

РАЗДЕЛ 1. ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

Научная статья

1.3.8. Физика конденсированного состояния (физико-математические науки)

УДК 539.22

doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2023.04.001

ВЛИЯНИЕ АНСАМБЛЕЙ ДИСКРЕТНЫХ БРИЗЕРОВ НА ТЕПЛОЕМКОСТЬ НЕЛИНЕЙНЫХ ЦЕПОЧЕК

Алина Юрьевна Моркина^{1†}, Юрий Владимирович Бебихов²,
Сергей Владимирович Дмитриев³, Елена Александровна Корзникова⁴

^{1,4} Уфимский университет науки и технологий, ул. 3. Валиди, 32, 450076, Уфа, Россия

^{2, 3} Северо-Восточный федеральный университет, Политехнический институт (филиал) в Мирном, ул. Тихонова, 5/1, 678170, Мирный, Саха (Якутия), Россия

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

¹ alinamorkina@yandex.ru[†], <https://orcid.org/0000-0002-3989-0376>

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

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

⁴ elena.a.korznikova@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-5975-4849>

Аннотация. Дискретный бризер (ДБ) представляет собой пространственно-локализованную и периодическую во времени колебательную моду большой амплитуды в нелинейной решетке. Экспериментальные и молекулярно-динамические исследования подтвердили, что ДБ могут возбуждаться в различных кристаллических решетках, и при взаимодействии с точечными дефектами они могут снижать потенциальный барьер их миграции. Это в свою очередь может влиять на структуру кристалла и его свойства. В данной работе моделируется нелинейный одномерный кристалл с частицами, взаимодействие которых описывается линейным межчастичным и нелинейным локальным потенциалом. В кристалл с жестким или мягким типом нелинейности вводились ДБ в количестве от 1 до 7 и с амплитудой колебаний от 0,5 до 3. Было установлено, что количество ДБ в ансамбле не влияет на изменение теплоемкости, но при этом выявлена зависимость теплоемкости от задаваемой амплитуды колебаний ДБ. В случае мягкого типа нелинейности значение теплоемкости увеличивается с ростом амплитуды колебаний, а при жестком типе нелинейности наблюдается обратная зависимость. Также было изучено влияние ансамбля, состоящего из ДБ с разной амплитудой колебаний. Получено выражение для определения теплоемкости в таких случаях. Данная работа показывает, что о присутствии ДБ в кристаллах можно судить по их влиянию на теплоемкость. Для достижения этой цели предстоит рассчитать концентрацию ДБ в кристалле как функции температуры. Развитие методов косвенного подтверждения существования ДБ в кристаллах является важной задачей ввиду отсутствия на сегодняшний день методов их прямого наблюдения.

Ключевые слова: дискретные бризеры, локальный потенциал, молекулярная динамика, теплоемкость.

Благодарности: Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания на оказание государственных услуг ФГБОУ ВО «УУ-НиТ» (соглашение № 075-03-2023-119/1) «Молодежная научно-исследовательская лаборатория НОЦ «Металлы и сплавы при экстремальных воздействиях». Для Бебихова Ю.В. работа была поддержана грантом Российского научного фонда № 22-22-00810.

Для цитирования: Моркина А.Ю., Бебихов Ю.В., Дмитриев С.В., Корзникова Е.А. Влияние ансамблей дискретных бризеров на теплоемкость нелинейных цепочек // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2023. Т. 20, № 4. С. 429–437. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2023.04.001.

Original article

EFFECT OF DISCRETE BREATHER ENSEMBLES ON THE HEAT CAPACITY OF NONLINEAR CHAINS**Alina Yu. Morkina^{1†}, Yurii V. Bebikhov², Sergey V. Dmitriev³, Elena A. Korznikova⁴**^{1,4} Ufa University of Science and Technology, Valdy Str., 32, Ufa, 450076, Russia^{2,3} Polytechnic Institute (Branch) in Mirny, North-Eastern Federal University, Tikhonova Str., 5/1, Mirny, Sakha Republic (Yakutia), 678170, Russia³ Institute of Molecule and Crystal Physics, Ufa Federal Research Centre of RAS, Oktyabrya Pr., 71, Ufa, 450054, Russia[†] alinamorkina@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0002-3989-0376>² bebikhov.yura@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-8366-4819>³ dmitriev.sergey.v@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-6744-4445>⁴ elena.a.korznikova@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-5975-4849>

