона между акустическими и оптическими ветвями возникает в упорядоченных соединениях с большим контрастом масс компонентов. Механизм НСТ не связан с распространением линейных волн запрещённой частоты: при пре-

вышении амплитудного порога нелинейный эванесцентный профиль у границы теряет устойчивость, и в объём излучаются локализованные нелинейные возбуждения — щелевые солитоны и бризеры, частоты которых лежат в зоне за счёт ангармонической перенормировки локального спектра [1, 2].

Интерметаллид Pt₃Al со сверхструктурой L1₂ (отношение масс подрешёток около 7,2) стал базовым объектом атомистических исследований этого круга явлений: для него продемонстрированы локализация энергии на подрешётке алюминия [4], возбуждение дискретных бризеров и уединённых волн при воздействии в запрещённой зоне [5, 6], установлена частотная зависимость амплитудного порога НСТ [7] и обнаружено нарушение равнораспределения кинетической энергии между подрешётками [8].

Реальные кристаллы содержат точечные дефекты, и вопрос о том, как дефектная подсистема сосуществует с нелинейным переносом энергии, имеет две стороны. Первая — влияние дефектов на носители энергии: рассеивают ли вакансии и межузельные атомы уединённые волны. Вторая — обратное влияние волн на дефекты: способен ли локализованный энергетический фронт стимулировать миграцию дефекта, для которой требуется преодоление активационного барьера [9, 10]. Для дискретных брызгов взаимодействие с точечными дефектами исследовалось в Pt_3Al [5], в одномерных моделях [11] и в ОЦК-железе [12].

На представлении о локальных концентраторах энергии построена ангармоническая теория скоростей термоактивируемых реакций [13]. Для уединённых волн НСТ в трёхмерных интерметаллидах систематические данные такого рода отсутствуют.

Количественное рассмотрение обеих сторон вопроса требует, чтобы характеристики дефектов и характеристики волн были получены в рамках одного и того же межатомного потенциала. Целью настоящей работы является согласованный расчёт энергий образования и миграции точечных дефектов в ГЦК-металлах Pt и Al и прямое молекулярно-динамическое исследование взаимодействия уединённых волн НСТ с вакансиями и межузельными атомами в кристалле Pt_3Al .

Методы исследования

Все расчёты выполнены методом классической молекулярной динамики в пакете LAMMPS [14]. Межатомное взаимодействие описывалось многочастичным потенциалом метода погружённого атома (EAM) в параметризации Чжоу с соавторами [15], воспроизводящей упругие и энергетические свойства систем Pt–Al. Шаг интегрирования уравнений движения составлял 1 фс.

Энергии образования дефектов вычислялись методом молекулярной статистики. В кубической расчётной ячейке из 4000 узлов с периодическими граничными условиями создавался одиночный дефект: вакансия удалением атома либо собственный межузельный атом в энергетически выгодной конфигурации гантели $\langle 100 \rangle$. Структура релаксировалась до сходимости сил, и энергия образования определялась

по разности полных энергий дефектной и идеальной ячеек с учётом изменения числа атомов.

Барьеры миграции вакансий рассчитывались методом подталкиваемой упругой ленты с восхождением к седловой точке (climbing image NEB) [16] по цепочке промежуточных конфигураций между соседними положениями вакансии.

Взаимодействие уединённых волн с дефектами исследовалось в расчётной ячейке Pt_3Al размером $12 \times 12 \times 500$ элементарных ячеек (288 000 атомов, параметр решётки 3,92 Å), периодической в плоскости XY и ограниченной по оси Z свободной и закреплённой поверхностями — постановка, идентичная использованной при исследовании порога НСТ [7]. Точечный дефект вносился на оси ячейки в 480 Å от слоя-источника (координата $z = 1470$ Å), после чего структура релаксировалась минимизацией энергии. Уединённые волны возбуждались гармоническим смещением атомов приповерхностного слоя с периодом $\tau = 0,146$ пс (частота внутри запрещённой зоны) в течение 5 пс. Далее система эволюционировала в микроканоническом ансамбле до 35 пс при начальной температуре, близкой к 0 К.

