

**Дискретные бризеры в ГЦК и ГЦТ-кристаллах\****М.Д. Старостенков<sup>1</sup>, П.В. Захаров<sup>2</sup>, Н.Н. Медведев<sup>3</sup>*<sup>1</sup>Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова (Барнаул, Россия)<sup>2</sup>Алтайский государственный гуманитарно-педагогический университет им. В.М. Шукшина (Бийск, Россия)<sup>3</sup>Бийский технологический институт (филиал) Алтайского государственного технического университета им. И.И. Ползунова (Бийск, Россия)**Discrete Breathers in FCC and FCT Crystals***M.D. Starostenkov<sup>1</sup>, P.V. Zakharov<sup>2</sup>, N.N. Medvedev<sup>3</sup>*<sup>1</sup>Polzunov Altai State Technical University (Barnaul, Russia)<sup>2</sup>Shukshin Altai State Humanities Pedagogical University (Biysk, Russia)<sup>3</sup>Biysk Technological Institute (branch) of the Polzunov Altai State Technical University (Biysk, Russia)

Обзор посвящен исследованию дискретных бризеров в кристаллах стехиометрии  $A_3B$ ,  $AB$  и в монокристаллах. Дана краткая история развития концепции дискретных бризеров в кристаллах, рассмотрены возможные пути дальнейших исследований. Приведены данные, свидетельствующие о том, что для существования дискретных бризеров необходимо наличие свойств дискретности и нелинейности исследуемой системы.

В рассматриваемых работах исследование дискретных бризеров осуществлялось методом молекулярной динамики с использованием как парных, так и многочастичных потенциалов.

На примере кристаллов  $Pt_3Al$  и  $CuAu$  показано, что дискретные бризеры с жестким типом нелинейности способны сосредоточивать энергию порядка нескольких электронвольт, при этом они являются мобильными и могут перемещаться по кристаллу вдоль плотноупакованных направлений. Выявлены два механизма возбуждения дискретных бризеров с мягким типом нелинейности в кристалле стехиометрии  $A_3B$  потоком частиц. Продемонстрировано, что внешние поля, осциллирующие с частотой вне фононного спектра кристалла  $A_3B$ , могут являться причиной возбуждения бризеров с мягким типом нелинейности вблизи его поверхности. Для металлов  $Pt$ ,  $Au$ ,  $Ni$ ,  $Pd$ ,  $Cu$  показана зависимость продолжительности жизни ДБ от их коэффициента Пуассона. Приведены амплитудно-частотные характеристики и зависимости времени жизни дискретных бризеров от начальных параметров возбуждения.

**Ключевые слова:** дискретный бризер, солитон, квазибризер, кристалл, нелинейная мода, фононный спектр.

The review is devoted to the study of discrete breathers in  $A_3B$ ,  $AB$  stoichiometry crystals, and in monoatomic crystals. A brief history of the development of the concept of discrete breathers in crystals is given, and possible ways for further research are considered. The data to support the fact that the existence of discrete breathers requires the presence of discreteness and nonlinearity of the system under study are provided.

In the reviewed works, the study of discrete breathers was carried out by the method of molecular dynamics, using both pairwise and many-body potentials.

Using  $Pt_3Al$  and  $CuAu$  crystals as examples, it was shown that discrete breathers with hard type nonlinearity are able to concentrate energy on the order of several electron volts, being mobile and able to move across the crystal along close-packed directions. Two mechanisms of excitation of discrete breathers with a soft type nonlinearity in the  $A_3B$  stoichiometry crystal by a particle flow are revealed. It has been demonstrated that external fields oscillating with a frequency outside the phonon spectrum of an  $A_3B$  crystal may cause excitation of discrete breathers with a soft nonlinearity type near its surface. For metals  $Pt$ ,  $Au$ ,  $Ni$ ,  $Pd$ ,  $Cu$ , the dependence of the lifetime of discrete breathers on their Poisson's ratio is shown. The amplitude-frequency characteristics and the dependences of the lifetime of discrete breathers on the initial excitation parameters are given.

**Key words:** discrete breather, soliton, quasi-breather, crystal, nonlinear mode, phonon spectrum.

DOI 10.14258/izvasu(2019)4-07

\*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ и Алтайского края в рамках научного проекта № 18-42-220002 p\_a.

**Введение.** Дискретный бризер (ДБ) — локализованное в пространстве и периодическое по времени высокоамплитудное возбуждение в нелинейных дискретных структурах с трансляционной симметрией [1]. Возможность долгоживущих локализованных колебательных решений в пространственно-дискретных системах была первоначально показана на примере двух связанных осцилляторов для классического и квантового случаев [1]. Такие решения были обнаружены в численных экспериментах [2–5] и по аналогии с бризерами в непрерывных системах были названы дискретными бризерами. Известны также другие наименования: внутренние локализованные моды (intrinsic localized modes) — в физике твердого тела и дискретные солитоны — в нелинейной оптике.

Отметим, что бризеры в непрерывных моделях структурно неустойчивы в том смысле, что малое изменение уравнений движения приводит к делокализации решения [6]. Таким образом, бризеры в непрерывных системах можно отнести к «редким» математическим объектам, что снижает интерес к ним с точки зрения физики. Дискретные бризеры, в отличие от бризеров в непрерывных системах, не являются «редкими», поэтому можно говорить о потенциальной важности этого класса решений в физике.

Наряду со стационарными ДБ в литературе обсуждаются и движущиеся бризеры. Их форма должна периодически повторяться во времени при одновременном смещении на целое число постоянных кристаллической решетки. Существование движущихся ДБ в их строгом смысле до сих пор является предметом дискуссий. Точные движущиеся дискретные бризеры были построены лишь в простейших моделях [7, 8]. Например, в одномерных моноатомных цепочках различают ДБ, представляющие собой моды Сиверса-Такено (симметричные бризеры — центр бризера совпадает с положением некоторого узла цепочки) и моды Пейджа (антисимметричные бризеры — центр бризера находится между соседними узлами).

В двумерных и трехмерных гамильтоновых решетках возможно очень большое число различных по симметрии и своим динамическим свойствам дискретных бризеров. Согласно работе [9] можно говорить о простых дискретных бризерах и мультибризерах, имея в виду количество узлов решетки, которым соответствуют колебания частиц с наибольшими амплитудами (эти частицы образуют «ядро» бризера). В работе [9] обсуждаются и так называемые ротобризеры, которым отвечают вращение одного элемента цепочки и колебания ее соседних элементов.

В отличие от моноатомных цепочек, фононный спектр диатомных цепочек может иметь как акустическую, так и оптическую ветви. Внутри щели между этими ветвями могут существовать так называемые щелевые бризеры [10–21]. В частности, они могут от-

щепляться как от верхнего края акустической ветви, так и от нижнего края ветви оптической [22–24].

Из выше сказанного следует, что для существования ДБ необходимо свойство дискретности и нелинейности исследуемой системы. Это делает бризеры объектами, встречающимися в широком классе систем различной физической природы [25–31].

