

УДК 538.91

DOI 10.25587/2222-5404-2024-21-3-39-49

Дискретные бризеры в трехмерной решетке с потенциалом Ферми-Паста-Улама-Цингоу

Ю. В. Бебихов¹, М. Н. Семёнова¹ ✉, Д. У. Абдуллина², Е. К. Наумов², С. В. Дмитриев²

¹Политехнический институт (филиал) СВФУ, г. Мирный, Россия

²Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН, г. Уфа, Россия

✉ mariya_semyonova86@mail.ru

Аннотация. В работе рассматриваются такие нелинейные явления в физике конденсированного состояния, как дискретные бризеры (ДБ) и делокализованные нелинейные колебательные моды (ДНКМ). ДБ – это пространственно локализованные колебательные моды большой амплитуды, существующие при условиях нелинейности межатомных взаимодействий и дискретности среды. Частота колебаний ДБ лежит вне фононного спектра низкоамплитудных колебаний кристалла и не резонирует с фононами, т. е. не тратит свою энергию на их возбуждение. ДНКМ – это колебательные моды, проявляющиеся в кристаллических решетках с трансляционной симметрией, которые существуют для любых амплитуд колебаний и независимы от типа взаимодействия между элементами системы. Авторами в ранних работах была установлена связь между ДБ и ДНКМ. В настоящей работе исследуется трехмерная объемноцентрированная кубическая (ОЦК) решетка с взаимодействиями между ближайшими и вторыми соседями, описываемыми межатомным потенциалом β -Ферми-Паста-Улама-Цингоу (ФПУЦ). Анализируются свойства ДНКМ с волновым вектором на границе первой зоны Бриллюэна. ДНКМ являются точными решениями уравнений движения, которые могут быть найдены из анализа только симметрии ОЦК решетки. Произведены расчеты частотных характеристик ДНКМ для случая мягкой и жесткой ангармоничности. В случае жесткой ангармоничности четыре ДНКМ имеют частоты, бифуркационные с верхнего края фононного спектра и растущие с амплитудой. Путем наложения локализирующих функций на эти ДНКМ получены различные ДБ, которые были отнесены к квази-бризерам. Они не являются одночастотными колебательными модами с конечным временем жизни и образуются благодаря преодолению силы межатомного потенциала. В результате исследования были получены шесть долгоживущих квази-бризеров на основе четырех ДНКМ с частотами выше фононной полосы. Результаты этого исследования подтверждают эффективность поиска долгоживущих квази-бризеров в сложных решетках, начиная с анализа ДНКМ. В дальнейшем полученные квази-бризерные решения могут быть использованы в качестве начальных условий для итерационной процедуры поиска точных ДБ. Таким образом, представленная работа демонстрирует практический подход к поиску ДБ в решетках высокой размерности.

Ключевые слова: дискретный бризер, квази-бризер, колебательная мода, нелинейность и дискретность среды, кристаллическая решетка, межатомный потенциал взаимодействия, частотные характеристики, фононный спектр, локализирующая функция, уравнения движения.

Для цитирования: Бебихов Ю. В., Семёнова М. Н., Абдуллина Д. У., Наумов Е. К., Дмитриев С. В. Дискретные бризеры в трехмерной решетке с потенциалом Ферми-Паста-Улама-Цингоу. *Вестник СВФУ*. 2024, Т. 21, № 3. С. 39–49. DOI: 10.25587/2222-5404-2024-21-3-39-49

Авторы благодарят за поддержку исследования Российский научный фонд, грант 24-22-00092 (<https://rscf.ru/project/24-22-00092/>).

© Бебихов Ю. В., Семёнова М. Н., Абдуллина Д. У., Наумов Е. К., Дмитриев С. В., 2024

Discrete breathers in a three-dimensional lattice with a Fermi-Pasta-Ulam-Zingou potential

Yu. V. Bebikhov¹, M. N. Semenova¹ ✉, D. U. Abdullina², E. K. Naumov², S. V. Dmitriev²

¹Polytechnic Institute (branch) M.K. Ammosov NEFU, Mirny, Russia

²Institute of Molecule and Crystal Physics UFRC RAS, Ufa, Russia

✉ mariya_semyonova86@mail.ru

Abstract. The paper considers such nonlinear phenomena in condensed matter physics as Discrete Breathers (DB) and delocalised nonlinear vibrational modes (DNVM). DB are spatially localised vibrational modes of large amplitude that exist under conditions of nonlinearity of interatomic interactions and discreteness of the medium. The oscillation frequency of DB lies outside the phonon spectrum of low-amplitude crystal vibrations and does not resonate with phonons, i.e. it does not waste its energy on their excitation. DNVM are vibrational modes manifested in crystal lattices with translational symmetry, which exist for any oscillation amplitudes and regardless of the type of interaction between the elements of the system. In early works, the authors established a connection between DB and DNVM. A three-dimensional Body Centered Cubic (BCC) lattice with nearest and next-nearest interactions described by the β -Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou (FPUT) interatomic potential is investigated. Properties of DNVM with the wave-vector on the boundary of the first Brillouin zone are analysed. DNVM are exact solutions to the equations of motion that can be found from the analysis of only the symmetry of the bcc lattice. Frequency response of DNVM for the case of soft- and hard-type anharmonicity is calculated. In the case of hard-type anharmonicity, four DNVM have frequencies bifurcating from the upper edge of the phonon spectrum and growing with the amplitude. By superimposing localisation functions on these DNVM, various DB were obtained, which were attributed to quasi-breathers. They are not single-frequency oscillatory modes with a finite lifetime and are formed due to overcoming the strength of the intersite potential. As a result of the study, six long-lived quasi-freezers were obtained based on four DNVM frequencies above the phonon band. The results of this study confirm the effectiveness of the search for long-lived quasi-freezers in complex lattices, starting with the analysis of DNVM. In the future, the obtained quasi-breath solutions can be used as initial conditions for an iterative procedure for searching for exact DB. Thus, the presented work demonstrates a practical approach to the search for DB in high-dimensional lattices.