В отсутствие тепловых флуктуаций каждый расчёт детерминирован, а полная энергия в ансамбле NVE сохранялась с относительной точностью $\sim 10^{-7}$. Серия включала шестнадцать расчётов: три конфигурации дефекта — вакансия Pt, вакансия Al, межузельный атом Al — и бездефектный контрольный расчёт, каждая при четырёх амплитудах $A = 0,15, 0,18, 0,21$ и $0,24$ Å, от пороговой для данной частоты до надпороговых. Продольный размер ячейки выбран так, что за время регистрации (35 пс) фронт не достигает закреплённой границы, и отражённые от неё волны не искажают сигналы в контрольных слоях.

Регистрировались средняя кинетическая энергия атомов в слоях толщиной 100 Å до дефекта ($z = 1520$ – 1620 Å) и после него ($z = 1320$ – 1420 Å), а также кинетическая и потенциальная энергия сферической области радиусом 8 Å вокруг дефекта. Радиус 8 Å — около двух параметров решётки (~ 150 атомов) — охватывает зону локализации статических искажений, создаваемых точечным дефектом, и при этом мал по сравнению с расстоянием до контрольных слоёв (50 Å), что исключает перекрытие областей регистрации.

Коэффициент прохождения определялся как отношение пиковой энергии в слое за дефектом к пиковой энергии в слое перед ним (обозначено Т) и нормировался на значение T_0 бездефектного расчёта при той же амплитуде.

Мерой разового захвата энергии дефектом служило установившееся приращение потенциальной энергии дефектной сферы после прохождения волны за вычетом такого же приращения в бездефектном расчёте, ΔE_{sph} .

Результаты и их обсуждение

Рассчитанные энергетические характеристики точечных дефектов приведены в таблице 1 в сопоставлении со справочными данными [9, 10]. Энергии образования вакансий и межузельных гантелей в Pt и Al согласуются с литературными значениями на уровне, типичном для потенциалов ЕАМ. Барьеры миграции вакансий систематически занижены относительно экспериментальных оценок — известная особенность данного класса потенциалов, не влияющая на качественные выводы работы. Существенно, что все величины получены в том же силовом поле, в котором ниже моделируется динамика волн: это делает корректным прямое сопоставление энергии, доставляемой волной к дефекту, с барьерами миграции. Величины, полученные для чистых металлов, используются далее как опорные оценки для соответствующих подрешёток Pt_3Al .

Таблица 1. Энергии образования и миграции точечных дефектов в ГЦК-металлах Pt и Al (потенциал ЕАМ [15], литературные данные по [9, 10])

Table 1. Formation and migration energies of point defects in fcc Pt and Al (EAM potential [15], reference data from [9, 10])

Металл	Дефект	E_f , эВ (расч./лит.)	E_m , эВ (расч./лит.)
Pt	вакансия	1,54 / $\approx 1,35$	0,73 / $\approx 1,4$
Pt	межузельный < 100>	3,91 / $\approx 3,5$ – 4,0	— / $\approx 0,1$ –0,2
Al	вакансия	0,66 / $\approx 0,67$	0,30 / $\approx 0,6$
Al	межузельный < 100>	1,85 / $\approx 2,5$ – 3,0	— / $\approx 0,1$

Динамика взаимодействия волны с дефектом иллюстрируется рисунком 1: временные профили кинетической энергии в контрольных слоях до и после дефекта для вакансии Pt при $A = 0,21 \text{ \AA}$ практически совпадают с профилями бездефектного кристалла.

Фронт уединённых волн достигает первого слоя примерно за 8 пс, дефектной области — за 11–12 пс и слоя за дефектом — за 12–13 пс, что соответствует сверхзвуковой скорости распространения около $48 \text{ \AA/пс}$, характерной для уединённых волн НСТ в Pt_3Al [6, 7]. Профили для вакансии Al и межузельного атома Al ведут себя аналогично.

