

Научная статья

1.3.8. Физика конденсированного состояния (физико-математические науки)

УДК 539.22

doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2024.04.004

## **ВЛИЯНИЕ ЛИНЕЙНЫХ ДИСКРЕТНЫХ БРИЗЕРОВ НА МАКРОСКОПИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ГЦК КРИСТАЛЛОВ**

**Ольга Владимировна Бачурина**

Уфимский государственный нефтяной технический университет, ул. Космонавтов, 1, 450062, Уфа, Россия  
Институт физики молекул и кристаллов, Уфимский федеральный исследовательский центр РАН, пр. Октября, 71, 450054, Уфа, Россия  
obachurina@yahoo.com<sup>†</sup>, <https://orcid.org/0000-0002-3702-2532>

**Аннотация.** Методом молекулярной динамики исследовано влияние одномерной нелинейной колебательной моды на макроскопические свойства бездефектных ГЦК кристаллов (Al, Cu и Ni). Для описания взаимодействия между атомами использовались стандартные потенциалы на основе метода погруженного атома. В трехмерной расчетной ячейке нелинейная колебательная мода возбуждается при перемещении четных и нечетных атомов в противоположные стороны атомной цепочки вдоль плотноупакованного кристаллографического направления  $[10\bar{1}]$ . Амплитуды начальных смещений атомов изменялись в пределах 0,05–0,5 Å. Амплитуды атомов экспоненциально уменьшаются с увеличением расстояния от возбужденной атомной цепочки. Полученные колебательные моды в Al, Cu и Ni имеют жесткий тип нелинейности, то есть их частота увеличивается с увеличением амплитуды. Мода способна накапливать колебательную энергию в диапазоне от 0,9 до 3,4 эВ на один атом. Теплоемкость или возможность сохранять энергию системы уменьшается для ГЦК металлов с увеличением амплитуды. Возбуждение одномерной нелинейной колебательной моды приводит к возникновению сжимающих напряжений, что соответствует тепловому расширению кристалла. Благодаря высокой степени пространственной локализации вдоль одного направления, рассмотренную одномерную колебательную моду можно считать линейным дискретным бризером. Расчеты, проведенные для монокристалла Ni с двумя различными расчетными ячейками, показали, что изменение размеров не влияет на характеристики линейного дискретного бризера.

**Ключевые слова:** локализованная нелинейная колебательная мода, нелинейная динамика, молекулярно-динамическое моделирование, теплоемкость, ГЦК кристаллы.

**Благодарности:** Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта РФФ № 24-11-00139.

---

**Для цитирования:** Бачурина О.В. Влияние линейных дискретных бризеров на макроскопические свойства ГЦК кристаллов // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2024. Т. 21, № 4. С. 440–447. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2024.04.004.

---

Original article

## **INFLUENCE OF LINEAR DISCRETE BREATHERS ON MACROSCOPIC PROPERTIES OF FCC CRYSTALS**

**Olga V. Bachurina**

Ufa State Petroleum Technological University, Kosmonavtov St., 1, Ufa, 450062, Russia  
Institute of Molecule and Crystal Physics, Ufa Federal Research Centre of RAS, Oktyabrya Pr., 71, Ufa, 450054, Russia  
obachurina@yahoo.com<sup>†</sup>, <https://orcid.org/0000-0002-3702-2532>

**Abstract.** The effect of a one-dimensional nonlinear vibrational mode on the macroscopic properties of defect-free fcc crystals (Al, Cu, and Ni) was studied using the molecular dynamics method. Standard potentials based on the embedded atom method were used to describe the interaction between atoms. In a three-dimensional computa-

tional cell, a nonlinear vibrational mode is excited by moving even and odd atoms in opposite directions of the atomic chain along the close-packed crystallographic direction  $[10\bar{1}]$ . The amplitudes of the initial atomic displacements varied within 0.05-0.5 Å. The amplitudes of atoms decrease exponentially with increasing distance from the excited atomic chain. The obtained vibrational modes in Al, Cu, and Ni have a hard type of nonlinearity, i.e. their frequency increases with increasing amplitude. The mode is capable of accumulating vibrational energy in the range from 0.9 to 3.4 eV per atom. The heat capacity or the ability to store energy of the system decreases for fcc metals with increasing amplitude. Excitation of a one-dimensional nonlinear vibrational mode leads to the appearance of compressive stresses, which corresponds to the thermal expansion of the crystal. Due to the high degree of spatial localization along one direction, the considered one-dimensional vibrational mode can be considered as a linear discrete breather. Calculations performed for a Ni single crystal with two different computational cells showed that a change in size does not affect the characteristics of a linear discrete breather.

