

УДК 538.9

<https://doi.org/10.25587/2222-5404-2025-22-4-67-78>

Оригинальная научная статья



Моделирование стационарных и осциллирующих дискретных бризеров в биатомном кристалле типа CsCl

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

¹Политехнический институт (филиал) Северо-Восточного федерального университета им. М.К. Аммосова, г. Мирный, Российская Федерация

²Институт физики молекул и кристаллов Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук, г. Уфа, Российская Федерация

✉ mariya_semyonova86@mail.ru

Аннотация

В настоящей работе исследуется моделирование стационарных и осциллирующих дискретных бризеров в биатомном кристалле типа CsCl с межатомными взаимодействиями, описываемыми потенциалом β -FPUT, при помощи методов молекулярной динамики. Дискретные бризеры (ДБ) – это пространственно локализованные колебания частиц в бездефектных нелинейных цепочках, которые могут существовать только в дискретных средах и нелинейных системах. Упорядоченные структуры типа CsCl относятся к кристаллам с объемно-центрированной кубической (ОЦК) решеткой, нелинейная динамика которых в последнее время привлекает высокий интерес и внимание исследователей. Представлена история открытия и эволюция исследований в изучении ДБ и делокализованных нелинейных колебательных мод (ДНКМ). Показан увеличивающийся интерес в изучении подвижных ДБ, способных переносить энергию по кристаллической решетке. Изображена расчетная ячейка ОЦК кристалла со структурой CsCl, где анализируется случай большой разницы в атомных массах компонентов. Показаны ДНКМ и ее частотная характеристика, где в фононном спектре кристалла возникает щель. Представлена частотная характеристика ДБ с жестким типом нелинейности, численно найденного в щели фононного спектра путем применения функции локализации к ДНКМ. Эта функция имеет вид гиперболического косинуса, что позволяет частоте ДБ с ростом амплитуды оторваться от нижней границы фононного спектра. В результате молекулярно-динамического моделирования в пакете LAMMPS получены ДБ, центрированные на атоме и между двумя соседними тяжелыми атомами. Показаны их движения, где атомы тяжелой подрешетки движутся с гораздо большими амплитудами, чем легкие атомы. Наконец, показаны временные зависимости стационарного ДБ, центрированного на атоме, и ДБ, осциллирующих вблизи этой конфигурации. Отмечена возможность существования ДБ только с амплитудой колебаний более 0,2 от межатомного расстояния.

Ключевые слова: молекулярно-динамическое моделирование, дискретный бризер, делокализованная нелинейная колебательная мода, кристаллическая решетка, биатомный кристалл, упорядоченный сплав, структура типа CsCl, частотная характеристика, функция локализации, потенциал β -FPUT, пакет LAMMPS

Финансирование. Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда, грант № 24-22-00092

Для цитирования: Семёнова М. Н., Бебихов Ю. В., Наумов Е. К., Дмитриев С. В. Моделирование стационарных и осциллирующих дискретных бризеров в биатомном кристалле типа CsCl. *Вестник СВФУ*. 2025, Т. 22, № 4. С. 67–78. DOI: 10.25587/2222-5404-2025-22-4-67-78

Original article

Modeling of stationary and oscillating discrete breather in a CsCl type biatomic crystal

Mariya N. Semenova¹ ✉, Yuriy V. Bebikhov¹, Evgeniy K. Naumov², Sergey V. Dmitriev²

© Семёнова М. Н., Бебихов Ю. В., Наумов Е. К., Дмитриев С. В., 2025

¹Polytechnic Institute (branch) M.K. Ammosov North-Eastern Federal University,
Mirny, Russian Federation

²Institute of Molecule and Crystal Physics, Ufa Federal Research Center
of the Russian Academy of Sciences, Ufa, Russian Federation

✉ mariya_semyonova86@mail.ru

Abstract

This paper explores the modeling of stationary and oscillating discrete breathers in a biatomic crystal of the CsCl type with interatomic interactions described by the β -FPUT potential using molecular dynamics methods. Discrete breathers (DBs) are spatially localized oscillations of particles in defect-free nonlinear chains that can exist only in discrete media and nonlinear systems. Ordered CsCl-type structures belong to crystals with a body-centered cubic (BCC) lattice, the nonlinear dynamics of which have recently attracted considerable interest and attention from researchers. The history of the discovery and evolution of research into DBs and delocalized nonlinear vibrational modes (DNVMs) is presented. Growing interest in the study of mobile DBs capable of transferring energy across the crystal lattice is demonstrated. A computational cell for a bcc crystal with a CsCl structure is depicted, where the case of a large difference in the atomic masses of the components is analyzed. The DNVM and its frequency response are shown, where a gap appears in the phonon spectrum of the crystal. The frequency response of a discrete breather with a hard type of nonlinearity is presented, numerically found in the gap of the phonon spectrum by applying the localization function to the DNVM. This function has the form of a hyperbolic cosine, which allows the discrete breather frequency to deviate from the lower boundary of the phonon spectrum with increasing amplitude. Molecular dynamics simulations in the LAMMPS package resulted in discrete breathers centered on an atom and between two adjacent heavy atoms. Their motions are shown, where the atoms of the heavy sublattice move with much larger amplitudes than the light atoms. Finally, the time dependences of a stationary discrete breather centered on an atom and of discrete breathers oscillating near this configuration are shown. The possibility of the existence of discrete breathers only with an oscillation amplitude greater than 0.2 of the interatomic distance is noted.