Keywords: discrete breather, quasi-breather, vibrational mode, nonlinearity and discreteness of the medium, crystal lattice, interatomic interaction potential, frequency characteristics, phonon spectrum, localisation function, equations of motion.

For citation: Bebikhov Yu. V., Semenova M. N., Abdullina D. U., Naumov E. K., Dmitriev S. V. Discrete breathers in a three-dimensional lattice with a Fermi-Pasta-Ulam-Zingou potential. *Vestnik of NEFU*. 2024, Vol. 21, No. 3. Pp. 39–49. DOI: 10.25587/2222-5404-2024-21-3-39-49

The authors are grateful for research support from the Russian Science Foundation, grant 24-22-00092 (<https://rscf.ru/project/24-22-00092/>).

Введение

Кристаллы на атомном уровне представляют собой дискретные среды с трансляционной симметрией. Нелинейность межатомных взаимодействий и дискретность среды являются двумя необходимыми условиями существования дискретных бризеров (ДБ) или собственных локализованных мод [1–3]. Пространственная локализация колебательной энергии на ДБ обусловлена тем, что частота его колебаний лежит вне спектра низкоамплитудных колебаний кристалла, а ограничение спектра сверху гарантируется дискретностью среды [4]. ДБ с частотой колебаний вне фононного спектра не резонируют с фононами и не тратят свою энергию на их возбуждение.

ДБ влияют на спектры колебаний кристаллов, измеренные методом рентгеновского, комбинационного и нейтронного рассеяния [5]. Они также влияют на теплоемкость, теплопроводность, тепловое расширение и другие свойства кристаллов [6–8]. В присутствии тепловых колебаний ДБ имеют ограниченное время жизни, но их популяция увеличивается с ростом температуры [9–11]. ДБ могут перемещаться вдоль решетки [12], перенося энергию, которая может быть использована для трансформации структуры [13].

В настоящее время для изучения ДБ применяется метод молекулярной динамики. С помощью этого метода ДБ были проанализированы в модельных двумерных решетках [14], в ионных кристаллах [11] и в упорядоченных сплавах [15] с щелью в фононном спектре. Они также изучались в кристаллах с ковалентной связью [16], в металлах с гранецентрированной кубической (ГЦК) [17], объемно-центрированной кубической (ОЦК) [18] и гексагональной плотноупакованной (ГПУ) [19] решетках, в α -урани [20], на поверхности кристалла интерметаллида Pt_3Al [21], простой кубической β -ФПУЦ решетке [22], а также в кристаллах Морзе [9], углеродных нанотрубках [13], графене [23], графене [24], коронене [25] и в магнитных системах [26].

Одномерные моноатомные решетки поддерживают ДБ двух типов: центрированные на частице Сиверса-Такено [2] и центрированные на середине связи Пейджа [3]. ДБ решетки более высокой размерности допускают множество ДБ различной симметрии [18, 27–29]. Для физики твердого тела важно найти все типы ДБ в рассматриваемом кристалле. Насколько известно авторам, строгих методов решения этой задачи не существует. Один из практических подходов к ее решению основан на связи между ДБ и делокализованными нелинейными колебательными модами (ДНКМ), т. е. колебательными модами с волновым вектором на границе первой зоны Бриллюэна. Первыми на эту связь обратили внимание Бурлаков, Киселев и Рупасов, которые обнаружили, что модуляционно неустойчивые ДНКМ порождают хаотические ДБ в нелинейной цепочке [30]. Необходимым условием для наблюдения этого явления является то, что ДНКМ должны иметь частоту вне фононного спектра решетки. При этом условии неустойчивые ДНКМ не могут напрямую передавать свою энергию делокализованным фононам, и её разрушение приводит к локализации энергии на хаотических ДБ. Хаотические ДБ изучались в одномерных [30], двумерных [31] и трехмерных системах [32].

Показано, что различные ДБ в треугольных [30], квадратных [28] и ОЦК [18] решетках могут быть найдены путем наложения локализуемых функций на ДНКМ с частотами выше фононного спектра. Такой подход к нахождению ДБ не является строгим и не гарантирует, что полученные локализованные колебательные моды являются одночастотными точными решениями уравнений движения. На самом деле с помощью этого метода удастся найти долгоживущие бризеры. Концепция квази-бризеров была введена в работе [33]. Авторы провели строгий анализ существования и устойчивости ДБ и квази-бризеров в нелинейной цепочке и доказали, что точные время-периодические ДБ устойчивы до определенной силы межатомного потенциала, а выше этого порога ДБ превращаются в квази-бризер, который не является одночастотной колебательной модой с конечным временем жизни. Они также предложили характеризовать разницу между ДБ и квази-бризерами средним квадратичным отклонением частот отдельных частиц.