Abstract. A discrete breather (DB) is a spatially localized and time-periodic high-amplitude oscillatory mode in a nonlinear lattice. Experimental and molecular dynamics studies have confirmed that DBs can be excited in various crystal lattices, and when interacting with point defects, they can reduce the potential barrier to their migration. This, in turn, can affect the structure of the crystal and its properties. In this paper, we model a nonlinear one-dimensional crystal with particles whose interaction is described by a linear interparticle and a nonlinear on-site potential. DBs were introduced into a crystal with a hard or soft type of nonlinearity in an amount from 1 to 7 and with an oscillation amplitude from 0.5 to 3. It was found that the number of DBs in the ensemble does not affect the change in heat capacity, but heat capacity depends on the DB oscillation amplitude. In the case of a soft type of nonlinearity, the heat capacity increases with an increase in the oscillation amplitude, and in the case of a hard type of nonlinearity, an inverse relationship is observed. The effect on the heat capacity of an ensemble consisting of DBs with different oscillation amplitudes was also studied. An expression is obtained for determining the heat capacity in such cases. This work shows that the presence of DBs in crystals can be judged from their effect on the heat capacity. To achieve this goal, it is necessary to calculate the DB concentration in the crystal as a function of temperature. The development of methods for indirect confirmation of the existence of DBs in crystals is an important task due to the lack of methods for their direct observation to date.

Keywords: discrete breathers, on-site potential, molecular dynamics, heat capacity.

Acknowledgements: The study was carried out with the financial support of the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation within the framework of the state order for the provision of public services of the Federal State Budgetary Educational Institution of Higher Education «UUNiT» (agreement No. 075-03-2023-119/1) «Youth Research Laboratory of the REC «Metals and Alloys under Extreme Impacts». For Bebikhov Yu.V. This work was supported by the Russian Science Foundation grant No. 22-22-00810.

For citation: Morkina, A. Yu., Bebikhov, Yu. V., Dmitriev, S. V. & Korznikova, E. A. (2023). Effect of discrete breather ensembles on the heat capacity of nonlinear chains. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 20(4), 429–437. (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2023.04.001.

Введение

Дискретными бризерами (ДБ) называются локализованные в пространстве и периодические во времени колебательные моды в бездефектных нелинейных решетках [1]. В ряде работ была показана возможность существования ДБ в кристаллах [2–4], что привело к всплеску научного интереса к изучению ДБ и их свойств в кристаллах различного типа. В настоящее время концепция ДБ все чаще привлекается для объяснения различных физических эффектов в твердых телах.

ДБ не излучают свою энергию в виде малоамплитудных колебаний (фононов), поскольку

их частоты лежат вне спектра фоновых колебаний кристалла [5]. Поэтому при исследовании ДБ следует обратить внимание на следующие нюансы – структуру фонового спектра изучаемого кристалла (наличие/отсутствие щели в фоновом спектре) и каким образом частота ДБ может выйти из фонового спектра кристалла. В простых структурах, таких как чистые металлы, щель в фоновом спектре отсутствует, что допускает наличие ДБ только с частотами выше фонового спектра кристалла [6]. С другой стороны, кристаллы со сложной структурой могут иметь щель в фоновом спектре, в этом случае возможно появление щелевых ДБ, то есть, ДБ с частотами колебаний

в щели фононного спектра. Стоит отметить, что частоты ДБ выходят из фононного спектра из-за наличия ангармонизмов межатомных сил, приводящих к зависимости частоты колебаний атомов от амплитуды. ДБ может демонстрировать два типа нелинейности – жесткий и мягкий, при которых частота моды, соответственно, увеличивается или уменьшается с ростом амплитуды [7].

Очевидно, что ДБ с мягким типом нелинейности возможны только в кристаллах со щелью в фононном спектре. В этом случае частота ДБ отщепляется от верхнего края щели и, уменьшаясь с ростом амплитуды, входит в щель фононного спектра. Частоты щелевых ДБ с жестким типом нелинейности отходят от нижней границы щели фононного спектра и растут с увеличением амплитуды ДБ [10].

В кристаллах со сплошным спектром возможно наличие ДБ только с жестким типом нелинейности, когда частота ДБ растет с амплитудой, отделяясь от верхнего края фононного спектра [11].

В случае, когда частота типа мягкой нелинейности уменьшается с ростом амплитуды, тип жесткой нелинейности характеризуется ростом частоты с увеличением амплитуды ДБ [12, 13]. Обычно ДБ с мягким типом нелинейности существуют в двухатомных кристаллах с заметной разницей в атомных массах и имеют частоту внутри запрещенной зоны фононов. Этот тип бризера обычно локализуется на одном легком атоме и его очень легко возбудить, просто введя начальную скорость или начальное смещение для атома [14]. По этой причине такие типы ДБ широко исследовались во многих биатомных системах и хорошо изучены в литературе [15-17].