**Keywords:** localized nonlinear vibrational mode, nonlinear dynamics, molecular dynamics simulations, heat capacity, fcc crystals.

**Acknowledgements:** The study was carried out with the financial support of the Russian Science Foundation grant No. 24-11-00139.

**For citation:** Bachurina, O. V. & Murzaev, R. T. (2024). Influence of linear discrete breathers on macroscopic properties of fcc crystals. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 21(4), 440–447. (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2024.04.004.

## Введение

Пространственно-локализованные моды – периодические во времени колебания атомов в бездефектной кристаллической решетке получили название дискретных бризеров (ДБ). Возможность возбуждения таких локализованных колебательных мод в кристаллах впервые было установлено Долговым и Сиверсом в 1980-х годах [1, 2]. Дальнейшее изучение [3] привело к пониманию того, что дискретность и нелинейность среды являются двумя необходимыми условиями для их возбуждения.

Условно, нелинейные колебательные моды кристаллической решетки можно разделить на два типа:

а) локализованные, которые ограничены в определенной области кристалла, а за ее пределами колебания атомов экспоненциально уменьшаются с увеличением расстояния;

б) делокализованные, которые не ограничиваются определённой областью кристалла и распространяются вдоль одного, двух, или трех направлений.

Одним из механизмов возбуждения ДБ в кристаллах является спонтанное возникновение в результате модуляционной неустойчивости фононной коротковолновой колебательной моды [4], амплитуда которой не слишком мала (порядка 9-15 % от межатомного расстояния). Получение таких фононных коротковолновых или делокализованных нелинейных колебательных мод (ДНКМ) в динамических системах с дискретной симметрией было впервые пред-

ложено в 1998 году Г.М. Чечиным и В.П. Сахненко [5]. Предметом их исследования являлась «нормальная мода» или ДНКМ, которая представляет собой точное решение нелинейных динамических уравнений [4]. Структура мод определяется теоретико-групповыми методами. При выводах уравнений движения атомов учитывается только симметрия решетки, поэтому существование ДНКМ не зависит от типа межатомного потенциала, используемого при моделировании.

ДБ были изучены в чистых металлах и упорядоченных сплавах с различной кристаллической решеткой [6-10]. Все исследованные к настоящему времени ДБ в чистых металлах имеют одинаковую структуру. А именно, ДБ локализованы в плотноупакованном ряду примерно из десятка атомов. Амплитуды колебаний атомов экспоненциально уменьшаются по мере отклонения от ядра ДБ, что подчеркивает его пространственную локализацию. Частота ДБ превышает верхний край фононного спектра и увеличивается с увеличением амплитуды колебаний.

Интерес к исследованию ДБ в физике твердого тела, обусловлен их способностью локализовать колебательную энергию, которая может достигать значений в несколько эВ на атом. ДБ могут быть подвижными и перемещаться на значительные расстояния вдоль плотноупакованного направления, а энергия их колебательного движения может расходоваться, в частности, на изменение дефектной структуры кристалла. Теоретически предсказанные ДБ впо-

следствии были экспериментально обнаружены в нелинейных дискретных системах различной физической природы [3], а также в кристаллах [11-13].

При изучении нелинейных явлений в кристаллах большое значение имеет их пространственная размерность. Существуют как одномерные кристаллы, так и двумерные, однако подавляющее большинство кристаллов, используемых на практике, трехмерны. В одномерных кристаллах, локализованные в пространстве ДБ естественно считать нульмерными объектами. В двумерных кристаллах возможны как нульмерные ДБ, то есть пространственно-локализованные вдоль обоих координатных направлений, так и одномерные ДБ, делокализованные вдоль одного направления и локализованные вдоль другого. В трехмерных кристаллах возможно существование как нульмерных, одномерных так и двумерных ДБ. В последнем случае возбуждение атомов происходит вдоль некоторой плоскости, причем, с удалением от этой плоскости, амплитуда их колебаний экспоненциально уменьшается [7, 14-17]. В трехмерных кристаллических решетках (в чистых металлах и упорядоченных сплавах) свойства нульмерных ДБ изучены в работах [6-9]. Возможность существования одномерных ДБ, возбужденных во всем плотноупакованном атомном ряду трехмерного кристалла исследовалась в [9], а двумерных ДБ в работе [18].

