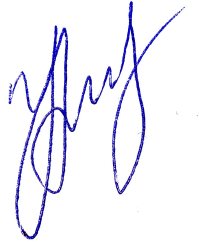


На правах рукописи



АБДУЛЛИНА ДИНА УРАЛОВНА

**ЛИНЕЙНАЯ И НЕЛИНЕЙНАЯ ДИНАМИКА КРИСТАЛЛОВ СО  
СТРУКТУРОЙ В<sub>2</sub> (CsCl)**

Специальность 1.3.8. — Физика конденсированного состояния

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание учёной степени  
кандидата физико-математических наук

Уфа - 2026

Работа выполнена в Институте физики молекул и кристаллов — обособленном структурном подразделении Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского Федерального исследовательского центра Российской академии наук

**Научный руководитель:** **Дмитриев Сергей Владимирович**  
доктор физико-математических наук, профессор,  
заведующий лабораторией Института физики молекул и  
кристаллов УФИЦ РАН, г. Уфа

**Официальный оппонент:** **Захаров Павел Васильевич**  
доктор физико-математических наук, доцент, директор  
Института физики и математики Санкт-Петербургского  
политехнического университета им. Петра Великого,  
г. Санкт-Петербург

**Официальный оппонент:** **Алфимов Георгий Леонидович**  
доктор физико-математических наук, профессор,  
профессор кафедры “Высшая математика-1” ФГАОУ  
ВО Национальный исследовательский университет  
Московский институт электронной техники, г. Зеленоград

**Ведущая организация:** Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования “Челябинский государственный университет”, г. Челябинск

Защита состоится «19» июня 2026 г. в 15<sup>00</sup> часов на заседании диссертационного совета 24.2.308.01 при ФГБОУ ВО «Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова» по адресу: 360004, Россия, г. Нальчик, ул. Чернышевского 173, зал заседаний диссертационного совета.

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке и на сайте ФГБОУ ВО «Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова», <https://diser.kbsu.ru>

Автореферат разослан «\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2026 г.

Учёный секретарь диссертационного совета,  
доктор физико-математических наук, профессор

А.А. Дышеков

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

**Актуальность работы.** Теория фононов, разработанная Максом Борном и Хуаном Кунем, описывает колебания кристаллической решетки в линейном режиме, который реализуется, например, при невысоких температурах [1]. Динамика кристаллической решетки существенно усложняется в нелинейном случае, для которого нет строгой теории и появляются новые физические эффекты, отсутствующие в линейном приближении.

В 1986 году Долгов, рассмотрев цепочку частиц, взаимодействующих посредством потенциала с кубической нелинейностью, показал возможность существования долгоживущих колебаний большой амплитуды, экспоненциально локализованных в пространстве [2]. Частота локализованных колебаний лежала выше фононного спектра цепочки, тем самым они не резонировали с фононными модами и не затрачивали свою энергию на их возбуждение. Двумя годами позже Сиверс и Такено независимо получили аналогичный результат [3], и их работа заинтересовала научную общественность, породив лавину теоретических изысканий [4; 5]. Основной целью пионерских работ было строгое доказательство существования локализованных колебаний, которые получили название внутренних колебательных мод (intrinsic localized modes) или дискретных бризеров (ДБ) (discrete breathers). Данные работы подытожены в обзорах [6; 7].

Прямых наблюдений ДБ в кристаллах на сегодняшний день нет, поскольку отсутствуют методы, позволяющие фиксировать колебания малых групп атомов на временных интервалах 0,1-10 пс, что соответствует времени жизни ДБ продолжительностью от 10 до 1000 периодов атомных колебаний. Однако существуют косвенные методы, позволяющие судить о вкладе ДБ в колебания решетки, используя рассеяние рентгеновских лучей или нейтронов [8]. Данные методы, основанные на измерении колебательных спектров кристаллов, показали возбуждение ДБ при достаточно высоких температурах в ионном кристалле NaI [9] и  $\alpha$ -урани [10]. Отсутствие прямых методов наблюдения ДБ в кристаллах побуждает искать макроскопические свойства кристаллов, зависящие от концентрации ДБ. Первым шагом на этом пути является описание всех возможных ДБ, поддерживаемых кристаллом.

При малых амплитудах различные колебательные моды не взаимодействуют друг с другом, но с ростом амплитуды происходит обмен энергией между ними. Однако некоторые высокосимметричные колебательные моды, в отсутствие возмущений, не возбуждают других мод даже при больших амплитудах колебаний. Теоретические подходы к нахождению таких мод в молекулах и кристаллах были разработаны Чечиным и Сахненко [11]. Авторы назвали их бушами нелинейных нормальных мод (БННМ). В более поздних работах БННМ в кристаллах именовались делокализованными нелинейными колебательными модами (ДНКМ). На основе ДНКМ был разработан подход к нахождению множества различных ДБ в кристаллах [12]. Для этого следует рассчитать амплитудно-частотные характеристики (АЧХ) ДНКМ с волновыми векторами на границе первой зоны Бриллюэна. ДБ могут быть получены путем наложения функции локализации на ДНКМ с частотами вне фононного спектра.

Учитывая сложности экспериментального обнаружения ДБ в кристаллах наиболее продуктивным методом их исследования на сегодняшний день является атомистическое моделирование. В то же время, для обширного семейства кристаллов со структурой В2, важных для практических приложений, отсутствует систематическое описание условий существования и свойств ДБ, что сдерживает как фундаментальное понимание их физики, так и поиск корреляций с макроскопическими свойствами. Таким образом, молекулярно-динамическое изучение свойств ДНКМ и ДБ в кристаллах системы В2 является *актуальной и важной задачей*.

**Степень разработанности темы исследования.** Чечин и Сахненко [11] внесли существенный вклад в теорию нелинейных колебаний, разработав теоретико-групповой метод нахождения бушей нелинейных нормальных мод для молекул и кристаллов. Одновременно, Манли с соавторами [8-10] экспериментально подтвердили значимость ДБ для физических свойств кристаллов. ДНКМ и ДБ изучались для многих кристаллов, включая алмаз [13], металлы [14] и упорядоченные сплавы [15]. Было показано влияние ДНКМ и ДБ на некоторые макроскопические свойства модельных решеток и кристаллов, например, теплоемкость, теплопроводность, тепловое расширение. Показана тесная взаимосвязь между ДНКМ и ДБ, в частности, спонтанное зарождение ДБ при потере устойчивости ДНКМ с частотой вне фононного спектра. Однако, несмотря на накопленный опыт, систематического анализа влияния атомных масс и жесткостей связей на нелинейную динамику важных для многих приложений кристаллов со структурой В2 до сих пор проведено не было. Данная диссертационная работа нацелена на полный анализ свойств ДНКМ и ДБ в кристаллах В2 в зависимости от атомных масс компонент и коэффициентов жесткости межатомных связей, с учетом дальнего действия. Такие сведения позволят для различных кристаллов данного семейства предсказать существование различных типов ДБ, что является первым необходимым шагом к определению влияния ДБ на свойства кристаллов.

**Целью работы** является установление закономерностей формирования фононных спектров, а также определение условий существования и свойств делокализованных и локализованных нелинейных колебательных мод (ДНКМ и ДБ) в бинарных кристаллах со структурой В2 в зависимости от соотношения масс компонент и параметров межатомных связей с учетом дальнего действия.

Для достижения поставленной цели решались следующие **задачи**:

1. Вывод и анализ дисперсионного соотношения для кристалла со сверхструктурой В2 с учетом взаимодействия атомов в первых четырех координационных сферах;
2. Анализ свойств ДНКМ: определение волнового вектора, вывод частоты в гармоническом приближении, численное определение амплитудно-частотных характеристик;
3. Нахождение ДБ в кристалле В2 с потенциалом  $\beta$ -ФПУЦ (Ферми-Паста-Улама-Цингоу) с жестким и мягким типом нелинейности;
4. Изучение свойств ДНКМ и ДБ в кристаллах CsCl, LiPb и NiTi с использованием метода молекулярной динамики.

