

**ON THE POSSIBILITY OF THE EXISTENCE OF DISCRETE BREEZERS  
OF VARIOUS TYPES IN A LONG-RANGE BCC LATTICE**

*Yuri Vladimirovich Bebikhov*<sup>1a</sup>, *Maria Nikolayevna Semenova*<sup>1</sup>,  
*Denis Sergeevich Ryabov*<sup>2</sup>, *Daxing Xiong*<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Polytechnic Institute (Branch) in Mirny, North-Eastern Federal University, Mirny, Sakha Republic (Yakutia), 678170 Russia

<sup>2</sup> Southern Federal University, Rostov-on-Don, 344006 Russia

<sup>3</sup> MinJiang Collaborative Center for Theoretical Physics, College of Physics and Electronic Information Engineering, Minjiang University, Fuzhou, 350108 China

<sup>a</sup> bebikhov.yura@mail.ru

**ABSTRACT**

In this paper we investigate the possibility of existence of different types of localized excitations in a nonlinear body-centered cubic (BCC) lattice, called discrete breathers. The interactions between the lattice particles are described by the  $\beta$ -FPUT potential, and interactions up to the fourth neighbors are taken into account. The consideration of long-range forces is justified by the fact that they are realized, for example, for interatomic interactions in metals and ionic crystals. Recently it has been shown that a special class of exact solutions of the equations of motion of lattice particles having frequencies outside the phonon spectrum can serve to search for discrete breathers. Such exact solutions are found from lattice symmetry analysis and are called bushes of nonlinear normal modes or delocalized nonlinear vibrational modes (DNVMs). In this paper, three groups of DNVMs of the BCC lattice with wave vectors at the Brillouin zone boundary are found, which can have frequencies above the phonon spectrum over the whole range of vibrational amplitudes. Discrete breathers can be obtained by imposing localizing functions on such DNVMs. Some of the DNVMs can have frequencies above the phonon spectrum only if the long-range interactions are taken into account. The presented results are important in discussing the role of discrete breathers in the formation of macroscopic properties of crystals.

**KEYWORDS**

Delocalized nonlinear vibrational modes; phonon spectrum; discrete breathers.

**О ВОЗМОЖНОСТИ СУЩЕСТВОВАНИЯ ДИСКРЕТНЫХ БРИЗЕРОВ  
РАЗЛИЧНЫХ ТИПОВ В ОЦК РЕШЕТКЕ С ДАЛЬНОДЕЙСТВИЕМ**

*Юрий Владимирович Бебихов*<sup>1a</sup>, *Мария Николаевна Семенова*<sup>1</sup>,  
*Денис Сергеевич Рябов*<sup>2</sup>, *Дасин Ксионг*<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Политехнический институт (филиал) в г. Мирном, Северо-Восточный федеральный университет, 678170 Россия, Республика Саха (Якутия), Мирный, ул. Тихонова, 5/1

<sup>2</sup> Южный федеральный университет, 344006, Россия, Ростов-на-Дону

<sup>3</sup> Миньцзянский совместный центр теоретической физики, Колледж физики и электронной информационной инженерии, Миньцзянский университет, 350108, Китай, Фучжоу

<sup>a</sup> bebikhov.yura@mail.ru

## АННОТАЦИЯ

В этой статье исследуется возможность существования различных типов локализованных возбуждений в нелинейной объемно-центрированной кубической (ОЦК) решетке, называемых дискретными бризерами. Взаимодействия между частицами решетки описываются  $\beta$ -ФПУЦ потенциалом, при этом учитываются взаимодействия вплоть до четвертых соседей. Рассмотрение дальнедействующих сил оправдано тем, что они реализуются, например, для межатомных взаимодействий в металлах и ионных кристаллах. Недавно было показано, что особый класс точных решений уравнений движения частиц решетки, имеющих частоты вне фононного спектра, может служить для поиска дискретных бризеров. Такие точные решения находятся из анализа симметрии решетки и называются бушами нелинейных нормальных мод или делокализованными нелинейными колебательными модами (ДНКМ). В данной работе найдены три группы ДНКМ ОЦК решетки с волновыми векторами на границе зоны Бриллюэна, которые могут иметь частоты выше фононного спектра во всем диапазоне амплитуд колебаний. Дискретные бризеры могут быть получены путем наложения локализирующих функций на такие ДНКМ. Некоторые из ДНКМ могут иметь частоты выше фононного спектра только при учете дальнедействия. Представленные результаты важны при обсуждении роли дискретных бризеров в формировании макроскопических свойств кристаллов.

## КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА

Делокализованные нелинейные колебательные моды; фононный спектр; дискретные бризеры.

### Введение

Нелинейные решетки допускают точные динамические решения в виде делокализованных нелинейных колебательных мод (ДНКМ). Такие решения могут быть получены с учетом только пространственной группы симметрии решетки [1–5] и, таким образом, существуют для любого типа межатомных взаимодействий даже при больших амплитудах.

ДНКМ хорошо изучены для нелинейных цепочек [2–6]. Большинство ДНКМ являются стоячими волнами, но волна с тремя частицами на период является бегущей волной [7], которая связана с локализованными движущимися возбуждениями с «магическим» волновым числом [8–10].

