Известия Алтайского государственного университета. 2026. № 4 (150). С. 28–34.
Izvestiya of Altai State University. 2026. No 4 (150). P. 28–34.

Научная статья
УДК 539.21
https://doi.org/10.14258/izvasu(2026)4-03

Нарушение эквипартиции кинетической энергии при нелинейной супратрансмиссии в интерметаллиде Pt_3Al

Андрей Сергеевич Кочкин[1], Борис Федорович Демьянов[2], Кирилл Андреевич Теников[3]

[1]Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова, Барнаул, Россия, andre211@mail.ru
[2]Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова, Барнаул, Россия, fiz@altgtu.ru
[3]Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова, Барнаул, Россия, gugolpleks@mail.ru

Original article

Violation of Kinetic Energy Equipartition in the Intermetallic Pt_3Al under Nonlinear Supratransmission

Andrey S. Kochkin[1], Boris F. Demyanov[2], Kirill A. Tenikov[3]

[1]Polzunov Altai State Technical University, Barnaul, Russia, andre211@mail.ru
[2]Polzunov Altai State Technical University, Barnaul, Russia, fiz@altgtu.ru
[3]Polzunov Altai State Technical University, Barnaul, Russia, gugolpleks@mail.ru

Аннотация. Методом молекулярной динамики исследовано распределение кинетической энергии между подрешетками платины и алюминия в интерметаллиде Pt_3Al при реализации нелинейной супратрансмиссии. Моделирование выполнено с использованием потенциала вложенного атома для кристалла из 288 000 атомов. Внешнее гармоническое воздействие задавалось в диапазоне частот запрещенной зоны фононного спектра при варьировании амплитуды смещения. Показано, что при превышении порога супратрансмиссии формируется устойчивый режим переноса энергии, сопровождающийся нарушением принципа эквипартиции.

Установлено, что в большинстве режимов кинетическая энергия на атом платины превышает аналогичную величину для алюминия в 1,1–3,1 раза, что указывает на квазистационарное неравновесное состояние. Обнаружено узкое параметрическое окно, где наблюдается инверсия распределения энергии с доминированием алюминиевой подрешетки. Предложено объяснение эффекта, основанное на конкуренции массового контраста и нелинейной динамики колебаний. Показано, что вклад массы определяет энергетический баланс, несмотря на более высокую подвижность легких атомов. Полученные результаты важны для уточнения моделей теплопереноса в условиях неравновесного возбуждения.

Abstract. This study employs molecular dynamics to investigate the distribution of kinetic energy between the platinum and aluminum sublattices in the intermetallic compound Pt_3Al under nonlinear supratransmission. Simulations were performed using an embedded atom potential method for a crystal containing 288,000 atoms. External harmonic excitation was applied within a frequency range corresponding to the phonon band gap, with varying displacement amplitudes. It is shown that, above the supratransmission threshold, a stable energy transfer regime emerges, accompanied by a violation of energy equipartition. In most cases, the kinetic energy per atom in the platinum sublattice exceeds that of aluminum by a factor of 1.1–3.1, indicating the formation of a quasi-stationary nonequilibrium state. A narrow parameter window is identified in which an inversion of energy distribution occurs, with dominance of the aluminum sublattice. A physical interpretation of the effect is proposed based on the interplay between mass contrast and nonlinear lattice dynamics. It is demonstrated that the mass contribution governs the energy balance despite the higher mobility of lighter atoms. The results are relevant for refining models of heat transport under nonequilibrium excitation conditions.

© Кочкин А.С., Демьянов Б.Ф., Теников К.А., 2026

Ключевые слова: нелинейная супратрансмиссия, эквипартиция энергии, интерметаллиды, молекулярная динамика, дискретные бризеры, фононный спектр, Pt_3Al

Для цитирования: Кочкин А.С., Демьянов Б.Ф., Теников К.А. Нарушение эквипартиции кинетической энергии при нелинейной супратрансмиссии в интерметаллиде Pt_3Al // Известия Алтайского государственного университета. 2026. № 4 (150). С. 28–34. https://doi.org/10.14258/izvasu(2026)4-03.

Keywords: nonlinear supertransmission, energy equipartition, intermetallics, molecular dynamics, discrete breathers, phonon spectrum, Pt_3Al

For citation: Kochkin A.S., Demyanov B.F., Tenikov K.A. Violation of Kinetic Energy Equipartition in the Intermetallic Pt_3Al under Nonlinear Supratransmission. *Izvestiya of Altai State University*. 2026. No 4 (150). P. 28–34. (In Russ.). https://doi.org/10.14258/izvasu(2026)4-03.

