

Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2025. Т. 22. № 1. С. 77-84
Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedenia (Basic Problems of Material Science (BPMS)). 2025; 1(22): 74-84

Научная статья

1.3.8. Физика конденсированного состояния (физико-математические науки)

УДК 539.22

doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2025.01.007

ДВУМЕРНЫЕ ДИСКРЕТНЫЕ БРИЗЕРЫ И ИХ ВЛИЯНИЕ НА МАКРОСКОПИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МОНОКРИСТАЛЛА АЛЮМИНИЯ

Бачурина Ольга Владимировна^{1,2†}, Мурзаев Рамиль Тухфатович³, Бачурин Дмитрий Владимирович³

¹Уфимский государственный нефтяной технический университет, ул. Космонавтов 1, 450062, Уфа, Россия

²Институт физики молекул и кристаллов, Уфимский федеральный исследовательский центр РАН, пр. Октября, 71, 450054, Уфа, Россия

³Институт проблем сверхпластичности металлов, ул. Степана Халтурина 39, 450001, Уфа, Россия

[†]obachurina@yahoo.com, <https://orcid.org/0000-0002-3702-2532>

³murzaevrt@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-2691-7031>

³dvbachurin@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-8995-211X>

Аннотация. Интерес к дискретным бризерам (ДБ), то есть периодическим во времени и пространственно-локализованным колебательным модам в бездефектной нелинейной решетке, связан с их способностью локализовать колебательную энергию порядка нескольких эВ на атом. В настоящей работе методом молекулярной динамики впервые проведено исследование влияния двумерного ДБ на макроскопические свойства (теплоемкость и тепловое расширение) бездефектного монокристалла ГЦК алюминия. Для этой цели применялся стандартный межатомный потенциал с использованием метода погруженного атома. Все расчеты проводились при нулевой абсолютной температуре. Возбуждение ДБ происходило путем смещения атомов из их равновесных решеточных положений соответствующим трем делокализованным нелинейным колебательным модам (ДНКМ), обнаруженным ранее для двумерной треугольной решетки. Выявлено, что сжимающее напряжение увеличивается с увеличением начальной амплитуды, то есть возбуждение двумерного ДБ приводит к тепловому расширению кристалла. Двумерный ДБ приводит к уменьшению теплоемкости кристалла при увеличении амплитуды начальной амплитуды колебаний атомов ДНКМ. При высоких амплитудах колебательная энергия может достигать значений в диапазоне 0,6-1,1 эВ на атом. Все изученные ДБ характеризуются жестким типом нелинейности, то есть увеличением частоты с ростом амплитуды колебаний.

Ключевые слова: делокализованная нелинейная колебательная мода, двумерные дискретные бризеры, нелинейная динамика, молекулярно-динамическое моделирование, теплоемкость, ГЦК металл.

Благодарности: Работа Бачуриной О.В. была поддержана грантом Российского научного фонда № 24-11-00139. Работа Мурзаева Р.Т. выполнена при поддержке Государственного задания 124022900108-3.

Для цитирования: Бачурина О.В., Мурзаев Р.Т., Бачурин Д.В., Двумерные дискретные бризеры и их влияние на макроскопические свойства монокристалла алюминия // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2025. Т. 22, № 1. С. 77-84. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2025.01.007.

Original article

TWO-DIMENSIONAL BREATHERS AND THEIR INFLUENCE ON MACROSCOPIC PROPERTIES OF ALUMINUM MONOCRYSTAL**Olga V. Bachurina^{1,2†}, Ramil T. Murzaev³, Dmitry V. Bachurin³**¹Ufa State Petroleum Technological University, Kosmonavtov St. 1, 450062, Ufa, Russia²Institute of Molecule and Crystal Physics, Ufa Federal Research Centre of RAS, Oktyabrya Pr., 71, Ufa, 450054, Russia³Institute for Metals Superplasticity Problems, Russian Academy of Sciences, Khalturin St. 39, 450001, Ufa, Russia[†]obachurina@yahoo.com, <https://orcid.org/0000-0002-3702-2532>³murzaevrt@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-2691-7031>³dvbachurin@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-8995-211X>