ДНКМ с  $n$  степенями свободы представляет собой  $n$ -компонентную колебательную моду; однокомпонентные ДНКМ фак-

тически являются модами Розенберга [11]. Одно- и двухкомпонентные ДНКМ в цепочке частиц были описаны в работе [7]. ДНКМ в двумерной решетке с симметрией решетки графена были рассмотрены авторами работы [12]. Одно- и двухкомпонентные ДНКМ в треугольной решетке были изучены в [13], а однокомпонентные ДНКМ – в квадратной решетке в [14]. Недавно были изучены ДНКМ в трехмерных решетках, включая алмазную [1], простую кубическую [15], ГЦК [16, 17] и ОЦК [18, 19] решетки. В большинстве случаев ДНКМ изучаются в решетках с ближайшими взаимодействиями или с учетом первых и вторых соседей, например, для квадратной решетки, поскольку эта решетка неустойчива, если не задействованы связи со вторыми соседями. Существует тесная связь между ДНКМ и пространственно локализованными нелинейными колебательными мо-

дами, называемыми дискретными бризерами [20–27].

ДНКМ можно эффективно использовать для проверки точности межатомных потенциалов [26, 27], и при решении этой задачи для металлов необходимо учитывать дальнедействующие взаимодействия. Это следует из природы металлических связей, поскольку внешняя электронная оболочка атомов металла перекрывается с большим числом соседних атомов.

Дисперсионные кривые для фононов очень информативны для характеристики динамики решетки, и многие исследования были проведены для ОЦК металлов. Дисперсионные кривые часто используются для проверки и подгонки межатомных потенциалов (см., например, работы [28, 29], посвященные щелочным ОЦК металлам Li, Na, K, Rb и Cs, а также работу [30], посвященную переходным ОЦК металлам Cr, Fe, Mo, Nb, Ta, V и W). Упругая анизотропия и зависимость дисперсии фононов от температуры для ОЦК Fe и W были изучены с помощью моделирования молекулярной динамики [31]. Первопринципное исследование фононных спектров для сильно сжатого Sb показало, что стабильность ОЦК структуры увеличивается с ростом давления [32]. Выбор межатомных потенциалов для моделирования метастабильного ОЦК-полиморфа Mg с учетом дисперсионных кривых фононов и других свойств обсуждался в [33]. Моделирование молекулярной динамики с использованием потенциала машинного обучения проведено для высокотемпературной ОЦК-фазы циркония [34]. *Ab initio* исследование дисперсионных кривых переходных металлов с ОЦК решеткой (ванадий и ниобий) показало важность рассмотрения суперячейки достаточно большого размера [35].

Ввиду упомянутого выше интереса к дисперсии фононов ОЦК решетки в металлах, в данной работе аналитически выводится дисперсионное соотношение фононов для ОЦК

решетки с учетом взаимодействий до четвертого соседа. Затем описываются три группы ДНКМ, которые могут иметь частоты выше фононного спектра во всем интервале амплитуд колебаний, приводятся их волновые векторы, и аналитически вычисляется частота в пределе малых амплитуд.

В целом данная работа направлена на установление влияния дискретных бризеров на макроскопические свойства кристаллов, в частности, с ОЦК решеткой. Решение данной задачи невозможно без установления всех возможных типов дискретных бризеров в кристалле.

## 1. Модель ОЦК решетки

Анализируется трехмерная ОЦК решетка со взаимодействием до четвертого ближайшего соседа, см. рис. 1, *a*. Параметр решетки равен  $h$ ; векторы, задающие примитивную трансляционную ячейку решетки, это  $\mathbf{e}_1=(h,0,0)$ ,  $\mathbf{e}_2=(0,h,0)$ , и  $\mathbf{e}_3=(h/2,h/2,h/2)$ . Тогда радиус-векторы точек решетки имеют вид:

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

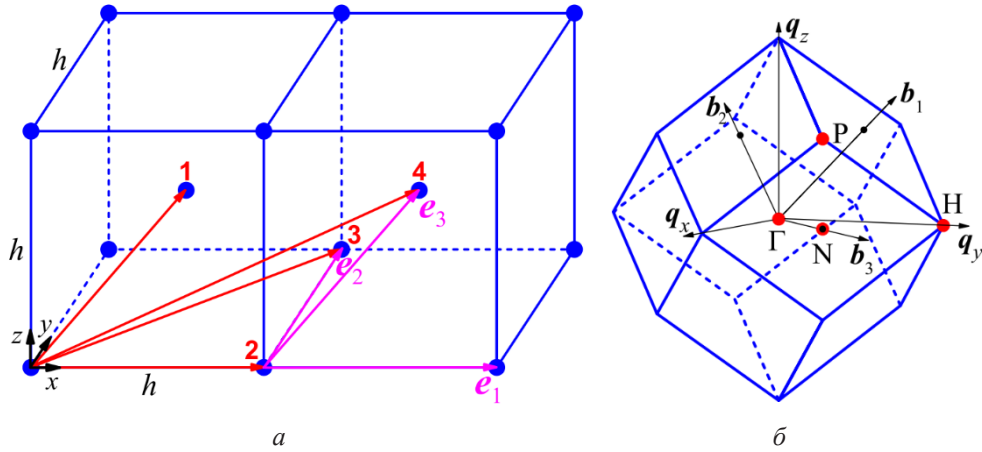
где  $i, j$  и  $k$  – целые числа.

Смещение частицы  $i,j,k$  из своего решеточного положения определяются вектором  $\delta_{i,j,k} = u_{i,j,k}\mathbf{v}_{i,j,k} + w_{i,j,k}\mathbf{e}_3$ . Таким образом, радиус-вектор этой частицы в момент времени  $t$  становится  $\mathbf{r}_{i,j,k} = \xi_{i,j,k} + \delta_{i,j,k}(t)$ .