Keywords: molecular dynamics simulation, discrete breather, delocalized nonlinear vibrational mode, crystal lattice, biatomic crystal, ordered alloy, CsCl-type structure, frequency response, localization function, β -FPUT potential, LAMMPS package

Funding. This work was carried out as part of a research project with Financial support from the Russian Science Foundation, grant No. 24-22-00092

For citation: Semenova M. N., Bebikhov Yu. V., Naumov E. K., Dmitriev S. V. Modeling of stationary and oscillating discrete breather in a CsCl type biatomic crystal. *Vestnik of NEFU*. 2025, Vol. 22, No. 4. Pp. 67–78. DOI: 10.25587/2222-5404-2025-22-4-67-78

Введение

Практически в одно время почти сорок лет назад отечественные [1] и зарубежные [2] ученые теоретически предсказали существование пространственно локализованных колебаний частиц в бездефектных нелинейных цепочках, которые в последствии были названы дискретными бризерами (ДБ). Для их существования должны выполняться два необходимых, но не всегда достаточных, условия: дискретность исследуемой среды и нелинейность системы [3].

Пионерские работы по ДБ делались физиками на простых одномерных моделях [4], таких как, например, цепочка материальных точек, частицы которой соединены нелинейными пружинами, как показано на рис. 1.

В работе [2], например, были приняты максимальные упрощения этой системы: там коэффициент k_3 был равен нулю и не вводился локальный потенциал U_n . Тем не менее было установлено главное условие существования ДБ: его частота должна лежать вне спектра малоамплитудных колебаний цепочки. Отрыв частоты ДБ от фононного спектра возможен за счет нелинейности цепочки, ведь частота

нелинейных колебаний зависит от амплитуды. Таким образом, ДБ – это сугубо нелинейный объект, который может существовать, только имея достаточно большую амплитуду колебаний, когда нелинейность модели проявляется достаточно сильно, и частота ДБ отходит от края фононного спектра решетки.

Семь лет спустя после открытия ДБ российскими учеными был разработан строгий и общий метод построения делокализованных нелинейных колебательных мод (ДНКМ) [5, 6], заключающийся в теоретико-групповом подходе для поиска всех возможных ДНКМ заданной решетки. Отметим, что ДНКМ – это точное решение уравнений движения для решетки, найденное путем анализа только симметрии решетки [7].

Менее чем через десятилетие после обнаружения ДБ в простых решетках внимание исследователей переключилось на кристаллы, поскольку для них выполняются оба необходимых условия существования ДБ [8]. ДБ были успешно возбуждены в молекулярно-динамических моделях кристаллов с различным типом химической связи: в ионном кристалле NaI [9], в ковалентных кристаллах кремния [10], германия, алмаза [11], в чистых металлах [12, 13] и упорядоченных сплавах [14].

На рис. 2 (слева) представлено схематическое изображение моноатомного кристалла (а), например, чистого металла и биатомного кристалла (б), например,

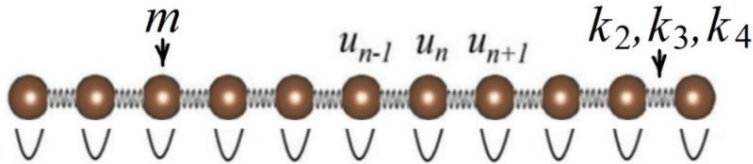


Рис. 1. Цепочка материальных точек массой m . Частицы соединены нелинейными пружинами с коэффициентами k_2, k_3 и k_4 , учитывающими взаимодействие между соседями. U_n – локальный потенциал, который описывает взаимодействие частиц цепочки с ее окружением

Fig. 1. A chain of particle particles with mass m . The particles are connected by nonlinear springs with coefficients k_2, k_3 , and k_4 , accounting for the interaction between neighboring particles. U_n is the local potential that describes the interaction of the particles in the chain with their surroundings

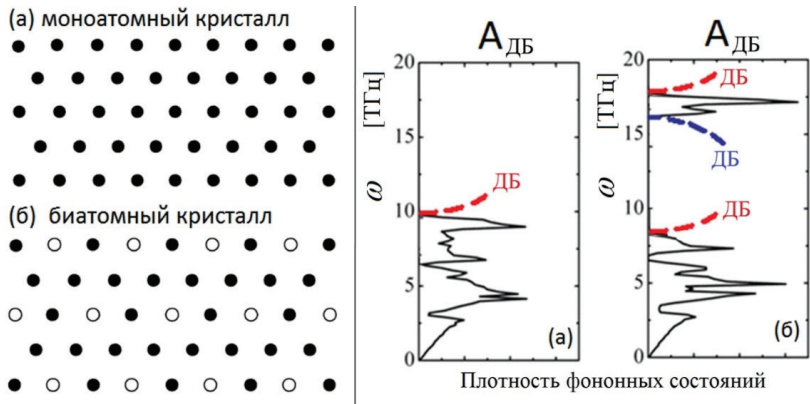


Рис. 2. Схематическое изображение моноатомного (а) и биатомного (б) кристаллов, их плотности фононных состояний и возможные типы дискретных бризеров

Fig. 2. Schematic representation of monoatomic (a) and biatomic (b) crystals, their phonon densities of states and possible types of discrete breathers

упорядоченного сплава. Все чистые металлы имеют сплошной фононный спектр, как показано на правом рисунке 2(а). Что же касается упорядоченных сплавов, то при значительной разнице атомных масс компонентов возможно появление щели в фононном спектре, как показано на правом рис. 2 (б).

Как уже отмечалось ранее, частота ДБ должна лежать вне фононного спектра кристалла. Для чистых металлов имеется только одна возможность получить ДБ с частотой выше фононного спектра. На правой части рис. 2 (а) красной пунктирной кривой схематически показана зависимость частоты ДБ от его амплитуды, где частота растет с амплитудой, отрываясь от края фононного спектра. Для такого случая характерен ДБ с жестким типом нелинейности [15].