Abstract. The interest in discrete breathers (DB), i.e. time-periodic and spatially localized vibrational modes in a defect-free nonlinear lattice, is related to their ability to localize vibrational energy of the order of several eV per atom. In this paper, the molecular dynamics method is used for the first time to study the effect of a two-dimensional DB on the macroscopic properties (heat capacity and thermal expansion) of a defect-free fcc aluminum single crystal. The standard embedded atom method interatomic potential was applied. All calculations were carried out at zero absolute temperature. The DBs were excited by displacing the atoms from their equilibrium lattice sites corresponding to three delocalized nonlinear vibrational modes (DNVMs) previously discovered for a two-dimensional triangular lattice. It was found that the compressive stress increases with increasing initial amplitude, i.e., excitation of a two-dimensional DB leads to thermal expansion of the crystal. The two-dimensional DB results in a decrease in heat capacity of a crystal with increasing in the initial amplitude of oscillations of the DNVM atoms. At high amplitudes, the vibrational energy can reach values in the range of 0.6-1.1 eV per atom. All studied DBs are characterized by a hard type of nonlinearity, i.e. an increase in frequency with increasing vibration amplitude.

Keywords: delocalized nonlinear vibrational mode, two-dimensional discrete breathers, nonlinear dynamics, molecular dynamics simulation, heat capacity, FCC metal.

Acknowledgements: The work of Bachurina O.V. was supported by the grant of the Russian Science Foundation № 24-11-00139. The work of Murzaev R.T. was supported by the State Assignment 124022900108 - 3.

For citation: Bachurina O.V., Murzaev R.T., Bachurin D.V., (2025). Two-dimensional breathers and their influence on macroscopic properties of aluminum monocrystal. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 22(1), 77-84 (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2025.01.007.

Введение

В последние десятилетия наблюдается значительный интерес к физическим и технологическим процессам, в которых материалы подвергаются воздействию высокоэнергетических частиц [1]. В результате чего происходят значительные смещения атомов из равновесных решеточных положений, что приводит к тепловому расширению кристалла и изменению его макроскопических свойств, таких как теплоемкость, теплопроводность, упругие постоянные и др. В этом случае, в полной мере начинает проявляться нелинейный характер межатомных взаимодействий.

В настоящее время в нелинейной физике активно изучаются делокализованные нелинейные колебательные моды (ДНКМ) большой амплитуды в различных кристаллах. ДНКМ являются точными решениями нелинейных уравнений движения атомов, которые полностью определяются симметрией кристаллической решетки [2].

Нелинейные колебания кристаллической решетки можно разделить на делокализованные

и пространственно-локализованные. В первом случае, группа атомов колеблется с амплитудами, значительно превышающими амплитуды остальных атомов решетки, и обладает трансляционной симметрией в заданных координатных направлениях; во втором случае, колебания атомов с большими амплитудами локализованы в пространстве и не обладают трансляционной симметрией.

Периодическая во времени и пространственно-локализованная колебательная мода в бездефектной нелинейной решетке получила название дискретный бризер (ДБ). Для того, чтобы ДБ не излучал свою энергию в кристаллическую решетку, его частота должна лежать вне фононного спектра кристалла. ДБ может проявлять нелинейность жесткого или мягкого типа, при которых частота моды соответственно увеличивается или уменьшается с увеличением амплитуды. Фононные спектры кристаллов могут быть как бесщелевыми, так и обладать щелью. Например, чистые металлы всегда имеют бесщелевой фононный спектр, и, следовательно, в них могут реализоваться только ДБ с жестким типом нелинейности с частотами выше фононного спектра. В случае упорядо-

ченных сплавов спектр может иметь щель, и в таких кристаллах могут быть возбуждены ДБ как с мягким, так и с жестким типом нелинейности и иметь частоты, лежащие как в щели, так и выше фонового спектра кристалла. Таким образом, главными условиями существования ДБ являются дискретность среды, которая обеспечивает наличие верхней границы спектра, и нелинейность, вызывающая зависимость частоты колебаний от амплитуды и, тем самым, возможность выхода частоты из фонового спектра.

Одним из механизмов возбуждения ДБ в кристаллах является модуляционная неустойчивость ДНКМ, приводящая к пространственной локализации энергии в виде ДБ большой амплитуды [3, 4]. Интенсивное развитие методов молекулярной динамики и межатомных потенциалов позволило изучить свойства нульмерных и одномерных ДБ в материалах с различной кристаллической решеткой [5-15]. Свойства двумерных ДБ, то есть локализованных в одном пространственном измерении и делокализованных в двух других, были изучены в ГЦК [16, 17] и ГПУ решетках [18].