Частицы взаимодействуют посредством межатомного потенциала  $\beta$ -Ферми-Паста-Улама-Цингоу ( $\beta$ -ФПУЦ)

$$\varphi_l(r) = (c_l/2)(r-a_l)^2 + (\beta/4)(r-a_l)^4, \quad l=1,\dots,4, \quad (2)$$

где  $r$  – межчастичное расстояние; радиусы первых четырех координационных сфер равны  $a_1 = \sqrt{3}h/2$ ,  $a_2 = h$ ,  $a_3 = \sqrt{2}h$  и  $a_4 = \sqrt{11}h/2$ ;  $c_l$  и  $b_l$  – коэффициенты линейной и нелинейной жесткости, соответственно. В качестве единицы длины используется параметр решетки,  $h=1$ , а  $c_1=1$  фиксируется путем выбора единиц энергии.



**Рис. 1.** (а) ОЦК решетка с параметром решетки  $h$ . Примитивная трансляционная ячейка решетки задается векторами  $e_1$ ,  $e_2$  и  $e_3$  (выделены пурпурным цветом). Радиус-векторы первого, второго, третьего и четвертого соседей частицы, расположенной в начале координат, изображены красным цветом. (б) Первая зона Бриллюэна ОЦК решетки. Высочисиметричные точки обозначены буквами  $\Gamma$ ,  $N$ ,  $P$  и  $H$

**Fig. 1.** (a) BCC lattice with lattice parameter  $h$ . The primitive translational cell of the lattice is defined by vectors  $e_1$ ,  $e_2$  и  $e_3$  (highlighted in magenta). The radius vectors of the first, second, third and fourth neighbors of the particle located at the origin are depicted in red. (b) The first Brillouin zone of the BCC lattice. Highly symmetric points are labeled by letters  $\Gamma$ ,  $N$ ,  $P$ , and  $H$

## 2. Дисперсионное соотношение

Используя стандартный подход, а именно, выписывая линеаризованные уравнения движения частицы  $i,j,k$ , и отыскивая их решение в виде  $u_{i,j,k} = U \exp[i(qi + sj + pk - \omega t)]$ ,  $v_{i,j,k} = V \exp[i(qi + sj + pk - \omega t)]$ ,  $w_{i,j,k} = W \exp[i(qi + sj + pk - \omega t)]$  (здесь  $U$ ,  $V$  и  $W$  – компоненты собственного вектора,  $q$ ,  $s$  и  $p$  – компонен-

ты волнового вектора,  $-\omega$  частота колебаний а  $i$  обозначает мнимую единицу), можно прийти к системе однородных линейных алгебраических уравнений относительно  $U$ ,  $V$  и  $W$ . Данная система имеет нетривиальное решение тогда и только тогда, когда определитель системы равен нулю. Это условие приводит к следующему кубическому относительно  $\omega^2$  уравнению:

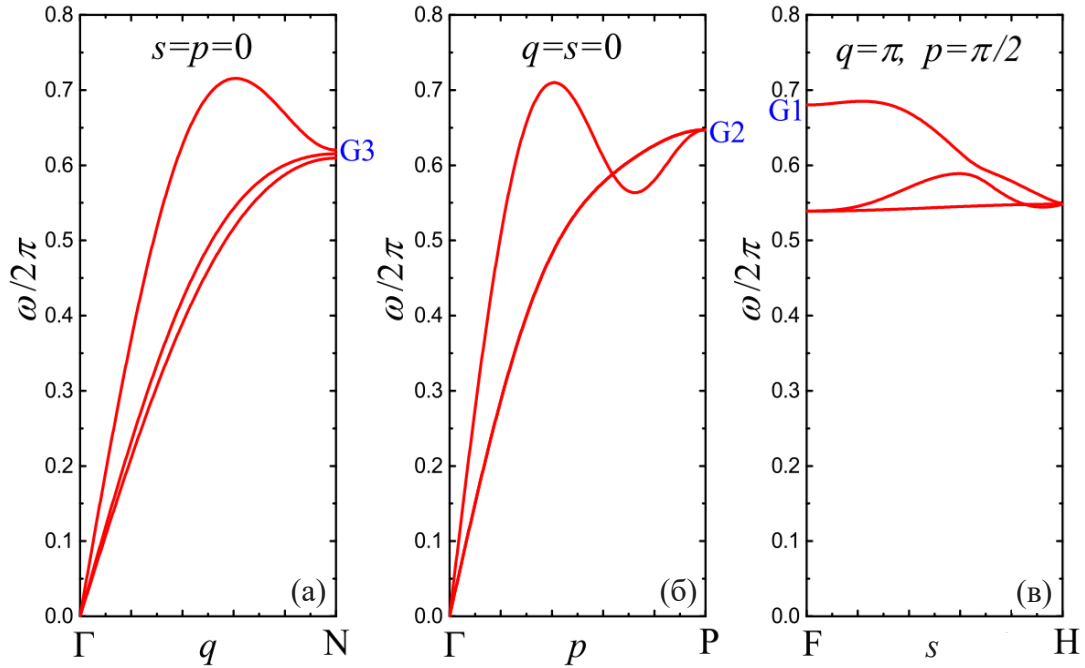
$$m^3 \omega^6 + (P_1 + P_2 + P_3) m^2 \omega^4 + (P_1 P_2 + P_2 P_3 + P_1 P_3 - Q^2 - S^2 - Z^2) m \omega^2 + P_1 P_2 P_3 - Q^2 P_1 - S^2 P_2 - Z^2 P_3 + 2 Q S Z = 0, \quad (3)$$