В данном обзоре рассмотрение ряда кристаллов различной стехиометрии и состава начинается с интерметаллида  $Pt_3Al$  со сверхструктурой  $L1_2$ . Выбор данного сплава обусловлен рядом факторов. Во-первых,  $Pt_3Al$  имеет достаточно широкую запрещенную зону в фононном спектре, что является необходимым условием для существования щелевых ДБ. Во-вторых, сплавы стехиометрии  $A_3B$  со сверхструктурой  $L1_2$  являются многочисленными среди интерметаллидов. Поиск известных в настоящее время систем, обладающих  $L1_2$  структурой, позволил выявить около 190 таких фаз в составе  $A_3B$ . В-третьих, сплавы с данной структурой хорошо изучены экспериментально и часто выбираются для фундаментальных исследований с целью разработки структурно-физических основ создания новых конструкционных и функциональных материалов с различными уникальными свойствами. Также сплавы с  $L1_2$  структурой являются основой разработки существующих в настоящее время суперсплавов [32].

Сплавы на основе платины обладают рядом уникальных свойств, например, высокой температурой плавления, стойкостью к коррозии и окислению. Такие сплавы применяются в космической отрасли, стекольной, химической промышленности.

В данной работе рассмотрены также моноатомные кристаллы с ГЦК-структурой, например  $Pt$ ,  $Au$ ,  $Ni$ ,  $Pd$ ,  $Cu$ . При этом основное внимание уделено возможности возбуждения квази-бризеров в этих кристаллах. Проведены исследования по изучению свойств и характеристик локализованных состояний атомов в кристаллах стехиометрии  $AB$  со сверхструктурой  $L1_0$  на примере  $CuAu$ . Систему медь — золото часто относят к металлургической классике, так как эти металлы могут образовывать твердые растворы при любом соотношении компонент. В то же время свойства  $CuAu$  представляют интерес для практического применения. Исследование возможности возбуждения в указанных металлах и сплавах нелинейных локализованных мод видится актуальным.

**Методы исследования.** Исследование дискретных бризеров на атомном уровне связано с рядом трудностей, которые обусловлены, например, невозможностью непосредственного наблюдения процессов, происходящих внутри кристаллического тела. Кроме того, такие процессы происходят со столь высокой скоростью, что их изучение в натурном эксперименте также проблематично. В большинстве случаев актуальным является компьютерное моделирование.

В настоящее время это признанный метод исследования, и он стоит в одном ряду с натурным экспериментом и математическим моделированием и применяется в физике твердого тела с конца 50-х гг. XX в.

При помощи компьютерной модели можно проверить теоретические предположения, спрогнозировать и объяснить эффекты, еще не выявленные другими методами исследования.

Изучение ДБ осуществляется, как правило, с помощью метода молекулярной динамики. Он имеет ряд преимуществ по сравнению с другими методами компьютерного моделирования при изучении волн солитонного типа в кристаллах, так как он позволя-

ет рассматривать достаточно большие ансамбли атомов и временные интервалы, существенно превосходящие размеры и время жизни исследуемых объектов. Динамика атомов описывается с помощью дифференциальных уравнений движения Ньютона. Это позволяет наиболее реалистично моделировать различные процессы как в идеальных кристаллических структурах, так и при наличии различных дефектов.

Выбор потенциала и обоснованность его использования для конкретной задачи — важный этап при моделировании. Во многих случаях применяются парные потенциалы, например потенциал Морзе:

$$U_{PQ}(r_{ij}) = D_{PQ} \beta_{PQ} \exp(-\alpha_{PQ} r_{ij}) (\beta_{PQ} \exp(-\alpha_{PQ} r_{ij}) - 2), \quad (1)$$

где  $D$  — энергетический параметр, соответствующий глубине потенциальной ямы,  $\alpha$  — параметр, определяющий жесткость межатомных связей,  $r_{ij}$  — некоторое усредненное равновесное расстояние

по координационным сферам, в которых учитывается взаимодействие между атомами. Параметры вычисляются по стандартной методике [33] из условий:

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

Здесь  $E_s$  — энергия сублимации атомов кристалла при нуле Кельвин;  $K_0$  — объемный модуль упругости;  $P_s$  — давление изоэнтропического сжатия;  $V_0$  и  $V$  — удельные объемы в начальном и деформированном состоянии,  $\eta_i$  — число атомов в  $i$ -й координационной сфере.

Для более корректного описания процессов межатомного взаимодействия используется потенциал, полученный методом погруженного атома (ЕАМ). В вычислительной химии модель погружен-

ного атома используется для приближенного описания энергии взаимодействия между двумя атомами. ЕАМ-потенциал может быть построен для различных биатомных систем по методике, предложенной Zhou [34].

Рассмотрим более подробно процесс построения ЕАМ-потенциала методом, предложенным авторами работы [34].

Полная энергия  $E$  кристалла может быть выражена как

$$E = \frac{1}{2} \sum_{i,j,i \neq j} \varphi_{ij}(r_{ij}) + \sum_i F_i(\rho_i), \quad (3)$$

где  $\varphi_{ij}$  представляет парную энергию между атомами  $i$  и  $j$ , отделенными друг от друга расстоянием  $r_{ij}$ , а  $F_i$  — энергия вложения, связанная с вложенным атомом  $i$  в локальном местоположении с электронной плотностью  $\rho_i$ . Электронную плотность можно рас-

считать по формуле  $\rho_i = \sum_{j,j \neq i} f_j(r_{ij})$ , где  $f_j(r_{ij})$  — электронная плотность на участке атома  $i$ , находящегося на расстоянии  $r_{ij}$  от атома  $j$ .

ЕАМ-потенциал чистого элемента состоит из трех функций: парной энергии  $\varphi$ , электронной плотности  $\rho$  и энергии вложения  $F$ . Для сплава ЕАМ-потенциал содержит не только три функции  $\varphi$ ,  $\rho$  и  $F$  для каждого из составляющих элементов, но также парную энергию  $\varphi_{ab}$  между разными элементами  $a$  и  $b$  ( $a \neq b$ ).

В результате функции  $\varphi$ ,  $\rho$  и  $F$ , приспособленные для чистых металлов, не могут быть непосредственно применены к сплаву или многослойным системам. Тем не менее путем нормализации ЕАМ-потенциалов и введения модели сплава процедура обобщения ЕАМ-потенциалов и их расстояния обрезки была предложена Zhou [34]. Эта процедура дает возможность построения ЕАМ-потенциалов сплавов из ЕАМ-потенциалов для отдельных элементов. Такие потенциалы сплавов использовались при молекулярном моделировании и дали хорошие результаты в экспериментах.

В этой модели ЕАМ-потенциала сплава обобщенные элементные парные потенциалы описываются:

$$\varphi(r) = \frac{A_{\text{exp}} \left[ -\alpha \left( r / r_e - 1 \right) \right]}{1 + \left( r / r_e - k \right)^{20}} - \frac{B_{\text{exp}} \left[ -\beta \left( r / r_e - 1 \right) \right]}{1 + \left( r / r_e - \lambda \right)^{20}}, \quad (4)$$

где  $r_e$  — равновесное расстояние между соседними атомами,  $A, B, \alpha, \beta$  — четыре регулируемых параметра, а  $k$  и  $\lambda$  — два дополнительных параметра для об-

резки. Функция электронной плотности взята в той же форме, что и располагающий элемент в парном потенциале с теми же значениями, т.е.

$$f(r) = \frac{f_e \exp \left[ -\beta \left( r / r_e - 1 \right) \right]}{1 + \left( r / r_e - \lambda \right)^{20}}. \quad (5)$$

Парный потенциал между различными видами  $a$  и  $b$  тогда строится как

$$\varphi^{ab}(r) = \frac{1}{2} \left[ \begin{array}{l} \frac{f^b(r)}{f^a(r)} \varphi^{aa}(r) + \\ \frac{f^a(r)}{f^b(r)} \varphi^{bb}(r) \end{array} \right]. \quad (6)$$