Целью настоящей работы является исследование влияния одномерной ДНКМ на макроскопические свойства (теплоемкость и тепловое расширение) ГЦК кристаллов (Al, Cu и Ni)

с помощью молекулярно-динамического моделирования.

### Методика моделирования

Молекулярно-динамическое моделирование выполнялось с использованием пакета программ LAMMPS. Межатомные взаимодействия в Al, Cu и Ni моделируются с помощью потенциалов, основанных на методе погруженного атома [20, 21], который широко применяется для исследования различных эффектов в кристаллической решетке [6, 7, 9, 18, 21, 22].

Чтобы изучить влияние размера расчетной ячейки на результаты моделирования, рассматривались две разных ячейки: монокристаллы с большей расчетной ячейкой обозначались как Ni, Cu, Al, а с меньшей как Ni\*, Cu\*, Al\*.

Данные, касающиеся размеров расчетной ячейки, числа атомов, постоянных решетки и верхнего края фононного спектра для выбранных ГЦК-металлов, представлены в таблице 1. Шаг по времени моделирования был выбран равным 1 фс. Периодические граничные условия использовались вдоль всех трех ортогональных направлений расчетной ячейки. Все расчеты проводились при нулевой начальной температуре  $T = 0$  К с использованием термодинамического ансамбля NVE (постоянное число атомов, объем и энергия). Поскольку тепловые флуктуации атомов существенно влияют на свойства ДБ, была выбрана нулевая температура. Продолжительность моделирования ограничивалась 20000 шагами по времени (соответствует 20 пс), что оказалось достаточным для наблюдения изучаемых явлений.

**Таблица 1.** Размеры расчетной ячейки вдоль осей  $x$ ,  $y$  и  $z$ , число атомов ( $N$ ), постоянная решетки  $a_0$  при  $T = 0$  К и верхний край фононного спектра ( $\nu$ ) для Al, Cu и Ni

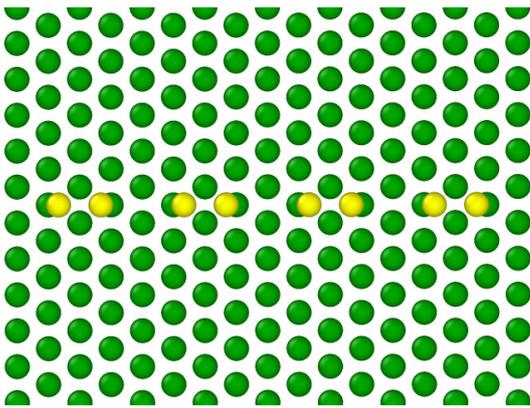
**Table 1.** The dimensions of the computational cell along the  $x$ ,  $y$  and  $z$  axes, the number of atoms ( $N$ ), the lattice constant  $a_0$  at  $T = 0$  K and the upper edge of the phonon spectrum ( $\nu$ ) for Al, Cu and Ni

Металл	Расчетная ячейка (Å)	$N$	$a_0$ (Å)	$\nu$ (ТГц)
Ni	138,0×109,6×67,1	92928	3,54	10,3
Cu	141,7×112,5×68,4	92928	3,62	7,9
Al	157,6×125,1×76,1	92928	4,05	10,0
Ni*	69,0×54,8×67,1	23232	3,54	10,3
Cu*	79,4×63,0×77,2	23232	3,62	7,9
Al*	79,4×63,0×77,2	23232	4,05	10,0

Одномерная ДНКМ в трехмерной расчетной ячейке возбуждалась в плотноупакованном атомном ряду вдоль кристаллографического

направления  $[10\bar{1}]$  в пределах плоскости (111). Нечетные и четные атомы ряда смещались навстречу друг другу из своих решеточных поло-

жений в ГЦК-решетке, как показано на рисунке 1. Амплитуды начальных смещений атомов из равновесных положений изменяются в пределах 0,05-0,50 Å. Эти значения выбраны потому, что, как показывают результаты моделирования, время «жизни» колебательной моды вне указанного интервала амплитуд ограничено всего несколькими колебаниями. Остальные атомы в расчетной ячейке имеют нулевые начальные смещения, и все атомы имеют нулевые начальные скорости.