Введение

Нелинейная супратрансмиссия (НСТ) рассматривается как один из механизмов переноса энергии в дискретных нелинейных системах при возбуждении на частотах, попадающих в запрещенную зону линейного спектра [1]. Под супратрансмиссией понимается режим передачи энергии через систему на частотах, для которых в линейном приближении распространение волн отсутствует. В линейной модели такие колебания затухают. Однако при превышении некоторого порога амплитуды внешнего воздействия в системе могут возникать локализованные нелинейные возбуждения, способные переносить энергию вглубь кристалла. Подобное поведение обычно связывают с возбуждением локализованных нелинейных состояний, в том числе дискретных бризеров [2, 3].

Интерметаллид Pt_3Al в этом смысле представляет собой достаточно показательный объект. Существенный массовый контраст компонентов ($M_{Pt}/M_{Al}\approx7.2$) приводит к расщеплению фононного спектра и появлению запрещенной зоны [4]. Именно наличие этой зоны создает условия, при которых могут формироваться локализованные возбуждения, способные переносить энергию на заметные расстояния [5, 6].

Ранее было показано, что при реализации НСТ колебания в алюминиевой подрешетке опережают по фазе платиновую [7]. Тем не менее вопрос о том, как в этих условиях распределяется энергия, остается не вполне ясным. В частности, неочевидно, приводит ли такая динамика к перераспределению кинетической энергии в пользу легких атомов. В данной работе предпринята попытка количественно проследить, как именно распределяется кинетическая энергия между подрешетками Pt и Al в надпороговом режиме, а также оценить применимость принципа эквипартиции, согласно которому в состоянии термодинамического равновесия энергия в среднем равномерно распределяется между степенями свободы системы в условиях явно неравновесного состояния.

1. Модель и метод

Расчеты выполнялись методом молекулярной динамики с использованием пакета LAMMPS [8]. В расчетах рассматривался кристалл интерметаллида Pt_3Al размером 47×47×1960 Å, содержащий 288 000 атомов. Протяженность образца вдоль направления распространения возбуждения выбрана с запасом, чтобы сформировавшийся режим не искажался влиянием границ.

Межатомное взаимодействие описывалось потенциалом вложенного атома (EAM) [9]. Он достаточно точно воспроизводит основные характеристики решетки: расхождения по упругим константам, энергии когезии и температуре плавления не превышают примерно 5 % [10]. При этом корректно передается и структура фононного спектра, включая наличие запрещенной зоны.

Граничные условия задавались периодическими в направлениях X и Y, тогда как вдоль оси Z оставлялась свободная поверхность. Такая постановка позволяет избежать влияния боковых границ и проследить отражение волны от торца образца.

Возбуждение вводилось в виде гармонического смещения атомов в приповерхностном слое толщиной Z<50 Å:

$$u(t) = A\sin(2\pi\nu t),$$

где A задает амплитуду, а ν — частоту внешнего воздействия. Амплитуда варьировалась в пределах 0.09–0.18 Å. Частота выбиралась внутри запрещенной зоны фононного спектра (ν/ν_{max}=0.1376–0.1544), где $\nu_{max}\approx8.5$ ТГц соответствует верхней границе акустической ветви [5]. Такой выбор параметров позволяет реализовать режим супратрансмиссии.

Интегрирование уравнений движения проводилось по алгоритму Верле с шагом 1 фс. Моделирование длилось 55 пс, чего достаточно для прохождения фронта возбуждения и выхода системы на квазистационарный режим.

Кинетическая энергия определялась отдельно для атомов Pt и Al по стандартному выражению и затем усреднялась на интервале 50–55 пс. Этот временной участок выбран после затухания начальных переходных процессов, что позволяет анализировать уже установившееся состояние.

2. Результаты

Распределение кинетической энергии KE(z) вдоль образца (рис. 1) оказывается неоднородным. Вблизи области возбуждения (Z<500 Å) фиксируются по-

вышенные значения, что связано с непосредственным вводом энергии. Далее на участке порядка 500–1750 Å профиль выравнивается и меняется слабо. В приповерхностной области у свободной границы наблюдается повторный рост энергии, обусловленный отражением волны и наложением встречных фронтов.