В связи с вышесказанным мы приходим к выводу, что поиску ДБ в рассматриваемой решетке должен предшествовать поиск ДНКМ с частотами вне фононной полосы. Эта задача может быть решена с помощью подхода, развитого Чечиным и Сахненко [34], с целью ознакомления с их методом (см. приложение к работе [35]). Их теоретико-групповой метод позволяет находить ДНКМ, учитывая только симметрию решетки. Было показано, что для моноатомных решеток высокой размерности может существовать более одной моды с частотой выше фононной полосы. Например, в треугольной решетке таких ДНКМ три [35], а в квадратной две [28, 36]. В ГЦК-решетке таких мод три [37], а в ОЦК-решетке – четыре [38].

ДНКМ могут быть найдены для бесконечных решеток [39] или для решеток конечного размера [40, 41]. В оригинальных работах они назывались кустами нелинейных нормальных мод (КННМ) [34, 39, 41], но в некоторых более поздних исследованиях они называются ДНКМ. Среди прочих применений ДНКМ полезны для проверки качества межатомных потенциалов [42].

В недавней работе [43] авторы использовали симметрию кристалла для получения КННМ в дискретных нелинейных уравнениях Шрёдингера. Возможность возбуждения КННМ внешним приводом в цепочках с Леннард-Джонсовским взаимодействием была продемонстрирована в работе [41].

Нелинейная динамика ОЦК-решетки заслуживает изучения, поскольку такую решетку имеют железо, молибден, ниобий, вольфрам, тантал, хром, ванадий, марганец и барий. Желательно найти как можно больше типов ДБ в различных ОЦК металлах, и в этом направлении была проделана определенная работа. В основополагающем исследовании по молекулярной динамике, проведенном Хаасом и другими [17], ДБ в ниобии возбуждался с помощью эвристических начальных условий. Используя их подход, Мурзаев с соавторами [44] исследовали движущиеся ДБ в ванадии, железе и вольфраме. Крылова и др. возбудили несколько квази-ДБ в ванадии и ниобии, применив сферическую локализирующую функцию к пяти ДНКМ, две из которых имели частоты выше фононного спектра для всех амплитуд, а три другие обладали этим свойством только при достаточно больших амплитудах [18]. Также было показано, что ДБ в ванадии имеют большее время жизни по сравнению с ДБ в ниобии. Дой и др. [27] построили итерационный метод поиска периодических орбит в фазовом пространстве и с его помощью обнаружили два типа ДБ в модельном кристалле ОЦК. Как видно из предыдущих работ, общего подхода к поиску различных типов ДБ в кристаллах не существует, и в данной работе для поиска новых типов ДБ будет использован метод, ранее применявшийся к другим двумерным [28, 29] и трехмерным [22] решеткам.

Метод моделирования

ОЦК-решетка показана на рис. 1. Параметр решетки кубической трансляционной ячейки равен a ; эта ячейка содержит два атома. ОЦК-решетка представляет собой объединение двух простых кубических решеток, сдвинутых одна относительно другой на вектор $1/2(a,a,a)$, атомы одной из которых показаны синими кружками, а другой – красными.

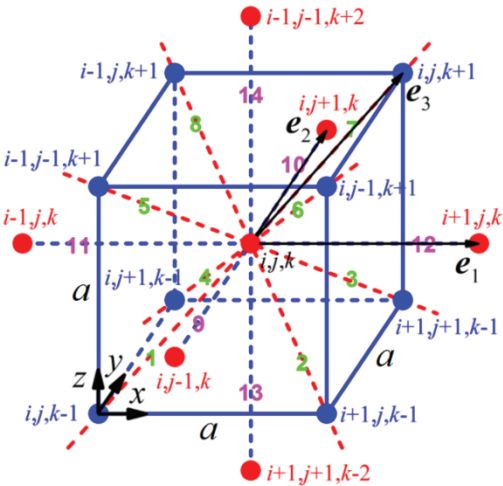


Рис. 1. Структура ОЦК кристалла с параметром решетки a
Fig. 1. Structure of BCC crystal with lattice parameter a

Учитываются ближайшие и соседние связи, показанные красным и синим цветами, соответственно. Примитивная трансляционная ячейка определяется векторами трансляции $\mathbf{e}_1=(a,0,0)$, $\mathbf{e}_2=(0,a,0)$ и $\mathbf{e}_3=1/2(a,a,a)$. Нумерация точек решетки, первых и вторых связей показана для атома с индексами i,j,k . Решетка ОЦК с шагом a представляет собой набор точек с радиус-векторами:

$$\xi_{i,j,k} = i\mathbf{e}_1 + j\mathbf{e}_2 + k\mathbf{e}_3, \quad (1)$$

где i, j и k – целые числа, а $\mathbf{e}_1=(h,0,0)$, $\mathbf{e}_2=(0,h,0)$ и $\mathbf{e}_3=1/2(h,h,h)$ – базисные векторы.