где

$$\begin{aligned} P_1 &= -\gamma_1 - \gamma_2 - \gamma_3 - \gamma_4 - \xi_1 - \phi_1 - \phi_2 - \phi_5 - \phi_6 \\ &\quad - 9\delta_1 - 9\delta_2 - 9\delta_3 - 9\delta_4 - \delta_5 - \delta_6 - \delta_7 - \delta_8 - \delta_9 - \delta_{10} - \delta_{11} - \delta_{12}, \\ P_2 &= -\gamma_1 - \gamma_2 - \gamma_3 - \gamma_4 - \xi_2 - \phi_1 - \phi_2 - \phi_3 - \phi_4 \\ &\quad - \delta_1 - \delta_2 - \delta_3 - \delta_4 - \delta_5 - \delta_6 - \delta_7 - \delta_8 - 9\delta_9 - 9\delta_{10} - 9\delta_{11} - 9\delta_{12}, \\ P_3 &= -\gamma_1 - \gamma_2 - \gamma_3 - \gamma_4 - \xi_3 - \phi_3 - \phi_4 - \phi_5 - \phi_6 \\ &\quad - \delta_1 - \delta_2 - \delta_3 - \delta_4 - 9\delta_5 - 9\delta_6 - 9\delta_7 - 9\delta_8 - \delta_9 - \delta_{10} - \delta_{11} - \delta_{12}, \\ Z &= -\gamma_1 + \gamma_2 - \gamma_3 + \gamma_4 - \phi_1 + \phi_2 - 3\delta_1 + 3\delta_2 + 3\delta_3 - 3\delta_4 - \delta_5 + \delta_6 + \delta_7 - \delta_8 - 3\delta_9 + 3\delta_{10} - 3\delta_{11} + 3\delta_{12}, \\ S &= -\gamma_1 + \gamma_2 + \gamma_3 - \gamma_4 - \phi_5 + \phi_6 - 3\delta_1 - 3\delta_2 + 3\delta_3 + 3\delta_4 - 3\delta_5 + 3\delta_6 - 3\delta_7 + 3\delta_8 - \delta_9 + \delta_{10} + \delta_{11} - \delta_{12}, \\ Q &= -\gamma_1 - \gamma_2 + \gamma_3 + \gamma_4 - \phi_3 + \phi_4 - \delta_1 + \delta_2 - \delta_3 + \delta_4 - 3\delta_5 - 3\delta_6 + 3\delta_7 + 3\delta_8 - 3\delta_9 - 3\delta_{10} + 3\delta_{11} + 3\delta_{12}, \end{aligned}$$

и, в свою очередь,

$$\begin{aligned} \gamma_1 &= 4 \frac{c_1}{3} \sin^2 \frac{p}{2}, \gamma_2 = 4 \frac{c_1}{3} \sin^2 \frac{q-p}{2}, \gamma_3 = 4 \frac{c_1}{3} \sin^2 \frac{q+s-p}{2}, \gamma_4 = 4 \frac{c_1}{3} \sin^2 \frac{s-p}{2}, \\ \xi_1 &= 4c_2 \sin^2 \frac{q}{2}, \xi_2 = 4c_2 \sin^2 \frac{s}{2}, \xi_3 = 4c_2 \sin^2 \frac{q+s-2p}{2}, \\ \phi_1 &= 4 \frac{c_3}{2} \sin^2 \frac{q+s}{2}, \phi_2 = 4 \frac{c_3}{2} \sin^2 \frac{q-s}{2}, \phi_3 = 4 \frac{c_3}{2} \sin^2 \frac{q-2p}{2}, \\ \phi_4 &= 4 \frac{c_3}{2} \sin^2 \frac{q+2s-2p}{2}, \phi_5 = 4 \frac{c_3}{2} \sin^2 \frac{s-2p}{2}, \phi_6 = 4 \frac{c_3}{2} \sin^2 \frac{2q+s-2p}{2}, \\ \delta_1 &= 4 \frac{c_4}{11} \sin^2 \frac{q+p}{2}, \delta_2 = 4 \frac{c_4}{11} \sin^2 \frac{q-s+p}{2}, \delta_3 = 4 \frac{c_4}{11} \sin^2 \frac{2q-p}{2}, \\ \delta_4 &= 4 \frac{c_4}{11} \sin^2 \frac{2q+s-p}{2}, \delta_5 = 4 \frac{c_4}{11} \sin^2 \frac{q+s-3p}{2}, \delta_6 = 4 \frac{c_4}{11} \sin^2 \frac{2q+s-3p}{2}, \\ \delta_7 &= 4 \frac{c_4}{11} \sin^2 \frac{q+2s-3p}{2}, \delta_8 = 4 \frac{c_4}{11} \sin^2 \frac{2q+2s-3p}{2}, \delta_9 = 4 \frac{c_4}{11} \sin^2 \frac{s+p}{2}, \\ \delta_{10} &= 4 \frac{c_4}{11} \sin^2 \frac{-q+s+p}{2}, \delta_{11} = 4 \frac{c_4}{11} \sin^2 \frac{q+2s-p}{2}, \delta_{12} = 4 \frac{c_4}{11} \sin^2 \frac{2s-p}{2}. \end{aligned}$$



**Рис. 2.** Дисперсионные кривые вдоль высокосимметричных линий в первой зоне Бриллюэна: (а)  $s = p = 0$ , (б)  $q = s = 0$ , (в)  $q = \pi, p = \pi/2$ . Отмечены частоты трех групп ДНКМ, которые могут иметь частоту выше фононного спектра

**Fig. 2.** Dispersion curves along the high-symmetry lines of the first Brillouin zone: (а)  $s = p = 0$ , (б)  $q = s = 0$ , and (в)  $q = \pi, p = \pi/2$ . The three groups of DNVMs that can have frequencies above the phonon spectrum are indicated

Кубическое уравнение (3) определяет три ветви дисперсионного соотношения ОЦК решетки, соответствующие продольным и двум типам поперечных колебаний.