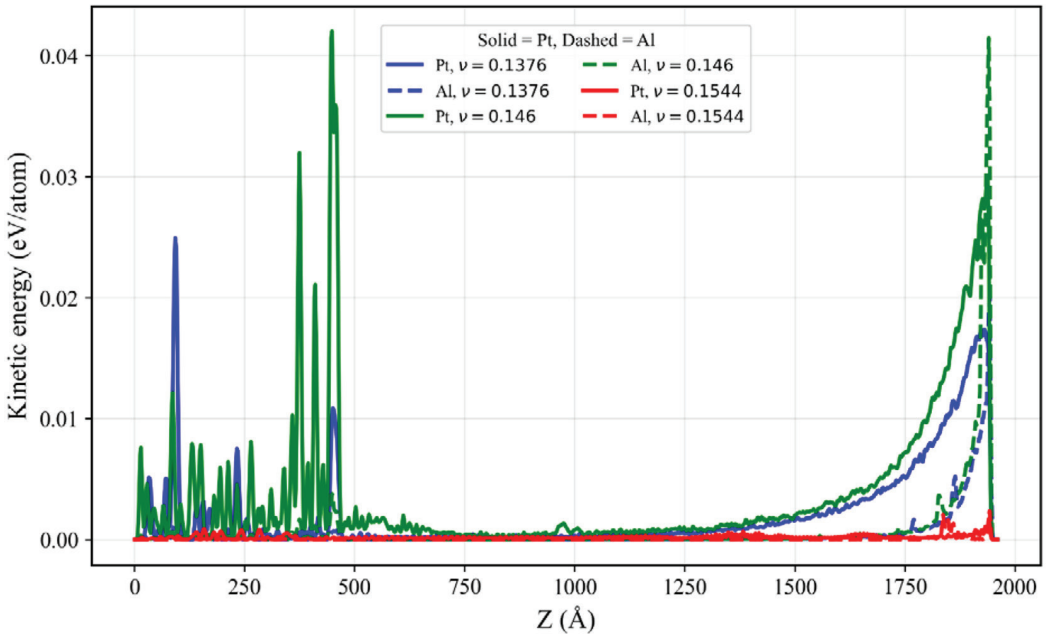


Рис. 1. Пространственное распределение кинетической энергии KE(z) для платины и алюминия

При всех рассмотренных параметрах энергия, приходящаяся на атомы Pt, оказывается выше, чем у Al. Это сохраняется даже с учетом того, что легкая подрешетка демонстрирует большую амплитуду и скорость движения. Поведение системы в терминах динамики и распределения энергии не совпадает.

Пространственно-временные карты KE (z, t) (рис. 2) показывают формирование направленного фронта, распространяющегося вглубь образца. По его наклону оценивается скорость порядка 35 Å/пс. Картина остается неоднородной: вблизи источника заметны локальные усиления, тогда как в центральной части структура сглаживается.