Атомы с массой m размещены в точках решетки. Вектор смещения атома i,j,k из его положения на решетке обозначается как $\delta_{i,j,k}=(u_{i,j,k}, v_{i,j,k}, w_{i,j,k})$. Положение этого атома в момент времени t равно $\mathbf{r}_{i,j,k}(t) = \xi_{i,j,k} + \delta_{i,j,k}(t)$. Каждый атом взаимодействует с восемью первыми и шестью вторыми соседями через межатомный потенциал β -ФПУЦ:

$$\varphi_{1,2}(r) = \frac{c_{1,2}}{2} (r - a_{1,2})^2 + \frac{\beta_{1,2}}{4} (r - a_{1,2})^4, \quad (2)$$

где r – расстояние между атомами, $a_1=\sqrt{3}a/2$ и $a_2=a$ для ближайшей и соседней связей, соответственно; c_1 и c_2 (β_1 и β_2) – коэффициенты гармонической (ангармонической) части потенциала для ближайшей и соседней связей, соответственно. Принимаем $a=1$ и $c_1=1$, выбирая единицы измерения расстояния и энергии, соответственно. Для простоты $c_2=1/5$, так как в кристаллах сила межатомных взаимодействий обычно уменьшается с увеличением расстояния между атомами. Для коэффициентов ангармоничности зададим $\beta_1=\beta_2=20$ (ангармонизм жесткого типа) и $\beta_1=\beta_2=-20$ (ангармонизм мягкого типа), тогда эффекты нелинейности становятся заметными для атомных смещений порядка $0,1a$. Для массы атома $m=1$ задается выбором единицы времени.

Рассматривается вычислительная ячейка с $I \times J \times K$ атомов при периодических граничных условиях, $\mathbf{r}_{i,j,k} = \mathbf{r}_{i+I,j,k} = \mathbf{r}_{i,j+J,k} = \mathbf{r}_{i,j,k+K}$.

Гамильтониан системы представляют собой сумму кинетических энергий атомов и потенциальных энергий связей первых и вторых соседей:

$$H = K + P_1 + P_2 = \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \sum_{k=1}^K \frac{m}{2} |\dot{\mathbf{r}}_{i,j,k}|^2 + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \sum_{k=1}^K \left(\sum_{s=1}^8 \varphi_1(|\mathbf{R}_{i,j,k,s}|) + \sum_{l=9}^{14} \varphi_2(|\mathbf{R}_{i,j,k,l}|) \right), \quad (3)$$

где производная по времени обозначается через точку, а векторы $\mathbf{R}_{i,j,k,s}$, $\mathbf{R}_{i,j,k,l}$ соединяют атом i,j,k с его первыми и вторыми соседями.

Уравнения движения, соответствующие гамильтониану (3), имеют вид:

$$\begin{aligned} m\ddot{u}_{i,j,k} &= \sum_{s=1}^8 D_1 R_{i,j,k,s,x} + \sum_{l=9}^{14} D_2 R_{i,j,k,s,x}, \\ m\ddot{v}_{i,j,k} &= \sum_{s=1}^8 D_1 R_{i,j,k,s,y} + \sum_{l=9}^{14} D_2 R_{i,j,k,s,y}, \\ m\ddot{w}_{i,j,k} &= \sum_{s=1}^8 D_1 R_{i,j,k,s,z} + \sum_{l=9}^{14} D_2 R_{i,j,k,s,z}, \\ D_1 &= \frac{\varphi_1'(|\mathbf{R}_{i,j,k,s}|)}{|\mathbf{R}_{i,j,k,s}|}, D_2 = \frac{\varphi_2'(|\mathbf{R}_{i,j,k,l}|)}{|\mathbf{R}_{i,j,k,l}|}. \end{aligned} \quad (4)$$

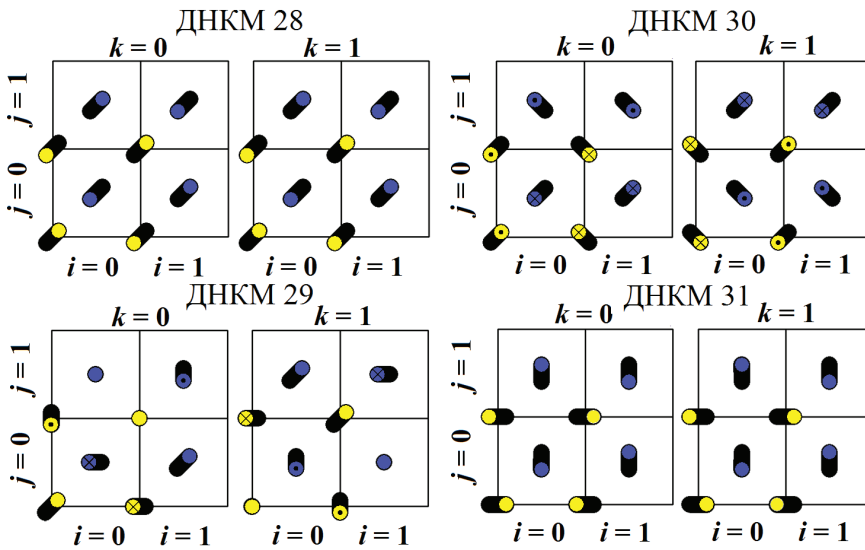


Рис. 2. Группа G5 однокомпонентных ДНКМ в ОЦК-решетке
 Fig. 2. G5 group of single-stranded DNVN in the BCC lattice

Размер вычислительной ячейки зависит от задачи. При расчете частотных характеристик ДНКМ размер ячейки составляет $I=J=K/2=2$, а при поиске ДБ – $I=J=K/2=20$. В первом случае используются периодические граничные условия, а во втором – поглощающие для поглощения низкоамплитудных волн, излучаемых ДБ при его стабилизации.