Целью настоящей работы является исследование влияния двумерных ДБ на макроскопические свойства (теплоемкость и тепловое расширение) трехмерного ГЦК-кристалла алюминия с помощью молекулярно-динамического моделирования. Для возбуждения двумерных ДБ используются однокомпонентные ДНКМ, то есть характеризующиеся только одним параметром (амплитудой колебаний), в отличие от многокомпонентных ДНКМ (с двумя или тремя разными амплитудами колебаний в пределах одной моды), исследованных ранее в работе [19].

ДНКМ и методика компьютерного моделирования

Авторы [20, 21] с помощью теоретико-группового подхода определили восемь однокомпонентных ДНКМ в двумерной треугольной решетке. Согласно проведенным молекулярно-динамическим исследованиям [16], только три из этих восьми однокомпонентных ДНКМ для ГЦК алюминия оказались стабильными, то есть способными поддерживать периодические колебания в течение времени порядка нескольких пикосекунд, а также накапливать и сохранять свою колебательную энергию. Поскольку плотноупакованная плоскость (111) в ГЦК-кристалле в точности представляет собой двумерную треугольную решетку, то эти однокомпонентные ДНКМ можно использовать в качестве начальных схем смещений для возбуждения двумерных ДБ в ГЦК-решетке.

На рис. 1 изображены три стабильные однокомпонентные ДНКМ 2, 5 и 7. Во избежание путаницы, в настоящей работе сохранена использованная ранее нумерация мод [21]. Черные стрелки на рис. 1 указывают смещения атомов из равновесных узлов решетки. Длина всех векторов смещения в начальный момент времени одинакова для всех атомов ДНКМ и равна A . Следует отметить, что согласно работе [21] ДНКМ 2 и 5 являются симметричными, так как максимальные положительные и отрицательные смещения атомов от равновесных решеточных положений равны по абсолютной величине, а ДНКМ 7 – асимметричной, поскольку у нее соответствующие положительные и отрицательные смещения не равны.

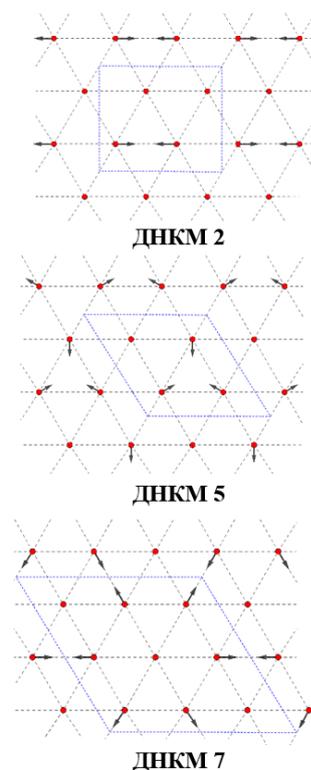


Рис. 1. Стабильные ДНКМ в ГЦК-решетке. Красными точками обозначены атомы алюминия, а черными стрелками показаны атомные смещения из положений равновесия.

Fig. 1. Stable DNVMs in the fcc lattice. Red dots indicate aluminum atoms and black arrows show atomic displacements from equilibrium sites

Пакет программ LAMMPS [22] использовался для молекулярно-динамического моделирования. Метод молекулярной динамики очень эффективен при изучении ДБ. Поскольку последние локализованы в пространстве, то нет необходимости использования больших расчетных ячеек. Межатомные взаимодействия описывались с помощью потенциала для ГЦК

алюминия [23] на основе метода погруженного атома, взятого из библиотеки LAMMPS.

Одной из основных трудностей, возникающих при исследовании, является поиск начальных условий, при которых возможно успешное возбуждение ДБ. Поэтому амплитуды начальных смещений атомов ДНКМ (указаны черными стрелками на рис. 1) из равновесных узлов решетки варьируются в широком диапазоне от 0,05 до 0,75 Å. Остальные атомы в начальный момент времени имеют нулевые начальные смещения. Шаг по времени выбран равным 1 фс, а время моделирования 20 пс, что оказалось достаточным для такого типа расчетов. Периодические граничные условия используются вдоль трех ортогональных направлений расчетной ячейки.

Для исследования были выбраны расчетные ячейки размером $125,1 \times 78,8 \times 76,6$ Å для ДНКМ 2 и 5 (23232 атома) и $119,4 \times 59,1 \times 76,6$ Å для ДНКМ 7 (33264 атома). Параметр кристаллической решетки $a_0 = 4.05$ Å при $T = 0$ К. Для выбранного потенциала межатомного взаимодействия, верхняя граница фононного спектра алюминия равна 10 ТГц [16].