**Научная новизна:**

1. Впервые рассчитан и проанализирован фононный спектр биатомного кристалла со структурой B2 (типа CsCl) в модели парных межатомных взаимодействий, при этом учтены связи вплоть до четвертых соседей, что важно, например, для интерметаллидных соединений и ионных кристаллов с дальнедействующими взаимодействиями.
2. Аналитически определены границы щели в фононном спектре кристалла со структурой B2, что позволило установить критерии (соотношения атомных масс и жесткостей связей), при которых становятся возможными щелевые ДБ. Получены аналитические выражения, определяющие границы щели в фононном спектре кристалла со структурой B2, тем самым, описаны условия существования щелевых ДБ.
3. Выявлены закономерности влияния атомных масс и жесткостей межатомных связей на амплитудно-частотные характеристики ДНКМ, на основе которых предсказаны разные типы ДБ (с жесткой или мягкой нелинейностью, щелевые или с частотами выше фононного спектра), реализуемые в кристаллах данного семейства.
4. Доказано, что учет дальнедействующих взаимодействий в кристаллах со структурой B2 приводит к возможности существования новых типов ДБ, которые не могут быть реализованы при учете взаимодействий только между ближайшими и вторыми соседями.
5. Методом молекулярной динамики рассчитаны амплитудно-частотные характеристики ДНКМ в кристаллах CsCl, LiPb и NiTi с непарными взаимодействиями, что позволило описать возможные типы ДБ в этих кристаллах. Впервые описаны ДБ в кристалле LiPb.

**Теоретическая и практическая значимость работы** заключается в том, что полученные аналитические и численные данные о частотных диапазонах существования ДБ могут быть использованы при интерпретации экспериментов по неупругому рассеянию нейтронов или рентгеновских лучей в кристаллах типа B2 (CsCl, LiPb, NiTi и др.). Выявленные условия существования движущихся ДБ описывают новый, безызлучательный канал транспорта колебательной энергии, что важно для понимания процессов теплопереноса и формирования дефектов в материалах при высокоэнергетических внешних воздействиях. Установлено влияние атомных масс компонент и коэффициентов жесткости межатомных связей на свойства ДНКМ и ДБ в кристаллах со структурой B2, причем анализ учитывает дальнедействие до четвертой координационной сферы, что важно для кристаллов с металлической или ионной связью.

**Методология и методы исследования.** Для вывода дисперсионных соотношений кристаллов со структурой B2 применялись стандартные методы поиска нормальных колебательных мод системы дискретных линеаризованных уравнений движения атомов. Расчет АЧХ ДНКМ в кристаллах с дальнедействием до четвертой координационной сферы выполнялся в рамках модели с потенциалом  $\beta$ -ФПУЦ. Для этих целей использовалась оригинальная программа численного интегрирования уравнений движения, написанная на языке C++. Расчет АЧХ ДНКМ и свойств ДБ в кристаллах CsCl, LiPb и NiTi проводился методом молекулярной динамики с использованием пакета LAMMPS с применением многочастичных

межатомных потенциалов, построенных в рамках метода погруженного атома (EAM). Результаты моделирования визуализировались с помощью программного комплекса OVITO.

#### **Положения, выносимые на защиту:**

1. Установлено, что в кристаллах со структурой B2 с жестким типом нелинейности, наложением локализирующих функций на ДНКМ G1a, могут быть возбуждены долгоживущие стационарные и движущиеся щелевые дискретные бризеры.
2. При достаточно большой разнице атомных масс компонент в кристаллах со структурой B2 появляется щель в фононном спектре, что делает возможным существование щелевых ДБ. Однако слишком большая разница атомных масс может приводить к попаданию частоты второй гармоники ДБ в оптическую часть спектра, что приведет к уменьшению времени жизни ДБ.
3. Молекулярно-динамические расчеты предсказывают существование долгоживущих щелевых ДБ в кристалле LiPb.

**Апробация работы.** Результаты исследований представлены на российских и международных конференциях, таких как: Международная школа-семинар «Эволюция дефектных структур в конденсированных средах» (г. Барнаул, 2018 г.); Открытая школа-конференция стран СНГ «Ультрамелкозернистые и наноструктурные материалы» (г. Уфа, 2018, 2022 гг.); 18-й Российский симпозиум Фундаментальные основы атомистического многомасштабного моделирования (г. Новый Афон, 2022 г.); 15-ая Всероссийская зимняя школа-семинар аспирантов и молодых ученых «Актуальные проблемы науки и техники» (г. Уфа, 2022 г.); I Всероссийская молодежная конференция «Современные физика, математика, цифровые и нанотехнологии в науке и образовании (ФМНЦ-2022) посвященная 100-летию со дня рождения А. Д. Сахарова» (г. Уфа, 2022 г.); VI Международная молодежная конференция «Magnitogorsk Rolling Practice 2022» (г. Магнитогорск, 2022 г.); XVI Всероссийская молодежная научная конференция «Мавлютовские чтения» (г. Уфа, 2022 г.); Международный симпозиум «Перспективные материалы и технологии» (г. Минск, 2023 г.); Международная научно-техническая конференция «Актуальные проблемы автоматизации, разработки и оптимизации технологических процессов и производств» (г. Карши, Узбекистан, 2025 г.).

**Личный вклад автора работы.** Диссертационная работа выполнена автором в значительной степени самостоятельно. Она самостоятельно проанализировала и обобщила обширный массив научной литературы, применила метод молекулярной динамики для проведения исследований, а также активно участвовала в осмыслении и интерпретации полученных данных, формулировке выводов и подготовке публикаций (статей и тезисов докладов). В опубликованных с соавторами работах основные результаты, касающиеся поиска щелевых ДБ в структуре B2, в том числе, движущихся, были получены именно соискателем. Автор также играла активную роль в определении направлений исследований и методов решения поставленных задач.

**Публикации.** По материалам диссертационной работы опубликовано 11 статей в журналах, из них 3 работы в рецензируемых журналах, входящих в перечень ВАК РФ, 8 работ входят в международные базы цитирования Web of Science и/или Scopus.

**Финансирование работы.** Работа поддержана грантами Российского научного фонда (РНФ) № 21-12-00229, № 24-22-00092 и № 24-11-00139.

**Объем и структура работы.** Диссертация состоит из введения, четырёх глав и заключения. Полный объём диссертации составляет 127 страниц с 42 рисунками и 4 таблицами. Список литературы содержит 209 наименований.

## Содержание работы

Во введении обосновывается актуальность исследований, проводимых в рамках данной диссертационной работы, формулируется цель, ставятся задачи работы, сформулированы научная новизна и практическая значимость представляемой работы, изложены методы исследования.

В первой главе приведён обзор литературы по теме диссертации. Кристаллы со структурой В2 (типа CsCl) являются классической моделью упорядоченного бинарного соединения, образуемого двумя вложенными простыми кубическими подрешетками. Несмотря на глубокую изученность их химических, физических и механических свойств, а также широкое применение в качестве жаропрочных сплавов и интеллектуальных материалов, их нелинейная динамика, в частности, свойства ДНКМ и ДБ, оставались неизученными.

Исследования В2-структур, начатые с работ по определению их кристаллической структуры, эволюционировали от фундаментальных изысканий к решению прикладных задач аэрокосмической отрасли, таких как преодоление низкотемпературной хрупкости и разработка жаропрочных сплавов на основе NiAl и FeAl. Эти соединения послужили идеальной моделью для развития теории упорядочения и фазовых переходов, изучения связи электронной структуры и свойств, а также для разработки и верификации современных вычислительных методов в материаловедении.

Кристаллы В2 характеризуются совокупностью уникальных свойств: высокой механической прочностью и твердостью, значительной анизотропией упругих свойств, высокой температурой плавления и теплопроводностью, а также полупроводниковыми характеристиками у некоторых представителей. Их исключительная химическая и термическая стабильность обусловлена сильной гибридной (металлическо-ковалентно-ионной) связью и способностью образовывать защитные оксидные пленки.

Ключевым аспектом данной диссертации является изучение фононных спектров кристаллов В2 со щелью, см. рис. 1, которая появляется при существенной разнице в массах составляющих атомов, например, в CuBe, LiPb, AuZn, CsCl. Данное явление открывает теоретическую возможность существования щелевых ДБ в дополнение к ДБ с частотами выше фононного спектра.

Отправной точкой в анализе возможных типов дискретных бризеров (ДБ) в структуре В2 стало изучение ДНКМ [11,17,18]. Эти нелинейные колебательные моды представляют собой точные решения уравнений движения атомов, которые охватывают всю кристаллическую решетку и определяются ее симметрией. ДНКМ, помимо того, что служат фундаментальной основой для построения ДБ, оказывают влияние на макроскопические свойства материалов.