На рис. 2 представлены дисперсионные соотношения вдоль высокосимметричных направлений в первой зоне Бриллюэна. Расчеты проводились для следующего набора параметров модели:

$$m = 1, c_1 = 1, c_2 = 0,9, c_3 = 0,8, c_4 = 0,7. \quad (4)$$

### 3. ДНКМ ОЦК решетки, которые могут иметь частоты выше фононного спектра

На рис. 3 представлены 10 ДНКМ ОЦК решетки, которые могут иметь частоту выше фононного спектра. На двух верхних панелях показаны координаты частиц. ДНКМ разбиты на три группы, обозначенные как G1, G2 и G3.

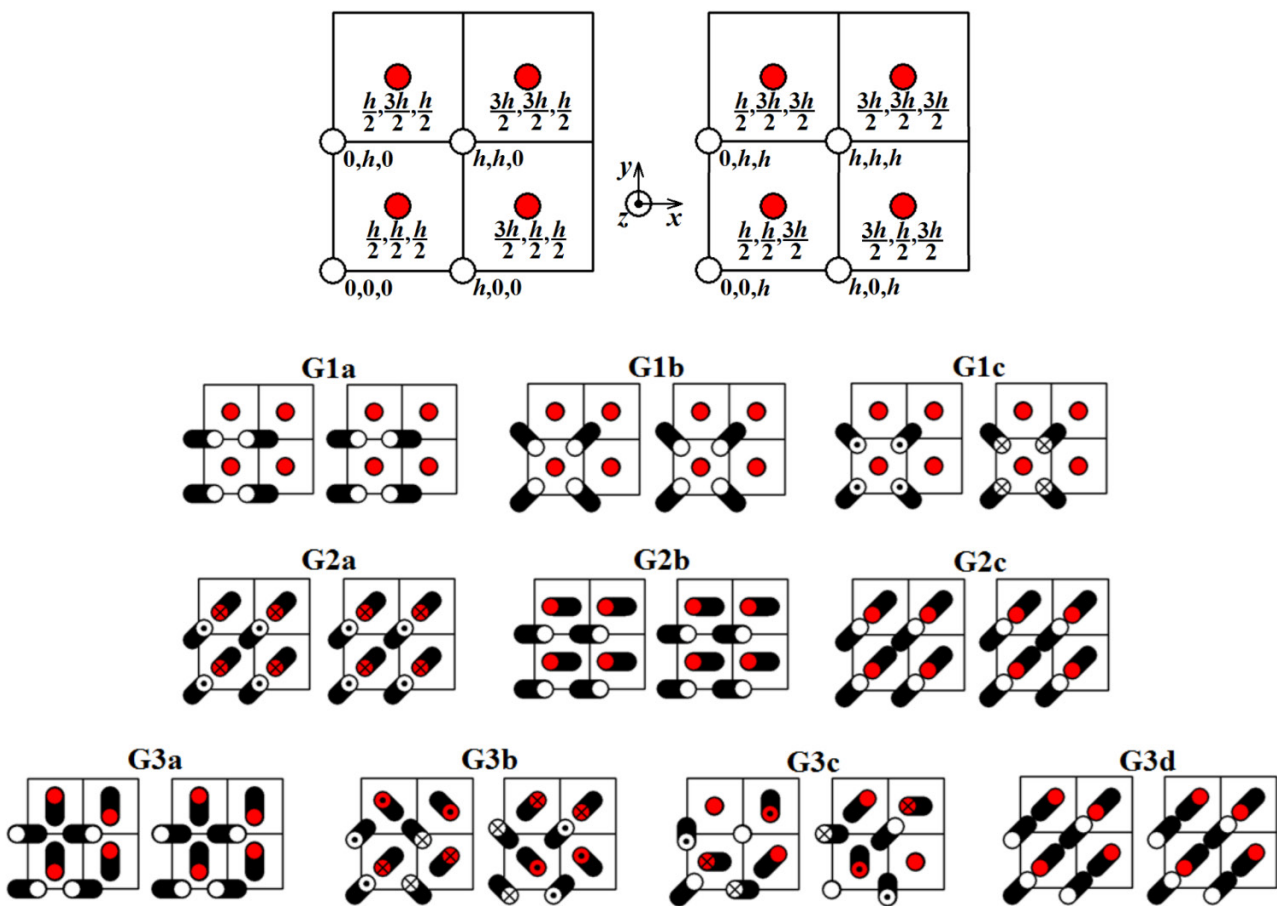


Рис. 3. Три группы ДНКМ, обозначенные как G1, G2 и G3, которые могут иметь частоту выше фононного спектра. Координаты частиц показаны на панелях в верхнем ряду. Группы G1 и G2 включают по три ДНКМ, а G3 – четыре ДНКМ

Fig. 3. Three groups of DNVMs, designated as G1, G2 and G3, that can have frequencies above the phonon spectrum. Coordinated of the particles are shown in the two panels at the top. Groups G1 and G2 include three DNVMs each, and G3 includes four DNVMs

Используя симметрию ДНКМ, удается посчитать аналитически их частоту колебаний в малоамплитудном пределе. Оказывается, что ДНКМ одной группы имеют одинаковую частоту линейных колебаний. Для ДНКМ группы G1 частота равна

$$m\omega^2 = (8/3) c_1 + 4c_2 + 8c_3 + 8c_4. \quad (5)$$

Для ДНКМ группы G2 частота равна

$$m\omega^2 = (16/3) c_1 + 16c_4. \quad (6)$$

Для ДНКМ группы G3 частота равна

$$m\omega^2 = (16/3) c_1 + 4c_2 + 4c_3 + (48/11)c_4. \quad (7)$$

Частоты линейных колебаний групп ДНКМ, рассчитанные для параметров модели (4), приведены в табл. 1. Там же показаны волновые вектора групп ДНКМ и указаны соответствующие точки первой зоны Бриллюэна, см. рис. 1, б.

