

Научная статья

1.3.8. Физика конденсированного состояния (физико-математические науки)

УДК 537.86, 530.182

doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2023.03.007

**ДИСКРЕТНЫЙ БРИЗЕР В МОДЕЛЬНОЙ 3D ОЦК РЕШЁТКЕ Cr₂Al
СО СВЕРХСТРУКТУРОЙ C11_b, ОСНОВАННЫЙ НА ДЕЛОКАЛИЗОВАННЫХ МОДАХ****Николай Николаевич Медведев^{1†}, Михаил Дмитриевич Старостенков²,
Павел Васильевич Захаров³, Юрий Владимирович Бебихов⁴**¹ Бийский технологический институт филиал Алтайского государственного технического университета им. И.И. Ползунова, ул. Трофимова, 27, 659305, Бийск, Россия² Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова, пр. Ленина, 46, 656038, Барнаул, Россия³ Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, ул. Политехническая, 29, 195251, Санкт-Петербург, Россия⁴ Северо-Восточный федеральный университет, Политехнический институт (филиал) в Мирном, ул. Тихонова, 5/1, 678170, Мирный, Саха (Якутия), Россия[†] nnm42@rambler.ru² genphys@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-6326-7613>³ zakharovpv1@rambler.ru, <https://orcid.org/0000-0002-6410-1594>⁴ bebikhov.yura@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-8366-4819>

Аннотация. Нелинейные локализованные колебательные моды большой амплитуды с частотой колебаний за пределами фононного спектра называют дискретными бризерами (ДБ). Различают щелевые и т.н. ДБ с жёстким типом возбуждения. Первые возбуждаются в двухатомных кристаллах, например, в упорядоченных сплавах, атомы компонент которых значительно различаются по массе. Такие кристаллы имеют щель в плотности фононных состояний, внутри которой может находиться частота щелевого ДБ. Бризеры второго типа, как правило, имеют место в моноатомных кристаллах. Известно также, что они были получены и в некоторых двухатомных кристаллах. В данной работе изучается возможность возбуждения ДБ в кристалле Cr₂Al. Хром-алюминиевые сплавы имеют большое практическое применение в электронагревательных устройствах большой мощности и промышленных электрических печах. Условия работы этих устройств создают предпосылки для возбуждения ДБ в кристаллической решётке сплавов, из которых изготавливают нагревательные элементы. Интерес к изучению возможности существования ДБ в указанном сплаве, связан с тем, что бризеры оказывают влияние на физические свойства материалов, могут снижать теплопроводность за счёт рассеяния фононов, а также способствуют возникновению и миграции дефектов. В работе была построена 3D модель ОЦК кристаллической решетки Cr₂Al со сверхструктурой C11_b. Рассчитаны коэффициенты потенциала Морзе, посредством которого осуществлялось взаимодействие между атомами. Рассмотрена возможность возбуждения ДБ в указанном модельном кристалле. Для поиска ДБ использовали методики, разработанные в работах Чечина Г.М., Сахненко В.П. с соавторами, а также Дмитриева С.В. с коллегами. Рассматривается также причина неустойчивости ДБ жёсткого типа возбуждения и их быстрого затухания, а также один из механизмов рассеяния энергии.

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

Для цитирования: Медведев Н.Н., Старостенков М.Д., Захаров П.В., Бебихов Ю.В. Дискретный бризер в модельной 3D ОЦК-решётке Cr₂Al со сверхструктурой C11_b, основанный на делокализованных модах // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2023. Т. 20, № 3. С. 344–351. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2023.03.007.

Original article

DISCRETE BREATHERS IN 3D MODEL BCC LATTICE OF Cr_2Al WITH C11_b SUPERSTRUCTURE BASED ON DELOCALIZED MODES

Nikolay N. Medvedev^{1†}, Mikhail D. Starostenkov², Pavel V. Zakharov³, Yurii V. Bebikhov⁴

¹ Biysk Technological Institute (branch) of the Altay State Technical University, Trofimov Str., 27, Biysk, 659305, Russia

² I.I. Polzunov Altai State Technical University, Lenin Pr., 46, Barnaul, 656038, Russia

³ Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, Politekhnikeskaya Str., 29, St. Petersburg, 195251, Russia