Дискретный бризер (ДБ) – это особый тип нелинейных колебаний, который характеризуется пространственной локализацией при относительно длительном времени существования. Частота ДБ находится за пределами фононного спектра, и они возникают благодаря

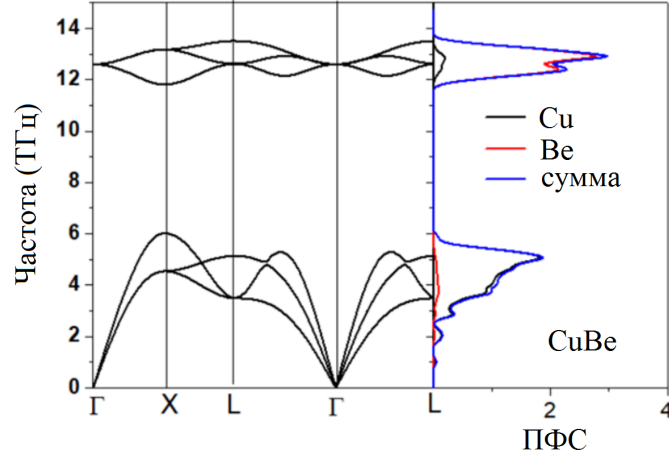


Рисунок 1 — Дисперсионные кривые (слева) и плотность фононных состояний (справа) кристалла CuBe согласно работе [16].

сочетанию нелинейных эффектов и дискретной природы решетки [7]. Обсуждалась их роль в процессах переноса энергии и заряда, а также их воздействие на такие макроскопические свойства кристаллов, как теплопроводность и теплоемкость.

Проведенный анализ показал наличие существенного пробела в знаниях: несмотря на обширные исследования статических свойств кристаллов с B2 структурой, их нелинейная динамика, включая полный набор ДНКМ и условия возникновения различных типов ДБ, оставались неизученными. Следовательно, основная цель данной диссертационной работы заключается в теоретическом исследовании ДНКМ и ДБ в кристаллических решетках со структурой B2. В рамках этой цели планируется установить взаимосвязь их свойств с такими параметрами решетки как отношение атомных масс компонент и жесткости межатомных связей, и определить условия их стабильного существования.

**Вторая глава** посвящена теоретическому исследованию динамики кристаллов со структурой B2, см. рис. 2. Рассматривается модель кристалла B2 с двумя сортами атомов массы  $m_1$  и  $m_2$ . Уравнения движения атомов имеют вид

$$m_n \frac{d^2 \mathbf{r}_n}{dt^2} = \mathbf{F}_n, \quad \mathbf{F}_n = -\frac{dV}{d\mathbf{r}_n}, \quad n = 1, \dots, N, \quad (1)$$

где  $\mathbf{r}_n$  — радиус-вектор  $n$ -го атома,  $m_n$  — его масса,  $\mathbf{F}_n$  — сила, действующая на атом,  $V$  — потенциальная энергия системы, которая представляет собой сумму потенциальных энергий парных межатомных связей в четырех координационных оболочках. Рассматривается межатомный потенциал  $\beta$ -ФПУЦ

$$\varphi_l(r) = \frac{c_l}{2}(r - \zeta_l)^2 + \frac{\beta_l}{4}(r - \zeta_l)^4, \quad l = 1, \dots, 4, \quad (2)$$

где  $l$  — номер координационной оболочки,  $r$  — расстояние между двумя атомами, радиусы координационных оболочек ОЦК-решетки  $\zeta_1 = a\sqrt{3}/2$ ,  $\zeta_2 = a$ ,  $\zeta_3 = a\sqrt{2}$  и  $\zeta_4 = a\sqrt{11}/2$ ;  $c_l$  и  $\beta_l$  — гармонический и ангармонический коэффициенты жесткости. Вне зависимости от сорта атомов используются одинаковые параметры межатомных потенциалов  $c_1 = 1,0$ ,  $c_2 = 0,7$ ,  $c_3 =$

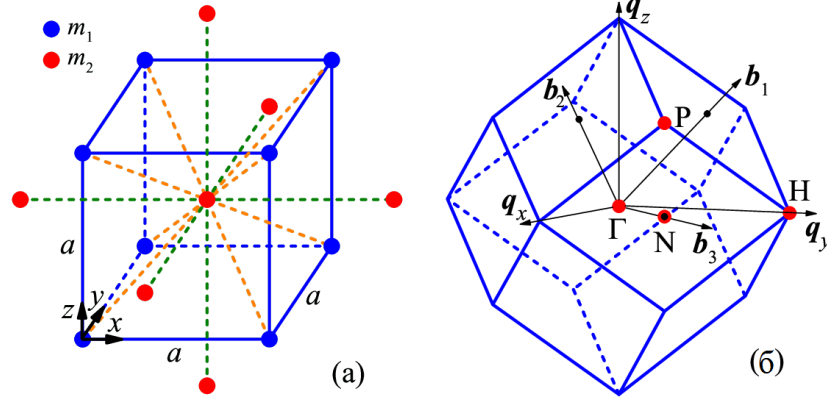


Рисунок 2 — (а) Структура В2 (CsCl) на основе ОЦК решетки состоит из двух простых кубических подрешеток с параметром решетки  $a$ . Подрешетки заполнены атомами с массой  $m_1$  (синий) и  $m_2$  (красный). Связи между ближайшими и вторыми соседями показаны оранжевым и зеленым цветом, соответственно. Связи между третьими и четвертыми соседями также учитываются, но они не показаны. (б) Координатные оси и точки высокой симметрии (показаны красным) в первой зоне Бриллюэна ОЦК решетки.

$0,4, c_4 = 0,1$  и  $\beta_l = \pm 10c_l$  ( $l = 1, \dots, 4$ ); рассматриваются жесткий ( $\beta > 0$ ) и мягкий ( $\beta < 0$ ) типы ангармонизма. Динамика решетки исследуется методами молекулярной динамики, а фоннные спектры и плотности фоннных состояний рассчитываются из линеаризованных уравнений движения.

На основе симметрии кристалла В2 определены точные однокомпонентные нелинейные решения — ДНКМ групп G1, G2, G5, G6, G7 (см. рис. 3) [7,19]. Амплитудно-частотные характеристики ДНКМ, найденные путем численного интегрирования системы уравнений (1), демонстрируют рост частоты (жесткий тип нелинейности,  $\beta_l > 0$ ) или уменьшение частоты (мягкий тип нелинейности,  $\beta_l < 0$ ) с увеличением амплитуды (см. рис. 4 и 5). В малоамплитудном пределе частоты ДНКМ определяются аналитически. Для всех групп, кроме G2, существуют две частоты ( $\omega_1$  и  $\omega_2$ ), связанные соотношением  $\omega_2 = \sqrt{m_1/m_2} \omega_1$ , соответствующие колебаниям подрешеток легких и тяжелых атомов. ДНКМ группы G2 представляют исключение, поскольку в них, в отличие от остальных групп, колебания совершают обе кубические подрешетки относительно центра масс двух соседних атомов.

Анализ фоннного спектра показал, что при равенстве атомных масс компонент ( $m_1 = m_2 = 1$ ) спектр непрерывен (см. рис. 6). При увеличении отношения масс  $m_2/m_1$ , в спектре появляется щель (см. рис. 6). Определены условия, при которых не только основная частота ДБ, но и все её высшие гармоники лежат вне фоннного спектра, что теоретически обеспечивает большее время жизни ДБ.

Продемонстрирован долгоживущий и устойчивый ДБ с временем жизни в тысячи периодов колебаний на основе ДНКМ G1a с жестким типом нелинейности ( $\beta > 0$ ) (см. рис. 7(a)). ДБ на основе мод G1b и G1c неустойчивы и за несколько десятков периодов трансформируются в устойчивую форму. Пример такой трансформации показан на рис. 8, где время нормировано на период колебания ДБ и видно, что колебания ДБ с  $A_x = A_y$  после нескольких