Видно, что все 10 ДНКМ имеют волновые векторы на границе первой зоны Бриллюэна (удвоение периода по сравнению с базовой ОЦК решеткой). Именно поэтому все ДНКМ на рис. 3 заданы в трансляционной ячейке размера  $2 \times 2 \times 2$  кубических трансляционных ячеек ОЦК решетки. ДНКМ возбуждаются путем придания частицам начальных смещений в соответствии с определенными схемами, показанными на рис. 3. Начальные скорости частиц равны

нулю. Траектории колеблющихся частиц показаны черным цветом. Для частиц, изображенных пустыми кружками,  $w$ -компонента начального смещения равна нулю, и она положительна (отрицательна), если частица помечена точкой (крестиком). Все ДНКМ являются колебательными модами с одной степенью свободы. Это означает, что длина вектора начального смещения равна либо нулю, либо  $A$ , причем последняя величина является амплитудой ДНКМ. Частицы с нулевым начальным смещением остаются в состоянии покоя, в то время как другие частицы колеблются.

Отметим, что если в модели рассматриваются только взаимодействия между ближайшими и вторыми соседями, то есть  $c_3=c_4=0$ , то максимальную частоту могут иметь только ДНКМ группы G3. С учетом же дальнего действия, в зависимости от жесткостей связей различной длины, максимальную частоту могут иметь и ДНКМ группы G1 или G2. Как отмечалось выше, ДНКМ с частотами выше фононного спектра могут использоваться для получения дискретных бризеров путем наложения локализирующих функций. Приходим к выводу, что в модели ОЦК решетки с дальним действием возможно существование новых типов дискретных бризеров.

**Таблица 1.** Волновые числа трех групп ДНКМ, которые могут иметь частоту выше фононного спектра

**Table 1.** Wave numbers of the three groups of DNVMs that can have frequencies above the phonon spectrum

Группа ДНКМ / DNVN group	Частоты линейных колебаний $\omega/2\pi$ для набора параметров (4). В скобках указана кратность корней / The frequencies of linear oscillations is $\omega/2\pi$ for a set of parameters (4). The multiplicity of roots is indicated in parentheses	Волновые числа $q, s, p$ / Wave numbers $q, s, p$
G1	0,6802(1)	(0, 0, $\pm\pi/2$ ), (0, $\pm\pi$ , $\pm\pi/2$ ), ( $\pm\pi$ , 0, $\pm\pi/2$ ), точка F / point F
G2	0,6471(3)	(0, 0, $\pm\pi$ ), точка P / point P
G3	0,6203(1)	(0, $\pm\pi$ , 0), ( $\pm\pi$ , 0, 0), (0, $\pm\pi$ , $\pm\pi$ ), ( $\pm\pi$ , 0, $\pm\pi$ ), ( $\pm\pi$ , $\pm\pi$ , 0), ( $\pm\pi$ , $\pm\pi$ , $\pm\pi$ ), точка N / point N

**Таблица 2.** Доля потенциальной энергии, запасенной связями с первой по четвертую за счет возбуждения ДНКМ разных групп с малой амплитудой  $A = 10^{-4}$ , рассчитанная в момент максимального отклонения атомов от их равновесных положений

**Table 2.** The fraction of potential energy stored by the first- through fourth-nearest neighbor bonds due to the excitation of DNVMs of different groups with a small amplitude of  $A = 10^{-4}$ , calculated at the time of maximum deviation of the atoms from their equilibrium positions

Группа ДНКМ / DNVM group	Первые соседи / First-nearest neighbor	Вторые соседи / Second-nearest neighbor	Третьи соседи / Third-nearest neighbor	Четвертые соседи / Fourth-nearest neighbor
G1	0,1460	0,1971	0,3504	0,3066
G2	0,3226	0,0	0,0	0,6774
G3	0,3512	0,2370	0,2107	0,2011

#### 4. Энергии различных связей

В разделе 3 было показано, что для группы ДНКМ G2 частоты малоамплитудных колебаний зависят не от всех коэффициентов жесткости, а только от  $c_1$  и  $c_4$ . Для дальнейшего изучения вклада различных связей в динамику ДНКМ для всех рассмотренных ДНКМ рассчитывается доля общей потенциальной энергии, запасенной связями различной длины. Это сделано для случая, когда колеблющиеся атомы находятся на расстоянии  $A = 10^{-4}$  от решеточных положений. Результат для параметров модели (4) представлен в табл. 2.

Как видно из табл. 2, различные связи вносят разный вклад в малоамплитудные колебания ДНКМ разных групп, и этот вклад коррелирует с коэффициентами в аналитических выражениях для частот ДНКМ, уравнениях (5–7). Видно, что полученные результаты для ДНКМ одной группы идентичны для случая малоамплитудных колебаний. С другой стороны, для колебаний большой амплитуды результат различен для разных ДНКМ одной группы; это эффект ангармонизма.