Функции энергии вложения, которые хорошо работают в широком диапазоне электронных плотностей, требуют трех уравнений, для того чтобы

показать три различных диапазона электронных плотностей. Эти уравнения имеют вид

$$F(\rho) = \sum_{i=0}^3 F_{ni} \left( \frac{\rho}{\rho_n} - 1 \right)^i, \quad \rho < \rho_n, \rho_n = 0,85\rho_e, \\ F(\rho) = \sum_{i=0}^3 F_i \left( \frac{\rho}{\rho_n} - 1 \right)^i, \quad \rho_n \leq \rho < \rho_0, \rho_0 = 1,15\rho_e, \quad (7)$$

$$F(\rho) = F_e \left[ 1 - \ln \left( \frac{\rho}{\rho_s} \right) \right] \left( \frac{\rho}{\rho_s} \right)^\eta, \quad \rho_0 \leq \rho.$$

Потенциалы, применяемые в этой модели, хорошо подогнаны к основным свойствам материалов, таким как постоянная решетка, коэффициент Пуассона, объемный модуль упругости, энергия образования вакансий и энергия сублимации, и они дают достаточно хорошие решения. В зависимости от решаемых задач применялся либо парный потенциал Морзе, либо потенциал, полученный методом погруженного атома.

#### Дискретные бризеры в $Pt_3Al$

Первоначально рассмотрим ДБ с мягким типом нелинейности в кристалле  $Pt_3Al$  как наиболее простые в возбуждении. Установлено, что такие бризеры локализованы на атомах  $Al$  и имеют колебания, поляризованные вдоль направления на ближайший атом  $Al$  (рис. 1 а) [35–37].

Для возбуждения бризера нужно вывести из положения равновесия один из атомов  $Al$  на расстояние, достаточное для проявления нелинейности связей.

Для ДБ получены зависимости частоты от амплитуды (рис. 1 б), время жизни и оценена степень пространственной локализации (рис. 2).

Такой тип дискретных бризеров способен локализовать энергию порядка 1 эВ при амплитудах 0,5 Å. В момент разрушения бризера его энергия рассеивается в подрешетку атомов алюминия [37].

В результате проведенных компьютерных экспериментов установлено, что незначительное повышение температуры приводит к существенному сокращению времени жизни ДБ [36]. Увеличение начальной температуры с 3 до 15 К приводит к уменьшению времени жизни с 420 пс до 70 пс, дальнейшее повышение начальной температуры ячейки до 100 К и выше приводит к уменьшению времени жизни ДБ до 10–6 пс. Определяющим фактором, обуславливающим это, является то, что атомы, окружающие основной атом, на котором происходит локали-

зация колебаний, не совершают согласованных с ним колебаний. Чем выше начальная температура ячейки, тем меньшее количество атомов входит в состав ДБ,

делая его профиль более узким и соответственно менее устойчивым к воздействиям со стороны других атомов кристалла [37, 38].

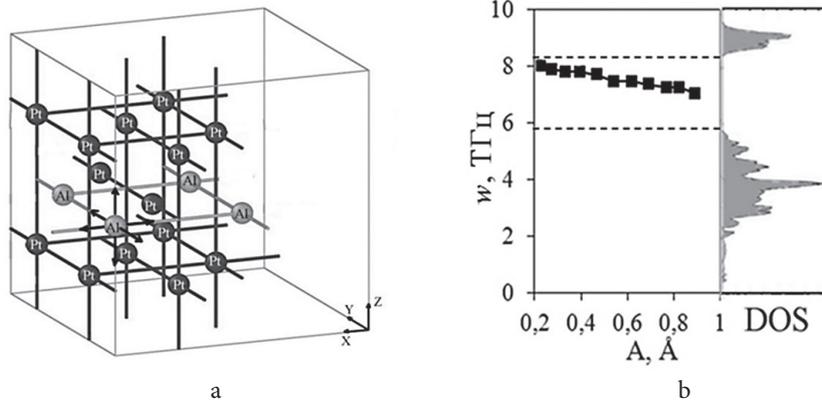


Рис. 1. Модель кристалла Pt<sub>3</sub>Al: а — фрагмент кристаллической решетки Pt<sub>3</sub>Al, стрелками показаны возможные направления колебаний ДБ1; б — зависимость частоты колебаний ДБ в объеме кристалла от амплитуды в сравнении с плотностью фоновых состояний кристалла (EAM-потенциал)

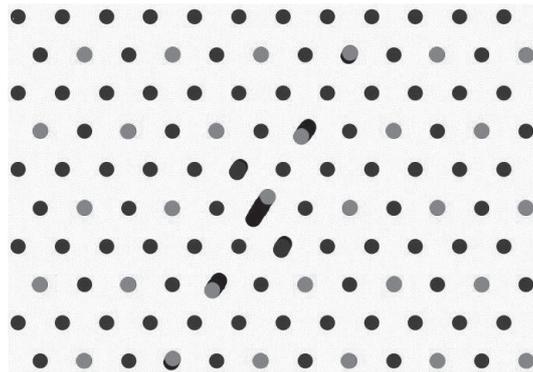


Рис. 2. Стробоскопическая картина ДБ1 в масштабе 1:1, визуализирована плоскость (111)

Далее рассмотрим дискретный бризер с жестким типом нелинейности в данном кристалле [39–41]. Поиск таких ДБ осуществлялся вдоль плотноупако-

ванных направлений кристалла Pt<sub>3</sub>Al. Возбудить ДБ в кристалле можно, задав группе из *n* атомов определенные начальные перемещения:

$$\mathbf{r}(t) = \{r_1(t), r_2(t), \dots, r_n(t)\} \quad (8)$$

или начальные скорости.

Таким образом, удалось возбудить ДБ, локализованный преимущественно на атомах Al (рис. 3). Такие ДБ могут перемещаться по кристаллу на значительные расстояния, практически не теряя своей энергии. Возбуждение бризера возможно вдоль следующих плотноупакованных направлений: [110], [011], [101], [110].

Они способны локализовать энергию порядка 2–3 эВ. Важными характеристиками ДБ являются его время жизни и максимальное расстояние, на которое

он способен переместиться по кристаллу. Полученная начальная скорость движения дискретного бризера с жестким типом нелинейности по кристаллу достигает 450 м/с, однако в дальнейшем происходит ее снижение до значений 110–120 м/с, при этом ДБ медленно рассеивает энергию в подрешетку Al. Изменение амплитуды происходит плавно в течение всего времени жизни бризера, но снижение амплитуды колебаний атомов до 0,4 Å приводит к его разрушению. Это связано с тем, что с уменьшением амплитуды его частота также уменьшается и входит в оптическую ветвь

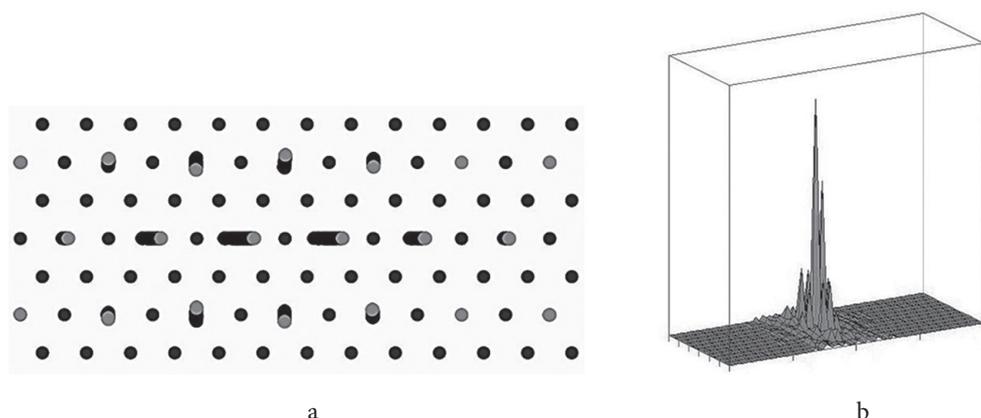


Рис. 3. Дискретный бризер с жестким типом нелинейности: а — стробоскопическая картина дискретного бризера; б — трехмерный профиль ДБ2 в плоскости (111)

фононного спектра, что приводит к возбуждению фононов и быстрому рассеиванию энергии в легкую подрешетку кристалла. Таким образом, за время жизни таких объектов в несколько наносекунд он способен преодолеть сотни нанометров.