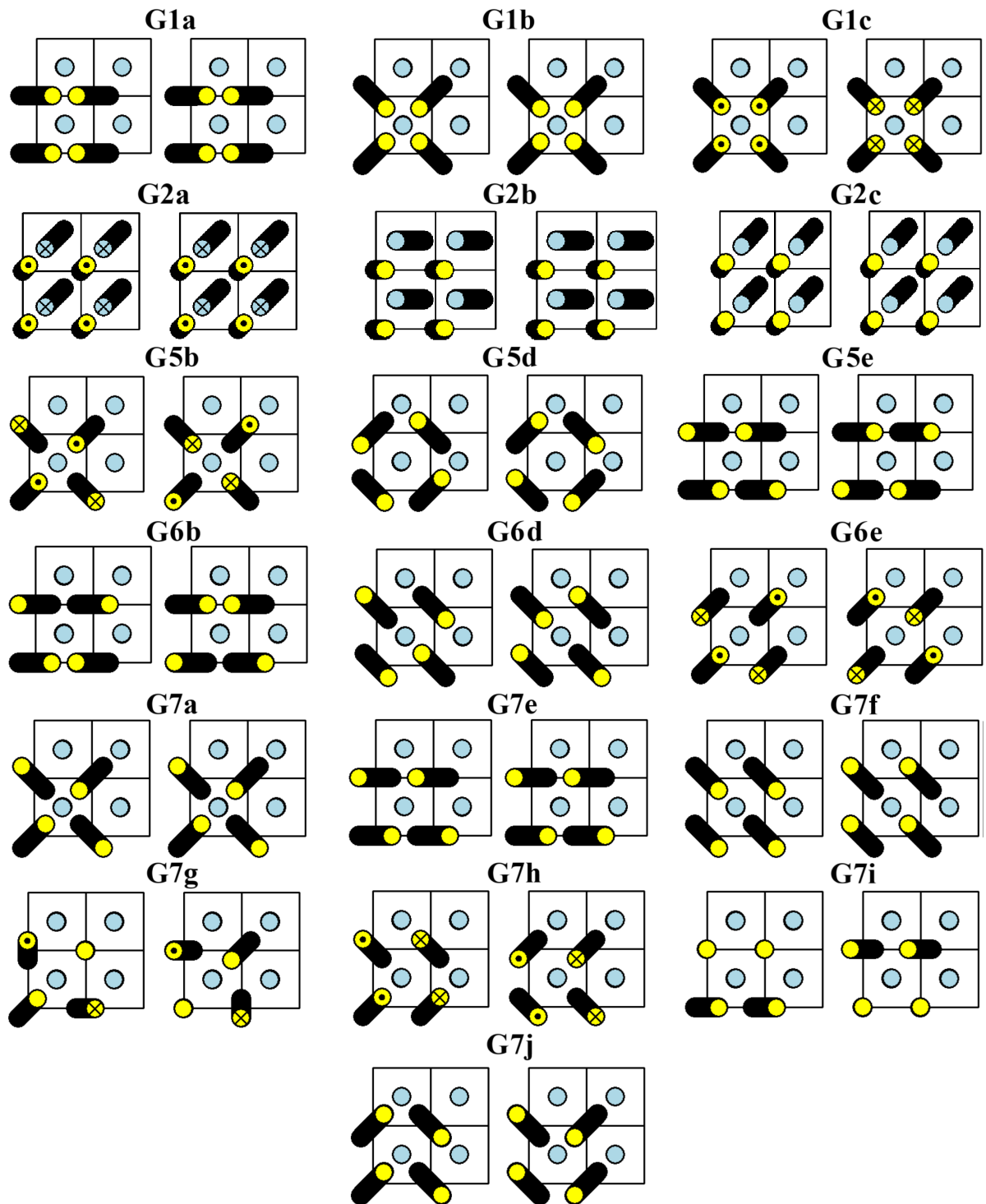


Рисунок 3 — ДНКМ групп G1, G2, G5, G6 и G7 соответственно. Траектории колеблющихся атомов показаны черным цветом. Атомы с положительной (отрицательной)  $z$ -компонентой смещения отмечены точкой (крестиком).

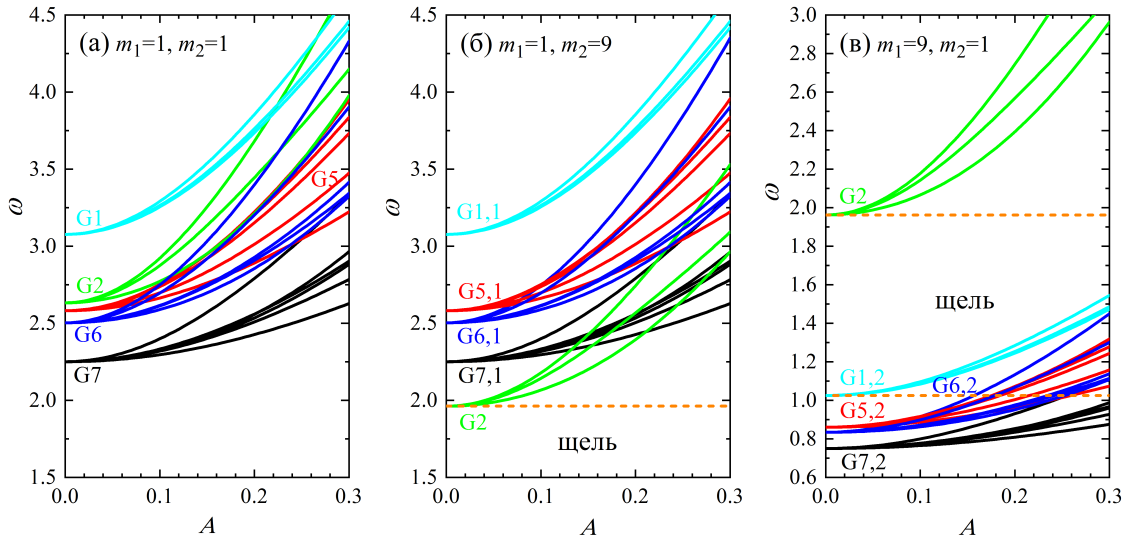


Рисунок 4 — АЧХ ДНКМ для решетки с жесткой ангармоничностью  $\beta_l > 0$ ,  $l = 1, \dots, 4$ : (а) моноатомная решетка с  $m_1 = m_2 = 1$ , (б) биатомная решетка с  $m_1 = 1$ ,  $m_2 = 9$ , и (в) биатомная решетка с  $m_1 = 9$ ,  $m_2 = 1$ . В (б) и (в) границы разрыва в фононном спектре обозначены горизонтальными пунктирными линиями.

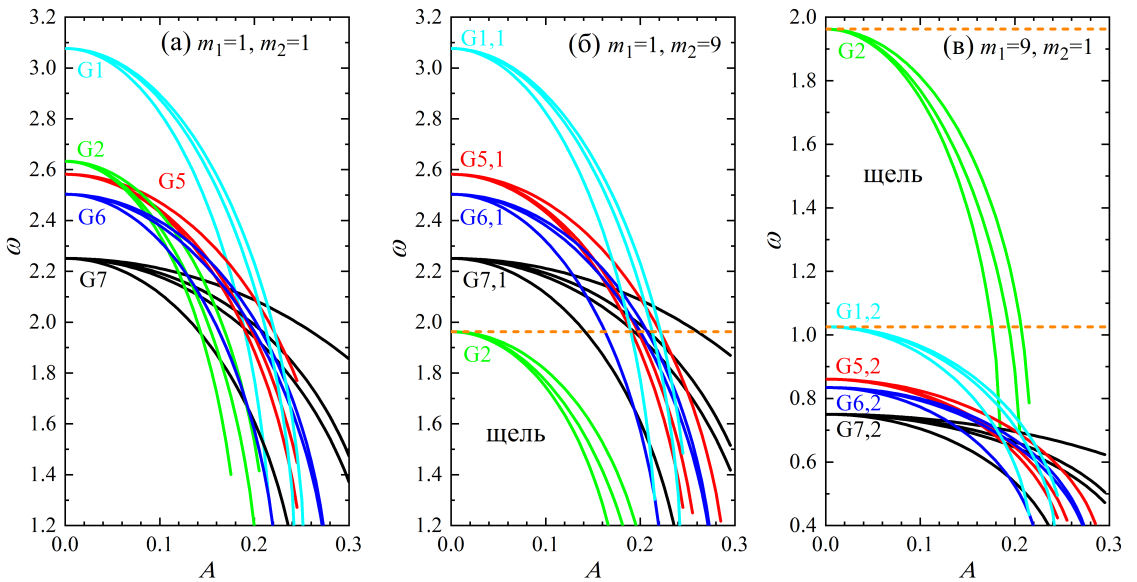


Рисунок 5 — АЧХ ДНКМ для решетки с мягкой ангармоничностью  $\beta_l < 0$ ,  $l = 1, \dots, 4$ : (а) моноатомная решетка с  $m_1 = m_2 = 1$ , (б) биатомная решетка с  $m_1 = 1$ ,  $m_2 = 9$ , и (в) биатомная решетка с  $m_1 = 9$ ,  $m_2 = 1$ . В (б) и (в) границы разрыва в фононном спектре обозначены горизонтальными пунктирными линиями.