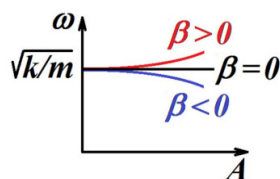


Рис.1. Диаграмма соответствия типа нелинейности (жесткий или мягкий) в зависимости от коэффициента β

Fig.1. Correspondence diagram of the type of nonlinearity (hard or soft) depending on the coefficient β

$$H = K + P = \sum_n \frac{m\dot{u}_n^2}{2} + \sum_n \left[\frac{s}{2}(u_{n+1} - u_n)^2 + U(u_n) \right], \quad (1)$$

где K – кинетическая энергия, P – потенциальная энергия, u_n – это смещение n -й частицы из ее положения в равновесном состоянии и

Ожидается, что ДБ с жестким типом нелинейности и частотой выше спектра будут существовать в одноатомных кристаллах с бесщелевой полосой. До недавнего времени считалось, что в реальных кристаллах межатомные взаимодействия имеют тенденцию проявлять мягкий тип нелинейности, и ДБ может существовать только в пределах промежутка в фононном спектре кристалла. Однако возможность существования ДБ с жестким типом нелинейности и частотами выше фононного спектра была продемонстрирована с помощью моделирования молекулярной динамики для Ni и Nb [18-19]. Позднее возможность существования ДБ с частотами выше фононного спектра кристалла была подтверждена для случая двумерного (2D) одноатомного кристалла с межатомным потенциалом Морзе [24].

Очень важно понять, как ДБ влияют на макроскопические свойства кристаллов. В экспериментальных исследованиях установлена связь аномалий теплового расширения [20] и теплоемкости [21] α -урана при высоких температурах с возбуждением ДБ. ДБ могут быть ответственны за турбулентную динамику [22].

Цель данной работы – изучение влияния ансамблей ДБ с одинаковой и разной амплитудой колебаний на теплоемкость одномерного нелинейного кристалла с мягким и жестким типом нелинейности.

Детали моделирования

Данное исследование проводилось при помощи метода молекулярной динамики (МД). Данный метод позволяет определять эволюцию ансамбля атомов при помощи интегрирования уравнений их движения. Траектории атомов и молекул в этом методе определяются путем численного решения уравнений движения Ньютона для системы взаимодействующих частиц, где силы между частицами и их потенциальные энергии рассчитываются с использованием межатомных потенциалов или силовых полей молекулярной механики.

Рассмотрим одномерную цепочку из 1000 частиц с массой m , гамильтониан которой определяется как

\dot{u}_n – скорость смещения n -й частицы (точка над буквой означает производную по времени). Частицы связаны со своими ближайшими сосе-

дями упругими линейными связями с жесткостью s . В качестве нелинейного локального потенциала мы принимаем

$$U(\xi) = k\xi^2 + \alpha\xi^4 + \beta\xi^6, \quad (2)$$

где k – коэффициент перед гармоническим членом, а коэффициенты α и β определяют вклады от членов четвертого и шестого порядка соответственно. Без потери общности мы полагаем $m = 1$, $s = 1$, а для локального потенциала возьмем $k = 1/2$, $\alpha = \pm 1/24$, и $\beta = 1/720$.

Эти уравнения интегрируются численно с использованием метода Штормера шестого порядка с шагом по времени $\tau = 10^{-3}$. В случае колебаний малой амплитуды нелинейными членами можно пренебречь, а решениями линеаризованного уравнения являются нормальные моды

$$u_n \sim \exp[i(qn - \omega_q t)] \quad (4)$$

с волновым числом q и частотой ω_q . Эти моды подчиняются следующему дисперсионному соотношению:

$$\omega_q^2 = \frac{2}{m} [k + s(1 - \cos q)]. \quad (5)$$

Рассматриваемая цепочка поддерживает бегущие волны (фононы) с малой амплитудой с частотами в пределах от $\omega_{min} = 1$ для $q = 0$ до $\omega_{max} = \sqrt{5} \approx 2,236$ для $q = \pi$.