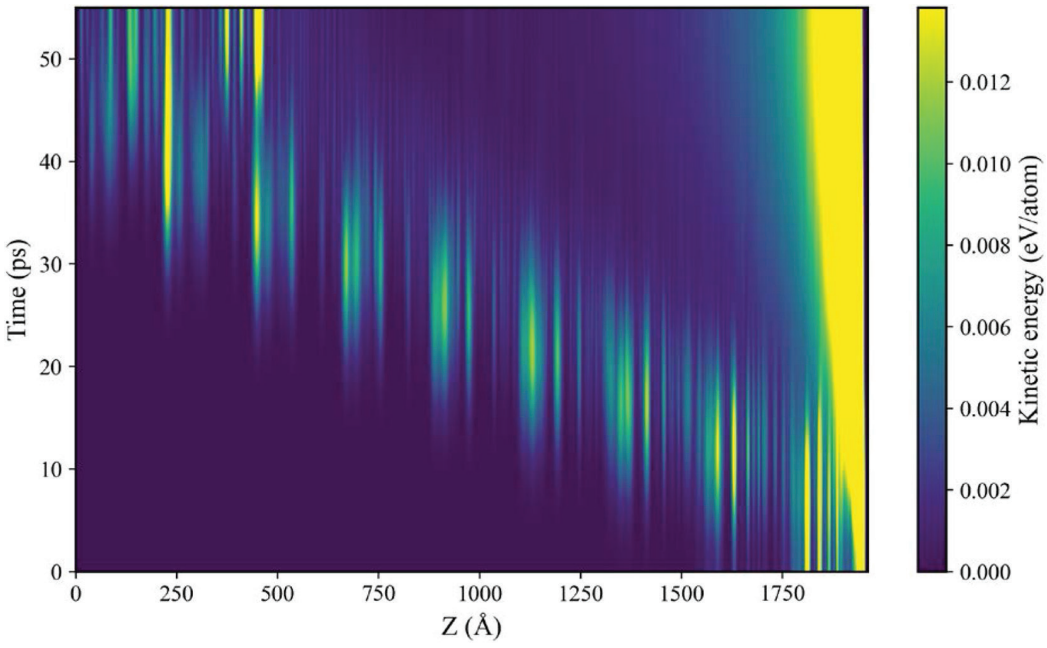


Рис. 2. Пространственно-временное распределение KE (z, t) при ν/ν_{max}=0.146, A=0.18 Å

Разность энергий $\Delta KE=KE_{Pt}-KE_{Al}$ (рис. 3) в большинстве случаев остается положительной и имеет тенденцию к увеличению по мере развития процесса. Однако при $\nu/\nu_{max}=0.1544$ и A=0.12 Å наблюдается иная ситуация — энергия алюминиевой подрешетки оказывается выше ($KE_{Al}>KE_{Pt}$), что указывает на смену режима.

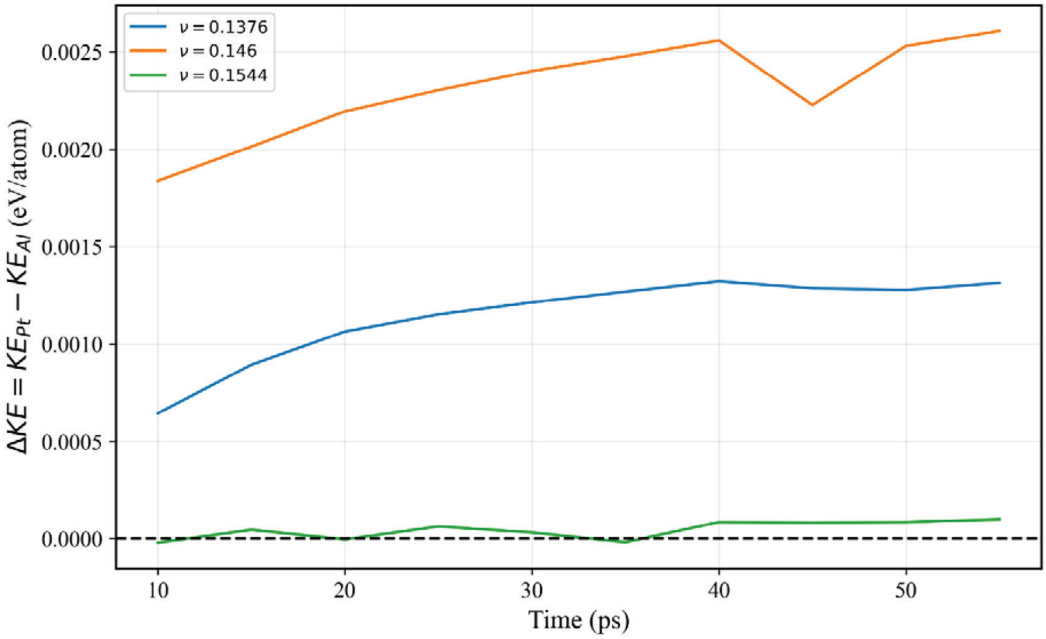


Рис. 3. Временная эволюция $\Delta KE=KE_{Pt}-KE_{Al}$ для $\nu/\nu_{max}=0.1376, 0.146, 0.1544$. A=0.18 Å. Пунктир: ΔKE=0

Аналогичное соотношение прослеживается и во временных зависимостях энергии на атом (рис. 4): значения KE для атомов Pt превышают соответствующие значения для Al.