⁴ Polytechnic Institute (Branch) in Mirny, North-Eastern Federal University, Tikhonova Str., 5/1, Mirny, Sakha Republic (Yakutia), 678170, Russia

[†] nnm42@rambler.ru

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

³ zakharovpv1@rambler.ru, <https://orcid.org/0000-0002-6410-1594>

⁴ bebikhov.yura@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-8366-4819>

Abstract. Nonlinear localized vibrational modes of large amplitude with a frequency of oscillation outside the phonon spectrum are called discrete breathers (DBs). A distinction is made between slot and so-called rigid-type EBs. The former are excited in two-atom crystals, for example, in ordered alloys where atoms of the components differ significantly in mass. Such crystals have a gap in the density of phonon states, within which the frequency of the gap DB can reside. Breathers of the second type usually occur in monatomic crystals. It is also known that they have been obtained in some two-atom crystals as well. In this work, the possibility of excitation of DB in Cr_2Al crystal is studied. Chromium-alumina alloys have great practical application in high power electric heating devices and industrial electric furnaces. The operating conditions of these devices create preconditions for excitation of DB in a crystal lattice of alloys from which heating elements are made. The interest in studying the possibility of the existence of DB in the said alloy is related to the fact that breathers affect the physical properties of materials, can reduce thermal conductivity due to phonon scattering, as well as contribute to the emergence and migration of defects. In this work 3D model of the BCC crystal lattice of Cr_2Al with C11_b superstructure was constructed. Coefficients of the Morse potential by which interaction between atoms was carried out were calculated. The possibility of excitation of DB in the specified model crystal was considered. The methodology developed by G.M. Chechin and V.P. Sakhnenko et al. The cause of the instability of the hard type of excitation and its rapid attenuation, as well as one of the mechanisms of energy dissipation, are also considered.

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

For citation: Medvedev, N. N., Starostenkov, M. D., Zakharov, P. V. & Bebikhov, Yu. V. (2023). Discrete breathers in 3D model bcc lattice of Cr_2Al with C11_b superstructure based on delocalized modes. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 20(3), 344–351. (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2023.03.007.

Введение

Хром-алюминиевые сплавы в основном используют в электротермии для электронагревательных устройств большой мощности и промышленных электрических печах. Условия работы этих устройств способствуют возникновению нелинейных эффектов в кристаллической решётке сплавов, из которых изготавливают нагревательные элементы. В частности, в них возможно возбуждение нелинейных локализованных мод большой амплитуды, частота колебаний которых находится за пределами фононного спектра, или т.н. дискретных бризеров (ДБ) [1]. В настоящей работе рассмотрена возможность возбуждения ДБ в компьютерной

3D модели кристаллической решетки Cr_2Al со сверхструктурой C11_b . Известно, что ДБ оказывают влияние на физические свойства материалов [2], теоретически, могут снижать теплопроводность за счёт рассеяния фононов [3, 4], также ДБ способствуют миграции уже имеющихся и образованию новых дефектов кристаллической решётки [5-7]. Следовательно, исследования, связанные с ДБ являются актуальными и практически значимыми. В реальных кристаллах нелинейные локализованные колебательные моды не обладают монохроматичностью, т.е. в спектре колебаний нелинейной локализованной моды имеются низкочастотные составляющие, благодаря чему происходит обмен энергией с кристаллической решёткой, они

достаточно быстро затухают и поэтому корректнее их называть «квазибризерами» [8].

Различают два типа ДБ (квазибризеров) – с мягким типом возбуждения [9] и с жёстким типом возбуждения [1]. Если с естественными причинами возбуждения ДБ с мягким типом нелинейности имеется некоторая определённая [10], то нахождение механизмов возбуждения ДБ жёсткого типа задача нетривиальная. На сегодняшний момент достоверно они возбуждаются исключительно в модельных кристаллических решётках различной размерности. Все они получаются путём наложения функции

локализации на делокализованные нелинейные колебательные моды (ДНКМ) [11-15], чьи частоты выше частот фононного спектра кристалла. Таким образом, прежде чем получить все возможные ДБ жёсткого типа, необходимо найти все возможные ДНКМ в кристалле, частота которых выше фононного спектра и наложить на них локализирующую функцию [14-18].