В случае ангармонизма жесткого типа ($\alpha = 1/24$) в цепочке из $N = 1000$ частиц в момент времени $t = 0$ возбуждается мода с волновым числом на границе зоны Бриллюэна ($q = \pi$) и амплитудой A ,

$$u_n = A \sin(\pi n - \omega_{max} t). \quad (6)$$

Для цепочки с ангармонизмом мягкого типа ($\alpha = -1/24$) возбуждается мода с волновым числом в Γ -точке зоны Бриллюэна ($q = 0$) и амплитудой A ,

$$u_n = A \sin(\omega_{min} t). \quad (7)$$

Если амплитуда возбуждаемых мод не слишком мала, они являются модуляционно неустойчивыми. Первоначально энергия равномерно распределяется между всеми частицами. Развитие неустойчивости приводит к локализации энергии, которую можно отслеживать, вычисляя параметр локализации

$$L = \frac{\sum e_n^2}{(\sum e_n)^2}, \quad (8)$$

Отметим, что при $\alpha > 0$ у нас имеется локальный потенциал с ангармонизмом жесткого типа, а при $\alpha < 0$ локальный потенциал обладает ангармонизмом мягкого типа при не очень больших амплитудах колебаний. С другой стороны, для очень больших амплитуд колебаний, когда член шестого порядка доминирует, даже при $\alpha < 0$, система демонстрирует ангармонизм жесткого типа, но этот случай здесь не рассматривается.

Уравнение движения, которое вытекает из гамильтониана:

$$m\ddot{u}_n = s(u_{n-1} - 2u_n + u_{n+1}) - 2ku_n - 4\alpha u_n^3 - 6\beta u_n^5. \quad (3)$$

где $e_n = \frac{m\dot{u}_n^2}{2} + \frac{s}{4}(u_n - u_{n-1})^2 + U(u_n)$ – это энергия n -й частицы.

В качестве меры температуры будет использоваться усредненная кинетическая энергия на атом:

$$K = \frac{1}{N} \sum_n \frac{m\dot{u}_n^2}{2}. \quad (9)$$

Фактически, температура одномерной решетки равна $T = 2K/k_B$, где $k_B = 8,617 \cdot 10^{-5}$ эВК⁻¹ – постоянная Больцмана. Теплоемкость всей цепи определяется следующим образом:

$$C = \lim_{\Delta T \rightarrow \infty} \frac{\Delta H}{\Delta T}, \quad (10)$$

где ΔH – доля энергии, передаваемой системе, и ΔT – соответствующее увеличение температуры. Удельная теплоемкость определяется как теплоемкость на единицу массы в расчете на частицу. Поскольку в этом исследовании используются периодические граничные условия и тепловое расширение цепи не допускается, мы оцениваем удельную теплоемкость при постоянном объеме. Проблема с использованием этого определения теплоемкости заключается в том, что наше моделирование выполняется при постоянной полной энергии H . Поэтому, в наших расчетах удельная теплоемкость цепи при постоянном объеме характеризуется отношением:

$$c_v = \frac{\bar{H}}{\bar{K}}, \quad (11)$$

где \bar{H} и \bar{K} – полная энергия и кинетическая энергия цепи на атом, соответственно. В линейных системах прирост полной энергии равномерно распределяется между кинетической и потенциальной энергиями, так что $\bar{H} = 2\bar{K}$ и $c_v = 2$. В то время как в нелинейных системах кинетическая и потенциальная

энергии могут быть разными и c_v может отклоняться от этого значения.

ДБ возбуждался при помощи задания следующих начальных условий:

$$u_n(0) = \frac{A}{\cosh(\theta n)}, \quad \dot{u}_n(0) = 0. \quad (12)$$

Таблица 1. Параметры ДБ, задаваемые при моделировании. A – амплитуда ДБ, θ – степень локализации ДБ, ω – частота ДБ

Table 1. DB parameters specified in the simulation. A is the BR amplitude, θ is the degree of BR localization, ω is the BR frequency

Мягкий тип нелинейности			Жесткий тип нелинейности		
A	θ	ω	A	θ	ω
0,5	0,125	0,992	0,5	0,126	2,240
0,75	0,186	0,983	0,75	0,190	2,244
1	0,246	0,969	1	0,257	2,250
1,25	0,305	0,952	1,25	0,326	2,259
1,5	0,361	0,932	1,5	0,398	2,270
1,75	0,414	0,908	1,75	0,475	2,283
2	0,464	0,882	2	0,560	2,299
2,25	0,511	0,854	2,25	0,658	2,318
2,5	0,551	0,824	2,5	0,783	2,339
2,75	0,585	0,793	2,75	0,933	2,369
3	0,613	0,764	3	1,097	2,403

Результаты и обсуждение

На рис.2 представлен пример моделирования цепочки атомов с ансамблями ДБ одинаковой амплитуды, расположенными на одинаковом расстоянии друг от друга.