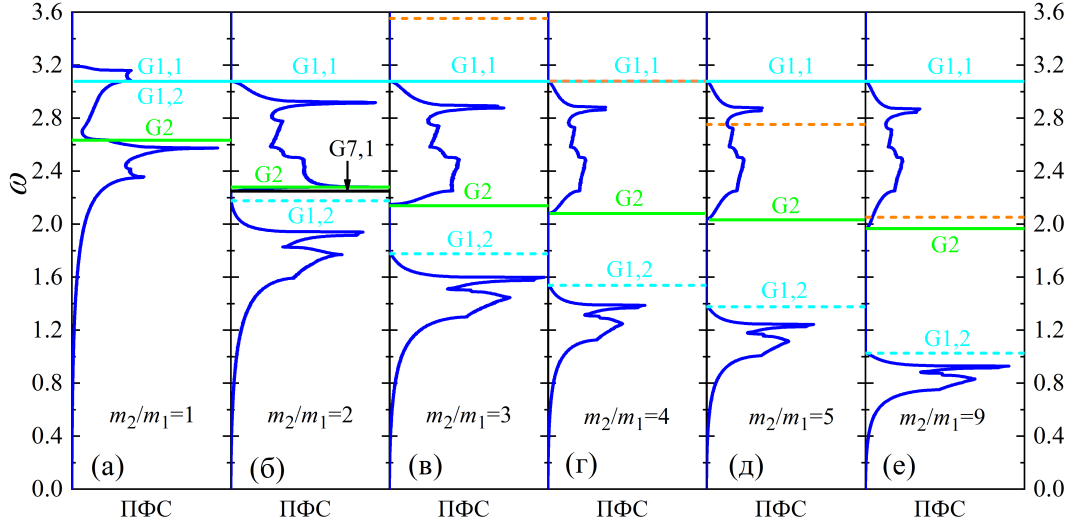


Рисунок 6 — Плотность фоновых состояний для различных соотношений атомных масс, как указано на каждой панели ( $m_1 = 1$ ). Горизонтальными линиями показаны частоты малоамплитудных колебаний ДНКМ групп G1 и G2. На (б) частота малоамплитудных колебаний группы G7 показана черной линией, так как она соответствует верхнему краю щели в фоновом спектре. Оранжевые пунктирные линии показывают удвоенную частоту нижнего края щели в фоновом спектре.

десятков периодов спонтанно меняют поляризацию так, что  $A_x$  возрастает, а  $A_y$  оказывается близким к нулю. Отметим, что ДБ, показанные на рис. 7 были получены наложением функции локализации на соответствующие ДНКМ. Тем же способом удалось получить ДБ на основе ДНКМ G7a (см. рис. 9) для кристалла с мягким типом нелинейности ( $\beta < 0$ ). Его время жизни существенно меньше ( $\sim 10^2$  периодов), что может быть связано с неустойчивостью ДБ.

**В третьей главе** исследовались возможность существования и свойства движущихся щелевых ДБ в кристалле со структурой В2 при значительной разнице масс компонент,  $m_1 = 3$  и  $m_2 = 1$ , что обеспечивает образование щели в фоновом спектре. Использовался потенциал взаимодействия  $\beta$ -ФПУЦ для связей вплоть до четвертых соседей. Щелевые ДБ получены путем наложения функции локализации на ДНКМ G1a, см. рис. 3, с частотой, лежащей в щели фонового спектра. Стационарный ДБ (см. рис. 10) получается путем применения следующей функции локализации

$$u_{xyz}^0 = \frac{(-1)^n A}{\cosh[\gamma(x - x_0)] \cosh(\delta y) \cosh(\delta z)}, \quad (3)$$

где  $u_{xyz}^0$  — начальное смещение атома вдоль оси  $x$ , принадлежащего узлу решетки с координатами  $x, y, z$ ;  $A$  — амплитуда делокализованной нелинейной колебательной моды;  $\gamma$  и  $\delta$  — параметры локализации вдоль направлений  $x$  и направлений  $y$  и  $z$ , соответственно. Цело-

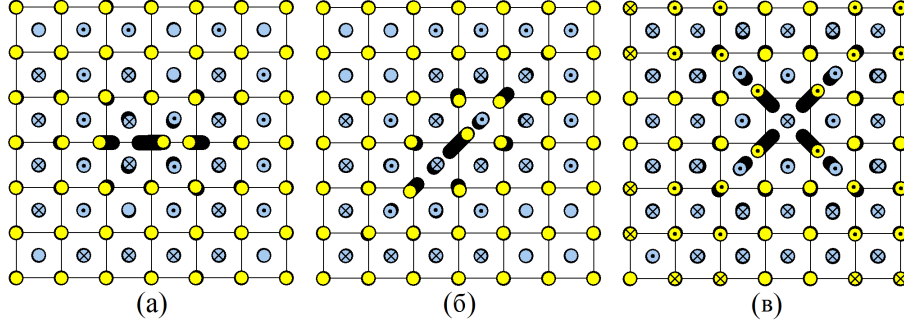


Рисунок 7 — Щелевые ДБ на основе ДНКМ (а) G1a, (б) G1b и (в) G1c в кристалле с ангармонизмом жесткого типа. Параметры модели:  $m_1 = 1$ ,  $m_2 = 3$ ,  $\beta_l > 0$ ,  $l = 1, \dots, 4$ .

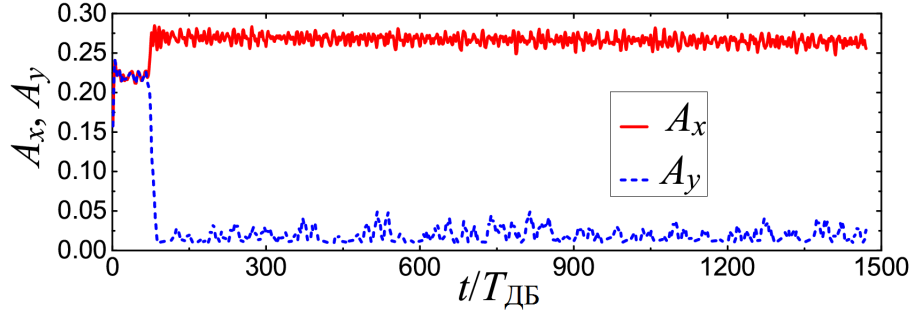


Рисунок 8 — Неустойчивый ДБ на основе ДНКМ G1b, см. рис. 7(б). Показаны амплитуды колебаний центрального атома ДБ по координатам  $x$  и  $y$  как функции времени, нормированного на период колебаний ДБ.  $A_z = 0$  в течение всего времени моделирования.

численный показатель  $n = x/a$  нумерует атомы одного ряда, в котором локализован ДБ. Параметр  $x_0$  смещает центр функции локализации вдоль направления  $x$ , и для  $x_0 = 0$  она центрирована на атоме в начале координат, а для  $x_0 = a/2$  – между двумя ближайшими атомами с одинаковой массой. В первом случае мы имеем ДБ Сиверса-Такено [3], а во втором случае – межсайтовый ДБ Пейджа [4]. Частота ДБ монотонно растет с амплитудой, оставаясь в щели фононного спектра, см. рис. 11. При использовании уравнения (3), начальные смещения задаются только тяжелым атомам с массой  $m_1$ . Кроме того, все атомы в расчетной ячейке имеют нулевые начальные скорости.

Для выбранной амплитуды ДБ  $A$  параметры локализации  $\gamma$  и  $\delta$  находятся методом проб и ошибок так, чтобы минимизировать излучение энергии. При больших  $A$  ДБ становится более локализованным, и параметры локализации увеличиваются. После того как  $\gamma$  и  $\delta$  найдены, численно определяется частота ДБ  $\omega_{\text{ДБ}}$ .

Для возбуждения движущихся ДБ (см. рис. 12) используется следующая функция локализации, зависящая от времени

$$u_{xyz}(t) = \frac{(-1)^n A \cos[\omega_{\text{ДБ}} t + \theta(x - x_0)]}{\cosh[\gamma(x - x_0)] \cosh(\delta y) \cosh(\delta z)}, \quad (4)$$

которая также применяется только к тяжелым атомам. В этом анзаце  $\omega_{\text{ДБ}}$  – это частота ДБ, найденная для стационарного ДБ амплитуды  $A$ . Параметры локализации  $\gamma$  и  $\delta$  также берут-

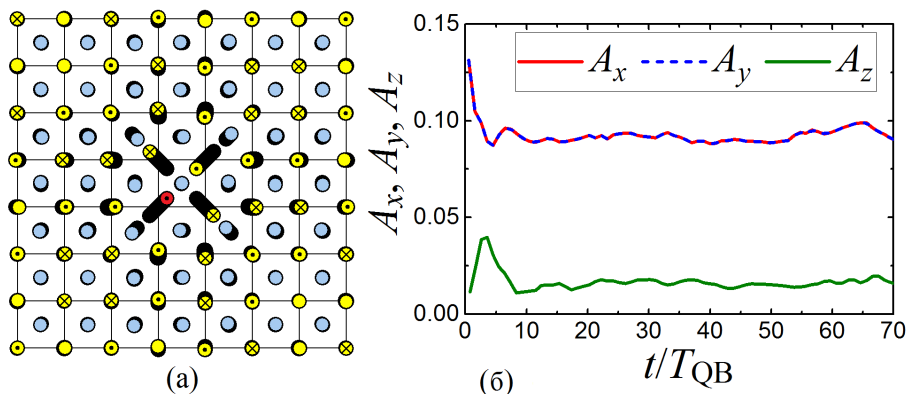


Рисунок 9 — (а) Щелевой ДБ на основе ДНКМ G7a в кристалле с ангармонизмом мягкого типа. Параметры модели:  $m_1 = 1$ ,  $m_2 = 2,1$ ,  $\beta_l < 0$ ,  $l = 1, \dots, 4$ . (б) Компоненты амплитуд колебаний атома, окрашенного в красный цвет на (а), как функции времени, нормированного на период колебаний ДБ.