Для численного решения уравнений движения атомов использовался симплектический метод Штормера шестого порядка [45] с шагом интегрирования 0.001 единицы времени.

Результаты исследования

Зонно-граничные ДНКМ и их частотные характеристики.

Анализ симметрии ОЦК-решетки, проведенный Щербининым [38] на основе теоретико-группового подхода, разработанного Чечиным и Сахненко [34], выявил 31 зонно-граничные ДНКМ. ДНКМ разделились на пять групп в соответствии с их частотой в низкоамплитудном пределе. Будет рассмотрена одна из таких групп, а именно G5.

Индексами i, j, k обозначаются кубические трансляционные ячейки с параметром решетки, равным a , по координатам x, y и z , соответственно. ДНКМ, принадлежащие группе G5, показаны на рис. 2 в кубе, содержащем $2 \times 2 \times 2$ кубических ячеек или 16 атомов. Атомы двух кубических подрешеток с параметром решетки a показаны желтыми и синими кружками, соответственно. Показаны атомы, максимально отклонившиеся от своих положений в решетке. Скорости атомов в этих положениях равны нулю. Стрелками показаны компоненты вектора смещения в плоскости xu , а смещения вдоль оси z показаны точками (положительные), крестиками (отрицательные) или пустыми кружками (нулевые). Все ненулевые компоненты векторов перемещений равны.

В ДНКМ 28 и 31 атомы вибрируют в плоскости xu , а в ДНКМ 29 и 30 имеют все три ненулевые компоненты вектора смещения. В ДНКМ 29 четыре из 16 атомов в расчетной ячейке остаются в состоянии покоя, когда другие атомы совершают колебания.

Наша основная цель – поиск зонно-граничных ДНКМ с частотами выше фононного спектра. Частотные характеристики для ДНКМ группы G5 показаны на рис. 3. Был рассмотрен случай жесткой нелинейности ($\beta_1=\beta_2=20$). Другие параметры модели: $m=1$, $c_1=1$ и $c_2=0.2$. Наибольшая фононная частота, $\omega_{\max}=2,477$, показана горизонтальной пунктирной линией.

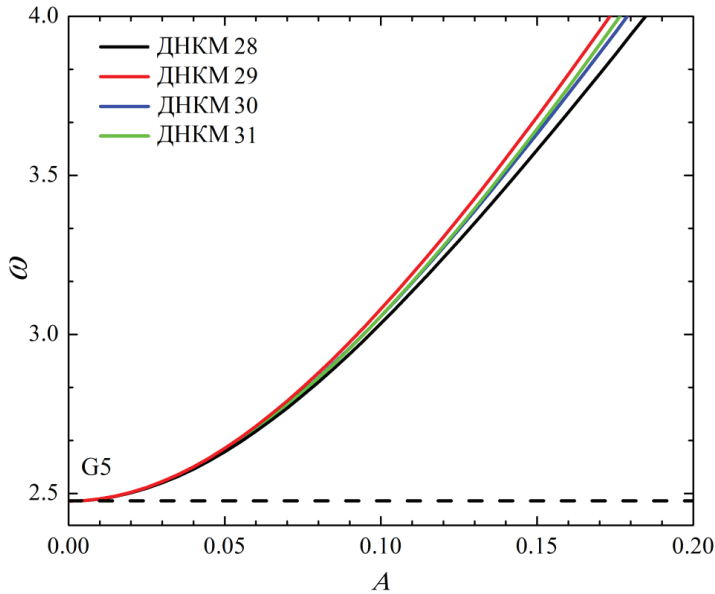


Рис. 3. Частотная характеристика ДНКМ для β -ФПУЦ ОЦК-решетки
Fig. 3. Frequency response of DNVМ for the β -FPUC of the BCC lattice

Из рис. 3 видно, что ДНКМ группы G5 в случае ангармоничности жесткого типа отщепляются от фоновой полосы и растут над фоновым спектром. Эти ДНКМ являются кандидатами на получение ДБ путем наложения функций локализации.

Дискретные бризеры.

Как уже отмечалось ранее, будут находиться долгоживущие квази-бризеры [33], которые не обязательно являются точными решениями уравнений движения (4). Для краткости квази-бризеры будем называть ДБ. ДБ строятся путем наложения локализирующих функций на ДНКМ группы G5, а именно ДНКМ 28, ДНКМ 29, ДНКМ 30 и ДНКМ 31, поскольку они имеют частоты выше фонового спектра.

Дальнейшее упрощение поиска параметров функции локализации достигается предположением, что все параметры локализации равны, а именно $\gamma_1 = \gamma_2 = \gamma_3 = \gamma$, тогда:

$$a_{i,j,k} = \frac{A}{\cosh(\gamma |x_{i,j,k} + L_4|) \cosh(\gamma |y_{i,j,k} + M_4|) \cosh(\gamma |z_{i,j,k} + N_4|)}. \quad (5)$$

ДБ получается следующим образом. Для выбранных параметров локализирующей функции (5) A , γ , L_4 , M_4 и N_4 с учетом конкретной ДНКМ задаются начальные смещения атомов, сохраняя шаблон ДНКМ и находя длины векторов смещений $a_{i,j,k}$ для каждого атома в расчетной ячейке. Начальные скорости всех атомов задаются равными нулю. Затем начинается численный прогон, и при правильном выборе параметров локализирующей функции только часть энергии будет излучаться и поглощаться поглощающими граничными условиями, и образуется долгоживущий квази-бризер. Время, необходимое для формирования квази-бризера, обозначается как t^* , оно обычно равно 15–30 периодам колебаний или 30–60 единицам времени. Такой подход хорошо работает, по крайней мере, для высокоамплитудных ДБ, поэтому мы берем относительно большие значения A , порядка 0,1а.