На рис.3 представлены графики зависимости теплоемкости от амплитуды для ансамбля ДБ с мягким и жестким типом нелинейности. Были посчитаны теплоемкости для систем, содержащих от 1 до 7 ДБ. Можно заметить, что в случае системы, содержащей ДБ с мягким ангармонизмом, теплоемкость увеличивается. Это происходит из-за того, что при увеличении амплитуды частота колебаний наоборот уменьшается, вследствие чего уменьшается и скорость частиц. Это приводит к уменьшению кинетической энергии, находящейся в знаменателе, вследствие чего теплоемкость увеличивается. Противоположная ситуация наблюдается в случае ДБ с жестким типом нелинейности – с увеличением амплитуды растет и частота колебаний, что приводит к увеличению кинетической энергии, и, как результат, уменьшается теплоемкость.

Для моделирования ДБ выбирались параметры начальных условий, представленные в таблице 1. По выбранной амплитуде A находился параметр локализации ДБ θ , при котором наблюдалось минимальное излучение энергии дискретным бризером. Для такого ДБ затем определялась частота его колебания ω .

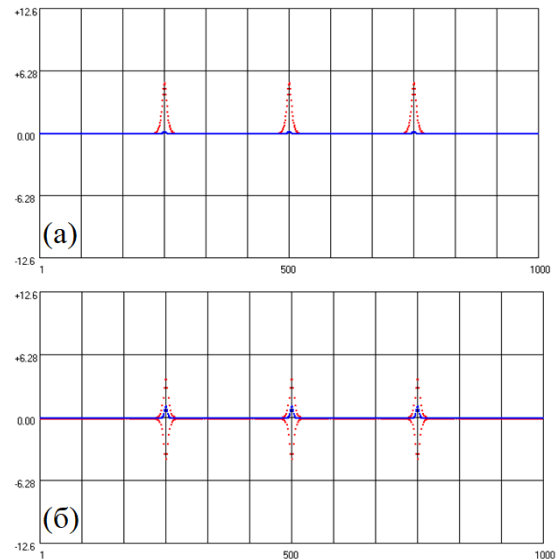


Рис.2. Пример модели цепочки атомов, содержащей ансамбль из 3 ДБ с амплитудой равной 1, (а) мягкий ангармонизм, (б) жесткий ангармонизм.

Красные точки показывают перемещения частиц, а синие – их энергии

Fig.2. An example of an atomic chain model containing an ensemble of 3 DB with an amplitude of 1, (a) soft anharmonicity, (b) hard anharmonicity. The red dots show the movement of particles, and the blue dots show their energies

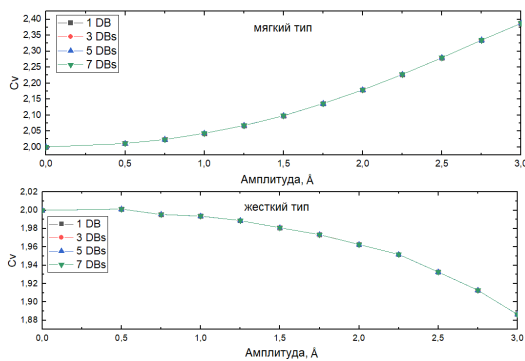


Рис.3. Зависимость теплоемкости от амплитуды для ансамбля дискретных бримеров с мягким (верхний график) и жестким (нижний график) ангармонизмом

Fig.3. Heat capacity versus amplitude for an ensemble of discrete breathers with soft (upper graph) and hard (lower graph) anharmonicity

Также из графиков видно, что изменение количества ДБ с одинаковой частотой никак не влияет на изменение теплоемкости. Поэтому в таблице 2 представлены общие значения теплоемкости для систем.

Далее мы решили выяснить, как влияет на теплоемкость системы ансамбль ДБ с разной амплитудой. Пример такой системы представлен на рис.4.

В этих случаях были получены значения теплоемкости, не совпадающие с полученными ранее, а именно – для системы с мягким ангармонизмом теплоемкость равна 2,13, а с жестким 1,97.