Одной из основных задач, связанных с дискретными бризерами, является исследование способов их возбуждения. Далее рассмотрим возможные механизмы возбуждения ДБ при интенсивных внешних воздействиях, задаваемых в виде нагрева ячейки, взаимодействия с потоком высокоэнергетических частиц, а также в виде периодического внешнего воздействия на частоте вне фононного спектра кристалла [42]. Такие воздействия на кристаллы приводят к значительным отклонениям атомов от решеточных положений, активизируя различные процессы, изучение которых невозможно в рамках линеаризованных уравнений движения. Ангармонизмы межатомных связей ответственны за различные нелинейные явления, начиная от теплового расширения кристаллов, возбуждения локализованных колебательных мод и кончая структурными перестройками в кристалле.

При анализе воздействия потока частиц на кристалл  $Pt_3Al$  рассмотрим два варианта возбуждения ДБ: при однократном столкновении частицы с атомом решетки или более сложный процесс, связанный с многократными столкновениями.

Для моделирования воздействия потока частиц случайно выбранным атомам кристалла  $Pt_3Al$  передавался импульс вдоль возможного направления возбуждения ДБ с мягким типом нелинейности, тем самым имитировалось взаимодействие атомов, например, с медленными нейтронами или высокоэнергетическими электронами. Количество атомов, получающих импульс, зависело от энергии, передаваемой атомам. Диапазон передаваемой энергии варьировался от 0,2 до 5 эВ за одно взаимодействие, при этом его получали соответственно от 1,5 % до 0,025 % от общего

числа атомов расчетной ячейки. Периодичность импульсов энергии от потока частиц изменялась в пределах от 0,5 пс до 10 пс. Таким образом, контролировался процесс нагрева, не приводящий к разрушению модели. Такой нагрев может наблюдаться, например, при электроимпульсной обработке металлов.

Установлено, что минимальная энергия ДБ с мягким типом нелинейности для кристалла  $Pt_3Al$  составляет величину порядка 0,8 эВ, однако для возбуждения ДБ требуется больше энергии, так как часть энергии рассеивается по решетке. Таким образом, атом Al должен аккумулировать необходимую энергию за счет одного или нескольких полученных импульсов (рис. 4).

При исследовании зависимости времени появления ДБ от количества атомов, получивших импульс одновременно, было установлено, что вероятность появления ДБ значительно возрастает, если процент атомов, получивших импульс, превышает 0,6 %. Энергии взаимодействия 1 эВ недостаточно, чтобы возбудить ДБ за одно столкновение, следовательно, чем большее количество атомов получает импульс за один раз, тем больше вероятность получить повторный импульс атому алюминия, что способствует возбуждению ДБ. Проведенные компьютерные эксперименты показали, что при интенсивных внешних воздействиях на кристалл  $Pt_3Al$  возможна генерация дискретных бризеров с мягким типом нелинейности на узлах кристаллической решетки Al. Выявлены два механизма возбуждения ДБ [42]. В случае энергии взаимодействия более 1,4 эВ возбуждение ДБ может происходить при единичном столкновении с узлом легкой подрешетки сплава  $Pt_3Al$ . Если же энергия взаимодействия меньше 1,4 эВ, то при множественных столкновениях частиц с атомами кристаллической решетки происходит накопление энергии в легкой подрешетке сплава, тем самым создаются благоприятные условия для генерации ДБ.

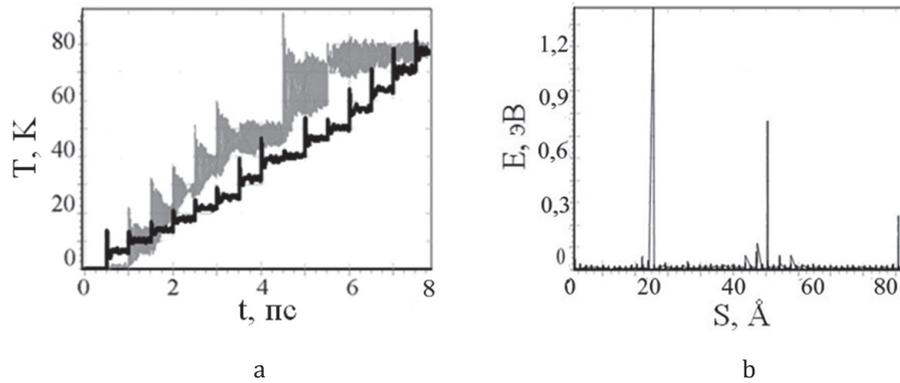


Рис. 4. Локализация энергии дискретным бризером с мягким типом нелинейности: а — температурные кривые подрешеток Pt (черный цвет) и Al (серый цвет) при взаимодействии кристаллической решетки сплава Pt<sub>3</sub>Al с частицами с энергией 1 эВ; б — распределение энергии вдоль кристалла в момент времени 5 пс

Нами проведена оценка вероятности возбуждения ДБ в рассматриваемом кристалле при различных температурах. Как известно, вероятность для атомов и молекул запасти в результате серии столкновений большую энергию незначительна. Для этого требуется большое число последовательных целенаправленных столкновений, в результате которых атом набирает энергию, практически не теряя ее. Поэтому для многих процессов лишь ничтожная доля атомов имеет энергию, достаточную для преодоления барьера создания ДБ. Эту долю, в соответствии с теорией Аррениуса, в нашем случае можно определить по следующей формуле:

$$k = e^{\frac{-E_a}{RT}}, \quad (9)$$

где  $R$  — универсальная газовая постоянная,  $T$  — температура кристалла,  $E_a$  — энергия активации процесса.

Из формулы следует, что доля активных столкновений  $k$  очень сильно зависит как от энергии активации, так и от температуры. Для ДБ с мягким типом нелинейности  $E_a$  составляет величину порядка 0,8–1,0 эВ. Из полученных данных можно сделать вывод, что до 0,01% атомов модельного кристалла при температуре 1000 К могут являться носителями таких бризеров. В свою очередь, ДБ с жестким типом нелинейности обладает большей энергией активации. Минимальная энергия, при которой такие ДБ могут стабильно существовать, составляет величину 1,8 эВ. Полученные значения говорят о том, что вероятность возбуждения их в состоянии термодинамического равновесия крайне мала и спонтанное возбуждение ДБ с жестким типом нелинейности без внешних воздействий на кристалл невозможно.