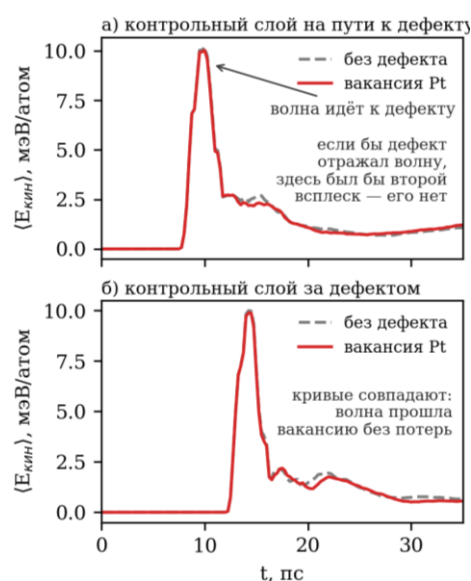


Рис. 1. Кинетическая энергия атомов в контрольных слоях (областях наблюдения толщиной $100 \text{ \AA}$): а — слой на пути волны к дефекту, б — слой за дефектом. Кривые — вакансия Pt и бездефектный кристалл, $A = 0,21 \text{ \AA}$. Всплеск — момент прохождения группы уединённых волн через слой. Отражённая от дефекта волна вернулась бы через слой (а) и дала бы второй всплеск — его отсутствие означает, что дефект не отражает волну. Совпадение кривых на панели (б) означает, что волна проходит вакансию без потерь энергии

Fig. 1. Kinetic energy of atoms in the monitor layers ($100 \text{ \AA}$ thick observation regions): (a) the layer on the wave path towards the defect, (b) the layer beyond the defect. The curves show the Pt vacancy and the defect-free crystal, $A = 0.21 \text{ \AA}$. The burst marks the passage of the solitary-wave train through the layer. A wave reflected by the defect would pass back through layer (a) and produce a second burst — its absence shows that the defect does not reflect the wave. The coincidence of the curves in panel (b) shows that the wave passes the vacancy without energy loss

Количественные данные по всей серии сведены в таблицу 2 и представлены на рисунке 2. Абсолютный коэффициент прохождения растёт с амплитудой от 0,94 до 0,99, однако нормированный на бездефектный случай T/T_0 при всех амплитудах и для всех типов дефектов лежит в диапазоне 0,993–1,005, то есть отличается от единицы не более чем на 1 %.

Отклонения в обе стороны от единицы, включая формально превышающие её значения, лежат в пределах погрешности определения пиковой энергии в контрольном слое и не свидетельствуют об усилении волны дефектом. Одиночный точечный дефект любого из рассмотренных типов практически прозрачен для уединённой волны: рассеяние на локальном нарушении решётки атомного масштаба пренебрежимо мало по сравнению с переносимой волной энергией. Это согласуется с солитоноподобным характером уединённых волн НСТ, устойчивость формы которых при прохождении протяжённых препятствий отмечалась ранее [17].

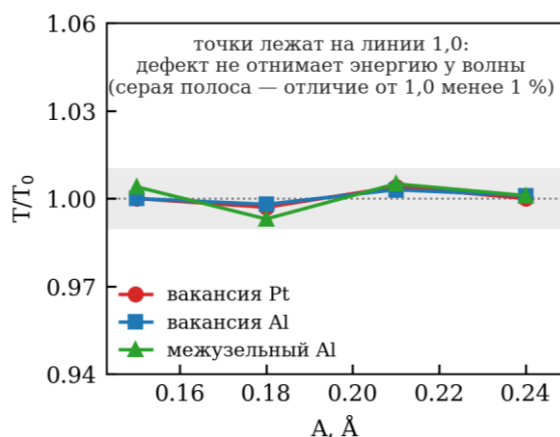


Рис. 2. Нормированный коэффициент прохождения T/T_0 уединённых волн через точечные дефекты: отношение энергии, прошедшей за дефект, к энергии, проходящей в кристалле без дефекта. Точка на линии 1,0 означает, что энергия, прошедшая за дефект, равна энергии в бездефектном кристалле. Серая полоса — коридор отклонений менее 1 %. Все точки лежат в коридоре — дефекты для волны практически прозрачны