В биатомном кристалле атомы легкой компоненты колеблются с более высокими частотами, создавая оптическую полосу в спектре, которая отделена щелью от остальной части спектра, поэтому для упорядоченного сплава имеется три возможности реализации ДБ: с частотой выше фононного спектра, аналогичный тому, что возбуждается в чистых металлах, а также два щелевых ДБ с частотами в щели, как показано на правой части рисунка 2(б), убывающей синей пунктирной кривой и возрастающей красной пунктирной кривой. В этом случае характерны ДБ с жестким и мягким типом нелинейности [16].

Помимо стационарных ДБ, особый интерес представляют подвижные дискретные бризеры, поскольку они способствуют переносу энергии в кристаллической решетке [17–20].

В последнее время интерес к нелинейной динамике объемно-центрированной кубической (ОЦК) решетки, к которой относится биатомный кристалл типа CsCl, привлекает внимание исследователей [21–25]. В работе [26] были найдены ДНКМ в ОЦК решетке с взаимодействиями, описываемыми межатомным потенциалом β -FPUT, а в работах [27, 28] были численно изучены хаотические ДБ в ОЦК решетке. Также в работе [29] были смоделированы ДБ в квадратной решетке β -FPUT, возникающие при внешнем воздействии в пределах фононного спектра.

Целью настоящего исследования станет возбуждение стационарных и осциллирующих дискретных бризеров в биатомном кристалле типа CsCl при помощи методов молекулярной динамики. Примитивная расчетная ячейка ОЦК структуры с атомами двух типов, которые отличаются только массами, а межатомные взаимодействия одинаковы, показана на рис. 3. Соотношение масс атомов для данной структуры является практически четырехкратным.

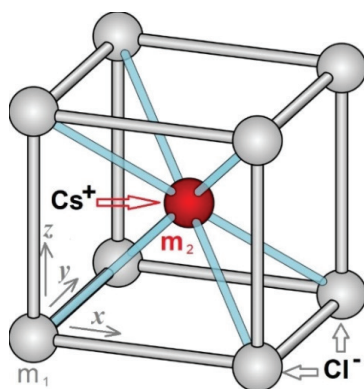


Рис. 3. Расчетная ячейка ОЦК кристалла со структурой CsCl

Fig. 3. Calculation cell of a BCC crystal with a CsCl structure

Материалы и методы

В ранней работе [30] авторами исследовался щелевой ДБ в кристалле со сверхструктурой В2. Там были подробно описаны: компьютерная модель, движение атомов, используемый потенциал β -FPUT, выбор параметров потенциала, метод возбуждения ДБ. Здесь покажем лишь ДНКМ и ее частотную характеристику, которые изображены на рис. 4.

На рис. 4(а) показана ДНКМ с атомными плоскостями (100), колеблющимися в противофазе с соседними плоскостями. Колеблются только атомы одной подрешетки, в то время как атомы другой подрешетки находятся в состоянии покоя. На рис. 4(б) частота ДНКМ отзывается от нижнего края щели в фононном спектре и увеличивается с ростом амплитуды. Амплитуда A нормирована на параметр решетки a . Горизонтальными пунктирными линиями показаны края щели в фононном спектре.

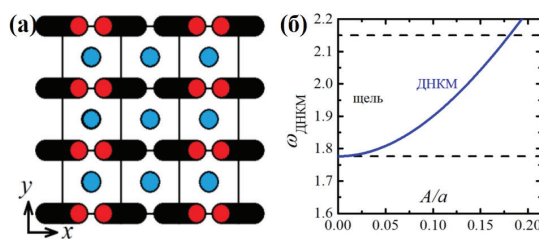


Рис. 4. ДНКМ (а) и её частотная характеристика (б)

Fig. 4. DNVM (a) and its frequency response (b)

Для возбуждения стационарных и осциллирующих ДБ в двухкомпонентном кристалле применим подход, использовавшийся ранее к моноатомным кристаллам [31]. Дискретный бризер получается путем применения к ДНКМ следующей функции локализации:

$$u_{xyz}^0 = \frac{(-1)^{x/a} A}{\cosh[\gamma(x-x_0)] \cosh(\delta y) \cosh(\delta z)}, \quad (1)$$

где u_{xyz}^0 – начальное смещение атома с координатами решетки x, y, z вдоль оси x , A – амплитуда ДНКМ, показанной на рис. 4 (а), γ и δ – параметры локализации вдоль направлений x и направлений y и z , соответственно. Параметр x_0 смещает центр функции локализации вдоль направления x , и для $x_0=0$ он расположен на атоме в начале координат, а для $x_0=a/2$ – между двумя ближайшими атомами с одинаковой массой. В первом случае получим моду Сиверса-Такено [2], а во втором случае – моду Пейджа [32]. При использовании уравнения (1) только тяжелые атомы имеют начальные смещения, кроме того, все атомы в расчетной ячейке имеют нулевые начальные скорости.

Для выбранной амплитуды ДБ A параметры локализации γ и δ находятся методом проб и ошибок, чтобы минимизировать излучение энергии. При больших A ДБ становится более локализованной, и параметры локализации увеличиваются. После того как γ и δ найдены, частота ДБ $\omega_{\text{ДБ}}$ определяется численно (рис. 5).

Результаты и обсуждение

Моделирование проводилось в свободно распространяемом пакете для классической молекулярной динамики LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator).