Результаты и обсуждение

ДНКМ 2, 5 и 7 являются стабильными, поскольку способны поддерживать периодические во времени колебания [16]. Все атомные колебания двумерных ДНКМ остаются локализованными в одной атомной плоскости трехмерного кристалла, где они первоначально возбуждались, а амплитуда атомных колебаний экспоненциально убывает по мере удаления от этой плоскости. Поэтому такие ДНКМ можно назвать двумерными ДБ. В то время как остальные возбужденные в алюминии ДНКМ 1, 3, 4, 6 и 8 оказались нестабильными, и после нескольких периодов колебаний рассеивали свою колебательную энергию на соседних атомах в виде малоамплитудных волн, что привело к быстрому разрушению структуры этих мод.

На рис. 2а представлены зависимости времени жизни и частоты для трех стабильных ДБ, возбужденных на основе однокомпонентных ДНКМ 2, 5 и 7 от начальной амплитуды. В области малых начальных амплитуд $A = 0,05-0,15$ Å для всех ДНКМ времена жизни малы и не превышают 2 пс. Интересно отметить, что максимальные времена жизни достигаются для ДБ, возбужденных на основе симметричных ДНКМ 2 и 5, и составляют 22 и 17 пс при начальных амплитудах 0,20 и 0,25 Å соответственно (см. рис. 2а). Для ассиметричной ДНКМ 7 максимальное время жизни значительно меньше и составляет 7 пс при начальной амплитуде 0,5 Å.

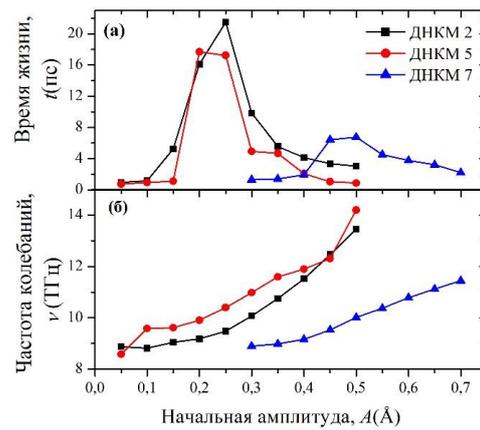


Рис. 2. Зависимость а) времени жизни и б) частоты колебаний атомов двумерного ДБ от начальной амплитуды.

Fig. 2. Dependence of a) the lifetime and b) vibrational frequency of atoms of a two-dimensional DB.

На рис. 2 б видно, что все исследованные двумерные ДБ демонстрируют жесткий тип нелинейности, то есть рост частоты колебаний с ростом амплитуды. Отметим, что при малых амплитудах наклон зависимости частоты от начальной амплитуды отличается от такового при более высоких амплитудах. Это связано с тем, что при больших смещениях атомов от равновесных узлов решетки ядро межатомного потенциала вносит больший вклад в динамику системы, чем его мягкий хвост. Атомы стабильных ДБ не взаимодействуют с фононами решетки, так как частота колебаний ДБ находится выше верхнего края фононного спектра кристалла.

Для того, чтобы оценить вклад двумерного ДБ в теплоемкость кристалла, необходимо найти отношение усредненных значений полной энергии системы \bar{H} и кинетической энергии \bar{K} :

$$C = \frac{\bar{H}}{\bar{K}} = \frac{\bar{P} + \bar{K}}{\bar{K}} = 1 + \frac{\bar{P}}{\bar{K}} \quad (1)$$

В гармонических системах наблюдается равенство потенциальной \bar{P} и кинетической \bar{K} энергии, что приводит к тому, что $C = 2$. Однако, в нелинейных системах $\bar{P} \neq \bar{K}$, и тогда $C \neq 2$. Таким образом, отклонение от отношения $C = 2$ является мерой нелинейности, которую вносит в систему ДБ, и связано с теплоемкостью кристалла. Иными словами, чем больше это отклонение, тем меньше теплоемкость.