Fig. 2. Normalized transmission coefficient T/T_0 of solitary waves through point defects: the ratio of the energy passed beyond the defect to the energy passing in the defect-free crystal. A point on the 1.0 line means that the transmitted energy equals that in the defect-free crystal. The grey band is the corridor of deviations below 1 %. All points lie within the corridor — the defects are almost transparent to the wave

Таблица 2. Нормированный коэффициент прохождения T/T_0 и разовый захват энергии ΔE_{sph} дефектной областью

Table 2. Normalized transmission coefficient T/T_0 and single-pass energy capture ΔE_{sph} by the defect region

A, Å	T/T_0 вак. Pt	T/T_0 вак. Al	T/T_0 меж. Al	ΔE_{sph} вак. Pt, эВ	ΔE_{sph} вак. Al, эВ	ΔE_{sph} меж. Al, эВ
0,15	1,000	1,000	1,004	0,001	0,001	0,002
0,18	0,997	0,998	0,993	0,058	0,018	0,034
0,21	1,004	1,003	1,005	0,043	0,019	0,024
0,24	1,000	1,001	1,001	0,041	0,021	0,029

Прозрачность, однако, не означает отсутствия взаимодействия. На рисунке 3 показан разовый захват энергии ΔE_{sph} дефектной областью за один проход волны. Величина захвата зависит от типа дефекта: она максимальна для вакансии Pt (0,04–0,06 эВ), промежуточна для межузельного атома Al (0,02–0,03 эВ) и минимальна для вакансии Al (около 0,02 эВ). Эта последовательность воспроизводит относительную силу возмущения, вносимого дефектом в решётку: удаление тяжёлого атома платины искажает локальное силовое поле сильнее, чем удаление лёгкого алюминия. Величина захвата слабо зависит от амплитуды волны: для вакансии Pt и межузельного атома Al она достигает максимума уже при $A = 0,18$ Å, вблизи порога НСТ, а для вакансии Al медленно растёт во всём исследованном диапазоне амплитуд.

Сопоставление захвата с барьерами миграции (уровни на рисунке 3) даёт энергетический критерий стимулированной перестройки дефектной подсистемы. Мгновенная кинетическая энергия дефектной сферы в момент прохождения фронта достигает 3–4 эВ, что формально в несколько раз (для вакансии Al — на порядок) превышает барьеры E_m . Однако это возбуждение распределено по ~150 атомам сферы и существует в течение долей пикосекунды — времени, недостаточного для термоактивируемого перескока. Остаточный же захват на порядок меньше E_m даже для вакансии Pt, где он максимален. Барьеры миграции межузельных гантелей в работе не рассчитывались: их литературные значения малы ($\approx 0,1$ – $0,2$ эВ [9, 10]), однако и для них разовый захват (0,02–0,03 эВ) остаётся в несколько раз ниже барьера, так что сделанный вывод сохраняется.

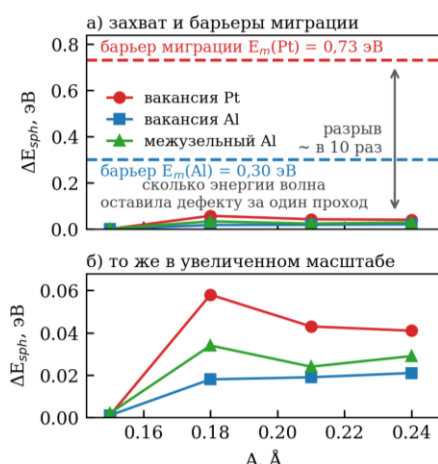


Рис. 3. Разовый захват энергии ΔE_{sph} (приращение энергии сферы радиусом $8 \text{ \AA}$ вокруг дефекта) за один проход группы волн: а — в сравнении с барьерами миграции вакансий (штриховые линии), б — в увеличенном масштабе. Захваченная энергия во всех режимах примерно в десять раз ниже барьеров — одиночный проход волны не способен сдвинуть дефект