Примеры ДБ, центрированных на атоме и между двумя соседними тяжелыми атомами, показаны на рис. 6. Они возбуждаются с помощью уравнения (1) с параметрами $A=0,38$, $\gamma=1,4$, $\delta=2,2$, причем на рис. 6 (а) $x_0 = 0$, а

на рис. 6 (б) $x_0 = a/2$. Смещения атомов увеличены, чтобы лучше видеть картину колебаний. Стоит обратить внимание, что атомы тяжелой подрешетки движутся с гораздо большими амплитудами, чем легкие атомы.

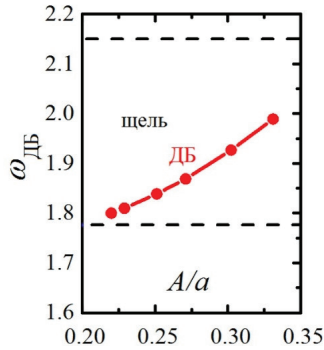


Рис. 5. Частотная характеристика ДБ
Fig. 5. Frequency response DB

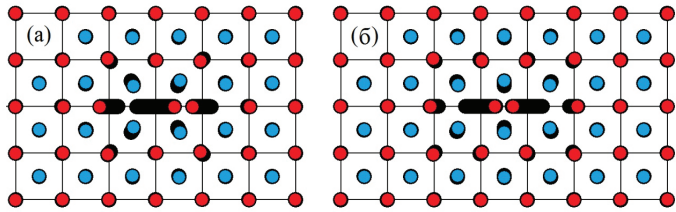


Рис. 6. Движения атомов в ДБ, центрированных на атоме (а) и между двумя соседними тяжелыми атомами (б). Смещения атомов увеличены для наглядности
Fig. 6. Atom motions in the DB, centered on an atom (a) and between two adjacent heavy atoms (b). Atom displacements are exaggerated for clarity

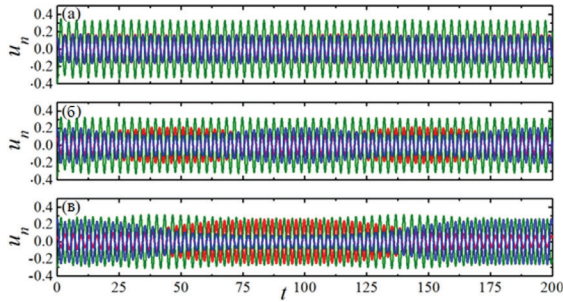


Рис. 7. Стационарный ДБ, центрированный на атоме (а). ДБ, осциллирующие вблизи этой конфигурации (б, в). Показаны временные зависимости смещений u_n вдоль оси x для трех центральных атомов ДБ. Параметры уравнения (1), используемого для возбуждения ДБ, следующие: $A=0.38$, $\beta=1.4$, $\gamma=2.2$, и (а) $x_0=0$, (б) $x_0=0.2a$, и (в) $x_0=0.45a$. На (а) представлен результат для ДБ, показанного на рис. 6 (а)
Fig. 7. A stationary DB centered on an atom (a). DBs oscillating near this configuration (b, c). The time dependences of the displacements u_n along the x -axis are shown for three central atoms of the DB. The parameters of equation (1) used to excite the DB are as follows: $A=0.38$, $\beta=1.4$, $\gamma=2.2$, and (a) $x_0=0$, (b) $x_0=0.2a$, and (c) $x_0=0.45a$. Figure (a) shows the result for the DB shown in Fig. 6 (a)

Ниже на рис. 7(а) зеленой кривой показана временная зависимость x -смещения центрального атома ДБ, центрированного на атоме и показанного на рис. 6(а). Смещения двух соседних атомов показаны синей и красной кривыми: они равны, поэтому кривые накладываются друг на друга. На графиках (б) и (в) рис. 7 центр функции локализации смещен из положения высокой симметрии на $x_0 = 0,2a$ и $0,45a$ соответственно. В этих случаях ДБ осциллируют вблизи высокосимметричного положения. Частота этих колебаний выше на (б), чем на (в). На (б) период колебаний составляет около 100 единиц времени, а на (в) – около 190 единиц времени. Из этого можно сделать вывод, что положение ДБ, центрированного на атоме, стабильно, а между двумя атомами – нестабильно. Уравнение (1) дает очень хорошие начальные условия для стационарных ДБ, поскольку они достигают стационарного колебательного режима всего через несколько периодов колебаний.

Таким образом, вышеприведенным методом могут быть получены ДБ с различными амплитудами. Численно найденная частота ДБ, нанесенная на рис. 5 красными точками и линией, находится в щели фононного спектра и увеличивается с ростом амплитуды. Также видно, что ДБ с амплитудой $A < 0,2a$ не может существовать, так как частота малоамплитудных ДБ приближается к акустической полосе фононного спектра.

Заключение

В настоящем исследовании впервые показано, что в структуре биатомного кристалла типа CsCl с межатомными взаимодействиями, описываемыми потенциалом β -FPUT [33], могут существовать стационарные и осциллирующие ДБ с жестким типом нелинейности в щели фононного спектра. Показаны ДБ, атомные колебания которых центрированы на атоме и находятся посередине между двумя тяжелыми атомами, где центрированный на атоме ДБ является стабильным, а между атомами – нестабильным. ДБ, помещенный между этими двумя конфигурациями с высокой симметрией, осциллирует относительно положения, центрированного на атоме. Частотная характеристика стационарного ДБ показывает, что ДБ с амплитудой $A < 0,2a$ невозможны, так как частота ДБ попадает в акустическую полосу фононного спектра.