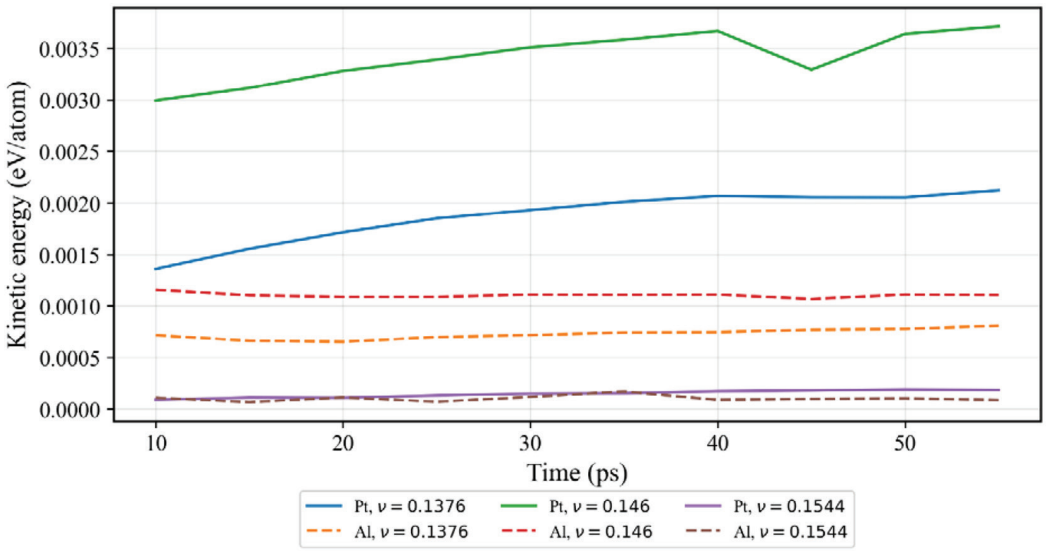


Рис. 4. Зависимость кинетической энергии на атом от времени для подрешеток Pt и Al при частотах $\nu/\nu_{max}=0.1376, 0.146, 0.1544$. Амплитуда A=0.18 Å

В суммарном виде это отражено в таблице — для 8 из 9 режимов отношение $\langle KE_{Pt}\rangle/\langle KE_{Al}\rangle$ лежит в пределах 1.1–3.1. Равномерного распределения энергии между подрешетками не наблюдается.

Кинетическая энергия подрешеток Pt и Al

Частота ν/ν_{max}	A, Å	$\langle KE_{Al}\rangle$, эВ/атом	$\langle KE_{Pt}\rangle$, эВ/атом	ΔKE, эВ/атом	Результат
0.1376	0.09	0.000784	0.001577	+0.000793	Pt>Al
0.1376	0.12	0.000842	0.001831	+0.000990	Pt>Al
0.1376	0.18	0.000730	0.001873	+0.001143	Pt>Al
0.146	0.12	0.000112	0.000124	+0.000012	Pt>Al
0.146	0.15	0.000961	0.001717	+0.000756	Pt>Al
0.146	0.18	0.001105	0.003419	+0.002314	Pt>Al
0.1544	0.12	0.000151	0.000109	−0.000042	Al>Pt
0.1544	0.15	0.000078	0.000128	+0.000050	Pt>Al
0.1544	0.18	0.000103	0.000148	+0.000045	Pt>Al

3. Обсуждение

Полученные данные показывают, что распределение энергии в системе определяется не одним фактором, а их сочетанием. Более легкие атомы Al действительно обладают большими скоростями. Тогда вклад массы в выражении для кинетической энергии остается существенным, и, по-видимому, именно он в большинстве случаев оказывается решающим.

В результате складывается ситуация, при которой алюминиевая подрешетка в большей степени задает фазовую структуру возбуждения, тогда как платиновая — основной вклад в энергию. Такое разделение ролей не следует из линейной теории.

Отдельного внимания заслуживает режим инверсии. Его появление, вероятно, связано с тем, что при определенных параметрах возбуждение преимущественно захватывает моды, локализованные на легкой подрешетке. При дальнейшем увеличении амплитуды влияние нелинейности возрастает, усиливается взаимодействие между подрешетками, и система возвращается к «обычному» распределению энергии.

В целом наблюдаемая картина не противоречит результатам, полученным ранее для других дискретных систем, включая виброударные цепочки [11] и решетки типа β-FPUT [12]. Схожие эффекты отмечались и в акустических метаматериалах [13].

С практической точки зрения это означает, что при внешнем возбуждении подрешетки могут находиться в состояниях с различной эффективной температурой. Соответственно, модели теплопереноса, основанные на предположении локального равновесия, в таких условиях требуют уточнения.