Рассматриваемый кристалл Cr_2Al имеет ОЦК решётку и представляет собой совокупность «слоёв» двумерных квадратных решёток атомов алюминия и хрома (рис.1).

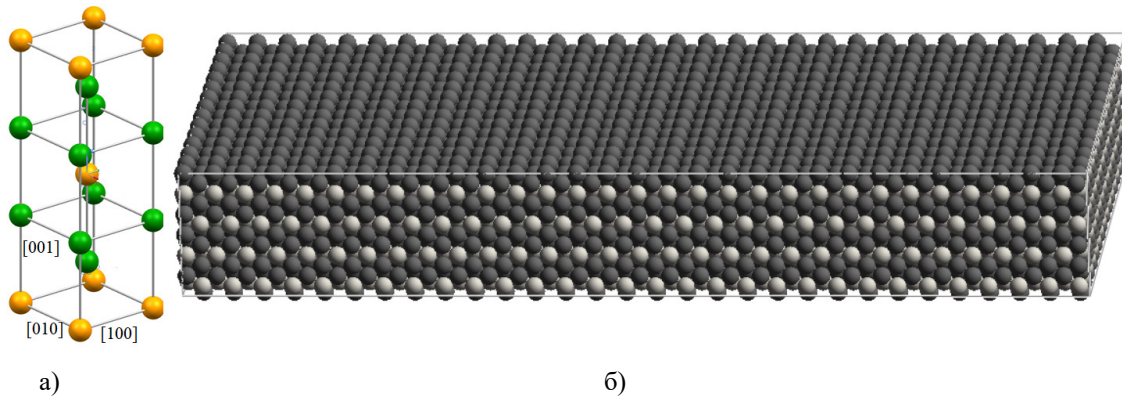


Рис.1. а) Сверхструктура $C11_b$ кристаллической решетки Cr_2Al ; б) Модельный расчётный блок

Fig.1. a) $C11_b$ superstructure of the Cr_2Al crystal lattice; б) Model calculation block

Эта структура интересна тем, что с точки зрения поставленной задачи мы имеем по существу квадратную кристаллическую решётку металла с лёгкими атомами встроенную в решётку металла с массивными атомами. Причём несмотря на то, что данная структура представляет собой двухкомпонентный упорядоченный сплав, бризеры мягкого типа в нём не возбуждаются из-за недостаточно большого соотношения масс атомов компонент сплава [19], поэтому основное внимание было уделено возможности возбуждения ДБ жёсткого типа.

Создание расчётной ячейки и методика компьютерного моделирования

Кристаллическая решётка Cr_2Al (рис.1а) строилась с помощью парного потенциала Морзе:

$$\frac{1}{2} \sum_{i=1}^z \eta_i U_{V=V_0} = E_s, \quad \frac{1}{2} \sum_{i=1}^z \eta_i \left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_{V=V_0} = 0, \quad K_0 = -V_0 \cdot \left(\frac{\partial P_s}{\partial V} \right), \quad (3)$$

где η_i – число атомов в i -координационной сфере, z – число учитываемых сфер, P_s – давление изоэнтропического сжатия, V_0 и V – удель-

$$U(r) = D\beta \exp(-\alpha r) [\beta \exp(-\alpha r) - 2], \quad (1)$$

где D , β , α – параметры потенциала, r – расстояние между атомами. Потенциал позволяет вычислить центральную силу, действующую на атом, со стороны другого атома:

$$F = \frac{dU(r)}{dr} = -2D\alpha \left[\left(\beta e^{-\alpha r} - \frac{1}{2} \right)^2 - \frac{1}{4} \right]. \quad (2)$$

Коэффициенты потенциала Морзе вычислялись методикой предложенной в [15], с использованием энергии сублимации атомов кристалла при нуле Кельвин E_s , минимального расстояния между атомами a_0 и объёмного модуля упругости K_0 , которая является модификацией метода Джирифалько-Вайзера [19]:

ные объёмы в начальном и деформированном состояниях.

Когда всестороннее давление, оказываемое на кристалл, изменит длину связи на величину x , очевидно, что объем, приходящийся на один атом станет равным $V = k_1(a_0 - x)^3$. Естественно, радиус произвольной координационной сферы для ОЦК решётки будет изменяться

пропорционально $r_i = 2/\sqrt{3}k_i(a_0 - x)$. Здесь коэффициент k_i позволяет вычислить радиус i -координационной сферы r_i . Значения коэффициентов k_i и чисел атомов z_i в координационных сферах с номером z приведены в таблице 1.