Примеры квази-ДБ, полученных с помощью описанной выше процедуры, приведены на рис. 4.

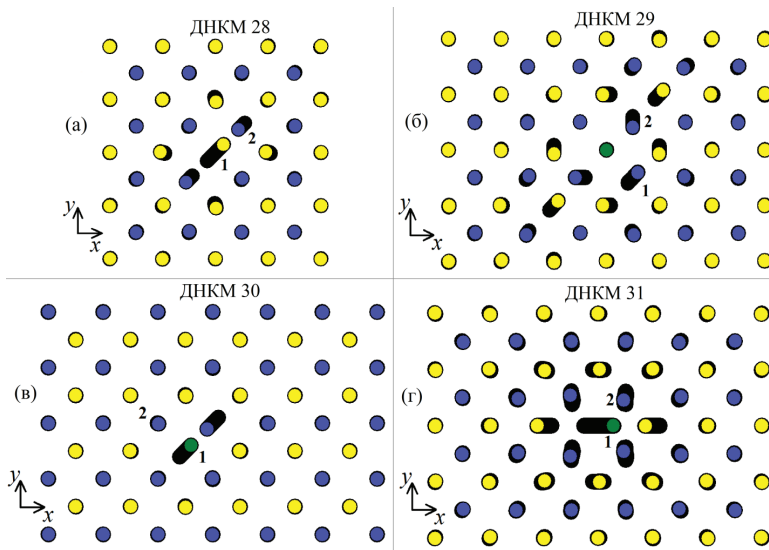


Рис. 4. ДБ на основе ДНКМ 28, ДНКМ 29, ДНКМ 30 и ДНКМ 31
 Fig. 4. DB based on DNVМ 28, DNVМ 29, DNVМ 30 and DNVМ 31

На рис. 4(а) показан пример ДБ, основанных на ДНКМ 28. Параметры функции локализации (5) составляют $A=0.15$, $\gamma=1.7$, а центр локализации расположен на атоме путем задания $L_4=M_4=N_4=0$. Атомные траектории проецируются на плоскость xy ; атомы показаны в момент максимального отклонения от положения решетки. Атомные смещения умножены на коэффициент 2. Атомы, окрашенные в желтый и синий цвета, принадлежат двум кубическим подрешеткам решетки ОЦК. В ДНКМ 28 все атомы колеблются в плоскости xy .

На основе ДНКМ 29 получается очень необычный ДБ, показанный на рис. 4(б). Напомним, что в ДНКМ 29 одни атомы находятся в состоянии покоя, а другие вибрируют (рис. 2). ДБ получен для следующих параметров локализующей функции (5): $A=0.2$, $\gamma=1.59$; центр локализации расположен на покоящемся атоме при задании $L_4=M_4=-a$ и $N_4=0$.

Далее следует междоузельный ДБ на основе ДНКМ 30, он показан на рис. 4(в). Параметры локализующей функции (5), используемой для возбуждения этого ДБ: $A=0.3$, $\gamma=2.3$; центр локализации расположен между двумя соседними атомами, принадлежащими к разным кубическим подрешеткам, путем задания $L_4=M_4=N_4=-a/4$.

На основе ДНКМ 31 нам удалось возбудить три ДБ различной симметрии. Один из них показан на рис. 4(г). Междоузельный ДБ возбуждался с параметрами $A=0.3$, $\gamma=2.0$, $L_4=-a/2$ и $M_4=N_4=0$. Центр локализации выбран между двумя соседними атомами кубической подрешетки.

Заключение

В данной работе анализируются делокализованные и пространственно локализованные нелинейные колебательные моды β -ФПУЦ ОЦК решетки.

Используя теоретико-групповой подход [34], Щербинин нашел 31 ДНКМ с волновыми векторами на границе первой зоны Бриллюэна (рис. 2). ДНКМ найдены с учетом только симметрии ОЦК-решетки и, следовательно, существуют как точные решения для любого типа междоузельного потенциала и любой амплитуды.

Частотные характеристики ДНКМ были рассчитаны для случаев жесткой ангармоничности (рис. 3). Для ОЦК-решетки с жесткой ангармоничностью четыре ДНКМ имеют частоты выше фононного спектра, а именно ДНКМ 28, 29, 30 и 31 (рис. 2). Эти ДНКМ были отнесены к группе G5. При малых амплитудах они превращаются в фононы

с волновым вектором в точке N первой зоны Бриллюэна. Частота этих фононов равна $\omega_{\max} = 2\sqrt{[(4/3)c_1 + c_2]}/m$.

В результате исследования были получены 6 долгоживущих квази-бризеров путем наложения локализирующих функций на четыре ДНКМ с частотами выше фононной полосы (рис. 4). Чтобы продемонстрировать простоту получения квази-бризеров, по крайней мере, для случая больших амплитуд, намеренно не был оптимизирован выбор параметров локализирующей функции, и она принималась в очень простой форме (5).