Заключение

В работе методом молекулярной динамики исследовано распределение кинетической энергии в интерметаллиде Pt_3Al при нелинейной супратрансмиссии. Показано, что в запрещенной зоне спектра формируется устойчивое неравновесное состояние, сопровождающееся нарушением эквипартиции.

Для большинства рассмотренных режимов энергия преимущественно сосредоточена на атомах Pt (отношение $\langle KE_{Pt}\rangle/\langle KE_{Al}\rangle$ =1.1–3.1). Инверсия наблюдается лишь в ограниченном диапазоне параметров.

Результаты показывают, что роль массового контраста, который, несмотря на более высокую подвижность легких атомов, определяет энергетический баланс. Это приводит к разделению динамических и энергетических характеристик системы.

Это означает, что в многокомпонентных материалах при внешнем возбуждении возможно устойчивое существование подрешеточной неравновесности.

Следует отметить, что расчеты выполнены для идеализированной структуры при нулевой температуре. Учет дефектов и температурных эффектов, а также рассмотрение других интерметаллидов представляют очевидный интерес для дальнейших исследований.

Библиографический список

1. Захаров П.В. Эффект нелинейной супратрансмиссии в дискретных структурах: обзор // Компьютерные исследования и моделирование. 2023. Т. 15. № 3. С. 599–617. https://doi.org/10.20537/2076-7633-2023-15-3-599-617

2. Geniet F., Leon J. Energy Transmission in the Forbidden Band Gap of a Nonlinear Chain // Physical Review Letters. 2002. Vol. 89. P. 134102. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.89.134102

3. Caputo J.-G., Leon J. Nonlinear Energy Transmission in the Gap // Physics Letters A. 2001. Vol. 283. P. 129–135. https://doi.org/10.1016/S0375-9601(01)00192-X

4. Захаров П.В., Дмитриев С.В., Корзникова Е.А. Molecular Dynamic Analysis of Energy Transport in a Pt_3Al Crystal under the Impact in the Spectrum Gap Frequency // Письма о материалах. 2021. Т. 11. № 3. С. 338–344. https://doi.org/10.22226/2410-3535-2021-3-338-344

5. Flach S., Gorbach A.V. Discrete Breathers — Advances in Theory and Applications // Physics Reports. 2008. Vol. 467. P. 1–112. https://doi.org/10.1016/j.physrep.2008.05.002

6. Дмитриев С.В., Корзникова Е.А., Баимова Ю.А., Веларде М.Г. Дискретные бризеры в кристаллах // Успехи физических наук. 2016. Т. 186. № 5. С. 471–496. https://doi.org/10.3367/UFNr.2016.02.037729

7. Zakharov P.V., Korznikova E.A., Izosimov A.A., Kochkin A.S. The Influence of Crystal Anisotropy on the Characteristics of Solitary Waves in the Nonlinear Supratransmission Effect: Molecular Dynamic Modeling // Computation. 2023. Vol. 11. P. 193. https://doi.org/10.3390/computation11100193

8. Plimpton S. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics // Journal of Computational Physics. 1995. Vol. 117. P. 1–19. https://doi.org/10.1006/jcph.1995.1039

9. Zhou X.W., Johnson R.A., Wadley H.N.G. Misfit-Energy-Increasing Dislocations in Vapor-Deposited CoFe/NiFe Multilayers // Physical Review B. 2004. Vol. 69. P. 144113. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.69.144113

10. Чередниченко А.И., Захаров П.В., Старостенков М.Д. и др. Нелинейная супратрансмиссия в кристалле Pt_3Al при интенсивном внешнем воздействии // Компьютерные исследования и моделирование. 2019. Т. 11. № 1. С. 109–117. https://doi.org/10.20537/2076-7633-2019-11-1-109-117

11. Bader A., Gendelman O.V. Supratransmission in a Vibro-Impact Chain // Journal of Sound and Vibration. 2023. Vol. 547. P. 117493. https://doi.org/10.1016/j.jsv.2022.117493

12. Bebikhov Yu.V., Naumov E.K., Semenova M.N., Dmitriev S.V. Discrete Breathers in a β-FPUT Square Lattice from In-Band External Driving // Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation. 2024. Vol. 132. P. 107897. https://doi.org/10.1016/j.cnsns.2024.107897

13. Abbagari S., Houwe A., Akinyemi L., Doka S.Y. Soliton Dynamics in One-Dimensional Nonlinear Acoustic Metamaterials // SSRN Electronic Journal. 2023. https://doi.org/10.2139/ssrn.4422428