Зависимость отношения C от начальной амплитуды, рассчитанное для трех двумерных ДБ, возбужденных на основе ДНКМ 2, 5 и 7, представлена на рис. 3. Видно, что нелинейность колебательной моды сравнительно мала при низких значениях амплитуд. Это связано с тем, что частота колебаний атомов в этом ин-

тервале амплитуд находится ниже верхней границы фононного спектра. При увеличении амплитудных колебаний двумерного ДБ, отношение C для всех ДБ начинает уменьшаться. Возможность сохранять энергию наиболее проявляется у симметричной ДНКМ 5, в отличие от ДНКМ 2. Ассиметричная ДНКМ 7, которая возбуждается в диапазоне начальных амплитуд 0,35-0,75 Å, обладает приблизительно одинаковыми значениями отношения C с симметричной ДНКМ 2.

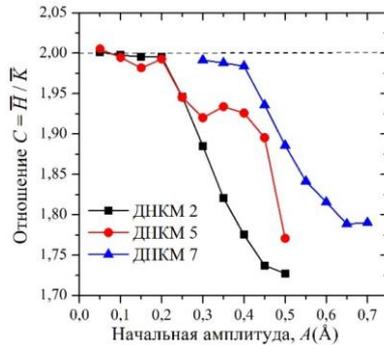


Рис. 3. Отношение C , характеризующее теплоёмкость и нелинейность системы, как функция начальной амплитуды.

Fig. 3. The ratio C characterizing the heat capacity and non-linearity of the system as a function of the initial amplitude.

На рис. 4 показана зависимость компонент напряжений σ_{xx} , σ_{yy} и σ_{zz} , возникающих в расчетной ячейке при возбуждении двумерных ДБ, от начальной амплитуды. Отметим, что для каждой ДНКМ значения двух компонент напряжений будут приблизительно равны, согласно схемам амплитудных смещений (см. рис. 1). То есть, для ДНКМ 5 и 7 имеет место соотношение $\sigma_{xx} \approx \sigma_{yy}$, а для ДНКМ 2 выполняется следующее $\sigma_{yy} \approx \sigma_{zz}$. Кроме того, значения напряжений σ_{xx} для симметричных ДНКМ 2 и 5 приблизительно одинаковы и значительно отличаются от ассиметричной ДНКМ 7. Таким образом, как хорошо видно из рис. 4, с увеличением начальной амплитуды атомных колебаний происходит рост сжимающих напряжений в кристалле, что соответствует тому, что возбуждение двумерного ДБ приводит к тепловому расширению кристалла. Причём возникающие в кристалле напряжения приблизительно равны для симметричных и несимметричных ДНКМ.

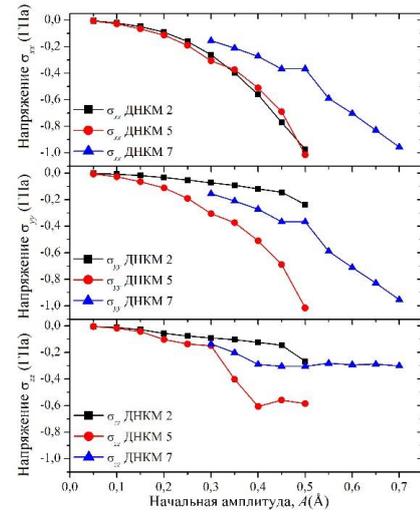


Рис. 4. Зависимость компонент напряжений σ_{xx} , σ_{yy} , σ_{zz} , возникающих при возбуждении двумерного ДБ от начальной амплитуды.

Fig. 4. Dependence of the stress components σ_{xx} , σ_{yy} , σ_{zz} arising in the lattice upon excitation of a two-dimensional DB on the initial amplitude.

На рис. 5 представлена зависимость кинетической энергии, приходящейся на один колеблющийся атом ДБ, от начальной амплитуды. Как видно, кинетическая энергия увеличивается с ростом амплитуды. При малых начальных амплитудах $A \leq 0,2$ Å, различия между зависимостями $K(A)$ для ДБ, возбуждённых на основе ДНКМ 2 и 5, очень малы, и точки практически перекрывают друг друга. При более высоких амплитудах $A \geq 0,2$ Å, поведение кривых заметно различается. В частности, для ДБ, возбуждённых на основе ДНКМ 2 и 5, наблюдается насыщение колебательной энергии от начальной амплитуды. В то же время, этого не происходит для ассиметричной ДНКМ 7, у которой энергия продолжает линейно возрастать с ростом амплитуды. При высоких начальных амплитудах, при которых времена жизни двумерных ДБ малы (см. рис. 2а), накопленная колебательная энергия может достигать значений 1,1 эВ для ассиметричной ДНКМ 7 и 0,62 эВ для симметричной ДНКМ 5. Таким образом, ДБ, возбуждённый на основе ассиметричной ДНКМ, может аккумулировать больше колебательной энергии, чем ДБ, для возбуждения которого используются симметричные ДНКМ, что, очевидно, напрямую связано с начальной амплитудой колебаний.