Таблица 2. Значения теплоемкости, полной энергии и кинетической энергии системы с возбужденными ДБ в цепочках с мягким и жестким типом нелинейности

Table 2. Values of heat capacity, total energy, and kinetic energy of a system with excited DBs in chains with soft and hard types of nonlinearity

A	0,5	0,75	1	1,25	1,5	1,75	2	2,25	2,5	2,75	3
$C_{VМ}$	2,01	2,0	2,0	2,1	2,1	2,1	2,1	2,2	2,3	2,3	2,4
$\bar{H}_М$	1,9	2,9	3,9	4,9	5,8	6,7	7,5	8,3	9,2	10,0	10,9
$\bar{K}_М$	0,9	1,5	1,9	2,3	2,8	3,1	3,5	3,7	4,1	4,3	4,6
$C_{VЖ}$	2,0	1,9	1,9	1,9	1,9	1,9	1,9	1,9	1,9	1,9	1,9
$\bar{H}_Ж$	9,9	14,9	19,6	24,2	28,7	32,9	36,7	39,8	41,6	42,5	43,5
$\bar{K}_Ж$	4,9	7,5	9,8	12,2	14,5	16,7	18,7	20,4	21,5	22,2	23,0

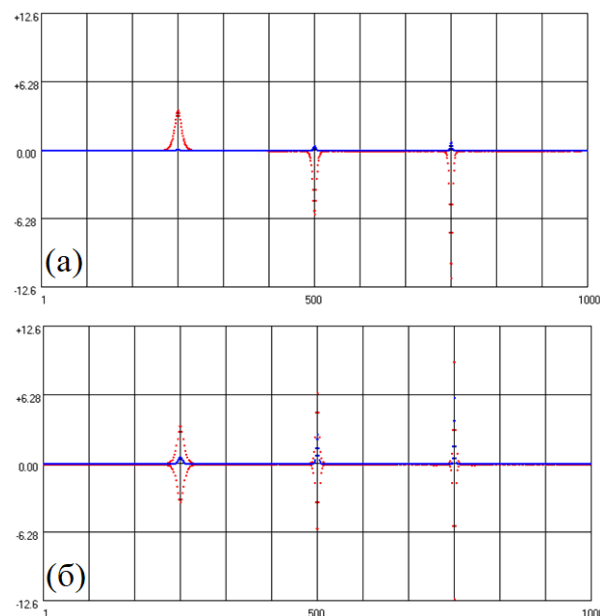


Рис.4. Цепочка атомов, содержащая ансамбль из трех ДБ с амплитудами 0,75, 1,5 и 2,25; (а) мягкий ангармонизм, (б) жесткий ангармонизм

Fig.4. A chain of atoms containing an ensemble of three discrete breathers with amplitudes of 0.75, 1.5, and 2.25; (a) soft anharmonicity, (b) hard anharmonicity

Путем расчетов была выведена формула, позволяющая рассчитать теплоемкость такой системы без моделирования, используя уже рассчитанные значения, представленные в таблице 2:

$$C_V = \frac{\sum_i \bar{H}_i}{\sum_i \bar{K}_i}, \quad (13)$$

где \bar{H}_i и \bar{K}_i – полная энергия и кинетическая энергия дискретных бризеров.

Заключение

По результатам проделанной работы можно сделать следующие выводы:

– как и предполагалось, ДБ в цепочке влияют на ее макроскопические свойства, в частности, в данном исследовании анализировалась теплоемкость. В случае ДБ с жестким ангармонизмом ДБ уменьшают теплоемкость. В обратном же случае, существование ДБ с мягким типом нелинейности увеличивает теплоемкость. Это объясняется тем, что при локализации ДБ с жестким типом нелинейности увеличивается частота колебаний (уменьшается в случае ДБ с мягким ангармонизмом) при увеличении амплитуды колебаний, что приводит к увеличению кинетической энергии за счет уменьшения потенциальной энергии.

– было выяснено, что количество ДБ с одинаковой амплитудой никак не влияет на теплоемкость системы. Если ДБ в системе имеют разные значения амплитуд, теплоемкость равна отношению суммы полных энергий к сумме кинетических энергий.