Таблица 1. Параметры z_i и k_i для первых 10 координационных сфер ОЦК металлов

Table 1. Parameters z_i and k_i for the first 10 coordination spheres of bcc metals

z	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
z_i	8	6	12	24	8	6	24	24	24	8
k_i	$\frac{\sqrt{3}}{2}$	1	$\sqrt{2}$	$\frac{\sqrt{11}}{2}$	$\sqrt{3}$	2	$\frac{\sqrt{19}}{2}$	$\sqrt{5}$	$\sqrt{6}$	$\frac{\sqrt{27}}{2}$

Вычислив производные входящие в (3), получим систему уравнений для расчёта парамет-

ров, входящих в (1) и (2) и, подставляя (3), получим систему уравнений:

$$\beta = \frac{\sum_{i=1}^z k_i \eta_i e^{-2/\sqrt{3}\alpha k_i a_0}}{\sum_{i=1}^z k_i \eta_i e^{-4/\sqrt{3}\alpha k_i a_0}},$$

$$D = \frac{2E_s}{\beta \sum_{i=1}^z \eta_i \left(\beta e^{-4/\sqrt{3}\alpha k_i a_0} - 2e^{-2/\sqrt{3}\alpha k_i a_0} \right)}, \quad (4)$$

$$9k_i a_0 K_0 - D\beta \alpha 2/\sqrt{3} \left(\frac{2}{a_0} \sum_{i=1}^z \eta_i k_i \left(\beta e^{-4/\sqrt{3}\alpha k_i a_0} - e^{-2/\sqrt{3}\alpha k_i a_0} \right) + \alpha 2/\sqrt{3} \sum_{i=1}^z \eta_i k_i^2 \left(2\beta e^{-4/\sqrt{3}\alpha k_i a_0} - e^{-2/\sqrt{3}\alpha k_i a_0} \right) \right) = 0.$$

Для нахождения коэффициентов D , β , α , варьируется параметр α . По его значению с помощью первого и второго уравнений в (4), определяются D и β . Подбор значений α осуществляется до тех пор, пока с нужной точностью не будет выполняться третье равенство в (4). В данной работе параметры рассчитывались при учёте 7 координационных сфер и $a_0 = 2,497 \text{ \AA}$. В результате были получены следующие значения: $D_{CrAl} = 0,445046 \text{ эВ}$, $\beta_{CrAl} = 25,9698$, $\alpha_{CrAl} = 1,01042 \text{ \AA}^{-1}$, $D_{AlAl} = 0,307315 \text{ эВ}$, $\beta_{AlAl} = 36,9762$, $\alpha_{AlAl} = 1,016834 \text{ \AA}^{-1}$, $D_{CrCr} = 0,445046 \text{ эВ}$, $\beta_{CrCr} = 25,9698$, $\alpha_{CrCr} = 1,01042 \text{ \AA}^{-1}$. Размеры расчётной ячейки $30 \times 12 \times 30$ частиц (рис.16).

Результаты моделирование локализованных дискретных бризеров

Рассмотрим кристаллографические направления, вдоль которых возможно возбуждение ДНКМ. Очевидно, что носителями ДНКМ могут быть только атомы алюминия, как более лёгкие, и как следствие носителями более высокочастотных мод. Также очевидно, что в данной структуре наиболее высокими частота-

ми ДНКМ обладает атом алюминия в направлении [111], т.е. в направлении к своему ближайшему соседу, более массивному атому хрома. Однако воспользоваться этим и упорядочить эти колебания локализующей функцией нельзя. Поскольку в области локализации окажутся разнородные атомы, что неизбежно разрушит монохроматизм колебаний ДНКМ. По той же причине выпадают направления [001], [011], [101]. Таким образом, остается два кристаллографических направления, вдоль которых возможно использовать приём, предлагаемый авторами работ [14, 15], это направления [100] (или идентичное ему [010]) и [110]. Многочисленные попытки сформировать ДБ вдоль [110] успеха не имели. ДБ удалось возбудить вдоль направления [100]. При этом использовалась функция локализации вида:

$$\Delta x_n = \frac{A_0}{\cosh(n)}, \quad (5)$$

где Δx_n – величина начального смещения атомов, $n = 0, \pm 1, \dots, \pm 3$ – номер пары атомов в атомном ряду, вдоль которого формировался ДБ см. рис.2.