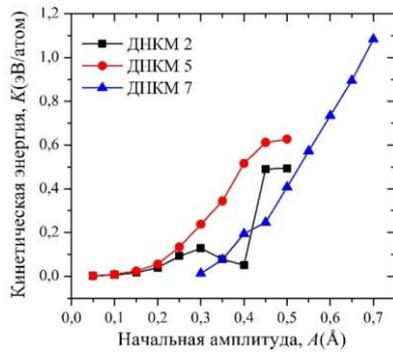


Рис. 5. Зависимость кинетической энергии на атом от начальной амплитуды атомных смещений.

Fig. 5. Dependence of the kinetic energy per atom on the initial amplitude of atomic displacement.

Выводы

Впервые исследовано влияние двумерных ДБ, локализованных вдоль одного направления и делокализованных вдоль двух других пространственных направлений, на макроскопические свойства трехмерного монокристалла алюминия с помощью молекулярно-динамического моделирования. Основные выводы могут быть сформулированы следующим образом.

- Время жизни двумерного ДБ существенно зависит как от симметрии ДНКМ, используемой для его возбуждения, так и от начальной амплитуды колебаний. Максимальные времена жизни достигают 22 пс для ассиметричной ДНКМ 7.

- Исследованные двумерные ДБ демонстрируют жесткий тип нелинейности, характеризующийся увеличением частоты с ростом начальной амплитуды колебаний.

- Наличие двумерного ДБ влияет на теплоемкость кристалла, которая уменьшается при увеличении начальной амплитуды атомных колебаний.

- Возбуждение двумерного ДБ приводит к тепловому расширению кристалла.

- Двумерные ДБ, которые возбуждаются при помощи ассиметричных ДНКМ, могут аккумулировать больше колебательной энергии, в отличие от ДБ, возбужденных на основе симметричных ДНКМ. При высоких амплитудах накопленная колебательная энергия может достигать значений 0,6-1,1 эВ на атом.

Список литературы

1. Fundamentals of radiation materials science: metals and alloys. / Was G. S.: Springer, 2007.
2. Chechin G. M., Sakhnenko V. P. Interactions between normal modes in nonlinear dynamical

systems with discrete symmetry. Exact results // *Physica D: Nonlinear Phenomena*. – 1998. – Т. 117, № 1-4. – С. 43-76.

3. Kavitha L., Muniyappan A., Prabhu A., Zdravković S., Jayanthi S., Gopi D. Nano breathers and molecular dynamics simulations in hydrogen-bonded chains // *Journal of Biological Physics*. – 2013. – Т. 39, № 1. – С. 15-35.

4. Kivshar Y. S., Peyrard M. Modulational instabilities in discrete lattices // *Physical Review A*. – 1992. – Т. 46, № 6. – С. 3198.

5. Baimova J. A., Murzaev R. T., Lobzenko I. P., Dmitriev S. V., Zhou K. Discrete breathers in graphane: Effect of temperature // *Journal of Experimental and Theoretical Physics*. – 2016. – Т. 122, № 5. – С. 869-873.

6. Barani E., Lobzenko I. P., Korznikova E. A., Soboleva E. G., Dmitriev S. V., Zhou K., Marjaneh A. M. Transverse discrete breathers in unstrained graphene // *The European Physical Journal B*. – 2017. – Т. 90, № 3. – С. 38.

7. Dmitriev S. V., Korznikova E. A., Baimova Y. A., Velarde M. G. Discrete breathers in crystals // *Physics - Uspekhi* – 2016. № 59. – С. 446–461.

8. Khadeeva L. Z., Dmitriev S. V. Discrete breathers in crystals with NaCl structure // *Physical Review B*. – 2010. – Т. 81, № 21. – С. 214306.

9. Kistanov A. A., Semenov A. S., Dmitriev S. V. Properties of moving discrete breathers in a monoatomic two-dimensional crystal // *Journal of Experimental and Theoretical Physics*. – 2014. – Т. 119. – С. 766-771.

10. Korznikova E. A., Bachurin D. V., Fomin S. Y., Chetverikov A. P., Dmitriev S. V. Instability of vibrational modes in hexagonal lattice // *The European Physical Journal B*. – 2017. – Т. 90, № 2. – С. 23.