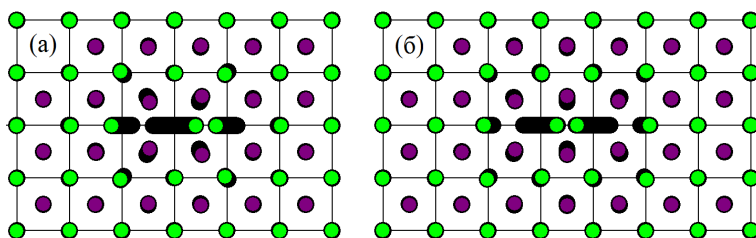


Рисунок 10 — Движения атомов в ДБ расположенных, (а) на атоме и (б) между двумя тяжелыми атомами. Смещения атомов увеличены для наглядности.

ся для стационарного ДБ. Сдвиг фазы  $\theta$  заставляет ДБ двигаться; для  $\theta = 0$  ДБ неподвижен (стационарен). На рис. 12 показаны движущиеся ДБ, полученные для двух значений параметра: (а)  $\theta = 0,15$  и (б)  $\theta = 0,20$ . Здесь представлены смещения атомов как функции времени в атомном ряду вдоль которого движется ДБ. Видно как амплитуда колебаний атомов поочередно сначала возрастает до максимума, а после прохождения ДБ убывает практически до нуля.

**Четвёртая глава** посвящена сравнительному анализу нелинейных динамических свойств трех кристаллов со структурой B2 (CsCl, LiPb и NiTi) с различным соотношением атомных масс и типом химической связи. Определены АЧХ ДНКМ для каждого кристалла. Исследованы возможности существования и свойства щелевых ДБ в кристалле LiPb.

Исследование проводилось методом молекулярной динамики с использованием пакета LAMMPS [20]. Для каждого кристалла применялись многочастичные межатомные потенциалы: для CsCl – потенциал из работы [21], для LiPb – из [22], для NiTi – из [23]. Расчеты выполнялись в микроканоническом ансамбле (NVE) для вычислительных ячеек размером  $2 \times 2 \times 2$  (для построения АЧХ ДНКМ) и  $20 \times 20 \times 20$  (для изучения ДБ) элементарных ячеек. Визуализация проводилась с помощью программы OVITO [24].

Для кристалла LiPb с металлической связью и очень большой разницей атомных масс ( $m_{\text{Pb}}/m_{\text{Li}} \approx 30,5$ ) наблюдается смешанный тип нелинейности, см. рис. 13. На (а) показаны

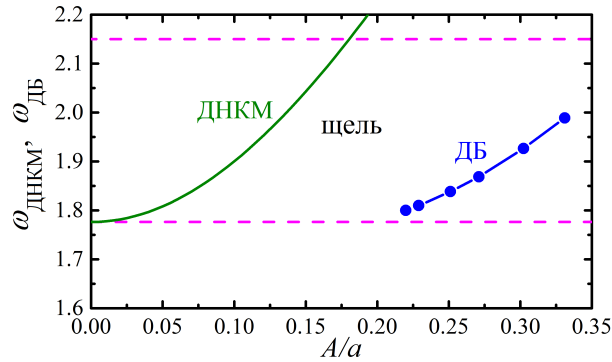


Рисунок 11 — Частотная характеристика ДНКМ G1, возбужденной на тяжелых атомах (зеленая сплошная линия), и частотная характеристика соответствующего стационарного ДБ (синие точки и линия). Амплитуда  $A$  нормирована на параметр решетки  $a$ . Горизонтальными пунктирными линиями показаны края щели в фоновом спектре.

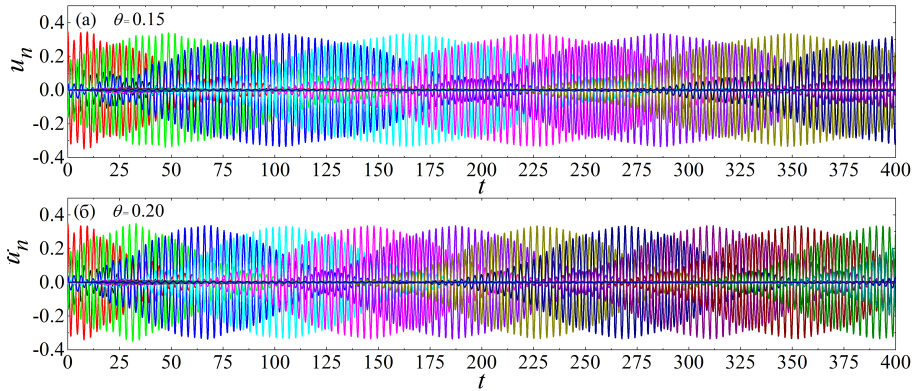


Рисунок 12 — Движущиеся ДБ в кристалле V2 с  $\beta$ -ФПУЦ потенциалом, представленные временными зависимостями смещений  $u_n$  вдоль оси  $x$  для атомов в атомном ряду, вдоль которого движется ДБ. Параметры уравнения (4), используемые для возбуждения ДБ, следующие:  $A = 0,38$ ,  $\beta = 1,40$ ,  $\gamma = 2,20$ ,  $x_0 = 0,5a$ , и (а)  $\theta = 0,15$ , (б)  $\theta = 0,20$ .

АЧХ ДНКМ, возбужденных на атомах Li, а на (б) - на атомах Pb. Характер нелинейности существенно зависит от того, какие атомы возбуждены. При возбуждении ДНКМ на легких атомах лития преобладает жесткий тип нелинейности. При возбуждении на тяжелых атомах свинца на малых амплитудах наблюдается мягкий тип нелинейности, который с увеличением амплитуды сменяется жестким. Большая разница масс компонент формирует широкую запрещенную зону в фоновом спектре. На рис. 13 розовыми пунктирными горизонтальными линиями отмечены границы запрещенной зоны фонового спектра: (а) верхняя граница, находящаяся на частоте  $\Omega = 6,26$  ТГц, (б) нижняя граница, находящаяся на частоте  $\Omega = 1,503$  ТГц. Черной штрих-пунктирной линией на (а) показана верхняя граница фонового спектра на частоте  $\Omega = 7,61$  ТГц. Кандидатами для возбуждения ДБ являются ДНКМ группы G1 с частотами выше спектра (при возбуждении их на легких атомах лития) или щелевых ДБ (при возбуждении на тяжелых атомах свинца). ДНКМ группы G5 тоже

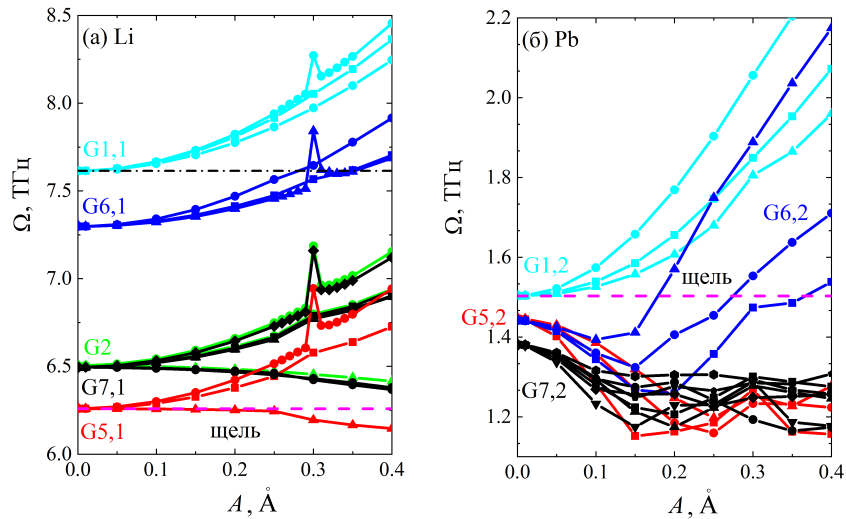


Рисунок 13 — Частотная характеристика ДНКМ в кристалле LiPb. На (а) ДНКМ возбуждены на легких атомах Li, на (б) на тяжелых атомах Pb. Розовыми горизонтальными пунктирными линиями обозначены границы запрещенной зоны фононного спектра (щели). Верхний край спектра отмечен горизонтальной черной штрих-пунктирной линией на (а).