Список литературы

1. Dolgov A.S. On localization of oscillations in nonlinear crystal structure // *Sov. Phys. Solid State*. 1986. V. 28. P. 907.
2. Sievers A.J., Takeno S. Intrinsic localized modes in anharmonic crystals // *Phys. Rev. Lett.* 1988. V. 61, Iss. 8. P. 970.
3. Page J.B. Asymptotic solutions for localized vibrational modes in strongly anharmonic periodic systems // *Phys. Rev. B*. 1990. V. 41. P. 7835.
4. Flach S., Willis C.R. Discrete breathers // *Phys. Rep.* 1998. V. 295. P. 181.
5. Flach S., Gorbach A.V. Discrete breathers – Advances in theory and applications // *Phys. Rep.* 2008. V. 467. P. 1.
6. Dmitriev S.V., Korznikova E.A., Baimova J.A., Velarde M.G. Discrete breathers in crystals // *Phys. Usp.* 2016. V. 59. P. 446.
7. Cuevas J., English L.Q., Kevrekidis P.G., Anderson M. Discrete Breathers in a Forced-Damped Array of Coupled Pendula: Modeling, Computation, and Experiment // *Phys. Rev. Lett.* 2009. V. 102. P. 224101.
8. Watanabe Y., Nishida T., Doi Y., Sugimoto N. Experimental demonstration of excitation and propagation of intrinsic localized modes in a mass-spring chain // *Phys. Lett. A*. 2018. V. 382. P. 1957.
9. Vorotnikov K., Starosvetsky Y., Theocharis G., Kevrekidis P.G. Wave propagation in a strongly nonlinear locally resonant granular crystal // *Physica D*. 2018. V. 365. P. 27.
10. Chong C., Porter M.A., Kevrekidis P.G., Daraio C. Nonlinear coherent structures in granular crystals // *J. Phys.: Condens. Matter*. 2017. V. 29. P. 413003.
11. 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. P. 59.
12. Liu L., James G., Kevrekidis P., Vainchtein A. Breathers in a locally resonant granular chain with precompression // *Physica D*. 2016. V. 331. P. 27.
13. Liu L., James G., Kevrekidis P., Vainchtein A. Strongly nonlinear waves in locally resonant granular chains // *Nonlinearity*. 2016. V. 29. P. 3496.
14. Jayaprakash K.R., Starosvetsky Y., Vakakis A.F., Peeters M., Kerschen G. Nonlinear normal modes and band zones in granular chains with no pre-compression // *Nonlinear Dynam.* 2011. V. 63. P. 359.
15. Boechler N., Theocharis G., Job S., Kevrekidis P.G., Porter M.A., Daraio C. Discrete Breathers in One-Dimensional Diatomic Granular Crystals // *Phys. Rev. Lett.* 2010. V. 104. P. 244302.
16. Theocharis G., Boechler N., Kevrekidis P.G., Job S., Porter M.A., Daraio C. Discrete Breathers in One-Dimensional Diatomic Granular Crystals // *Phys. Rev. E*. 2010. V. 82. P. 056604.
17. Korznikova E.A., Morkina A.Yu., Singh M. et al. Effect of discrete breathers on macroscopic properties of the Fermi-Pasta-Ulam chain // *Eur. Phys. J. B*. 2020. V. 93. P. 123.
18. Singh M., Morkina A.Yu., Korznikova E.A. et al. Effect of Discrete Breathers on the Specific Heat of a Nonlinear Chain // *J. Nonlinear Sci.* 2021. V. 31. P. 12.

19. Sato M., Hubbard B.E., Sievers A.J., Ilic B., Craighead H.G. Management of localized energy in discrete nonlinear transmission lines // *Europhys. Lett.* 2004. V. 66. P. 318.

20. Stearrett R., English L.Q. Experimental generation of intrinsic localized modes in a discrete electrical transmission line // *J. Phys. D.: Appl. Phys.* 2007. V. 40. P. 5394.

21. Gomez-Rojas A., Halevi P. Discrete breathers in an electric lattice with an impurity: Birth, interaction, and death // *Phys. Rev. E.* 2018. V. 97. P. 022225.

22. Palmero F., English L.Q., Chen X.-L., Li W. Experimental and numerical observation of dark and bright breathers in the band gap of a diatomic electrical lattice // *Phys. Rev. E.* 2019. V. 99. P. 032206.

Информация об авторах

А. Ю. Моркина – магистрант Уфимского университета науки и технологий, лаборант в молодежной научно-исследовательской лаборатории НОЦ «Металлы и сплавы при экстремальных воздействиях».

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

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

Е. А. Корзникова – доктор физико-математических наук, профессор, заведующая молодежной научно-исследовательской лаборатории НОЦ «Металлы и сплавы при экстремальных воздействиях» Уфимского университета науки и технологий.

References

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

2. Sievers, A. J. & Takeno, S. (1988). Intrinsic localized modes in anharmonic crystals. *Phys. Rev. Lett.*, 61(8), 970.

3. Page, J. B. (1990). Asymptotic solutions for localized vibrational modes in strongly anharmonic periodic systems. *Phys. Rev. B*, 41, 7835.