#### Выводы

Рассмотрена ОЦК решетка с учетом взаимодействий между частицами вплоть до четвертых соседей. Представлено 10 ДНКМ, разбитых на три группы, частоты которых

могут лежать выше фононного спектра (см. рис. 3). ДНКМ одной группы имеют одинаковую частоту в малоамплитудном пределе. Даны аналитические выражения (5–7) для расчета частот ДНКМ в малоамплитудном пределе, иными словами, в гармонической решетке. Как следует из данных выражений, в случае  $c_3=c_4=0$  максимальную частоту могут иметь только ДНКМ группы G3. Следовательно, в такой решетке дискретные бризеры можно получить путем наложения локализирующих функций на ДНКМ группы G3. Однако если включены взаимодействия между третьими и четвертыми соседями, то максимальную частоту могут иметь ДНКМ группы G1 или G2, а, следовательно, наложением на них локализирующих функций можно получить новые типы дискретных бризеров. Представленные результаты показывают, что в решетках с дальнодействием возможны новые типы дискретных бризеров, что важно, например, для решения вопроса о роли дискретных бризеров в формировании макроскопических свойств кристаллов [36].

#### Благодарности / Acknowledgments

*Работа выполнена в рамках проекта Российского научного фонда № 24-22-00092.*

*The work was carried out within the framework of Russian Science Foundation Project No. 24-22-00092.*



## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. G. Chechin, D. Ryabov, and S. Shcherbinin, Large-amplitude periodic atomic vibrations in diamond // *Journal of Micromechanics and Molecular Physics* 3, 1850002 (2018). DOI: 10.1142/S2424913018500029
2. G. M. Chechin and G. S. Dzhelauhova, Discrete breathers and nonlinear normal modes in monoatomic chains // *J. Sound Vib.* 322, 490 (2009). DOI: 10.1016/j.jsv.2008.04.002
3. G. Chechin and G. Bezuglova, Resonant excitation of the bushes of nonlinear vibrational modes in monoatomic chains // *Commun. Nonlinear Sci.* 126, 107509 (2023). DOI: 10.1016/j.cnsns.2023.107509
4. G. M. Chechin, D. A. Sizintsev, and O. A. Usoltsev, Nonlinear atomic vibrations and structural phase transitions in strained carbon chains // *Comp. Mater. Sci.* 138, 353 (2017). DOI: 10.1016/j.commatsci.2017.07.004
5. G. M. Chechin and S. A. Shcherbinin, Delocalized periodic vibrations in nonlinear LC and LCR electrical chains // *Commun. Nonlinear Sci.* 22, 244 (2015). DOI: 10.1016/j.cnsns.2014.09.028
6. G. M. Chechin and D. S. Ryabov, Stability of nonlinear normal modes in the Fermi-Pasta-Ulam  $\beta$  chain in the thermodynamic limit // *Phys. Rev. E* 85, 056601 (2012). DOI: 10.1103/PhysRevE.85.056601
7. G. M. Chechin, D. S. Ryabov, and K. G. Zhukov, Stability of low-dimensional bushes of vibrational modes in the Fermi-Pasta-Ulam chains // *Physica D* 203, 121 – 166 (2005).
8. Y. A. Kosevich, Charged ultradiscrete supersonic kinks and discrete breathers in nonlinear molecular chains with realistic interatomic potentials and electron-phonon interactions // *J. Phys.: Conf. Ser.* 833, 012021 (2017). DOI: 10.1088/1742-6596/833/1/012021
9. J. F. R. Archilla, Y. A. Kosevich, N. Jiménez, V. J. Sánchez-Morcillo, and L. M. Garcia-Raffi, Ultradiscrete kinks with supersonic speed in a layered crystal with realistic potentials // *Phys. Rev. E* 91 (2015). DOI: 10.1103/PhysRevE.91.022912
10. Y. A. Kosevich, R. Khomeriki, and S. Ruffo, Supersonic discrete kink-solitons and sinusoidal patterns with «magic» wave number in anharmonic lattices // *Europhys. Lett.* 66, 21 (2004). DOI: 10.1209/epl/i2003-10156-5
11. R. M. Rosenberg, The normal modes of nonlinear  $n$ -degree-of-freedom systems // *J. Appl. Mech. T. ASME* 29, 7 – 14 (1960). DOI: 10.1115/1.3636501
12. G. M. Chechin, D. S. Ryabov, and S. A. Shcherbinin, Nonlinear vibrational modes in graphene: group-theoretical results // *Letters on Materials* 6, 9 (2016). DOI: 10.22226/2410-3535-2016-1-9-15
13. D. S. Ryabov, G. M. Chechin, A. Upadhyaya, E. A. Korznikova, V. I. Dubinko, and S. V. Dmitriev, Delocalized nonlinear vibrational modes of triangular lattices // *Nonlinear Dynam.* 102, 2793 (2020). DOI: 10.1007/s11071-020-06015-5
14. D. S. Ryabov, G. M. Chechin, E. K. Naumov, Y. V. Bebikhov, E. A. Korznikova, and S. V. Dmitriev, One-component delocalized nonlinear vibrational modes of square lattices // *Nonlinear Dynam.* 111, 8135 – 8153 (2023). DOI: 10.1007/s11071-023-08264-6
15. S. A. Shcherbinin, A. M. Kazakov, Y. V. Bebikhov, A. A. Kudreyko, and S. V. Dmitriev, Delocalized nonlinear vibrational modes and discrete breathers in  $\beta$ -FPUT simple cubic lattice // *Phys. Rev. E* 109, 014215 (2024). DOI: 10.1103/PhysRevE.109.014215
16. R. I. Babicheva, A. S. Semenov, S. A. Shcherbinin, E. A. Korznikova, A. A. Kudreyko, P. Vivegananthan, K. Zhou, and S. V. Dmitriev, Effect of the stiffness of interparticle bonds on properties of delocalized nonlinear vibrational modes in an fcc lattice // *Phys. Rev. E* 105, 064204 (2022). DOI: 10.1103/PhysRevE.105.064204
17. S. A. Shcherbinin, K. A. Krylova, G. M. Chechin, E. G. Soboleva, and S. V. Dmitriev, Delocalized nonlinear vibrational modes in fcc metals // *Commun. Nonlinear Sci.* 104, 106039 (2022). DOI: 10.1016/j.cnsns.2021.106039
18. S. A. Shcherbinin, Y. V. Bebikhov, D. U. Abdullina, A. A. Kudreyko, and S. V. Dmitriev, Delocalized nonlinear vibrational modes and discrete breathers in a body centered cubic lattice // *Commun. Nonlinear Sci.* 135, 108033 (2024). DOI: 10.1016/j.cnsns.2024.108033
19. Колесников И.Д., Шепелев И. А. Возбуждение и распространение 1-краудиона в ОЦК решетке ниобия. *Materials. Technologies. Design*, 4(1 (7), 5–10. (2022). DOI: 10.54708/26587572\_2022\_4175
20. G. S. Bezuglova, G. M. Chechin, and P. P. Goncharov, Discrete breathers on symmetry-determined invariant manifolds for scalar models on the plane square lattice // *Phys. Rev. E* 84, 036606 (2011). DOI: 10.1103/PhysRevE.84.036606
21. O. V. Bachurina and A. A. Kudreyko, Two-dimensional discrete breathers in fcc metals // *Computational Materials Science* 182, 109737 (2020). DOI: 10.1016/j.commatsci.2020.109737
22. O. V. Bachurina, R. T. Murzaev, and D. V. Bachurin, Molecular dynamics study of two-dimensional discrete breather in nickel // *Journal of Micromechanics and Molecular Physics* 4, 1950001 (2019). DOI: 10.1142/S2424913019500012
23. O. V. Bachurina, Plane and plane-radial discrete breathers in fcc metals // *Model. Simul. Mater. Sc.* 27, 055001 (2019). DOI: 10.1088/1361-651X/ab17b7
24. O. V. Bachurina, Linear discrete breather in fcc metals // *Comp. Mater. Sci.* 160, 217 (2019). DOI: 10.1016/j.commatsci.2019.01.014
25. O. V. Bachurina, R. T. Murzaev, S. A. Shcherbinin, A. A. Kudreyko, S. V. Dmitriev, and D. V. Bachurin, Delocalized nonlinear vibrational modes in  $Ni_3Al$  // *Commun. Nonlinear Sci.* 132, 107890 (2024). DOI: 10.1016/j.cnsns.2024.107890
26. I. V. Kosarev, S. A. Shcherbinin, A. A. Kistanov, R. I. Babicheva, E. A. Korznikova, and S. V. Dmitriev,