На двумерной модели кристалла Pt<sub>3</sub>Al нами показано, что внешнее периодическое воздействие на частотах вне фонового спектра кристалла может вызы-

вать возбуждение дискретных бризеров вблизи области воздействия [35]. Такое явление называется эффектом супратрансмиссии, подразумевающим передачу энергии на частотах вне фонового спектра кристаллов. Для изучения данного эффекта рассматривалась трехмерная модель сплава Pt<sub>3</sub>Al, содержащая  $2,8 \cdot 10^4$  частиц, взаимодействующих посредством EAM-потенциала. Периодическое воздействие осуществлялось по гармоническому закону  $z(t) = A \sin(\omega t)$  с частотами от 0,2 до 15 ТГц, а также с различными амплитудами от 0,05 до 0,5 Å. Такой диапазон позволяет охватить весь спектр малоамплитудных колебаний атомов для рассматриваемого кристалла [43].

Фиксировалась поглощенная энергия в зависимости от частоты воздействия и амплитуды в указанных диапазонах (рис. 5).

Исходя из данного графика (рис. 5), можно отметить, что для амплитуд менее 0,2 Å эффект передачи энергии кристаллу отсутствовал в запрещенной зоне фонового спектра.

Для амплитуд 0,2 Å и более происходит передача энергии кристаллу в том числе на частотах в запрещенной зоне фонового спектра. С увеличением амплитуды пик поглощения смещается глубже в запрещенные частоты фонового спектра кристалла, что свидетельствует об увеличении доли нелинейных мод в процессе передачи энергии. При рассмотрении дискретных бризеров в различных кристаллах чаще всего речь идет об их свойствах в «идеальных» решетках без каких-либо дефектов структуры. Однако очевидным является и тот факт, что дефекты и различные неоднородности среды оказывают влияние на характеристики таких объектов.

Далее проведено исследование дискретных бризеров с мягким типом нелинейности вблизи поверхности кристалла Pt<sub>3</sub>Al и при наличии точечных дефектов в объеме кристалла. Рассматривались три плоскости таким образом, что они являлись поверхностью кристалла: (100), (110), (111).

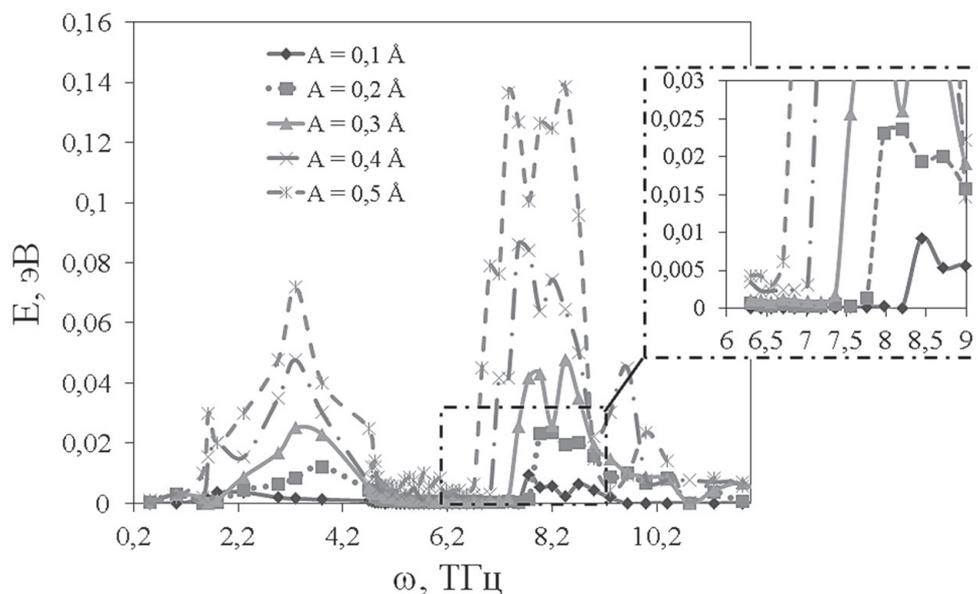


Рис. 5. Зависимость поглощенной энергии расчетной ячейкой на один атом за одну пикосекунду от частоты внешнего воздействия и амплитуды, увеличен масштаб для частот от 6 до 9 ТГц

По результатам расчетов [44] можно сказать, что в случае расположения бризера вблизи поверхности возможны колебания преимущественно перпендикулярно поверхности, при этом направления колебаний могут отличаться от случая ДБ в объеме. При попытке возбудить ДБ вдоль поверхности происходила переориентация колебаний перпендикулярно поверхности, за исключением плоскости (111). Возможна миграция дискретного бризера на соседний атом легкой подрешетки вглубь кристалла. Значение амплитуд колебаний в большинстве случаев для устойчивых колебаний перпендикулярно поверхности не превышает 0,5–0,6 Å, в то время как в объеме возможны устойчивые колебания до амплитуды 0,9 Å. Объем запасенной энергии на ДБ вблизи поверхности не превышает 0,6 эВ, в то время как в объеме кристалла возможно локализовать ДБ с мягким типом нелинейности с энергией до 2,5 эВ при максимальной амплитуде в 0,9 Å.

#### Локализованные моды в CuAu и моноатомных ГЦК-кристаллах

Рассмотрим дискретные бризеры в моноатомных ГЦК-кристаллах, а также биатомном кристалле стехиометрического состава АВ на примере CuAu. В моноатомных кристаллах дискретные бризеры уже достаточно хорошо изучены, механизмы их возбуждения аналогичны описанному выше для дискретного бризера с жестким типом нелинейности. Нами изучена их устойчивость к вариациям начальных параметров возбуждения, предложенных в работе [45]. Для анализа частотных характеристик бризеров в моноатомных кристаллах Pt, Au, Ni, Pd, Cu рассчитаны дисперсионные кривые и плотности фононных состояний (рис. 6) [46]

Далее для каждого выбранного металла исследованы такие важные характеристики, как время жизни ДБ и зависимость частоты колебаний атомов ДБ от амплитуды колебаний. Полученная зависимость близка к линейной и соответствует жесткому типу нелинейности. Так как задание идеальных начальных условий для возбуждения ДБ в реалистичных моделях достаточно сложно, то происходит рассеивание энергии в кристалл на начальных этапах моделирования. Следовательно, начальные условия играют определяющую роль в продолжительности существования ДБ в кристаллах.

Для анализа возможности существования ДБ в кристалле CuAu был произведен расчет плотности фононных состояний рассматриваемого кристалла. Отсутствие щели в фононном спектре CuAu говорит о том, что в нем не могут существовать дискретные бризеры с мягким типом нелинейности [47].

Для чистых металлов или сплавов с небольшим отличием масс компонент условия возбуждения ДБ с жестким типом нелинейности более специфичны. В данном случае для создания начального профиля ДБ использовалась функция Гаусса:

$$f(x) = A_0 e^{-\frac{x^2}{2C^2}}, \quad (10)$$

где  $A_0$  задает начальную амплитуду центральных атомов дискретного бризера,  $x$  — относительная координата пары атомов в ряду, параметр  $C$  — степень пространственной локализации дискретного бризера. Варьируя значения  $A_0$  и  $C$ , подбираем профиль дискретного бризера, тем самым задавая начальные отклонения из положения равновесия атомам, входящим в ДБ.