11. Liu B., Baimova J. A., Dmitriev S. V., Wang X., Zhu H., Zhou K. Discrete breathers in hydrogenated graphene // *Journal of Physics D: Applied Physics*. – 2013. – Т. 46, № 30. – С. 305302.

12. 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. – Т. 114, № 21.

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

14. Terentyev D. A., Dubinko A. V., Dubinko V. I., Dmitriev S. V., Zhurkin E. E., Sorokin M. I. V. Interaction of discrete breathers with primary

lattice defects in bcc Fe // Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering. – 2015. – Т. 23, № 8. – С. 085007.

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

16. Bachurina O. V., Kudreyko A. A. Two-dimensional discrete breathers in fcc metals // Computational Materials Science. – 2020. – Т. 182. – С. 109737.

17. Бачурина О. В., Мурзаев Р. Т., Дмитриев С. В. Двумерная нелинейная колебательная мода в никеле // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2018. – Т. 15, № 2. – С. 203-207.

18. Bachurina O. V., Murzaev R. T., Kudreyko A. A., Dmitriev S. V., Bachurin D. V. Atomistic study of two-dimensional discrete breathers in hcp titanium // The European Physical Journal B. – 2022. – Т. 95, № 7. – С. 104.

19. Bachurina O. V., Murzaev R. T., Shcherbinin S. A., Kudreyko A. A., Dmitriev S. V., Bachurin D. V. Multi-component delocalized nonlinear vibrational modes in nickel // Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering. – 2023. – Т. 31, № 7. – С. 075009.

20. Chechin G. M., Ryabov D. S., Shcherbinin S. A. Nonlinear vibrational modes in graphene: group-theoretical results // Letters on materials. – 2016. – Т. 6, № 1. – С. 9-15.

21. Semenova M. N., Semenov A. S., Bebikhov Y. V., Ryabov D. S., Chechin G. M., Rakhmatullina Z. G., Korznikova E. A., Dmitriev S. V. Some characteristics of one-dimensional delocalized nonlinear vibrational modes of triangular lattice with Morse interaction // Basic Problems Material Science – 2018. – Т. 15, № 2. – С. 257–264.

22. LAMMPS. <http://lammps.sandia.gov/>. –

23. Jacobsen K. W., Norskov J., K., Puska M., J. Interatomic interactions in the effective-medium theory // Physical Review B. – 1987. – Т. 35, № 14. – С. 7423.

Информация об авторах

О. В. Бачурина – кандидат физико-математических наук, научный сотрудник Института физики молекул и кристаллов Уфимского федерального исследовательского центра РАН, доцент Уфимского государственного нефтяного технического университета

Р.Т. Мурзаев – кандидат физико-математических наук, научный сотрудник, заведующий лабораторией «Нелинейная физика и механика материалов» Института проблем сверхпластичности металлов РАН

Д. В. Бачурин – доктор физико-математических наук, научный сотрудник лаборатории «Нелинейная физика и механика материалов» Института проблем сверхпластичности металлов РАН

References

1. Was, G. S. (2007). Fundamentals of radiation materials science: metals and alloys (Vol. 73): Springer.

2. Chechin, G. M., & Sakhnenko, V. P. (1998). Interactions between normal modes in nonlinear dynamical systems with discrete symmetry. Exact results. Physica D: Nonlinear Phenomena., 117(1-4), 43-76.

3. Kavitha, L., Muniyappan, A., Prabhu, A., Zdravković, S., Jayanthi, S., & Gopi, D. (2013). Nano breathers and molecular dynamics simulations in hydrogen-bonded chains. Journal of Biological Physics, 39(1), 15-35.

4. Kivshar, Y. S., & Peyrard, M. (1992). Modulational instabilities in discrete lattices. Physical Review A, 46(6), 3198.

5. Baimova, J. A., Murzaev, R. T., Lobzenko, I. P., Dmitriev, S. V., & Zhou, K. (2016). Discrete breathers in graphene: Effect of temperature. Journal of Experimental and Theoretical Physics, 122(5), 869-873.

6. Barani, E., Lobzenko, I. P., Korznikova, E. A., Soboleva, E. G., Dmitriev, S. V., Zhou, K., & Marjaneh, A. M. (2017). Transverse discrete breathers in unstrained graphene. The European Physical Journal B, 90(3), 38.