**Рис.1.** Делокализованная нелинейная колебательная мода в ГЦК-решетке вдоль плотноупакованного кристаллографического направления  $[10\bar{1}]$ . Атомы, смещенные относительно их равновесного решеточного положения, показаны желтым цветом. Остальные атомы в расчетной ячейке отображаются зеленым

**Fig.1.** Delocalized nonlinear vibrational mode in an fcc lattice along the close-packed crystallographic direction  $[10\bar{1}]$ . Atoms displaced from their equilibrium lattice sites are shown in yellow. The other atoms in the computational cell are displayed in green

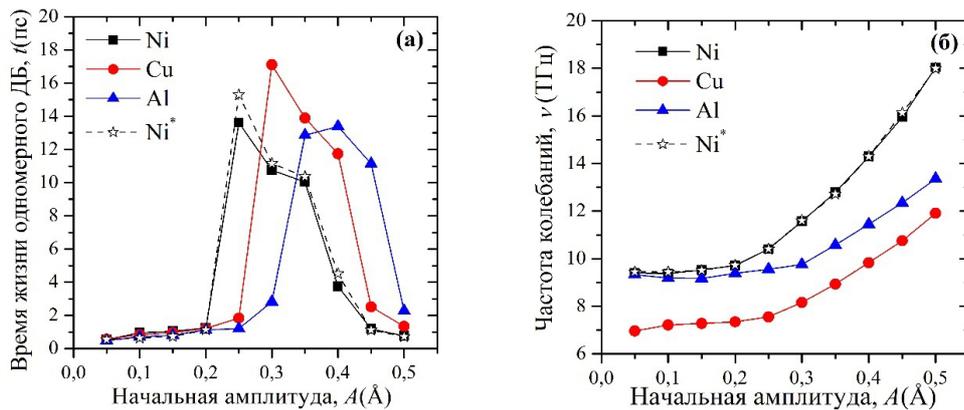
### Результаты и обсуждение

В работе использовался механизм спонтанного возникновения ДБ в результате модуляционной неустойчивости одномерной ДНКМ, показанной на рисунке 1. Для того, чтобы ДБ не излучал свою энергию в кристаллическую решетку, его частота должна превышать верхний край фононного спектра кристалла (табл.1). Это явление возможно, благодаря высокой степени пространственной локализации вдоль плотноупакованного кристаллографического направления  $[10\bar{1}]$ . Поэтому, такую одномерную ДНКМ можно рассматривать как одномерный (линейный) ДБ. В работе [9] были проведены

исследования, которые показали, что максимальное время жизни (количество шагов по времени) исследуемого одномерного ДБ находилось в диапазоне от 15 до 17 пс, что соответствует 140-160 колебаниям. Для сравнения зависимость времени жизни от начальной амплитуды с меньшей расчетной ячейкой Ni\* представлена на рис.2а. Как видно, для монокристалла Ni уменьшение ячейки моделирования практически не влияет на время жизни одномерного ДБ.

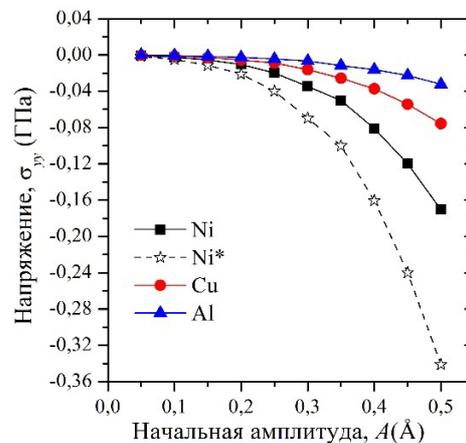
Зависимость частоты колебаний одномерного ДБ как функция начальной амплитуды колебаний, рассчитанная для Ni, Cu, Al, представлена рис.2б. В интервале амплитуд от 0,05 до 0,225 Å наблюдается незначительное увеличение частоты атомных колебаний, с временами жизни ДБ менее 1,5 пс. Это соответствует случаю, когда частота колебаний атомов ДНКМ находится ниже верхней границы фононного спектра. При амплитудах выше 0,25 Å происходит значительный рост частоты, что связано с жесткостью используемых межатомных потенциалов и соответствует жесткому типу нелинейности в металлах. Частоты колебаний, полученные для расчетных ячеек Ni и Ni\*, полностью совпадают. Получить устойчивые, периодические по времени колебания атомов в алюминии и меди с малой расчетной ячейкой Al\* и Cu\* не удалось.