Полученные здесь щелевые ДБ следует сравнить с щелевыми ДБ в кристалле NaI [9] и интерметаллическом соединении Pt_3Al [14]. Основное отличие заключается в том, что из-за жесткой нелинейности потенциала β -FPUT, рассматриваемого в данной работе, ДБ в структуре CsCl также проявляет жесткую нелинейность,

в то время как ДБ в NaI и Pt_3Al имеют мягкую нелинейность.

Исследование ДБ в кристаллах типа CsCl может быть продолжено путем рассмотрения более сложных межатомных потенциалов или ab initio моделирования. В семействе CsCl есть много кристаллов с достаточно большой разницей в атомных массах компонент, в которых, в принципе, могут существовать щелевые ДБ, поскольку фононный спектр имеет достаточно «большую» щель. Например, для CsCl отношение масс составляет немногим меньше 4 [34], а для CuBe – более 7 [35].

Л и т е р а т у р а

1. Долгов А.С. О локализации колебаний в нелинейной кристаллической структуре. *Физика твердого тела*. 1986;28(6):1641-1644.
2. Sievers AJ, Takeno S. Intrinsic localized modes in anharmonic crystals. *Physical Review Letters*. 1988;61(8):970-973. DOI: 10.1103/PhysRevLett.61.970.
3. Flach S, Willis C. Discrete breathers. *Physics Reports*. 1998;295(5):181-264. DOI: 10.1016/S0370-1573(97)00068-9.
4. Flach S, Gorbach AV. Discrete breathers - advances in theory and applications. *Physics Reports*. 2008;467(1-3):1-116. DOI: 10.1016/j.physrep.2008.05.002.

5. Сахненко В.П., Чечин Г.М. Симметричные правила отбора в нелинейной динамике атомных систем. *Доклады Академии наук*. 1993;330(3):308-310.
6. Сахненко В.П., Чечин Г.М. Кусты мод и нормальные колебания для нелинейных динамических систем с дискретной симметрией. *Доклады Академии наук*. 1994;338(1):42-45.
7. Chechin GM, Sakhnenko VP. Interactions between normal modes in nonlinear dynamical systems with discrete symmetry. Exact results. *Physica D: Nonlinear Phenomena*. 1998;117(1-4):43-76. DOI: 10.1016/S0167-2789(98)80012-2.
8. Kiselev SA, Bickham SR, Sievers AJ. Anharmonic gap modes in a perfect one-dimensional diatomic lattice for standard two-body nearest-neighbor potentials. *Physical Review B*. 1993;48(18):13508-13511. DOI: 10.1103/physrevb.48.13508.
9. Kiselev SA, Sievers AJ. Generation of intrinsic vibrational gap modes in three-dimensional ionic crystals. *Physical Review B*. 1997;55(9): 5755-5758. DOI: 10.1103/PhysRevB.55.5755.
10. Voulgarakis NK, Hadjisavvas G, Kelires PC, Tsironis G.P. Computational investigation of intrinsic localization in crystalline Si. *Physical Review B*. 2004;69:113201. DOI: 10.1103/PhysRevB.69.113201.
11. Murzaev RT, Bachurin DV, Korznikova EA, Dmitriev SV. Localized vibrational modes in diamond. *Physics Letters A*. 2017;381(11):1003-1008. DOI: 10.1016/j.physleta.2017.01.014.
12. Кистанов А.А., Семенов А.С., Мурзаев Р.Т., Дмитриев С.В. Неподвижные и движущиеся дискретные бризеры в ГПУ металле Co. *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2014;11(3):322-325.
13. Кистанов А.А., Семенов А.С., Мурзаев Р.Т., Дмитриев С.В. Взаимодействие движущихся дискретных бризеров в ГПУ металле Mg. *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2014;11(4-2):572-577.
14. Medvedev NN, Starostenkov MD, Zakharov PV, Pozidaeva OV. Localized oscillating modes in two-dimensional model of regulated Pt₃Al alloy. *Technical Physics Letters*. 2011;37(2):98-101. DOI: 10.1134/S1063785011020106.
15. 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;7(3):327-331. DOI: 10.22226/2410-3535-2017-3-327-331.
16. Семенов А.С., Корзникова Е.А., Дмитриев С.В. Дискретные бризеры с жестким и мягким типом нелинейности в одномерной цепочке с дальнедействующим Морзевским взаимодействием. *Письма о материалах*. 2015;5(1):11-14. DOI: 10.22226/2410-3535-2015-1-11-14.
17. Кистанов А.А., Семенов А.С. Столкновение движущихся дискретных бризеров в двумерном монокристаллическом кристалле. *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2014;11(2):241-244.
18. Kistanov AA, Dmitriev SV, Semenov AS. Properties of moving discrete breathers in a monoatomic two-dimensional crystal. *Journal of Experimental and Theoretical Physics*. 2014;119(4):766-771. DOI: 10.1134/S1063776114100045.
19. Kistanov AA, Dmitriev SV, Semenov AS, et al. Interaction of propagating discrete breathers with a vacancy in a two-dimensional crystal. *Technical Physics Letters*. 2014;40(8):657-661. DOI: 10.1134/S1063785014080069.
20. Bachurina OV, Murzaev RT, Korznikova EA, et al. Properties of moving discrete breathers in beryllium. *Physics of the Solid State*. 2018;60(5):989-994. DOI: 10.1134/S1063783418050049.
21. 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. DOI: 10.1016/j.commatsci.2014.10.061.
22. Krylova KA, Dmitriev SV, Lobzenko IP, et al. Spherically localized discrete breathers in BCC metals V and Nb. *Computational Materials Science*. 2020;180:109695. DOI: 10.1016/j.commatsci.2020.109695.
23. Казаков А.М., Шарапова Ю.Р., Бабичева Р.И. и др. Моделирование преодоления препятствий в виде пор дислокациями в вольфраме. *Frontier Materials & Technologies*. 2022;(3-1):76-84. DOI: 10.18323/2782-4039-2022-3-1-76-84.