Fig. 3. Single-pass energy capture ΔE_{sph} (the energy increment of an $8 \text{ \AA}$ -radius sphere around the defect): (a) compared with the vacancy migration barriers (dashed lines), (b) on an enlarged scale. In all regimes the captured energy is about ten times lower than the barriers — a single wave passage cannot displace the defect

Отсюда следует, что в дальней зоне источника — на удалении порядка $500 \text{ \AA}$, где группа уединённых волн уже сформирована и пространственно разрежена, — одиночное прохождение группы волн при исследованных амплитудах не инициирует миграцию точечного дефекта. Для перестройки дефектной подсистемы требуется многократное прохождение волн, накопление энергии на дефекте либо резонансное соотношение частоты возбуждения с локальными модами дефекта. В ближней зоне источника, где плотность потока энергии существенно выше, воздействие на дефект может оказываться значительно более сильным. Этот режим составляет предмет отдельного исследования. Полученный вывод согласуется с теорией скоростей реакций в ангармонических кристаллах [13]: заметное ускорение диффузионных процессов предсказывается лишь при стационарном потоке локализованных возбуждений.

Выводы

Проведено согласованное — в рамках единого потенциала ЕАМ — исследование энергетических характеристик точечных дефектов в ГЦК-металлах Pt и Al и их взаимодействия с уединёнными волнами нелинейной супратрансмиссии в интерметаллиде Pt_3Al . Основные результаты состоят в следующем.

1. Энергии образования вакансий ($0,66 \text{ эВ}$ для Al, $1,54 \text{ эВ}$ для Pt) и межузельных гантелей $\langle 100 \rangle$ ($1,85 \text{ эВ}$ для Al, $3,91 \text{ эВ}$ для Pt), рассчитанные методом молекулярной статистики, согласуются со справочными данными. Барьеры миграции вакансий ($0,30$ и $0,73 \text{ эВ}$ соответственно), полученные методом подталкиваемой упругой ленты, воспроизводятся с занижением, характерным для потенциалов ЕАМ, что не затрагивает выводов об энергетическом критерии.

2. Точечные дефекты практически прозрачны для уединённых волн НСТ: нормированный коэффициент прохождения отличается от бездефектного значения не более чем на 1% во всём исследованном диапазоне амплитуд.

3. Разовый захват энергии определяется типом дефекта: вакансия Pt ($0,04$ – $0,06 \text{ эВ}$) > межузельный Al ($0,02$ – $0,03 \text{ эВ}$) > вакансия Al ($\sim 0,02 \text{ эВ}$) — и слабо зависит от амплитуды волны.

4. Захваченная за один проход энергия на порядок ниже барьеров миграции вакансий и в несколько раз ниже барьеров миграции межузельных атомов: в дальней зоне источника одиночная группа уединённых волн не инициирует перескок дефекта. Стимулированная перестройка дефектной подсистемы требует многопроходного или резонансного воздействия либо перехода в ближнюю зону с высокой плотностью потока энергии.

Список литературы

1. Geniet F., Leon J. Energy transmission in the forbidden band gap of a nonlinear chain // Physical Review Letters. — 2002. — V. 89, № 13. — P. 134102.
2. Geniet F., Leon J. Nonlinear supratransmission // Journal of Physics: Condensed Matter. — 2003. — V. 15, № 17. — P. 2933–2949.
3. Захаров П.В. Эффект нелинейной супратрансмиссии в дискретных структурах: обзор // Компьютерные исследования и моделирование. — 2023. — Т. 15, № 3. — С. 599–617.