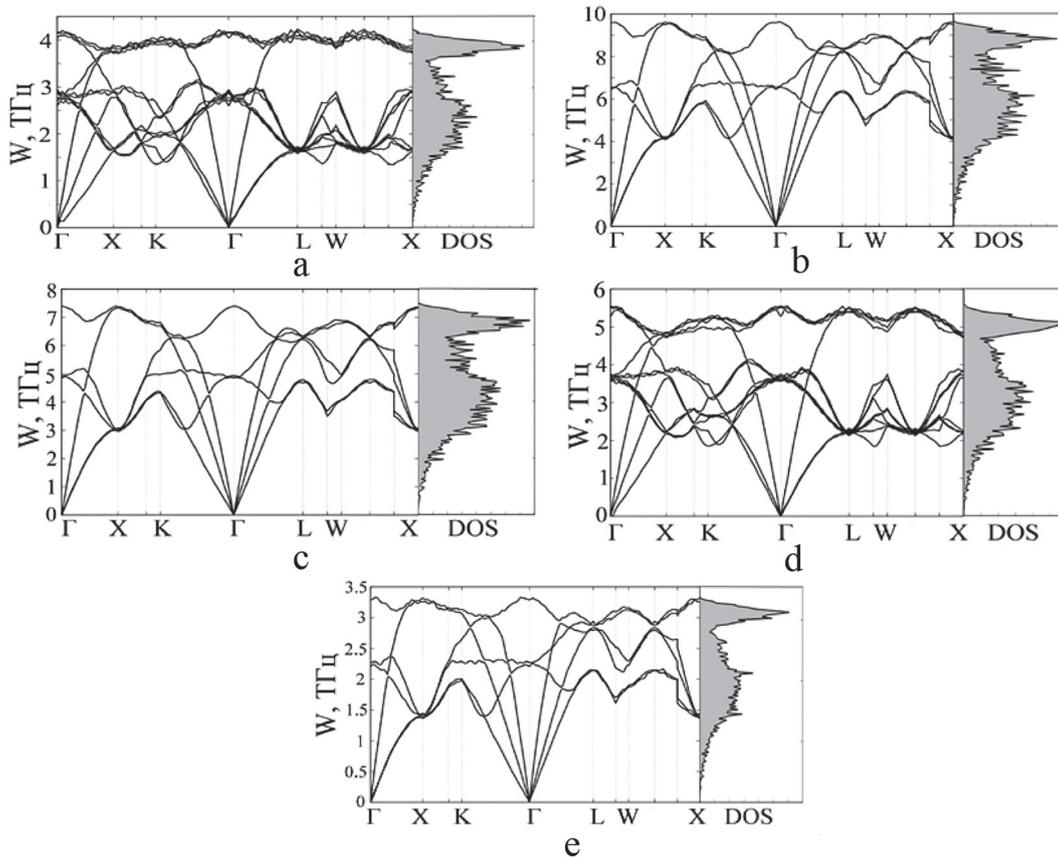


Рис. 6. Дисперсионные кривые и плотности фоновых состояний для моноатомных кристаллов: a — Pt; b — Ni; c — Cu; d — Pd; e — Au

Наиболее продолжительные колебания удалось получить для параметров уравнения (10)  $A_0=0,48 \text{ \AA}$ ,  $C=0,75$  [47]. Время жизни ДБ в этом случае превысило 50 пс. Сформированный дискретный бризер был локализован на 6–8 атомах меди, колеблющихся в противофазе, и он может иметь энергию до 2,1 эВ.

В ряде работ [31, 48] было показано, что дискретный бризер с мягким типом нелинейности возможно получить в кристаллах путем их деформации или занижения массы компонента сплава, что приводило к формированию щели в фоновом спектре кристалла, тем самым обеспечивая необходимое условие для существования ДБ.

Нами производилась деформация кристалла CuAu с учетом принципа Пуассона, т.е. объем модельной ячейки сохранялся. Характерным показателем для кристаллов с тетрагональной структурой является отношение параметров решетки  $c/a$ , для CuAu при нормальных условиях это соотношение равно 0,92. Деформируя кристалл вдоль кристаллографического направления [001], соответствующего параметру решетки  $c$ , учитывая изменения параметра решетки  $a$  для сохранения объема рассматриваемой модели, получали плотности фоновых состояний кристалла.

Для поиска дискретного бризера с мягким типом нелинейности в условиях деформированного кристалла отклонялся из положения равновесия один из атомов Cu вдоль различных кристаллографических направлений. Как и ожидалось, в этом случае удалось получить дискретный бризер вдоль направления [100]. Частота полученного ДБ с мягким типом нелинейности лежит в щели фоновонного спектра и соответствует 3,5 ТГц. Время жизни полученных локализованных колебаний составляет порядка 2 пс, или более 15 периодов колебаний. Такой тип ДБ локализован в основном на одном атоме Cu и способен сосредоточивать энергию порядка 0,9 эВ.

Для задания движущегося ДБ необходимо внести асимметрию в профиль дискретного бризера. Для этой цели вводился множитель  $\gamma$  при  $C$  для переопределения одной из ветвей функции (10), вторая ветвь рассчитывалась при  $\gamma=1$ :

$$f(x)=A_0 e^{-\frac{x^2}{2\gamma C^2}}. \quad (11)$$

Подбирая множитель для правой ветви, можно получить ДБ с различной начальной скоростью движения по кристаллу. Полученные результаты свидетельствуют, что скорость таких смещений ДБ зна-

чительно ниже скорости звука в рассматриваемом кристалле. Движение дискретного бризера с несимметричным профилем происходит в сторону более крутой ветви функции. Результаты свидетельствуют о слабой мобильности таких объектов в рассматриваемом кристалле. Но все же возможен транспорт энергии вдоль плотноупакованных направлений подрешетки  $S_u$ .

Дискретный бризер, как строго периодический во времени объект, получается при численном моделировании лишь в случае идеальной настройки начальных условий задачи Коши на некоторое многообразие малой размерности в многомерном пространстве всех возможных начальных значений координат отдельных частиц и их скоростей. Такую точную настройку трудно осуществить даже при проведении вычислительного эксперимента. Тем более это практически невозможно сделать при постановке любых физических экспериментов, особенно в тех случаях, когда бризероподобные объекты возникают спонтанно [49–56].

В связи с этим в работах [57–59] была выдвинута концепция квази-бризеров как некоторых локализованных в пространстве, но не строго периодических во времени динамических объектов. При этом был сформулирован определенный критерий близости квази-бризера к соответствующему ему точному бризеру, основанный на вычислении среднеквадратичного отклонения частот колебаний отдельных частиц бризера, найденных на некотором интервале в окрестности момента  $t$ , и вычислении среднеквадратичного отклонения частот колебаний выделенной  $j$ -й частицы бризера на различных временных интервалах.

В отличие от точных дискретных бризеров, квази-бризеры являются не строго периодическими во времени динамическими объектами, хотя и локализованными в пространстве. Они возникают при любых достаточно малых отклонениях от точных бризерных решений в многомерном пространстве всех возможных начальных условий при решении задачи Коши для исходных дифференциальных уравнений, поскольку в этом случае не происходит полного подавления вкладов от колебаний периферийных частиц со своими собственными частотами. Таким образом, «ослабление диктатуры» со стороны ядра бризера (в случае рассматриваемого нами симметричного бризера также ядро образует одна центральная частица, а в случае антисимметричного бризера — две его центральные частицы) приводит к наличию в бризерном решении малых вкладов, имеющих разные частоты. Эти малые вклады можно обнаружить в колебаниях всех частиц цепочки, в частности, и центральных. Если найти достаточно точно частоты колебаний

всех частиц квази-бризера, вычисленные на некотором временном интервале вблизи  $t = t_k$ , то они не будут строго одинаковыми.