Результаты этого исследования подтверждают эффективность поиска долгоживущих квази-бризеров в сложных решетках, начиная с анализа ДНКМ. В дальнейшем полученные квази-бризерные решения могут быть использованы в качестве начальных условий для итерационной процедуры поиска точных ДБ, если они существуют с симметрией, диктуемой соответствующими ДНКМ.

Л и т е р а т у р а / R e f e r e n c e s

1. Dolgov AS. On localisation of oscillations in nonlinear crystal structure. *Soviet Physics - Solid State*, 1986;28:907.
2. Sievers AJ, Takeno S. Intrinsic localised modes in anharmonic crystals. *Physical Review Letters*, 1988;61(8):970.
3. Page JB. Asymptotic solutions for localised vibrational modes in strongly anharmonic periodic systems. *Physical Review B*, 1990;41:7835.
4. Flach S, Willis CR. Discrete breathers. *Physics Reports*. 1998;295(5):181–264.
5. Sievers AJ, Sato M, Page JB, et al. Thermally populated intrinsic localised modes in pure alkali halide crystals. *Physical Review B*, 2013;88:104305.
6. Manley ME. Impact of intrinsic localised modes of atomic motion on materials properties. *Acta Materialia*, 2010;58(8):2926.
7. Xiong D, Wang J, Zhang Y, et al. Non-universal heat conduction of one-dimensional lattices. *Physical Review E*, 2012;85:020102.
8. Dubinko VI, Selyshchev PA, Archilla JFR. Reaction-rate theory with account of the crystal anharmonicity. *Physical Review E*, 2011;83:041124.
9. Khadeeva LZ, Dmitriev SV. Lifetime of gap discrete breathers in diatomic crystals at thermal equilibrium. *Physical Review B*, 2011;84:144304.
10. Baimova JA, Murzaev RT, Rudskoy AI. Discrete breathers in graphane in thermal equilibrium. *Physics Letters A*, 2017;381(36):3049.
11. Riviere A, Lepri S, Colognesi D, et al. Wavelet imaging of transient energy localisation in nonlinear systems at thermal equilibrium: The case study of NaI crystals at high temperature. *Physical Review B*. 2019;99:024307.
12. Duran H, Cuevas-Maraver J, Kevrekidis PG, et al. Moving discrete breathers in a β -FPU lattice revisited. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, 2022;111:106435.
13. Shimada T, Shirasaki D, Kitamura T. Stone-Wales transformations triggered by intrinsic localised modes in carbon nanotubes. *Physical Review B*, 2010;81:035401.
14. Feng B.-F, Kawahara T. Discrete breathers in two-dimensional nonlinear lattices. *Wave Motion*, 2007;45(1–2):68–82.
15. Medvedev NN, Starostenkov MD, Zakharov PV, et al. Localised oscillating modes in two-dimensional model of regulated Pt3Al alloy. *Technical Physics Letters*, 2011;37(2):98–101.
16. Voulgarakis NK, Hadjisavvas G, Kelires PC, et al. Computational investigation of intrinsic localisation in crystalline Si. *Physical Review B*, 2004;69:113201.
17. Haas M, Hizhnyakov V, Shelkan A, et al. Prediction of high-frequency intrinsic localised modes in Ni and Nb. *Physical Review B*, 2011;84:144303.
18. Krylova KA, Lobzenko IP, Semenov AS, et al. Spherically localised discrete breathers in bcc metals V and Nb. *Computational Materials Science*, 2020;180:109695.