4. Flach, S. & Willis, C. R. (1998). Discrete breathers. *Phys. Rep.*, 295, 181.

5. Flach, S. & Gorbach, A. V. (2008). Discrete breathers – Advances in theory and applications. *Phys. Rep.*, 467, 1.

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

7. Cuevas, J., English, L. Q., Kevrekidis, P. G. & Anderson, M. (2009). Discrete Breathers in a Forced-Damped Array of Coupled Pendula: Modeling, Computation, and Experiment. *Phys. Rev. Lett.*, 102, 224101.

8. Watanabe, Y., Nishida, T., Doi, Y. & Sugimoto, N. (2018). Experimental demonstration of excitation and propagation of intrinsic localized modes in a mass-spring chain. *Phys. Lett. A*, 382, 1957.

9. Vorotnikov, K., Starosvetsky, Y., Theocharis, G. & Kevrekidis, P. G. (2018). Wave propagation in a strongly nonlinear locally resonant granular crystal. *Physica D*, 365, 27.

10. Chong, C., Porter, M. A., Kevrekidis, P. G. & Daraio, C. (2017). Nonlinear coherent structures in granular crystals. *J. Phys.: Condens. Matter.*, 29, 413003.

11. Zhang, Y., McFarland, D. M. & Vakakis, A. F. (2017). Propagating discrete breathers in forced one-dimensional granular networks: theory and experiment. *Granular Matter.*, 19, 59.

12. Liu, L., James, G., Kevrekidis, P. & Vainchtein, A. (2016). Breathers in a locally resonant granular chain with precompression. *Physica D*, 331, 27.

13. Liu, L., James, G., Kevrekidis, P. & Vainchtein, A. (2016). Strongly nonlinear waves in locally resonant granular chains. *Nonlinearity*, 29, 3496.

14. Jayaprakash, K. R., Starosvetsky, Y., Vakakis, A. F., Peeters, M. & Kerschen, G. (2011). Nonlinear normal modes and band zones in granular chains with no pre-compression. *Nonlinear Dynam.*, 63, 359.

15. Boechler, N., Theocharis, G., Job, S., Kevrekidis, P. G., Porter, M. A. & Daraio, C. (2010). Discrete Breathers in One-Dimensional Diatomic Granular Crystals. *Phys. Rev. Lett.*, 104, 244302.

16. Theocharis, G., Boechler, N., Kevrekidis, P. G., Job, S., Porter, M. A. & Daraio, C. (2010). Discrete Breathers in One-Dimensional Diatomic Granular Crystals. *Phys. Rev. E*, 82, 056604.

17. Korznikova, E. A., Morkina, A. Yu. & Singh, M. et al. (2020). Effect of discrete breathers on macroscopic properties of the Fermi-Pasta-Ulam chain. *Eur. Phys. J. B*, 93, 123.

18. Singh, M., Morkina, A. Yu. & Korznikova, E. A. et al. (2021). Effect of Discrete Breathers on the Specific Heat of a Nonlinear Chain. *J. Nonlinear Sci.*, 31, 12.

19. Sato, M., Hubbard, B. E., Sievers, A. J., Ilic, B. & Craighead, H. G. (2004). Management of localized energy in discrete nonlinear transmission lines. *Europhys. Lett.*, 66, 318.

20. Stearrett, R. & English, L. Q. (2007). Experimental generation of intrinsic localized modes in a discrete electrical transmission line. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 40, 5394.

21. Gomez-Rojas, A. & Halevi, P. (2018). Discrete breathers in an electric lattice with an impurity: Birth, interaction, and death. *Phys. Rev. E*, 97, 022225.

22. Palmero, F., English, L. Q., Chen, X.-L. & Li, W. (2019). Experimental and numerical observation of dark and bright breathers in the band gap

of a diatomic electrical lattice. *Phys. Rev. E*, 99, 032206.

Information about the authors

A. Y. Morkina – Undergraduate Student, Ufa University of Science and Technology, Laboratory Assistant of the laboratory «Metals and Alloys under Extreme Impacts».

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

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

E. A. Korznikova – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Head of the Laboratory «Metals and Alloys under Extreme Impacts» of the Ufa University of Science and Technology.

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

Статья поступила в редакцию 25.09.2023; одобрена после рецензирования 09.10.2023; принята к публикации 23.10.2023.

The article was received by the editorial board on 25 Sept. 23; approved after reviewing 09 Oct. 23; accepted for publication 23 Oct. 23.