На рисунке 3 показана зависимость компоненты напряжения  $\sigma_{yy}$ , возникающей в расчетной ячейке при возбуждении одномерного ДБ, от начальной амплитуды. При этом, значения остальных компонент напряжений  $\sigma_{xx}$  и  $\sigma_{zz}$  очень малы. Таким образом, возникает только напряжение  $\sigma_{yy}$  за счет локализованных колебаний в цепочке атомов, согласно выбранной геометрии ДНКМ (см. рис.1). Например, напряжения  $\sigma_{yy}$  могут достигать значений 0,16, 0,08 и 0,04 ГПа при начальной амплитуде 0,50 Å для Ni, Cu, Al, соответственно. Сжимающее напряжение  $\sigma_{yy}$  увеличивается с увеличением начальной амплитуды, а это соответствует тому, что возбуждение одномерного ДБ вызывает тепловое расширение кристалла. Увеличение размера расчетной ячейки приводит к уменьшению напряжения  $\sigma_{yy}$  в кристалле, поскольку напряжение обратно пропорционально площади поверхности стенок ячейки. Иначе говоря, большему монокристаллу соответствует большая площадь поверхности стенок, то есть меньшие значения напряжения.



**Рис.2.** Зависимость времени жизни (а) и частоты колебаний атомов (б) от начальной амплитуды, рассчитанная для одномерного ДБ в Al, Cu и Ni

**Fig.2.** Dependence of the lifetime (a) and vibrational frequency of atoms (b) on the initial amplitude, calculated for one-dimensional DB in Al, Cu and Ni



**Рис.3.** Зависимость компоненты напряжения  $\sigma_{yy}$  от начальной амплитуды, рассчитанная для одномерного ДБ в Al, Cu и Ni

**Fig.3.** Dependence of the stress component  $\sigma_{yy}$  on the initial amplitude calculated for one-dimensional DB in Al, Cu and Ni

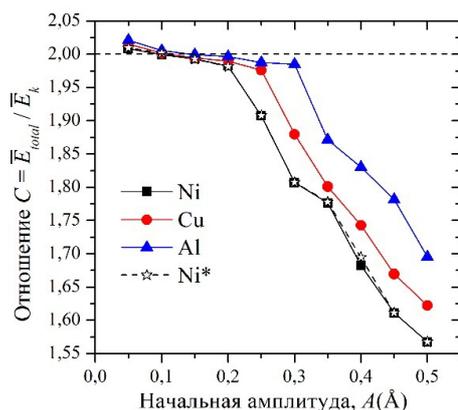
Оценим вклад одномерного ДБ в теплоемкость кристалла путем определения отношения полной энергии системы  $\overline{E_{total}}$  к усредненной кинетической энергии за период колебаний  $\overline{E_k}$  по следующей формуле:

$$C = \frac{\overline{E_{total}}}{\overline{E_k}} = 1 + \frac{E_p}{E_k}. \quad (1)$$

В гармонических системах  $\overline{E_p} = \overline{E_k}$ , где  $\overline{E_p}$  – усредненная потенциальная энергия за период, что соответствует  $C = 2$ . Однако в нелинейных системах  $\overline{E_p} \neq \overline{E_k}$ , что приводит к тому, что  $C \neq 2$ . Поэтому отклонение от равенства  $C = 2$  служит характеристикой нелинейно-

сти колебательной моды, что также связано с теплоемкостью кристалла.

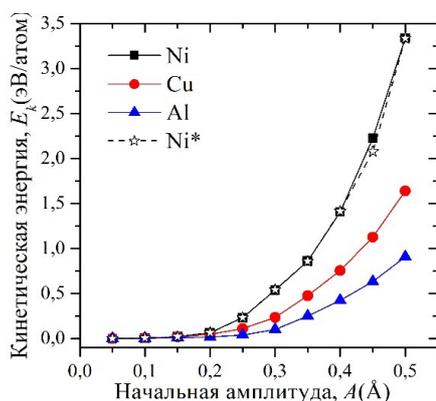
Зависимость отношения  $C$  от начальной амплитуды, рассчитанное для одномерного ДБ для Al, Cu и Ni представлена на рисунке 4. При малых значениях амплитуд нелинейность колебательной моды достаточно мала и составляет менее 1%. Это связано с тем, что в этом интервале амплитуд частота колебаний атомов находится ниже верхней границы фонового спектра. С ростом амплитуды у одномерного ДБ в ГЦК металлах, характеризующегося жестким типом нелинейности, наблюдается уменьшение отношения  $C$ . Как видно на рисунке 4, возможность сохранять энергию системы наиболее проявляется у атомов Al. Кроме того, изменение размеров расчетной ячейки для Ni не влияет на величины параметра нелинейности  $C$ , которые в Ni и Ni\* полностью совпадают.