могут быть потенциальными кандидатами для возбуждения щелевых ДБ, но только если амплитуда ДБ достаточна для нахождения частоты в запрещенной зоне.

На панели (а) рис. 13 при амплитуде  $A=0,3 \text{ \AA}$  наблюдается резкий одновременный скачок частот у ДНКМ разных групп. Это явление не имеет физического объяснения и может быть обусловлено погрешностью использованного межатомного потенциала, что ограничивает его использование в области сильной ангармоничности, при  $A>0,3 \text{ \AA}$ .

В отличие от LiPb, кристалл CsCl с ионной связью демонстрирует исключительно жесткую нелинейность для всех групп мод. Потенциальными кандидатами для получения ДБ с частотами выше спектра (при возбуждении их на легких атомах хлора) или щелевых ДБ (при возбуждении их на тяжелых атомах цезия) являются ДНКМ группы G1. NiTi с металлической связью и малой разницей атомных масс не имеет щели в спектре, и его нелинейность имеет сложный, немонотонный характер. Единственная группа для получения ДБ является G6, так как одна ДНКМ из этой группы имеет жесткий тип ангармоничности; на малых амплитудах её частоты колебаний лежат на верхнем краю фононного спектра и с ростом амплитуды выходят за пределы спектра.

Наиболее благоприятные условия для существования долгоживущих щелевых ДБ, как и в случае CsCl, создаются в кристаллах с большой разницей атомных масс. LiPb представляет особый интерес, поскольку в нем была численно продемонстрирована возможность возбуждения стабильного щелевого ДБ, что указывает на его высокую перспективность для возможного экспериментального обнаружения. Получение таких ДБ требует тонкой настройки начальных условий локализации атомных колебаний. Упрощенная теоретическая модель

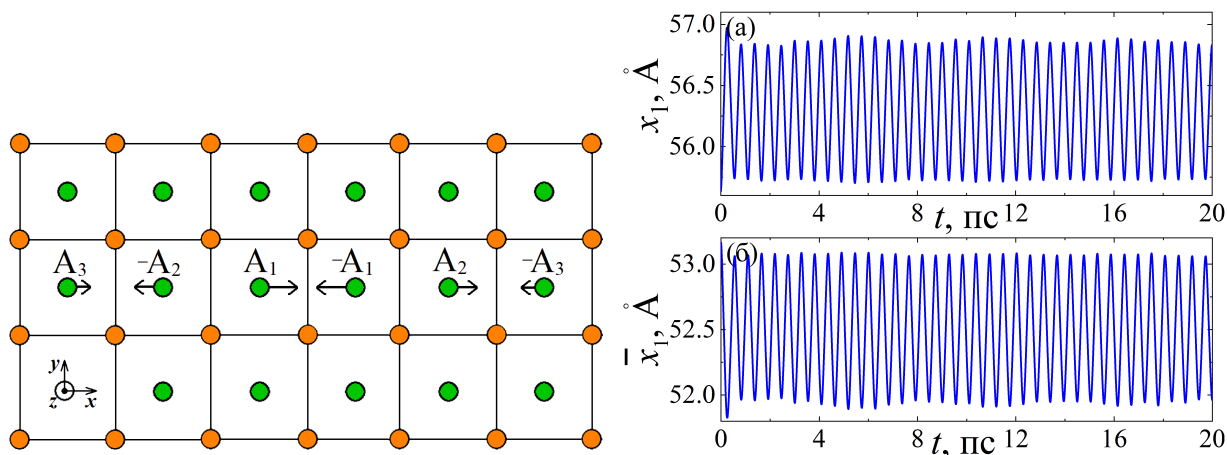


Рисунок 14 — Слева: начальные смещения атомов для возбуждения ДБ в LiPb. Возбуждение атомов одного ряда происходит вдоль оси  $x$ , при этом амплитуда начальных смещений убывает с удалением от центра ДБ. Справа: колебания двух центральных атомов целевого ДБ с течением времени в кристалле LiPb. Параметры, используемые для возбуждения ДБ:  $A_1 = 0,55 \text{ \AA}$ ,  $A_2 = 0,40 \text{ \AA}$  и  $A_3 = 0,15 \text{ \AA}$ . Частота ДБ равна  $\Omega = 1,88 \text{ ТГц}$ .

удовлетворительно работает для описания кристаллов с большой разницей атомных масс, таких как LiPb и CsCl, но неприменима для кристалла NiTi.

На основе ДНКМ группы  $G1$ , возбужденной на тяжелых атомах свинца, успешно получили долгоживущие ДБ с частотами, находящимися в щели спектра. Для возбуждения ДБ использовалась схема с локализованным начальным смещением шести атомов свинца в ряду вдоль оси  $x$ , где амплитуда смещения убывала от центра  $A_1$  к краям  $A_2$  и  $A_3$ , см. левую панель рис. 14. Стабильность и время жизни ДБ критически зависели от точного подбора этих параметров. Оптимальный набор  $A_1 = 0,55 \text{ \AA}$ ,  $A_2 = 0,40 \text{ \AA}$  и  $A_3 = 0,15 \text{ \AA}$  позволил наблюдать весьма медленно затухающий ДБ с частотой  $\Omega = 1,88 \text{ ТГц}$ , находящийся внутри запрещенной зоны. Первые 20 пс существования ДБ показаны на правой части рис. 14, откуда видно, что два центральных атома ДБ колеблются в противофазе с практически постоянной амплитудой свыше  $0,5 \text{ \AA}$ .

### Основные результаты работы:

1. Выполнен аналитический вывод и проведен анализ дисперсионного соотношения для кристалла со структурой В2 с учетом взаимодействия атомов в первых четырех координационных сферах. Для модели с потенциалом  $\beta$ -ФПУЦ изучена нелинейная динамика кристалла. Установлено соотношение атомных масс, при превышении которого появляется щель в фононном спектре, что является необходимым условием существования щелевых ДБ. Путем наложения локализующей функции на ДНКМ  $G1a$  с частотой в щели фононного спектра обнаружен долгоживущий стационарный ДБ с жестким типом нелинейности. Показано, что при слишком большой разнице атомных масс, удвоенная частота целевого ДБ, возбужденного на тяжелых атомах, может попадать в оптическую полосу спектра, что приведет к снижению его времени жизни.

2. В рамках модели  $\beta$ -ФПУЦ для структуры CsCl впервые продемонстрирована возможность существования движущихся щелевых ДБ жесткого типа нелинейности. Рассчитана их амплитудно-частотная характеристика, исследована динамика перемещения вдоль атомной цепочки. Определена зависимость скорости движения ДБ от параметров возбуждения. Тем самым описан канал транспорта колебательной энергии в кристалле посредством ДБ. Показано, что движущиеся планарные ДБ могут генерироваться в режиме супратрансмиссии при внешнем воздействии на поверхность кристалла.
3. Методом молекулярной динамики с использованием многочастичных межатомных потенциалов выполнено сравнительное исследование нелинейных свойств трех кристаллов со структурой В2 (CsCl, LiPb и NiTi). Установлено, что большая разница атомных масс в кристаллах CsCl и LiPb приводит к формированию широкой запрещенной зоны в фононном спектре, тогда как при близких атомных массах в кристалле NiTi щель отсутствует. Тип химической связи (ионная в CsCl, металлическая с ковалентной компонентой в LiPb и NiTi) определяет характер нелинейности ДНКМ: в CsCl наблюдается исключительно жесткая нелинейность, в LiPb и NiTi — смешанная, зависящая от типа возбуждаемой подрешетки и от ДНКМ. В кристалле LiPb впервые численно продемонстрировано возбуждение долгоживущего щелевого ДБ на основе ДНКМ группы G1, возбужденной на тяжелых атомах свинца.
4. Теоретически обоснована принципиальная возможность экспериментального обнаружения щелевых ДБ в ряде соединений В2 с большой разницей атомных масс (таких как CuBe, AuZn, CsCl, SrS, AgMg). Результаты работы служат основой для целенаправленного поиска щелевых ДБ в кристаллах структуры В2 с помощью современных экспериментальных методов.