4. 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.
5. Захаров П.В., Старостенков М.Д., Дмитриев С.В., Ерёмин А.М., Корзникова Е.А. Модификация свойств дискретных бризеров в Pt₃Al точечными дефектами // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. – 2015. – Т. 12, № 2. – С. 217–222.
6. Zakharov P.V., Korznikova E.A., Izosimov A.A., Kochkin A.S. The influence of crystal anisotropy on the characteristics of solitary waves in the nonlinear supratransmission effect: molecular dynamic modeling // *Computation*. – 2023. – V. 11, № 10. – P. 193.
7. Кочкин А.С., Старостенков М.Д., Теников К.А. Частотная зависимость порога нелинейной супратрансмиссии при гармоническом возбуждении в интерметаллиде Pt₃Al // *Письма в журнал технической физики*. – 2026. – Т. 52, вып. 16. – С. 40–44.
8. Кочкин А.С., Демьянов Б.Ф., Теников К.А. Нарушение экvipартиции кинетической энергии при нелинейной супратрансмиссии в интерметаллиде Pt₃Al // *Известия Алтайского государственного университета*. – 2026. – № 4 (150). – С. 28–34.
9. Дамаск А., Динс Дж. Точечные дефекты в металлах. – М.: Мир, 1966. – 291 с.
10. Орлов А.Н., Трушин Ю.В. Энергии точечных дефектов в металлах. – М.: Энергоатомиздат, 1983. – 80 с.
11. Cuevas J., Archilla J.F.R., Sánchez-Rey B., Romero F.R. Interaction of moving discrete breathers with vacancies // *Physica D: Nonlinear Phenomena*. – 2006. – V. 216, № 1. – P. 115–120.
12. Terentyev D., 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 and Simulation in Materials Science and Engineering*. – 2015. – V. 23, № 8. – P. 085007.
13. Dubinko V.I., Selyshchev P.A., Archilla J.F.R. Reaction-rate theory with account of the crystal anharmonicity // *Physical Review E*. – 2011. – V. 83, № 4. – P. 041124.
14. Thompson A.P., Aktulga H.M., Berger R. et al. LAMMPS – a flexible simulation tool for particle-based materials modeling at the atomic, meso, and continuum scales // *Computer Physics Communications*. – 2022. – V. 271. – P. 108171.
15. Zhou X.W., Johnson R.A., Wadley H.N.G. Misfit-energy-increasing dislocations in vapor-deposited CoFe/NiFe multilayers // *Physical Review B*. – 2004. – V. 69, № 14. – P. 144113.
16. Henkelman G., Uberuaga B.P., Jónsson H. A climbing image nudged elastic band method for finding saddle points and minimum energy paths // *The Journal of Chemical Physics*. – 2000. – V. 113, № 22. – P. 9901–9904.
17. Zakharov P.V., Starostenkov M.D., Lucenko I.S., Kochkin A.S. Interaction of a soliton wave with nanopores in stoichiometry crystals A₃B // *Journal of Physics: Conference Series*. – 2020. – V. 1697. – P. 012076.

Информация об авторах

А. С. Кочкин – преподаватель Алтайского государственного университета, аспирант Алтайского государственного технического университета им. И.И. Ползунова.

М. Д. Старостенков – заслуженный деятель науки РФ, доктор физико-математических наук, профессор, главный научный сотрудник Алтайского государственного технического университета им. И.И. Ползунова.

К. А. Теников – аспирант Алтайского государственного технического университета им. И.И. Ползунова.