19. Bachurina OV, Murzaev RT, Semenov AS, et al. Properties of moving discrete breathers in Beryllium. *Physics Solid State*, 2018;60(5):989–94.
20. Murzaev RT, Babicheva RI, Zhou K, et al. Discrete breathers in alpha-uranium. *The European Physical Journal B*, 2016;89(7):168.
21. Zakharov PV, Korznikova EA, Dmitriev SV, et al. Surface discrete breathers in Pt3Al intermetallic alloy. *Surface Science*, 2019;679:1–5.
22. Shcherbinin SA, Kazakov AM, Bebikhov YV, et al. Delocalised nonlinear vibrational modes and discrete breathers in β -FPUT simple cubic lattice. *Physical Review E*, 2024;109:014215.
23. Hizhnyakov V, Klopov M, Shelkan A. Transverse intrinsic localised modes in monatomic chain and in grapheme. *Physics Letters A*, 2016;380(9–10):1075–81.
24. Krylova KA, Baimova JA, Murzaev RT, et al. Energy exchange between discrete breathers in graphane in thermal equilibrium. *Physics Letters A*, 2019;383(14):1583.
25. Savin AV, Dmitriev SV. Influence of the internal degrees of freedom of coronene molecules on the nonlinear dynamics of a columnar chain. *Physical Review E*, 2023;107:054216.
26. Kavitha L, Mohamadou A, Parasuraman E, et al. Modulational instability and nano-scale energy localisation in ferromagnetic spin chain with higher order dispersive interactions. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 2016;404:91–118.
27. Doi Y, Komiya T, Nagashima S, et al. Search of Nonlinear Energy Localised Structure in BCC Crystals. *Journal of the Society of Materials Science*, 2021;70(4):330.
28. Naumov EK, Bebikhov YV, Ekomasov EG, et al. Discrete breathers in square lattices from delocalised nonlinear vibrational modes. *Physical Review E*, 2023;107(3):034214.
29. Babicheva RI, Semenov AS, Soboleva EG, et al. Discrete breathers in a triangular β -Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou lattice. *Physical Review E*, 2021;103:052202.
30. Burlakov VM, Kiselev SA, Rupasov VI. Localised vibrations of homogeneous anharmonic chains. *Physics Letters A*, 1990;147(2):130.
31. Dauxois T, Khomeriki R, Piazza F, et al. The anti-FPU problem. *Chaos*. 2005;15(1):015110.
32. Kolesnikov ID, Shcherbinin SA, Bebikhov YV, et al. Chaotic discrete breathers in bcc lattice. *Chaos, Solitons and Fractals*, 2024;178:114339.
33. Chechin GM, Dzhelauhova GS, Mehonoshina EA. Quasibreathers as a generalisation of the concept of discrete breathers. *Physical Review E*, 2006;74:036608.
34. Chechin GM, Sakhnenko VP. Interactions between normal modes in nonlinear dynamical systems with discrete symmetry. Exact results. *Physics D*, 1998;117(1–4):43–76.
35. Ryabov DS, Chechin GM, Upadhyaya A, et al. Delocalised nonlinear vibrational modes of triangular lattices. *Nonlinear Dynamics*, 2020;102(4):2793.
36. Ryabov DS, Chechin GM, Naumov EK, et al. One-component delocalised nonlinear vibrational modes of square lattices. *Nonlinear Dynamics*. 2023;111(9):8135.
37. Babicheva RI, Semenov AS, Shcherbinin SA, et al. Effect of the stiffness of interparticle bonds on properties of delocalised nonlinear vibrational modes in an fcc lattice. *Physical Review E*, 2022;105(5):064204.
38. Kosarev IV, Shcherbinin SA, Kistanov AA, et al. An approach to evaluate the accuracy of interatomic potentials as applied to Tungsten. *Computational Materials Science*, 2024;231:112597.
39. Chechin GM, Ryabov DS, Shcherbinin SA. Nonlinear vibrational modes in graphene: Group-theoretical results. *Letters on Materials*, 2016;6(1):9–15.
40. Chechin G, Ryabov D. Exact solutions of nonlinear dynamical equations for large-amplitude atomic vibrations in arbitrary monoatomic chains with fixed ends. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, 2023;120:107176.
41. Chechin G, Bezuglova G. Resonant excitation of the bushes of nonlinear vibrational modes in monoatomic chains. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, 2023;(126):107509.
42. Shcherbinin SA, Krylova KA, Chechin GM, et al. Delocalised nonlinear vibrational modes in fcc metals. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, 2022;104:106039.
43. Schindler F, Bulchandani VB, Benalcazar WA. Nonlinear breathers with crystalline symmetries. 2023. Available at: <https://arxiv.org/pdf/2309.07244.pdf>. [Accessed: 15 Sep 2023].

44. Murzaev RT, Kistanov AA, Dubinko VI, et al. Moving discrete breathers in bcc metals V, Fe and W. Computational Materials Science, 2015;98:88–92.

45. Bakhvalov NS. Numerical methods: analysis, algebra, ordinary differential equations. Moscow: MIR Publishers, 1977.

БЕБИХОВ Юрий Владимирович – к. ф.-м. н., доцент каф. ЭиАПП Политехнического института (филиала), ФГАОУ ВО «Северо-Восточный федеральный университет им. М.К. Аммосова».

E-mail: bebikhov.yura@mail.ru

Yuri V. BEBIKHOV – Cand. Sci. (Phys. and Math.), Assoc. Prof. of the Department of Electrification and Automation of Industrial Production, Polytechnic Institute (branch), M.K. Ammosov North-Eastern Federal University.

СЕМЁНОВА Мария Николаевна – к. ф.-м. н., доцент каф. ФиПМ Политехнического института (филиала), ФГАОУ ВО «Северо-Восточный федеральный университет им. М.К. Аммосова».

E-mail: mariya_semyonova86@mail.ru

Mariya N. SEMENOVA – Cand. Sci. (Phys. and Math.), Assoc. Prof. of the Department of Fundamental and Applied Mathematics, Polytechnic Institute (branch) M.K. Ammosov North-Eastern Federal University.

АБДУЛЛИНА Дина Ураловна – м. н. с., ФГБНУ «Институт физики молекул и кристаллов» УФИЦ РАН.

E-mail: abdullina.dina-u@net.ugatu.su

Dina U. ABDULLINA – Junior Researcher, Institute of Molecule and Crystal Physics UFRC RAS.

НАУМОВ Евгений Константинович – аспирант, ФГБНУ «Институт физики молекул и кристаллов» УФИЦ РАН.

E-mail: naumov.evg-k@net.ugatu.su

Evgeny K. NAUMOV – Postgraduate Student, Institute of Molecule and Crystal Physics UFRC RAS.

ДМИТРИЕВ Сергей Владимирович – д. ф.-м. н., проф., зав. лаб., ФГБНУ «Институт физики молекул и кристаллов» УФИЦ РАН.

E-mail: dmitriev.sergey.v@gmail.com

Sergey V. DMITRIEV – Dr. Sci. (Phys. and Math.), Prof., Head of the Laboratory, Institute of Molecule and Crystal Physics UFRC RAS.