7. Dmitriev, S. V., Korznikova, E. A., Baimova, Y. A., & Velarde, M. G. (2016). Discrete breathers in crystals. Physics - Uspekhi, (59), 446–461.

8. Khadeeva, L. Z., & Dmitriev, S. V. (2010). Discrete breathers in crystals with NaCl structure. Physical Review B, 81(21), 214306.

9. Kistanov, A. A., Semenov, A. S., & Dmitriev, S. V. (2014). Properties of moving discrete breathers in a monoatomic two-dimensional crystal. Journal of Experimental and Theoretical Physics, 119, 766-771.

10. Korznikova, E. A., Bachurin, D. V., Fomin, S. Y., Chetverikov, A. P., & Dmitriev, S. V. (2017). Instability of vibrational modes in hexagonal

- lattice. *The European Physical Journal B*, 90(2), 23.
11. Liu, B., Baimova, J. A., Dmitriev, S. V., Wang, X., Zhu, H., & Zhou, K. (2013). Discrete breathers in hydrogenated graphene. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 46(30), 305302.
 12. 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).
 13. Murzaev, R. T., Bachurin, D. V., Korznikova, E. A., & Dmitriev, S. V. (2017). Localized vibrational modes in diamond. *Physics Letters A*, 381(11), 1003-1008.
 14. Terentyev, D. A., Dubinko, A. V., Dubinko, V. I., Dmitriev, S. V., Zhurkin, E. E., & Sorokin, M. I. V. (2015). Interaction of discrete breathers with primary lattice defects in bcc Fe. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 23(8), 085007.
 15. Murzaev, R. T., Babicheva, R. I., Zhou, K., Korznikova, E. A., Fomin, S. Y., Dubinko, V. I., & Dmitriev, S. V. (2016). Discrete breathers in alpha-uranium. *The European Physical Journal B*, 89, 1-6.
 16. Bachurina, O. V., & Kudreyko, A. A. (2020). Two-dimensional discrete breathers in fcc metals. *Computational Materials Science*, 182, 109737.
 17. Бачурина, О. В., Мурзаев, Р. Т., & Дмитриев, С. В. (2018). Двумерная нелинейная колебательная мода в никеле. *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*, 15(2), 203-207.
 18. Bachurina, O. V., Murzaev, R. T., Kudreyko, A. A., Dmitriev, S. V., & Bachurin, D. V. (2022). Atomistic study of two-dimensional discrete breathers in hcp titanium. *The European Physical Journal B*, 95(7), 104.
 19. Bachurina, O. V., Murzaev, R. T., Shcherbinin, S. A., Kudreyko, A. A., Dmitriev, S. V., & Bachurin, D. V. (2023). Multi-component delocalized nonlinear vibrational modes in nickel. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 31(7), 075009.
 20. Chechin, G. M., Ryabov, D. S., & Shcherbinin, S. A. (2016). Nonlinear vibrational modes in graphene: group-theoretical results. *Letters on materials*, 6(1), 9-15.
 21. Semenova, M. N., Semenov, A. S., Bebikhov, Y. V., Ryabov, D. S., Chechin, G. M., Rakhmatullina, Z. G., Korznikova, E. A., & Dmitriev, S. V. (2018). Some characteristics of one-dimensional delocalized nonlinear vibrational modes of triangular lattice with Morse interaction. *Basic Problems Material Science*, 15(2), 257–264.
 22. LAMMPS. <http://lammps.sandia.gov/>.
 23. Jacobsen, K. W., Norskov, J., K., & Puska, M., J. (1987). Interatomic interactions in the effective-medium theory. *Physical Review B*, 35(14), 7423.

Information about the authors

O. V. Bachurina - Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Researcher at the Institute of Molecule and Crystal Physics Ufa Federal Research Centre of the RAS, Associate Professor at the Ufa State Petroleum Technological University.

R.T. Murzaev - Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Researcher, Head of Laboratory "Nonlinear Physics and Mechanics of Materials", Institute for Metals Superplasticity Problems Russian Academy of Sciences.

D. V. Bachurin – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Researcher at the Laboratory of "Nonlinear Physics and Mechanics of Materials", Institute for Metals Superplasticity Problems Russian Academy of Sciences..

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

Статья поступила в редакцию 17.10.2024; одобрена после рецензирования 17.01.2025; принята к публикации 03.02.2025.

The article was received by the editorial board on 17 Oct. 2024; approved after reviewing 17 Jan. 2025; accepted for publication 03 Feb. 2025.