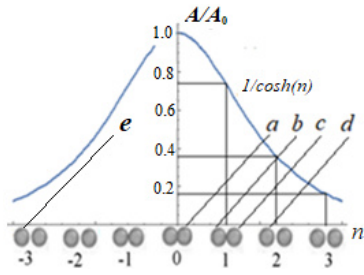


Рис.2. Локализирующая функция, накладываемая на ДНКМ

Fig.2. Localizing function superimposed on DNM

Средняя частота полученного бризера составила величину порядка 18,3 ТГц и она выше частот фонового спектра рассматриваемой модельной решётки (см. рис.3). На рис.4а показаны колебания атомов *a*, *b*, *c* и *d*, несущих нелинейную локализованную моду. Обращают на себя внимание две особенности. Первая заключается в том, что атомы *b*, *c*, и *d* сдвинуты от своего положения равновесия в сторону от центральной пары атомов ДБ. Они сдвинуты тем

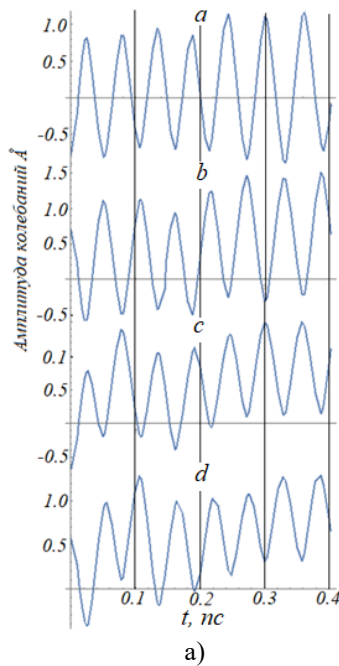


Рис.4. а) Колебания атомов *a*, *b*, *c*, *b* и *d* несущих нелинейную локализованную моду; б) Колебания периферийного атома с образующих бризера, а также 2-го, 4-го и 6-го атомов за пределами бризера (отсчёт ведётся от атома *c*)

Fig.4. a) Vibrations of atoms *a*, *b*, *c*, *b* and *d* carrying a nonlinear localized mode; б) Vibrations of the peripheral atom from the breather, as well as the 2nd, 4th and 6th atoms outside the breather (the count is from the atom *c*)

Напомним, каковы начальные условия, необходимые для возбуждения ДБ жесткого типа. Он получается путём сближения пар атомов модельной решётки навстречу друг другу.

больше, чем дальше они от центральной пары атомов. Вторая особенность проявляется в том, что фазовые траектории атомов имеют наклон к временной оси *t*. Это является признаком того, что атомы, несущие дискретный бризер со временем «расползается», при этом его частота уменьшается. Так, в первые 0,1 пс атомом *a* совершается почти 2 колебания, а в промежутке от 0,3 до 0,4 пс – чуть больше полутора.

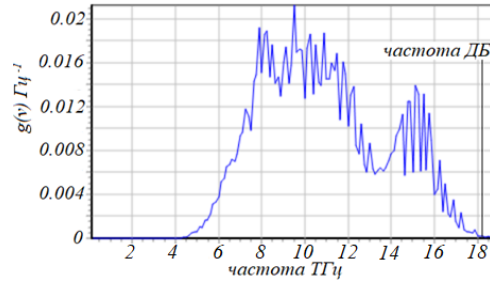
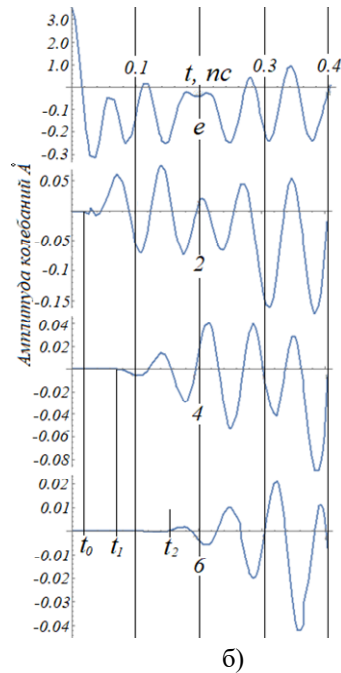