Обобщая ряд полученных нами результатов по квази-бризерам [60, 61], можно сказать, что объекты, рассмотренные с позиции квази-бризеров, разрушаются в тот момент, когда среднее квадратичное отклонение частот превышает разность между средней частотой квази-бризера и ближайшей границей фононного спектра кристалла. При этом происходит делокализация колебаний и рассеивание энергии по кристаллу в виде малоамплитудных тепловых колебаний решетки.

#### Выводы

В работе рассмотрены дискретные бризеры в ряде ГЦК и ГЦТ металлов и сплавов с различной стехиометрией. Все исследования проводились методом молекулярной динамики с применением парных потенциалов и многочастичных потенциалов, полученных методом погруженного атома.

Для всех рассмотренных материалов были получены фононные спектры кристаллов, дисперсионные кривые и проанализированы с позиции возможности существования дискретных бризеров в данных системах.

Выявлены два механизма возбуждения щелевых ДБ с мягким типом нелинейности в кристалле стехиометрии  $A_3B$  (на примере  $Pt_3Al$ ) потоком частиц. В случае если частица способна передавать атому  $Al$  энергию более 1,4 эВ, возбуждение дискретного бризера может происходить единственной частицей. При меньших энергиях частиц образование ДБ происходит при неоднократных столкновениях частиц с атомами  $Al$ . В случае термодинамического равновесия была проведена оценка вероятности возбуждения ДБ с мягким типом нелинейности за счет тепловых флуктуаций в кристалле  $Pt_3Al$ . Показано, что при температуре 1000 К до 0,01% атомов  $Al$  могут являться носителями ДБ с мягким типом нелинейности.

Для моноатомных ГЦК металлов  $Pt$ ,  $Au$ ,  $Ni$ ,  $Pd$ ,  $Cu$  показано, что время жизни ДБ увеличивается для кристаллов с большим значением коэффициента Пуассона. Получены амплитудно-частотные характеристики и зависимости времени жизни ДБ от параметров возбуждения бризера.

Все объекты, рассмотренные с позиции квази-бризеров, разрушаются в тот момент, когда среднее квадратичное отклонение частот превышает разность между средней частотой квази-бризера и ближайшей границей фононного спектра кристалла. При этом происходит делокализация колебаний и рассеивание энергии по кристаллу в виде малоамплитудных тепловых колебаний решетки.

## Библиографический список

1. Sievers A.J., Takeno S. Intrinsic Localized Modes in Anharmonic Crystals // *Phys. Rev. Lett.* 1988. V.61. №8.
2. Flach S., Willis C.R. Discrete Breathers // *Phys. Rep.* 1998. V.295.
3. Flach S., Gorbach A.V. Discrete breathers – Advances in theory and applications // *Phys. Rep.* 2008. V.467.
4. Manley M.E. Impact of intrinsic localized modes of atomic motion on materials properties // *Acta Mater.* 2010. V.58.
5. Campbell D.K., Flach S., Kivshar Yu.S. Localizing energy through nonlinearity and discreteness // *Phys. Today.* 2004. V.57.
6. Овчинников А.А. Локализованные долгоживущие колебательные состояния в молекулярных кристаллах // *ЖЭТФ.* 1969. Т. 57. Вып. 1 (7).
7. Yoshimura K., Doi Y. Moving discrete breathers in nonlinear lattice: Resonance and stability // *Wave Motion.* 2007. V.45.
8. Butt I.A., Wattis J.A.D. Discrete breathers in a two-dimensional Fermi Pasta-Ulam lattice // *Journal of Physics A: Mathematical and General.* 2006. V.39.
9. Aubry S. Breathers in nonlinear lattices: Existence, linear stability and quantization // *Physica D.* 1997. V.103.
10. Дмитриев С.В., Хадеева Л.З., Пшеничнюк А.И., Медведев Н.Н. Щелевые дискретные бризеры в двухкомпонентном трехмерном и двумерном кристаллах с межатомными потенциалами Морзе // *Физика твердого тела.* 2010. Т. 52.
11. Ostrovskaya E.A., Kivshar Yu.S. Matter-wave gap solitons in atomic band-gap structures // *Physical Review Letters.* 2003. V.90.
12. Xu Q., Qiang T. Two-dimensional discrete gap breathers in a two dimensional discrete diatomic Klein-Gordon lattice // *Chinese Physics Letters.* 2009. V.26.
13. James G., Kastner M. Bifurcation of discrete breathers in a diatomic Fermi-Pasta-Ulam chain // *Nonlinearity.* 2007. V.20.
14. Kiselev S.A., Bickham S.R., Sievers A.J. Anharmonic gap modes in a perfect one-dimensional diatomic lattice for standard two-body nearest-neighbor potentials // *Phys. Rev. B.* 1993. V. 48.
15. Khadeeva L.Z., Dmitriev S.V. Discrete breathers in crystals with NaCl structure // *Phys. Rev. B.* 2010. V. 81.
16. Khadeeva L.Z., Dmitriev S.V., Kivshar Y.S. Discrete breathers in deformed graphene // *JETP Lett.* 2011. V. 94.
17. Baimova J.A., Dmitriev S.V., Zhou K. Discrete breather clusters in strained graphene // *Europhys. Lett.* 2012. V. 100.
18. Kiselev S.A., Sievers A.J. Generation of intrinsic vibrational gap modes in three-dimensional ionic crystals // *Phys. Rev. B.* 1997. V. 55.
19. Lobzenko I.P., Chechin G.M., Bezuglova G.S., Baimova Yu.A., Korznikova E.A., Dmitriev S.V. Ab initio simulation of gap discrete breathers in strained graphene // *Phys. Solid State.* 2016. V. 58.
20. Chechin G.M., Ryabov D.S., Shcherbinin S.A. Nonlinear vibrational modes in graphene: group-theoretical results // *Letters on Materials.* 2016. V. 6(1).
21. Chechin G.M., Sakhnenko V.P. Interactions between normal modes in nonlinear dynamical systems with discrete symmetry. Exact results // *Physica D.* 1998. V. 117(1–4).
22. Flach S., Ivanchenko M.V., Kanakov O. I. q-Breathers and the Fermi-Pasta-Ulam Problem // *Physical Review Letters.* 2005. V.95.
23. Семенов А.С., Фомин С.Ю., Жоу К., Соболева Э.Г. Дискретный бризер с жестким типом нелинейности в двумерном биатомном кристалле // *Письма о материалах.* 2017. Т. 7. Вып. 3.
24. Дмитриев С.В. Корзникова Е.А., Баимова Ю.А., Велларде М.Г. Дискретные бризеры в кристаллах // *УФН.* 2016. Т. 186. № 5.
25. 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 // *Eur. Phys. J. B.* 2017. V. 90(3).
26. 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 // *Comp. Mater. Sci.* 2015. V. 98.
27. 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 // *Eur. Phys. J. B.* 2016. V. 89.
28. Cuevas J., Katerji C., Archilla J.F.R., Eilbeck J.C., Russell F.M. Influence of moving breathers on vacancies migration // *Phys. Lett. A.* 2003. V. 315.
29. Cuevas J., Archilla J.F.R., Sanchez-Rey B., Romero F.R. Interaction of moving discrete breathers with vacancies // *Physica D.* 2006. V. 216.
30. Hizhnyakov V., Haas M., Pishtshev A., Shelkan A., Klopov M. Modeling of self-localized vibrations and defect formation in solids // *Nucl. Instrum. Meth. B.* 2013. V. 303.
31. Terentyev D.A., Dubinko A.V., Dubinko V.I., Dmitriev S.V., Zhurkin E.E., Sorokin M.V. Interaction of discrete breathers with primary lattice defects in bcc Fe // *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* 2015. V. 23.
32. Клопотов А.А., Потехаев А.И., Козлов Э.В., Тюрин Ю.И., Арефьев К.П., Солоницина Н.О., Клопотов В.Д. Кристаллогеометрические и кристаллохимические закономерности образования бинарных и тройных соединений на основе титана и никеля : монография / под общ. ред. А.И. Потехаева. Томск, 2011.
33. Medvedev N.N., Starostenkov M.D., Potekaev A.I., Zakharov P.V., Markidonov A.V., Eremin. A.M. Energy Localization in the Ordered Condensed Systems:  $A_3B$  Alloys With  $L1_2$  Superstructure // *Russian Physics Journal.* July 2014. Volume 57. Issue 3.
34. Zhou, X.W. Misfit-energy-increasing dislocations in vapor-deposited CoFe/NiFe multilayers / X.W. Zhou, R.A. Johnson, H.N.G. Wadley // *Phys. Rev.* 2004. V.69.
35. Медведев Н.Н., Старостенков М.Д., Захаров П.В., Маркидонов А.В. О локализации энергии нелинейных и линейных колебаний атомов в модельной кристаллической решетке // *Физика твердого тела.* 2016. Т. 58. Вып. 1.