24. Шарапова Ю.Р., Казаков А.М., Семенов А.С., и др. Молекулярно-динамический анализ дисперсионного упрочнения когерентными интерметаллидными фазами в ОЦК вольфраме. *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2023;20(4):455-461. DOI: 10.25712/ASTU.1811-1416.2023.04.004.

25. Шарапова Ю.Р., Казаков А.М., Семёнова М.Н., и др. Динамика 2-краудииона и перенос энергии в вольфраме: атомистическое моделирование. *Вестник Северо-Восточного федерального университета им. М.К. Аммосова*. 2024;21(4):73-80. DOI: 10.25587/2222-5404-2024-21-4-73-80.

26. Shcherbinin SA, Bebikhov YV, Abdullina DU, et al. Delocalized nonlinear vibrational modes and discrete breathers in a body centered cubic lattice. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*. 2024;135:108033. DOI: 10.1016/j.cnsns.2024.108033.

27. Bachurin DV, Murzaev RT, Abdullina DU, et al. Chaotic discrete breathers in bcc lattice: Effect of the first-and second-neighbor interactions. *Physica D: Nonlinear Phenomena*. 2024;470:134344. DOI: 10.1016/j.physd.2024.134344.

28. Kolesnikov ID, Shcherbinin SA, Bebikhov YV, et al. Chaotic discrete breathers in bcc lattice. *Chaos, Solitons & Fractals*. 2024;178(8):114339. DOI: 10.1016/j.chaos.2023.114339.

29. Bebikhov YV, Naumov EK, Semenova MN, Dmitriev SV. Discrete breathers in a β -FPUT square lattice from in-band external driving. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*. 2024;132(7475):107897. DOI: 10.1016/j.cnsns.2024.107897.

30. Абдуллина Д.У., Бебихов Ю.В., Семенова М.Н., и др. Щелевой дискретный бризер в биатомном кристалле В2. *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2025;22(2):184-193. DOI: 10.25712/ASTU.1811-1416.2025.02.006.

31. Shcherbinin SA, Kazakov AM, Bebikhov YV, et al. Delocalized nonlinear vibrational modes and discrete breathers in β -FPUT simple cubic lattice. *Physical Review E*. 2024;109(1):014215. DOI: 10.1103/PhysRevE.109.014215.

32. Page JB. Asymptotic solutions for localized vibrational modes in strongly anharmonic periodic systems. *Physical Review B*. 1990;41(11):7835-7838. DOI: 10.1103/physrevb.41.7835.

33. Abdullina DU, Bebikhov YuV, Semenova MN, Dmitriev SV. Excitation of Moving Discrete Breathers in Square β -FPUT Lattice by External Driving. *Physics of the Solid State*. 2025;67(11):977-982. DOI: 10.1134/S1063783425602346.

34. Bingol S, Erdinc B, Akkus H. Electronic band structure, optical, dynamical and thermodynamic properties of cesium chloride (CsCl) from first-principles. *International Journal for Simulation and Multidisciplinary Design Optimization*. 2015;6:A7. DOI: 10.1051/smdo/2015007.

35. Durukan İK, Çiftçi Y. DFT analysis of mechanical and dynamic properties of CuBe. *Gazi University Journal of Science*. 2022;35(4):1652-1663. DOI: 10.35378/gujs.915127.

References

1. Dolgov AS. On the localization of oscillations in a nonlinear crystal structure. *Physics of the Solid State*. 1986;28(6):1641-1644. (in Russian)

2. Sievers AJ, Takeno S. Intrinsic localized modes in anharmonic crystals. *Physical Review Letters*. 1988;61(8):970-973. (in English) DOI: 10.1103/PhysRevLett.61.970.

3. Flach S, Willis C. Discrete breathers. *Physics Reports*. 1998;295(5):181-264. (in English) DOI: 10.1016/S0370-1573(97)00068-9.

4. Flach S, Gorbach AV. Discrete breathers - advances in theory and applications. *Physics Reports*. 2008;467(1-3):1-116. (in English) DOI: 10.1016/j.physrep.2008.05.002.

5. Sakhnenko VP, Chechin GM. Symmetry Selection Rules in Nonlinear Dynamics of Atomic Systems. *Doklady Akademii Nauk*. 1993;330(3):308-310. (in Russian)

6. Sakhnenko VP, Chechin GM. Mode bushes and normal oscillations for nonlinear dynamical systems with discrete symmetry. *Doklady Akademii Nauk*. 1994;338(1):42-45. (in Russian)

7. Chechin GM, Sakhnenko VP. Interactions between normal modes in nonlinear dynamical systems with discrete symmetry. Exact results. *Physica D: Nonlinear Phenomena*. 1998;117(1-4):43-76. (in English) DOI: 10.1016/S0167-2789(98)80012-2.