Рис.3. Плотность фонных состояний модельного кристалла Cr₂Al со сверхструктурой C11_b

Fig.3. Density of phonon states of a model Cr₂Al crystal with a C11_b superstructure



Атомы центральной пары смещаются на расстояние $\Delta x_0 = A_0$. Величины начальных смещений атомов остальных пар, из которых строится ДБ, рассчитывались по формуле (5). В

данной работе все графики построены для $A_0=0,5 \text{ \AA}$.

Наибольшее сближение у атомов центральной пары. Следовательно, силы отталкивания между ними ничем не скомпенсированы. Поэтому атомы, несущие нелинейную локализованную моду, находящиеся с разных сторон от центральной пары, совершая продольные колебания, дрейфуют в противоположные стороны, раздвигая область локализации колебательной энергии. При этом частота их колебаний постоянно уменьшается, из-за увеличения расстояния между атомами. Практически сразу, несмотря на то, что средняя частота колебаний ДБ выше частоты фононного спектра, включается механизм фокусонной [20-22] передачи энергии соседним атомам (рис.4б). На этом рисунке показаны зависимости от времени смещений периферийного атома e и смещений 2-го, 4-го и 6-го атомов, лежащих в одном ряду с атомами a, b, c, d, e за пределами группы атомов участвующих в возбуждении ДБ. Колебания 2-го, 4-го и 6-го атомов начинаются с некоторой задержкой. Причём интервалы времени, через которые возмущение дошло от атома e до 2-го атома – t_0 , от 2-го атома до 4-го – t_1 и от 4-го атома до 6-го – t_2 очевидно зависят от амплитуды внешнего воздействия. Амплитуда воздействия с расстоянием уменьшается, а интервал времени, через который возмущение доходит до следующего атома – увеличивается. Оценка скорости, с которой сигнал проходит от 4-го к 6-му атому, даёт величину порядка 7000 м/с, т.е. она близка к скорости звука в алюминии (6400 м/с). Скорости дрейфа атомов a, b, c и d от центра можно определить по углу наклона их графиков колебаний к временной оси (рис.4а). Скорости, как и углы наклона все разные и они меньше скорости звука в металле.

Неустойчивость ДБ жёсткого типа является принципиальным отличием от щелевого ДБ, продолжительность колебаний которого может быть на несколько порядков выше [15, 23, 24].

Заключение

В представленной работе построена трёхмерная модель ОЦК решётки Cr_2Al со сверхструктурой C11_b , атомы в которой взаимодействовали посредством потенциала Морзе. Рассчитаны коэффициенты потенциала взаимодействия.

В построенной модели рассматривалась возможность возбуждения нелинейных локализованных колебательных мод. Была показана невозможность существования щелевого ДБ из-за незначительного соотношения масс компонент данного упорядоченного сплава, и как

следствие, отсутствия щели в плотности фононных состояний кристалла.

В результате проведённого анализа, рекомендованного в [13, 14], впервые удалось получить ДБ жёсткого типа для модельного кристалла Cr_2Al со сверхструктурой C11_b .

Указана причина относительно короткой продолжительности колебаний ДБ жёсткого типа – не скомпенсированная сила отталкивания атомов, несущих нелинейную локализованную моду приводит к их разнонаправленному дрейфу от центральной пары и как следствие уменьшению частоты колебаний.

Указан один из возможных механизмов затухания дискретного бризера жёсткого типа за счёт рассеяния энергии колебаний ДБ фокусонами.