References

1. Zakharov P.V. The Effect of Nonlinear Supratransmission in Discrete Structures: A Review. *Computer Research and Modeling*. 2023. Vol. 15. No 3. P. 599–617. (In Russ.). https://doi.org/10.20537/2076-7633-2023-15-3-599-617

2. Geniet F., Leon J. Energy Transmission in the Forbidden Band Gap of a Nonlinear Chain. *Physical Review Letters*. 2002. Vol. 89. P. 134102. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.89.134102

3. Caputo J.-G., Leon J. Nonlinear Energy Transmission in the Gap. *Physics Letters A*. 2001. Vol. 283. P. 129–135. https://doi.org/10.1016/S0375-9601(01)00192-X

4. Zakharov P.V., Dmitriev S.V., Korznikova E.A. Molecular Dynamic Analysis of Energy Transport in a Pt_3Al Crystal under the Impact in the Spectrum Gap Frequency. *Letters on Materials*. 2021. Vol. 11. No 3. P. 338–344. (In Russ.). https://doi.org/10.22226/2410-3535-2021-3-338-344

5. Flach S., Gorbach A. V. Discrete Breathers — Advances in Theory and Applications. *Physics Reports*. 2008. Vol. 467. P. 1–112. https://doi.org/10.1016/j.physrep.2008.05.002

6. Dmitriev S.V., Korznikova E.A., Baimova Yu.A., Velarde M.G. Discrete Breathers in Crystals. *Physics-Uspekhi.* 2016. Vol. 59. No 5. P. 446–470. (In Russ.). https://doi.org/10.3367/UFNr.2016.02.037729

7. Zakharov P.V., Korznikova E.A., Izosimov A.A., Kochkin A.S. The Influence of Crystal Anisotropy on the Characteristics of Solitary Waves in the Nonlinear Supratransmission Effect: Molecular Dynamic Modeling. *Computation*. 2023. Vol. 11. P. 193. https://doi.org/10.3390/computation11100193

8. Plimpton S. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics. *Journal of Computational Physics*. 1995. Vol. 117. P. 1–19. https://doi.org/10.1006/jcph.1995.1039

9. Zhou X.W., Johnson R.A., Wadley H.N.G. Misfit-Energy-Increasing Dislocations in Vapor-Deposited CoFe/NiFe Multilayers. *Physical Review B*. 2004. Vol. 69. P. 144113. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.69.144113

10. Cherednichenko A.I., Zakharov P.V., Starostenkov M.D., et al. Nonlinear Supratransmission in a Pt_3Al Crystal at Intense External Influence. *Computer Research and Modeling*. 2019. Vol. 11. No. 1. P. 109–117. (In Russ.). https://doi.org/10.20537/2076-7633-2019-11-1-109-117

11. Bader A., Gendelman O.V. Supratransmission in a Vibro-Impact Chain. *Journal of Sound and Vibration*. 2023. Vol. 547. P. 117493. https://doi.org/10.1016/j.jsv.2022.117493

12. Bebikhov Yu.V., Naumov E.K., Semenova M.N., Dmitriev S.V. Discrete Breathers in a β-FPUT Square Lattice from In-Band External Driving. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*. 2024. Vol. 132. P. 107897. https://doi.org/10.1016/j.cnsns.2024.107897

13. Abbagari S., Houwe A., Akinyemi L., Doka S.Y. Soliton Dynamics in One-Dimensional Nonlinear Acoustic Metamaterials. *SSRN Electronic Journal*. 2023. https://doi.org/10.2139/ssrn.4422428

Информация об авторах

А.С. Кочкин, аспирант кафедры физики, Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова, Барнаул, Россия;

Б.Ф. Демьянов, доктор физико-математических наук, профессор кафедры физики, Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова, Барнаул, Россия;

К.А. Теников, аспирант кафедры физики, Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова, Барнаул, Россия.

Information about the authors

A.S. Kochkin, Postgraduate Student of the Department of Physics, Polzunov Altai State Technical University, Barnaul, Russia;

B.F. Demyanov, Doctor of Sciences in Physics and Mathematics, Professor of the Department of Physics, Polzunov Altai State Technical University, Barnaul, Russia;

K.A. Tenikov, Postgraduate Student of the Department of Physics, Polzunov Altai State Technical University, Barnaul, Russia.