**Рис.4.** Зависимость отношения  $C$ , характеризующего нелинейность системы, от начальной амплитуды, рассчитанная для одномерного ДБ в Al, Cu и Ni

**Fig.4.** Dependence of the ratio  $C$ , characterizing the nonlinearity of the system, on the initial amplitude, calculated for one-dimensional DB in Al, Cu and Ni

На рисунке 5 показана зависимость кинетической энергии на атом от начальной амплитуды. Как видно, кинетическая энергия растет пропорционально квадрату амплитуды. Одномерные ДБ, обладающие наибольшим временем жизни, имеют установившиеся амплитуды колебаний в диапазоне 0,25-0,4 Å и способны аккумулировать до 0,5-1,4 эВ энергии на атом. При этом максимальные значения кинетической энергии наблюдаются при наибольших амплитудах и равны 3,4, 1,6 и 0,9 эВ на атом для Ni, Cu, Al соответственно. Таким образом, одномерный ДБ, возбужденный в Ni, может аккумулировать больше колебательной энергии по сравнению с Al и Cu. Размер расчетной ячейки не оказал значительного влияния на величину кинетической энергии.



**Рис.5.** Зависимость кинетической энергии на атом от начальной амплитуды смещений, рассчитанная для одномерного ДБ в Al, Cu и Ni

**Fig.5.** Dependence of the kinetic energy per atom on the initial displacement amplitude, calculated for one-dimensional DB in Al, Cu and Ni

## Выводы

Впервые исследовано влияние одномерной колебательной моды на свойства трехмерных бездефектных ГЦК монокристаллов (Ni, Cu, и Al) с использованием молекулярно-динамических методов. Атомы ДНКМ, возбуждаемые вдоль плотноупакованного кристаллографического направления  $[10\bar{1}]$ , во всех рассматриваемых ГЦК-металлах из-за низкой диссипации колебательной энергии колеблются с амплитудами, значительно превышающими амплитуды соседних атомов. Поэтому этот режим ввиду его высокой степени пространственной локализации можно рассматривать как одномерный ДБ.

– Исследованные одномерные ДБ во всех трех ГЦК-металлах (Ni, Cu, и Al) демонстрируют жесткий тип нелинейности, характеризующийся увеличением частоты с ростом начальной амплитуды колебаний.

– Время жизни такого ДБ существенно зависит от начальной амплитуды колебаний. Максимальные времена жизни могут достигать 15-17 пс.

– Возбуждение одномерного ДБ приводит к появлению сжимающего напряжения  $\sigma_{yy}$ , что соответствует тепловому расширению кристалла.

– С ростом амплитуды у одномерного ДБ наблюдается уменьшение соотношения  $C$ , характеризующего нелинейность системы. Эта характеристика проявляется в способности сохранять колебательную энергию и наиболее обнаруживается у атомов Al.

– В исследованном интервале амплитуд, одномерный ДБ может аккумулировать колебательную энергию 0,9-3,4 эВ на атом.

– Изменение размера расчетной ячейки не влияет на результаты моделирования для Ni.

Результаты, полученные в настоящей работе, могут быть полезны для постановки экспериментов, направленных на обнаружение ДБ в кристаллах путем измерения их макроскопических свойств.

## Список литературы

1. Sievers A.J., Takeno S. Intrinsic Localized Modes in Anharmonic Crystals // Physical Review Letters. 1988. V. 61, N 8. P. 970–973.
2. Dolgov A.S. The localization of vibrations in a nonlinear crystal-structure // Physics of the Solid State. 1986 V. 28, N 6. P. 1641–1644.