Список литературы

1. Dmitriev S.V., Korznikova E.A., Baimova J.A., Velarde M.G. Discrete breathers in crystals // *Phys. Usp.* 2016. V. 59. P. 446.
2. Manley M.E. Impact of intrinsic localized modes of atomic motion on materials properties // *Acta. Mater.* 2010. V. 58. P. 2926-2935.
3. Xiong D., Wang J., Zhang Y., Zhao H. Nonuniversal heat conduction of one-dimensional lattices // *Phys. Rev. E.* 2012. V. 85. P. 020102(R).
4. Xiong D., Saadatmand D., Dmitriev S.V. Crossover from ballistic to normal heat transport in the ϕ_4 lattice: If nonconservation of momentum is the reason, what is the mechanism? // *Physical Review E.* 2017. V. 96, N 4. P. 042109.
5. 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.
6. 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.
7. 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.
8. 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.
9. Medvedev N.N., Starostenkov M.D., Manley M.E. Energy Localization in the Al sublattice of Pt_3Al with L1_2 order // *Journal of Applied Physics.* 2013. V. 114. P. 213506.
10. Zakharov P.V., Eremin A.M., Starostenkov M.D., Korznikova E.A., Dmitriev S.V. Ex-

citation of gab discrete breathers in an A_3B crystal with a flux of particles // *Physics of the Solid State*. 2018. V. 59. P. 223–228.

11. Sakhnenko V.P., Chechin G.M. Symmetrical selection rules in nonlinear dynamics of atomic systems // *Phys. Dokl.* 1993. V. 38. P. 219.

12. Sakhnenko V.P., Chechin G.M. Bushes of modes and normal modes for nonlinear dynamical systems with discrete symmetry // *Phys. Dokl.* 1994. V. 39. P. 625.

13. 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.

14. 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.

15. Naumov E.K., Bebikhov Yu.V., Ekomasov E.G., Soboleva E.G., Dmitriev S.V. Discrete breathers in square lattices from delocalized nonlinear vibrational modes // *Physical Review E*. 2023. V. 107, N 3. P. 034214.

16. Korznikova E.A., Fomin S.Yu., Soboleva E.G., Dmitriev S.V. Highly symmetric discrete breather in a two-dimensional Morse crystal // *JETP Letters*. 2016. V. 103, N 4. P. 277–281.

17. 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 // *Physical Review E*. 2021. V. 103, N 5. P. 052202.

18. 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 // *Computational Materials Science*. 2020. V. 180. P. 109695.

19. Medvedev N.N., Starostenkov M.D., Potekaev A.I., Zakharov P.V., Markidonov A.V., Eremin A.M. Energy localization in the ordered condensed system: A_3B alloys with $L1_2$ superstructure // *Russian Physics Journal*. 2014. V. 57. P. 378–395.

20. Старостенков М.Д. Проблемы моделирования состояния кристаллической решетки металлов и сплавов, содержащих дефекты // В сб. науч. трудов конференции «Дефекты и физико-механические свойства металлов и сплавов». Барнаул: Алт. политехн. ин-т, 1987. С. 16–25.

21. Girifalco L.A., Weiser V.G. Application of the Morse potential function to cubic metals // *Phys. Rev.* 1959. V. 114. P. 687–790.

22. Iskandarov A.M., Dmitriev S.V., Medvedev N.N., Zakharov P.V. Crowdion mobility and self-focusing in 3D and 2D nickel // *Computational Materials Science*. 2009. V. 47. P. 429–431.

23. Medvedev N.N., Starostenkov M.D., Zakharov P.V., Dmitriev S.V. Exciting discrete breathers of two types in a computer 3D model of Pt_3Al crystal // *Technical Physics Letters*. 2015. V. 41. P. 994–997.

24. Медведев Н.Н., Дмитриев С.В., Старостенков М.Д. О локализации энергии в двумерных кристаллических решётках металлов // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2007. Т. 4, № 3. P. 100–102.

Информация об авторах

Н. Н. Медведев – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой естественнонаучных дисциплин Бийского технологического института.

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

П. В. Захаров – доктор физико-математических наук, доцент, профессор кафедры физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.

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

References

1. Dmitriev, S. V., Korznikova, E. A., Baimova, J. A. & Velarde, M. G. (2016). Discrete breathers in crystals. *Phys. Usp.*, 59, 446.

2. Manley, M. E. (2010). Impact of intrinsic localized modes of atomic motion on materials properties. *Acta Mater.*, 58, 2926–2935.

3. Xiong, D., Wang, J., Zhang, Y. & Zhao, H. (2012). Nonuniversal heat conduction of one-dimensional lattices. *Phys. Rev. E*, 85, 020102(R).

4. Xiong, D., Saadatmand, D. & Dmitriev, S. V. (2017). Crossover from ballistic to normal heat transport in the $\phi 4$ lattice: If nonconservation of momentum is the reason, what is the mechanism? *Physical Review E*, 96(4), 042109.