References

1. Geniet, F., & Leon, J. (2002). Energy transmission in the forbidden band gap of a nonlinear chain. *Physical Review Letters*, 89(13), 134102.
2. Geniet, F., & Leon, J. (2003). Nonlinear supratransmission. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 15(17), 2933–2949.
3. Zakharov, P. V. (2023). The effect of nonlinear supratransmission in discrete structures: a review. *Computer Research and Modeling*, 15(3), 599–617. (In Russian).
4. Medvedev, N. N., Starostenkov, M. D., & Manley, M. E. (2013). Energy localization on the Al sublattice of Pt₃Al with L1₂ order. *Journal of Applied Physics*, 114(21), 213506.
5. Zakharov, P. V., Starostenkov, M. D., Dmitriev, S. V., Eremin, A. M., & Korznikova, E. A. (2015). Modification of properties of discrete breathers in Pt₃Al by point defects. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedenia*

(*Basic Problems of Material Science (BPMS)*), 12(2), 217–222. (In Russian).

6. Zakharov, P. V., Korznikova, E. A., Izosimov, A. A., & Kochkin, A. S. (2023). The influence of crystal anisotropy on the characteristics of solitary waves in the nonlinear supratransmission effect: molecular dynamic modeling. *Computation*, 11(10), 193.

7. Kochkin, A. S., Starostenkov, M. D., & Tenikov, K. A. (2026). Frequency dependence of the nonlinear supratransmission threshold under harmonic excitation in the Pt₃Al intermetallic. *Technical Physics Letters*, 52(16), 40–44. (In Russian).

8. Kochkin, A. S., Demyanov, B. F., & Tenikov, K. A. (2026). Violation of kinetic energy equipartition under nonlinear supratransmission in the Pt₃Al intermetallic. *Izvestiya of Altai State University*, 4(150), 28–34. (In Russian).

9. Damask, A. C., & Dienes, G. J. (1966). *Tochechnye defekty v metallakh* [Point defects in metals]. Moscow: Mir. 291 p. (In Russian).

10. Orlov, A. N., & Trushin, Yu. V. (1983). *Energii tochechnykh defektov v metallakh* [Energies of point defects in metals]. Moscow: Energoatomizdat. 80 p. (In Russian).

11. Cuevas, J., Archilla, J. F. R., Sánchez-Rey, B., & Romero, F. R. (2006). Interaction of moving discrete breathers with vacancies. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 216(1), 115–120.

12. Terentyev, D., 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 and Simulation in Materials Science and Engineering*, 23(8), 085007.

13. Dubinko, V. I., Selyshchev, P. A., & Archilla, J. F. R. (2011). Reaction-rate theory with account of the crystal anharmonicity. *Physical Review E*, 83(4), 041124.

14. Thompson, A. P., Aktulga, H. M., Berger, R. et al. (2022). LAMMPS – a flexible simulation tool for particle-based materials modeling at the atomic, meso, and continuum scales. *Computer Physics Communications*, 271, 108171.

15. Zhou, X. W., Johnson, R. A., & Wadley, H. N. G. (2004). Misfit-energy-increasing dislocations in vapor-deposited CoFe/NiFe multilayers. *Physical Review B*, 69(14), 144113.

16. Henkelman, G., Uberuaga, B. P., & Jónsson, H. (2000). A climbing image nudged elastic band method for finding saddle points and minimum energy paths. *The Journal of Chemical Physics*, 113(22), 9901–9904.

17. Zakharov, P. V., Starostenkov, M. D., Lucenko, I. S., & Kochkin, A. S. (2020). Interaction of a soliton wave with nanopores in stoichiometry crystals A₃B. *Journal of Physics: Conference Series*, 1697, 012076.

Information about the authors

A. S. Kochkin – lecturer at Altai State University and postgraduate student at Polzunov Altai State Technical University.

M. D. Starostenkov – Honored Scientist of the Russian Federation, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Chief Researcher, Polzunov Altai State Technical University.

K. A. Tenikov – postgraduate student, Polzunov Altai State Technical University.

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

Статья поступила в редакцию 07.07.2026; одобрена после рецензирования 07.09.2026; принята к публикации 14.09.2026.

The article was received by the editorial board on 07 Jul. 2026; approved after reviewing 07 Sep. 2026; accepted for publication 14 Sep. 2026.