ской решетке состава  $A_3B$  // Письма о материалах. 2013. Т. 3. № 1 (9).

36. Medvedev N.N., Starostenkov M.D. and Manley M.E. Energy Localization on the sublattice of  $Pt_3Al$  with  $L1_2$  order // Journal of Applied Physics. 2013. V.114.

37. Захаров П.В., Старостенков М.Д., Медведев Н.Н., Еремин А.М., Маркидонов А.В. Влияние низких температур на характеристики дискретного бризера в кристалле  $Pt_3Al$  // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2014. Т. 11. № 4.

38. Medvedev N.N., Starostenkov M.D., Potekaev A.I., Zakharov P.V., Eremin A.M., Markidonov A.V. Energy localization in the ordered condensed systems:  $A_3B$  alloys with  $L1_2$  superstructure // Russian Physics Journal. 2014. Т. 57. № 3.

39. Старостенков М.Д., Потекаев А.И., Дмитриев С.В., Захаров П.В., Еремин А.М., Кулагина В.В. Динамика дискретных бризеров в кристалле  $Pt_3Al$  // Известия вузов. Физика. 2015. Т. 58. № 9.

40. Захаров П.В., Старостенков М.Д., Еремин А.М. Влияние упругой деформации всестороннего растяжения-сжатия на характеристики дискретного бризера в кристалле  $Pt_3Al$  // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2016. Т. 13. № 2.

41. Zakharov P.V., Dmitriev S.V., Starostenkov M.D. Dynamics of discrete breathers in the  $Pt_3Al$  crystal // Key Engineering Materials. 2016. V. 685.

42. Захаров П.В., Старостенков М.Д., Еремин А.М., Корзникова Е.А., Дмитриев С.В. Возбуждение щелевых дискретных бризеров в кристалле состава  $A_3B$  потоком частиц // Физика твердого тела. 2017. Т. 59. № 2.

43. Захаров П.В., Старостенков М.Д., Еремин А.М., Луценко И.С. Эффект нелинейной супратрансмиссии в кристалле  $Pt_3Al$  // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2018. Т. 15. № 2.

44. Захаров П.В., Старостенков М.Д., Еремин А.М., Чердниченко А.И. Влияние свободной поверхности кристалла на характеристики дискретного бризера // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2017. Т. 14. № 2.

45. Кистанов А.А. и др. Движущиеся дискретные бризеры в монокристаллическом двумерном кристалле // Письма в ЖЭТФ. 2014. Т. 99.

46. Захаров П.В., Дмитриев С.В., Старостенков М.Д., Еремин А.М., Корзникова Е.А. Стационарные квази-бризеры в монокристаллических металлах с ГЦК-структурой // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 2017. Т. 152. Вып. 5 (11).

47. Захаров П.В., Старостенков М.Д., Еремин А.М., Чердниченко А.И. Дискретные бризеры в кристалле  $CuAu$  // Письма о материалах. 2016. Т. 6. № 4 (24).

48. Дмитриев С.В., Хадеева Л.З. Щелевые дискретные бризеры в двухкомпонентном двумерном кристалле в состоянии теплового равновесия // ФТТ. 2011. Т. 53. Вып. 7.

49. Dubinko V., Shapovalov R. Localized Excitations in Nonlinear Complex Systems. Current State of the Art and Future Perspectives (Nonlinear Systems and Complexity) / Eds R. Carretero-González et al // Berlin: Springer. 2014. V.7.

50. Sato M., Hubbard B.E., Sievers A.T. Nonlinear energy localization and its manipulation in micromechanical oscillator arrays // Reviews of Modern Physics. 2006. V.78.

51. Rossler T., Page J.B. Optical creation of vibrational intrinsic localized modes in anharmonic lattices with realistic interatomic potentials // Physical Review B. 2000. V.62.

52. Cretegny T., Dauxois T., Ruffo S., Torcini A. Localization and equipartition of energy in the b-FPU chain: Chaotic breathers // Physical D. 1998. V.121.

53. Baimova J.A., Murzaev R.T., Rudskoy A.I. Discrete breathers in graphane in thermal equilibrium // Phys. Lett. A. 2017. V. 381(36).

54. Dubinko V.I., Selyshchev P.A., Archilla J.F.R. Reaction-rate theory with account of the crystal anharmonicity // Phys. Rev. E. 2011. V. 83(4).

55. Hizhnyakov V., Haas M., Pishtshev A., Shelkan A., Klopov M. Modeling of self-localized vibrations and defect formation in solids // Nucl. Instrum. Meth. B. 2013. V. 303.

56. Bachurina O.V. Linear discrete breather in fcc metals // Comp. Mater. Sci. 2019. V. 160.

57. Chechin G.M., Dzhelauhova G.S., Mehonoshina E.A. Quasibreathers as a generalization of the concept of discrete breathers. // Physical Review E. 2006. Vol.74.

58. Chechin, G.M., Zhukov, K.G. Stability analysis of dynamical regimes in nonlinear systems with discrete symmetries // Physical Review E - Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics. 2006. V.73(3).

59. Chechin G.M., Dzhelauhova G.S. Discrete breathers and nonlinear normal modes in monoatomic chains // Journal of Sound and Vibration. 2009. V. 322(3).

60. Еремин А.М., Захаров П.В., Старостенков М.Д. Статистические характеристики квази-бризера с мягким типом нелинейности в кристаллах стехиометрии  $A_3B$  // Химическая физика и мезоскопия. 2016. Т. 18. № 4.

61. Zakharov P.V., Eremin A.M., Starostenkov M.D., Lucenko I.S. Analysis of statistical characteristics of quasi-breather with soft-type of nonlinearity in the crystals of  $a_3b$  stoichiometry // Key Engineering Materials. 2017. V. 743.