3. Flach S., Gorbach A. Discrete breathers – advances in theory and applications // *Physics Reports*. 2008. N 467. P. 1–116.
4. Chechin G.M., Sakhnenko V.P. Interactions between normal modes in nonlinear dynamical systems with discrete symmetry. Exact results // *Physica D: Nonlinear Phenomena*. 1998. V. 117, N 1–4. P. 43–76.
5. Сахненко В.П., Чечин Г.М. Кусты мод и нормальные колебания для нелинейных динамических систем с дискретной симметрией // *Доклады Академии наук*. 1994. Т. 338, № 1. С. 42–45.
6. Haas M., Hizhnyakov V., Shelkan A., Klopov M., Sievers A.J. Prediction of high-frequency intrinsic localized modes in Ni and Nb // *Physical Review B*. 2011. V. 84, N 14. 144303.
7. Murzaev R.T., Kistanov A.A., Dubinko V.I., Terentyev D.A., Dmitriev S.V. Moving discrete breathers in bcc metals V, Fe and W // *Computational Materials Science*. 2015. V. 98. P. 88–92.
8. Zakharov P.V., Korznikova E.A., Dmitriev S.V., Ekomasov E.G., Zhou K. Surface discrete breathers in Pt<sub>3</sub>Al intermetallic alloy // *Surface Science*. 2019. V. 679. P. 1–5.
9. Bachurina O.V. Linear discrete breather in fcc metals // *Computational Materials Science*. 2019. V. 160. P. 217–221.
10. Бачурина О.В., Мурзаев Р.Т., Семенов А.С., Корзникова Е.А., Дмитриев С.В. Свойства движущихся дискретных бризеров в бериллии // *Физика твердого тела*. 2018. Т. 60, № 5. С. 978–983.
11. Dmitriev S.V., Korznikova E.A., Vaimova Yu.A., Velarde M.G. Discrete breathers in crystals // *Physics-Uspekhi*. 2016. V. 59, N 5. P. 446–461.
12. Manley M.E., Alatas A., Trouw F., Leu B. M., Lynn J.W., Chen Y., Hulst W.L. Intrinsic nature of thermally activated dynamical modes in  $\alpha$ -U: Nonequilibrium mode creation by X-ray and neutron scattering // *Physical Review B*. 2008. V. 77, N 21. 214305.
13. Chong C., Wang Y., Maréchal D., Charalampidis E.G., Molerón M., Martínez A.J., Porter M.A., Kevrekidis P.G., Daraio C. Nonlinear localized modes in two-dimensional hexagonally-packed magnetic lattices // *New Journal of Physics*. 2021. V. 23, N 4. 043008.
14. Voulgarakis N.K., Hadjisavvas G., Kelires P.C., Tsironis G.P. Computational investigation of intrinsic localization in crystalline Si // *Physical Review B*. 2004. V. 69, N 11. 113201.
15. Кистанов А.А., Семенов А.С., Мурзаев Р.Т., Дмитриев С.В. Взаимодействие движущихся дискретных бризеров в ГПУ металле Mg // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2014. Т. 11, № 4/2. С. 572–577.
16. Дмитриев С.В., Кистанов А.А., Потекаев А.И., Баймова Ю.А. Дискретные бризеры в кристалле со структурой NaCl // *Известия высших учебных заведений*. 2013. Т. 56, № 2. С. 180–191.
17. Захаров П.В., Старостенков М.Д., Ерёмин А.М., Чередниченко А.И. Дискретные бризеры в кристалле CuAu // *Письма о материалах*. 2016. Т. 6, № 4. С. 294–299.
18. Bachurina O.V., Kudreyko A.A. Two-dimensional discrete breathers in fcc metals // *Computational Materials Science*. 2020. V. 182. 109737.
19. Foiles S.M., Baskes M.I., Daw M.S. Embedded-atom-method for the fcc metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and their alloys // *Physical Review B*. 1986. V. 33. 7983.
20. Jacobsen K.W., Norskov J.K., Puska M.J. Interatomic interactions in the effective-medium theory // *Physical Review B*. 1987. V. 35, N 14. С. 7423–7442.
21. 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. V. 90, N 2. 23.
22. Бачурина О.В., Мурзаев Р.Т., Дмитриев С.В. Моделирование линейного дискретного бризера в никеле // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2017. Т. 14, № 3. С. 363–367.

### 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.

### References

1. Sievers, A. J. & Takeno, S. (1988). Intrinsic Localized Modes in Anharmonic Crystals. *Physical Review Letters*, 61(8), 970–973.
2. Dolgov, A. S. (1986). The localization of vibrations in a nonlinear crystal-structure. *Physics of the Solid State*, 28(6), 1641–1644.
3. Flach, S. & Gorbach, A. (2008). Discrete breathers – advances in theory and applications. *Physics Reports*, (467), 1–116.
4. 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.
5. Sakhnenko, V. P. & Chechin, G. M. (1994). Kusty mod i normal'nyye kolebaniya dlya nelineynykh dinamicheskikh sistem s diskretnoy simmetriyey. *Doklady Akademii nauk*, 338(1), 42–45. (In Russ.).