### Список литературы

1. Борн М. Динамическая теория кристаллических решеток / М. Борн, Х. Кунь. — Москва, Издательство иностранной литературы, 1958. — С. 488.
2. Dolgov A. S. On localization of oscillations in nonlinear crystal structure / A. S. Dolgov // Sov. Phys. Solid State. — 1986. — Vol. 28. — P. 907.
3. Sievers A. J. Intrinsic localized modes in anharmonic crystals / A. J. Sievers, S. Takeno // Phys. Rev. Lett. — 1988. — Vol. 61, no. 8. — P. 970–973.
4. Page J. B. Asymptotic solutions for localized vibrational modes in strongly anharmonic periodic systems / J. B. Page // Phys. Rev. B. — 1990. — Vol. 41, issue 11. — P. 7835–7838.
5. Aubry S. Breathers in nonlinear lattices: Existence, linear stability and quantization / S. Aubry // Physica D. — 1997. — Vol. 103, no. 1–4. — P. 201–250.
6. Flach S. Discrete breathers / S. Flach, C. R. Willis // Phys. Rep. — 1998. — Vol. 295, no. 5. — P. 181–264.
7. Flach S. Discrete breathers — Advances in theory and applications / S. Flach, A. V. Gorbach // Phys. Rep. — 2008. — Vol. 467, no. 1. — P. 1–116.

8. Manley M. E. Impact of intrinsic localized modes of atomic motion on materials properties / M. E. Manley // *Acta Mater.* — 2010. — Vol. 58, no. 8. — P. 2926–2935.
9. Intrinsic localized modes observed in the high-temperature vibrational spectrum of NaI / M. E. Manley [et al.] // *Phys. Rev. B.* — 2009. — Vol. 79, no. 13. — P. 134304.
10. Intrinsically localized mode in  $\alpha$ -U as a precursor to a solid-state phase transition / M. E. Manley, J. W. Lynn, Y. Chen, G. H. Lander // *Phys. Rev. B.* — 2008. — Vol. 77, issue 5. — P. 052301.
11. Chechin G. M. Interactions between normal modes in nonlinear dynamical systems with discrete symmetry. Exact results / G. M. Chechin, V. P. Sakhnenko // *Physica D.* — 1998. — Vol. 117, no. 1–4. — P. 43–76.
12. One-component delocalized nonlinear vibrational modes of square lattices / D. S. Ryabov, G. M. Chechin, E. K. Naumov, Y. V. Bebikhov, E. A. Korznikova, S. V. Dmitriev // *Nonlinear Dynamics.* — 2023. — Vol. 111. — P. 8135–8153.
13. Chechin G. Large-amplitude periodic atomic vibrations in diamond / G. Chechin, D. Ryabov, S. Shcherbinin // *Journal of Micromechanics and Molecular Physics.* — 2018. — Vol. 03, 01n02. — P. 1850002.
14. Unified approach to generating a training set for machine learning interatomic potentials: The case of BCC tungsten / A. A. Kistanov, I. V. Kosarev, S. A. Shcherbinin, A. V. Shapeev, E. A. Korznikova, S. V. Dmitriev // *Materials Today Communications.* — 2025. — Vol. 42. — P. 111437.
15. Impact of delocalized nonlinear vibrational modes on the properties of NiTi / O. V. Bachurina, A. A. Kudreyko, S. V. Dmitriev, D. V. Bachurin // *Phys. Lett. A.* — 2025. — Vol. 555. — P. 130769.
16. Durukan I. DFT Analysis of Mechanical and Dynamic Properties of CuBe / I. Durukan, Y. Ciftci // *Gazi University Journal of Science.* — 2022. — Vol. 35. — P. 1652–1663.
17. Rosenberg R. M. The normal modes of nonlinear  $n$ -degree-of-freedom systems / R. M. Rosenberg // *Journal of Applied Mechanics, Transactions ASME.* — 1960. — Vol. 29, no. 1. — P. 7–14.
18. Sakhnenko V. Symmetrical selection rules in nonlinear dynamics of atomic systems / V. Sakhnenko, G. M. Chechin, S. J. Amoretty // *Doklady Physics.* — 1993. — T. 38. — C. 219–221.
19. Testing interatomic potentials for binary alloys using exact solutions to the equations of motion / D. S. Ryabov, G. S. Bezuglova, E. A. Korznikova, S. V. Dmitriev // *Procedia Structural Integrity.* — 2014. — Vol. 65. — P. 209–214.
20. Plimpton S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics / S. Plimpton // *Journal of computational physics.* — 1995. — Vol. 117, no. 1. — P. 1–19.
21. Zhou X. Atomistic simulation study of atomic size effects on B1 (NaCl), B2 (CsCl), and B3 (zinc-blende) crystal stability of binary ionic compounds / X. Zhou, F. Doty, P. Yang // *Computational materials science.* — 2011. — Vol. 50, no. 8. — P. 2470–2481.

22. Al-Awad A. S. Parametrization of embedded-atom method potential for liquid lithium and lead-lithium eutectic alloy / A. S. Al-Awad, L. Batet, L. Sedano // Journal of Nuclear Materials. — 2023. — Vol. 587. — P. 154735.

23. Sharifi H. Developing interatomic potentials for complex concentrated alloys of Cu, Ti, Ni, Cr, Co, Al, Fe, and Mn / H. Sharifi, C. D. Wick // Computational Materials Science. — 2025. — Vol. 248. — P. 113595.

24. Stukowski A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO—the Open Visualization Tool / A. Stukowski // Modelling and simulation in materials science and engineering. — 2009. — Vol. 18, no. 1. — P. 015012.

### Публикации автора по теме работы

1. **Abdullina D.U.**, Semenova M.N., Semenov A.S., Ryabov D.S., Chechin G.M., Korznikova E.A., Baimova J.A., Dmitriev S.V. Stability of in-plane delocalized vibrational modes in triangular Morse lattice (2018) IOP Conference Series: Materials Science and Engineering, 447 (1), art. no. 012060

2. **Abdullina D.U.**, Semenova M.N., Semenov A.S., Korznikova E.A., Dmitriev S.V. Stability of delocalized nonlinear vibrational modes in graphene lattice (2019) European Physical Journal B, 92 (11), art. no. 249

3. **Abdullina D.U.**, Bebikhov Y.V., Khazimullin M.V., Kudreyko A.A., Dmitriev S.V. Atom deposition and sputtering at normal incidence simulated by the Frenkel-Kontorova chain (2022) Physical Review E, 106 (2), art. no. 024207

4. Bachurin D.V., Murzaev R.T., **Abdullina D.U.**, Semenova M.N., Bebikhov Y.V., Dmitriev S.V. Chaotic discrete breathers in bcc lattice: Effect of the first- and second-neighbor interactions (2024) Physica D: Nonlinear Phenomena, 470, art. no. 134344

5. Shcherbinin S.A., Bebikhov Y.V., **Abdullina D.U.**, Kudreyko A.A., Dmitriev S.V. Delocalized nonlinear vibrational modes and discrete breathers in a body centered cubic lattice (2024) Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation, 135, art. no. 108033

6. **Abdullina D.U.**, Kosarev I.V., Evarestov R.A., Kudreyko A.A., Dmitriev S.V. (2025). Phonon spectrum and gap quasi-breathers in B2 (CsCl) structure. Chaos, Solitons & Fractals, 199, 116724.

7. **Abdullina D.U.**, Naumov E.K., Bebikhov Y.V., Semenova M.N., Kudreyko A.A., Dmitriev S.V. (2025). Supratransmission in a  $\beta$ -FPUT square lattice. Physics Letters A, 130587.

8. **Abdullina D.U.**, Kuzkin V.A., Krivtsov A.M., Kudreyko A.A., Dmitriev S.V. (2025). Heat transfer regimes and the electroplasticity effect: A molecular dynamics study. Physical Review B, 112(14), 144310.

9. Bebikhov Y.V., Semenova M.N., **Abdullina D.U.**, Dmitriev S.V. (2025). Moving gap discrete breather in biatomic crystal. Russian Journal of Nonlinear Dynamics, 21(3), 287-299.

10. **Abdullina D.U.**, Bebikhov Y.V., Semenova M.N., Dmitriev S.V. (2025). Excitation of moving discrete breathers in square  $\beta$ -FPUT lattice by external driving. Physics of the Solid State, 67(11), 977-982.

11. Рябов Д.С., Косарев И.В., **Абдуллина Д.У.**, Дмитриев С.В. (2025). Делокализованные нелинейные колебательные моды ОЦК решетки // Известия Алтайского государственного университета. № 1 (141). С. 58–66.