8. Kiselev SA, Bickham SR, Sievers AJ. Anharmonic gap modes in a perfect one-dimensional diatomic lattice for standard two-body nearest-neighbor potentials. *Physical Review B*. 1993;48(18):13508-13511. (in English) DOI: 10.1103/physrevb.48.13508.
9. Kiselev SA, Sievers AJ. Generation of intrinsic vibrational gap modes in three-dimensional ionic crystals. *Physical Review B*. 1997;55(9): 5755-5758. (in English) DOI: 10.1103/PhysRevB.55.5755.
10. Voulgarakis NK, Hadjisavvas G, Kelires PC, Tsironis G.P. Computational investigation of intrinsic localization in crystalline Si. *Physical Review B*. 2004;69:113201. (in English) DOI: 10.1103/PhysRevB.69.113201.
11. Murzaev RT, Bachurin DV, Korznikova EA, Dmitriev SV. Localized vibrational modes in diamond. *Physics Letters A*. 2017;381(11):1003-1008. (in English) DOI: 10.1016/j.physleta.2017.01.014.
12. Kistanov AA, Semenov AS, Murzaev RT, Dmitriev SV. Stationary and moving discrete breathers in HCP metal Co. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedenia = Basic Problems of Material Science*. 2014;11(3):322-325. (in Russian)
13. Kistanov AA, Semenov AS, Murzaev RT, Dmitriev SV. Interaction of moving discrete breathers in HCP metal Mg. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedenia = Basic Problems of Material Science*. 2014;11(4-2):572-577. (in Russian)
14. Medvedev NN, Starostenkov MD, Zakharov PV, Pozidaeva OV. Localized oscillating modes in two-dimensional model of regulated Pt₃Al alloy. *Technical Physics Letters*. 2011;37(2):98-101. (in English) DOI: 10.1134/S1063785011020106.
15. Semenov AS, Fomin SYu, Zhou K, Soboleva EG. Discrete breather with hard-type nonlinearity in a two-dimensional diatomic crystal. *Letter on materials*. 2017;7(3):327-331. DOI: 10.22226/2410-3535-2017-3-327-331. (in Russian)
16. Semenov AS, Korznikova EA, Dmitriev SV. Discrete breathers with hard and soft types of nonlinearity in a one-dimensional chain with long-range Morse interaction.. *Letter on materials*. 2015;5(1):11-14. DOI: 10.22226/2410-3535-2015-1-11-14. (in Russian)
17. Kistanov AA, Semenov AS. Collision of moving discrete breathers in a two-dimensional monatomic crystal. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedenia = Basic Problems of Material Science*. 2014;11(2):241-244. (in Russian)
18. Kistanov AA, Dmitriev SV, Semenov AS. Properties of moving discrete breathers in a monoatomic two-dimensional crystal. *Journal of Experimental and Theoretical Physics*. 2014;119(4):766-771. (in English) DOI: 10.1134/S1063776114100045.
19. Kistanov AA, Dmitriev SV, Semenov AS, et al. Interaction of propagating discrete breathers with a vacancy in a two-dimensional crystal. *Technical Physics Letters*. 2014;40(8):657-661. (in English) DOI: 10.1134/S1063785014080069.
20. Bachurina OV, Murzaev RT, Korznikova EA, et al. Properties of moving discrete breathers in beryllium. *Physics of the Solid State*. 2018;60(5):989-994. (in English) DOI: 10.1134/S1063783418050049.
21. 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. (in English) DOI: 10.1016/j.commatsci.2014.10.061.
22. Krylova KA, Dmitriev SV, Lobzenko IP, et al. Spherically localized discrete breathers in BCC metals V and Nb. *Computational Materials Science*. 2020;180:109695. (in English) DOI: 10.1016/j.commatsci.2020.109695.
23. Kazakov AM, Sharapova YuR, Babicheva RI, et al. Modeling obstacle overcoming in the form of pores by dislocations in tungsten. *Frontier Materials & Technologies*. 2022;(3-1):76-84. DOI: 10.18323/2782-4039-2022-3-1-76-84. (in Russian)
24. Sharapova YuR, Kazakov AM, Semenov AS, et al. Molecular dynamics analysis of dispersion hardening by coherent intermetallic phases in BCC tungsten *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedenia = Basic Problems of Material Science*. 2023;20(4):455-461. DOI: 10.25712/ASTU.1811-1416.2023.04.004. (in Russian)
25. Sharapova YuR., Kazakov AM, Semenova MN, et al. Dynamics of a 2-crowdion and energy transfer in tungsten: atomistic modeling. *Vestnik of North-Eastern Federal University* . 2024;21(4):73-80. DOI: 10.25587/2222-5404-2024-21-4-73-80. (in Russian)

26. Shcherbinin SA, Bebikhov YV, Abdullina DU, et al. Delocalized nonlinear vibrational modes and discrete breathers in a body centered cubic lattice. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*. 2024;135:108033. (in English) DOI: 10.1016/j.cnsns.2024.108033.
27. Bachurin DV, Murzaev RT, Abdullina DU, et al. Chaotic discrete breathers in bcc lattice: Effect of the first-and second-neighbor interactions. *Physica D: Nonlinear Phenomena*. 2024;470:134344. (in English) DOI: 10.1016/j.physd.2024.134344.
28. Kolesnikov ID, Shcherbinin SA, Bebikhov YV, et al. Chaotic discrete breathers in bcc lattice. *Chaos, Solitons & Fractals*. 2024;178(8):114339. (in English) DOI: 10.1016/j.chaos.2023.114339.
29. Bebikhov YV, Naumov EK, Semenova MN, Dmitriev SV. Discrete breathers in a β -FPUT square lattice from in-band external driving. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*. 2024;132(7475):107897. (in English) DOI: 10.1016/j.cnsns.2024.107897.
30. Abdullina DU, Bebikhov YuV, Semenova MN, et al. Gap discrete breather in a B2 diatomic crystal. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya = Basic Problems of Material Science*. 2025;22(2):184-193. DOI: 10.25712/ASTU.1811-1416.2025.02.006. (in Russian)
31. Shcherbinin SA, Kazakov AM, Bebikhov YV, et al. Delocalized nonlinear vibrational modes and discrete breathers in β -FPUT simple cubic lattice. *Physical Review E*. 2024;109(1):014215. (in English) DOI: 10.1103/PhysRevE.109.014215.
32. Page JB. Asymptotic solutions for localized vibrational modes in strongly anharmonic periodic systems. *Physical Review B*. 1990;41(11):7835-7838. (in English) DOI: 10.1103/physrevb.41.7835.
33. Abdullina DU, Bebikhov YuV, Semenova MN, Dmitriev SV. Excitation of Moving Discrete Breathers in Square β -FPUT Lattice by External Driving. *Physics of the Solid State*. 2025;67(11):977-982. (in English) DOI: 10.1134/S1063783425602346.
34. Bingol S, Erdinc B, Akkus H. Electronic band structure, optical, dynamical and thermodynamic properties of cesium chloride (CsCl) from first-principles. *International Journal for Simulation and Multidisciplinary Design Optimization*. 2015;6:A7. (in English) DOI: 10.1051/smdo/2015007.
35. Durukan İK, Çiftçi Y. DFT analysis of mechanical and dynamic properties of CuBe. *Gazi University Journal of Science*. 2022;35(4):1652-1663. (in English) DOI: 10.35378/gujs.915127.