An approach to evaluate the accuracy of interatomic potentials as applied to tungsten, *Comp. Mater. Sci.* 231, 112597 (2024). DOI: 10.1016/j.commatsci.2023.112597

27. S. V. Dmitriev, A. A. Kistanov, I. V. Kosarev, S. A. Scherbinin, and A. V. Shapeev, Construction of machine learning interatomic potentials for metals, *Russ. Phys. J.* 67, 1408 (2024). DOI: 10.1007/s11182-024-03261-7

28. Y. Xie and J.-M. Zhang, Atomistic simulation of phonon dispersion for body-centred cubic alkali metals, *Canadian Journal of Physics* 86, 801 – 805 (2008). DOI: 10.1139/P07-200

29. R. B. Wilson and D. M. Riffe, An embedded-atom-method model for alkali-metal vibrations, *Journal of Physics Condensed Matter* 24, 335401 (2012). DOI: 10.1088/0953-8984/24/33/335401

30. G.-B. Jong, P. Song, and H.-S. Jin, Phonon and thermodynamic properties of bcc transition metals using MEAM potentials, *Indian J. Phys.* 94, 753 – 766 (2020). DOI: 10.1007/s12648-019-01497-5

31. H. Mei, F. Wang, J. Li, and L. Kong, Elastic anisotropy and its temperature dependence for cubic crystals revealed by molecular dynamics simulations,

*Model. Simul. Mater. Sc.* 31, 065013 (2023). DOI: 10.1088/1361-651X/ace541

32. M. Geshi, H. Funashima, and G. P. Hettiarachchi, First-principles study of highly-compressed Sb: a stubborn body-centered cubic structure, *Jpn. J. Appl. Phys.* 61, 012011 (2022). DOI: 10.35848/1347-4065/ac8035

33. J. F. Troncoso and V. Turlo, Evaluating the applicability of classical and neural network interatomic potentials for modeling body centered cubic polymorph of magnesium, *Model. Simul. Mater. Sc.* 30, 045009 (2022). DOI: 10.1088/1361-651X/ac5ebc

34. X. Qian and R. Yang, Temperature effect on the phonon dispersion stability of zirconium by machine learning driven atomistic simulations, *Phys. Rev. B* 98, 224108 (2018). DOI: 10.1103/PhysRevB.98.224108

35. P. Pandey and S. K. Pandey, Ab initio investigation of the lattice dynamics and thermophysical properties of BCC vanadium and niobium, *J. Phys. Condens. Mat.* 36, 165602 (2024). DOI: 10.1088/1361-648X/ad1bf4

36. Dmitriev, S.V., Korznikova, E.A., Baimova, Y.A., Velarde, M.G., Discrete breathers in crystals // *Physics-Usppekhi*, 59 (5), 446-461 (2016). DOI: 10.3367/UFNe.2016.02.037729