6. Haas, M., Hizhnyakov, V., Shelkan, A., Klopov, M. & Sievers, A. J. (2011). Prediction of high-frequency intrinsic localized modes in Ni and Nb. *Physical Review B*, 84(14), 144303.
7. Murzaev, R. T., Kistanov, A. A., Dubinko, V. I., Terentyev, D. A. & Dmitriev, S. V. (2015). Moving discrete breathers in bcc metals V, Fe and W. *Computational Materials Science*, 98, 88–92.
8. Zakharov, P. V., Korznikova, E. A., Dmitriev, S. V., Ekomasov, E. G. & Zhou, K. (2019). Surface discrete breathers in Pt<sub>3</sub>Al intermetallic alloy. *Surface Science*, 679, 1–5.
9. Bachurina, O. V. (2019). Linear discrete breather in fcc metals. *Computational Materials Science*, 160, 217–221.
10. Bachurina, O. V., Murzayev R. T., Semenov A. S., Korznikova E. A. & Dmitriyev S. V. (2018). Svoystva dvizhushchikhsya diskretnykh brizerov v berillii. *Fizika tverdogo tela*, 60(5), 978–983. (In Russ.).
11. Dmitriev, S. V., Korznikova, E. A., Baimova, Yu. A. & Velarde, M. G. (2016). Discrete breathers in crystals. *Physics-Uspexhi*, 59(5), 446–461.
12. Manley, M. E., Alatas, A., Trouw, F., Leu, B. M., Lynn, J. W., Chen, Y. & Hulst, W. L. (2008). Intrinsic nature of thermally activated dynamical modes in  $\alpha$ -U: Nonequilibrium mode creation by x-ray and neutron scattering. *Physical Review B*, 77(21), 214305.
13. Chong, C., Wang, Y., Maréchal, D., Charalampidis, E. G., Molerón, M., Martínez, A. J., Porter, M. A., Kevrekidis, P. G. & Daraio, C. (2021). Nonlinear localized modes in two-dimensional hexagonally-packed magnetic lattices. *New Journal of Physics*, 23(4), 043008.
14. Voulgarakis, N. K., Hadjisavvas, G., Kelires, P. C. & Tsironis, G. P. (2004). Computational investigation of intrinsic localization in crystalline Si. *Physical Review B*, 69(11), 113201.
15. Kistanov, A. A., Semenov, A. S., Murzayev, R. T. & Dmitriyev, S. V. (2014). Vzaimodeystviye dvizhushchikhsya diskretnykh brizerov v GPU metalle Mg. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 11(4/2), 572–577. (In Russ.).
16. Dmitriyev, S. V., Kistanov, A. A., Potekayev, A. I. & Baimova, Yu. A. (2013). Diskretnyye brizery v kristalle so strukturoy NaCl. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy*, 56(2), 180–191. (In Russ.).
17. Zakharov, P. V., Starostenkov, M. D., Yeromin, A. M. & Cherednichenko, A. I. (2016). Diskretnyye brizery v kristalle CuAu. *Pis'ma o materialakh*, 6(4), 294–299. (In Russ.).
18. Bachurina, O. V. & Kudreyko, A. A. (2020). Two-dimensional discrete breathers in fcc metals. *Computational Materials Science*, 182, 109737.
19. Foiles, S. M., Baskes, M. I. & Daw, M. S. (1986). Embedded-atom-method for the fcc metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and their alloys. *Physical Review B*, 33, 7983.
20. Jacobsen, K. W., Norskov, J. K. & Puska, M. J. (1987). Interatomic interactions in the effective-medium theory. *Physical Review B*, 35(14), 7423–7442.
21. 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.
22. Bachurina, O. V., Murzayev, R. T. & Dmitriyev, S. V. (2017). Modelirovaniye lineynogo diskretnogo brizera v nikle. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 14(3), 363–367.

#### 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.

Автор заявляет об отсутствии конфликта интересов.  
The author declares that there is no conflict of interest.

Статья поступила в редакцию 02.09.2024; одобрена после рецензирования 07.10.2024; принята к публикации 02.12.2024.

The article was received by the editorial board on 02 Sept. 2024; approved after reviewing 07 Oct. 2024; accepted for publication 02 Dec. 2024.