Сведения об авторах

СЕМЁНОВА Мария Николаевна – к. ф.-м. н., доц. каф. фундаментальной и прикладной математики, Политехнический институт (филиал) ФГАОУ ВО «Северо-Восточный федеральный университет имени М.К. Аммосова» в г. Мирном, г. Мирный, Российская Федерация; <https://orcid.org/0000-0002-7298-0226>, ResearcherID: AAD-2973-2020, Scopus ID: 57204979109, SPIN: 2091-9681, mariya_semyonova86@mail.ru

БЕБИХОВ Юрий Владимирович – д. ф.-м. н., доц., зав. каф. электроэнергетики и автоматизации промышленного производства, Политехнический институт (филиал) ФГАОУ ВО «Северо-Восточный федеральный университет имени М.К. Аммосова» в г. Мирном, г. Мирный, Российская Федерация, <https://orcid.org/0000-0002-8366-4819>, ResearcherID: JCE-6803-2023, Scopus ID: 35329263600, SPIN: 1566-2739, bebikhov.yura@mail.ru

НАУМОВ Евгений Константинович – аспирант Института физики молекул и кристаллов, Уфимский федеральный исследовательский центр Российской академии наук, г. Уфа, Российская Федерация; <https://orcid.org/0000-0002-0320-2797>, Scopus ID: 57798022700, naumov.evg-k@net.ugatu.su

ДМИТРИЕВ Сергей Владимирович – д. ф.-м. н., профессор, зав. лаб. Института физики молекул и кристаллов, Уфимский федеральный исследовательский центр Российской академии наук, г. Уфа, Российская Федерация; <https://orcid.org/0000-0002-6744-4445>, ResearcherID: M-9582-2013, Scopus ID: 7102791521, SPIN: 7894-6739, dmitriev.sergey.v@gmail.com

About the authors

Mariya N. SEMENOVA – Cand. of Sci. (Phys. and Math.), Associate Professor, Polytechnic Institute (branch) M.K. Ammosov North-Eastern Federal University in Mirny, Mirny, Russian Federation, <https://orcid.org/0000-0002-7298-0226>, ResearcherID: AAD-2973-2020, Scopus ID: 57204979109, SPIN: 2091-9681, mariya_semyonova86@mail.ru

Yuriy V. BEBIKHOV – Doct. of Sci. (Phys. and Math.), Associate Professor, Head of the Department of Electric Power Engineering and Industrial Automation, Polytechnic Institute (branch) M.K. Ammosov North-Eastern Federal University in Mirny, Mirny, Russian Federation, <https://orcid.org/0000-0002-8366-4819>, ResearcherID: JCE-6803-2023, Scopus ID: 35329263600, SPIN: 1566-2739, bebikhov.yura@mail.ru

Evgeny K. NAUMOV – Graduate Student of the Institute of Physics of Molecules and Crystals, Ufa Federal Research Center of the Russian Academy of Sciences, Ufa, Russian Federation; <https://orcid.org/0000-0002-0320-2797>, Scopus ID: 57798022700, naumov.evg-k@net.ugatu.su

Sergey V. DMITRIEV – Doct. of Sci. (Phys. and Math.), Professor, Head of laboratory of the Institute of Physics of Molecules and Crystals, Ufa Federal Research Center of the Russian Academy of Sciences, Ufa, Russian Federation; <https://orcid.org/0000-0002-6744-4445>, ResearcherID: M-9582-2013, Scopus ID: 7102791521, SPIN: 7894-6739, dmitriev.sergey.v@gmail.com

Вклад авторов

Семёнова М. Н. – методология, визуализация, ресурсное обеспечение исследования

Бebихов Ю. В. – проведение статистического анализа, получение финансирования, создание черновика рукописи

Наумов Е. К. – программное обеспечение, администрирование данных, проведение исследования

Дмитриев С. В. – разработка концепции, верификация данных, редактирование рукописи.

Authors' contribution

Mariya N. Semenova – methodology, visualization, resources

Yuriy V. Bebikhov – formal analysis, funding acquisition, writing-original draft

Evgeny K. Naumov – software, data curation, investigation

Sergey V. Dmitriev – conceptualization, validation, writing-review & editing.

Конфликт интересов

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов

Conflict of interests

The authors declare no relevant conflict of interests

Поступила в редакцию / Received 25.09.2025

Поступила после рецензирования / Revised 15.10.2025

Принята к публикации / Accepted 03.11.2025