5. 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.

6. Shimada, T., Shirasaki, D. & Kitamura, T. (2010). Stone-Wales transformations triggered by intrinsic localized modes in carbon nanotubes. *Phys. Rev. B*, 81, 035401.

7. 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.

8. 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.
9. Medvedev, N. N., Starostenkov, M. D. & Manley, M. E. (2013). Energy Localization in the Al sublattice of Pt_3Al with L1_2 order. *Journal of Applied Physics*, 114, 213506.
10. Zakharov, P. V., Eremin, A. M., Starostenkov, M. D., Korznikova, E. A. & Dmitriev, S. V. (2018). Excitation of gap discrete breathers in an A_3B crystal with a flux of particles. *Physics of the Solid State*, 59, 223–228.
11. Sakhnenko, V. P. & Chechin, G. M. (1993). Symmetrical selection rules in nonlinear dynamics of atomic systems. *Phys. Dokl.*, 38, 219.
12. Sakhnenko, V. P. & Chechin, G. M. (1994). Bushes of modes and normal modes for nonlinear dynamical systems with discrete symmetry. *Phys. Dokl.*, 39, 625.
13. Chechin, G. M. & Sakhnenko, V. P. (1998). Interactions between normal modes in nonlinear dynamical systems with discrete symmetry. *Exact results. Physica D*, 117, 43.
14. 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.
15. Naumov, E. K., Bebikhov, Yu. V., Ekomasov, E. G., Soboleva, E. G. & Dmitriev, S. V. (2023). Discrete breathers in square lattices from delocalized nonlinear vibrational modes. *Physical Review E*, 107(3), 034214.
16. Korznikova, E. A., Fomin, S. Yu., Soboleva, E. G. & Dmitriev, S. V. (2016). Highly symmetric discrete breather in a two-dimensional Morse crystal. *JETP Letters*, 103(4), 277–281.
17. 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. *Physical Review E*, 103(5), 052202.
18. 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. *Computational Materials Science*, 180, 109695.
19. Medvedev, N. N., Starostenkov, M. D., Potekaev, A. I., Zakharov, P. V., Markidonov, A. V. & Eremin, A. M. (2014). Energy localization in the ordered condensed system: A_3B alloys with L1_2 superstructure. *Russian Physics Journal*, 57, 378–395.
20. Starostenkov, M. D. (1987). Problemy modelirovaniya sostoyaniya kristallicheskoj reshetki metallov i spлавov, sodержashchikh defekty. V sb. nauch. trudov konferentsii «Defekty i fiziko-mekhanicheskiye svoystva metallov i spлавov». Barnaul: Alt. politekhn. in-t. P. 16–25. (In Russ.).
21. Girifalco, L. A. & Weiser, V. G. (1959). Application of the Morse potential function to cubic metals. *Phys. Rev.*, 114, 687–790.
22. Iskandarov, A. M., Dmitriev, S. V., Medvedev, N. N. & Zakharov, P. V. (2009). Crowdion mobility and self-focusing in 3D and 2D nickel. *Computational Materials Science*, 47, 429–431.
23. Medvedev, N. N., Starostenkov, M. D., Zakharov, P. V. & Dmitriev, S. V. (2015). Exciting discrete breathers of two types in a computer 3D model of Pt_3Al crystal. *Technical Physics Letters*, 41, 994–997.
24. Medvedev, N. N., Dmitriyev, S. V. & Starostenkov, M. D. (2007). O lokalizatsii energii v dvumernykh kristallicheskiykh reshotkakh metallov. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 4(3), 100–102. (In Russ.).

Information about the authors

N. N. Medvedev – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Head of the Nature-science Discipline Department, Biysk Technological Institute.

M. D. Starostenkov – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Chief Researcher, Professor, I.I. Polzunov Altai State Technical University.

P. V. Zakharov – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor, Professor of the Department of Physics, St. Petersburg Polytechnic University.

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

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

Статья поступила в редакцию 04.07.2023; одобрена после рецензирования 20.07.2023; принята к публикации 03.08.2023.

The article was received by the editorial board on 04 July 23; approved after reviewing 20 July 23; accepted for publication 03 Aug. 23.