

Ерёмин А.М.¹, Захаров П.В.¹, Манаков Н.А.², Старостенков М.Д.³¹Алтайский государственный гуманитарно-педагогический университет им. В.М. Шукшина, г. Бийск, Россия²Оренбургский государственный университет, г. Оренбург, Россия³Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова, г. Барнаул, Россия

К ВОПРОСУ О СТАТИСТИЧЕСКОМ СРАВНЕНИИ ТОЧНЫХ ДИСКРЕТНЫХ БРИЗЕРОВ С КВАЗИ-БРИЗЕРНЫМИ МОДЕЛЬНЫМИ РЕШЕНИЯМИ КРИСТАЛЛА СТЕХИОМЕТРИИ A_3B

Методом молекулярной динамики проведено статистическое сравнение точных дискретных бризеров с квази-бризерными модельными решениями кристалла стехиометрии A_3B , на примере Pt_3Al . Получен фонный спектр данного модельного кристалла, получены зависимости среднеквадратичного отклонения, коэффициента вариации, средней частоты модельного квази-бризера от времени его существования. Также в рамках данной модели, были рассчитаны следующие статистические характеристики и зависимости: группированный статистический ряд абсолютных и относительных частот, полигон абсолютных и относительных частот, гистограмма относительных частот, оценка математического ожидания и дисперсии исходной выборки. Анализ статистических данных позволяет сделать вывод о том, что в рассматриваемой модели с использованием потенциала межатомного взаимодействия, полученного методом погружённого атома, квази-бризерное решение незначительно отличается от точного бризерного решения.

Ключевые слова: молекулярная динамика, дискретный бризер, квази-бризер, среднеквадратичное отклонение, коэффициент вариации, фонный спектр.

Eremin A.M.¹, Zakharov P.V.¹, Starostenkov M.D.³, Manakov N.A.²¹The Shukshin Altai State Humanities Pedagogical University, Biysk, Russia²Orenburg State University, Orenburg, Russia³Altay State Technical University, Barnaul, Russia

ON THE QUESTION ON THE STATISTICAL COMPARISON OF ACCURATE DISCRETE BREEZERS WITH QUASI-BREEZE MODEL SOLUTIONS OF A_3B STEHOMETRY CRYSTAL

The method of molecular dynamics is used to perform a statistical comparison of exact discrete breathers with quasi-breather model solutions of the A_3B stoichiometry crystal, using the example of Pt_3Al . A phonon spectrum of this model crystal is obtained, the dependences of the root-mean-square deviation, the coefficient of variation, and the mean frequency of the model quasi-breather on the time of its existence are obtained. Also within the framework of this model, the following statistical characteristics and dependencies were calculated: a grouped statistical series of absolute and relative frequencies, a polygon of absolute and relative frequencies, a histogram of relative frequencies, an empirical distribution function, an estimate of the mathematical expectation and variance of the original sample. Analysis of statistical data allows us to conclude that in the model under consideration using the interatomic interaction potential obtained by the immersed atom (EAM) method, the quasi-breather solution differs slightly from the exact breather solution. Moving discrete breather interactions with the point defect in crystal with A_3B composition taken as an example Pt_3Al are studied by the method of molecular dynamics.

Key words: molecular dynamics, discrete breather, quasi-breather, root-mean-square deviation, coefficient of variation, phonon spectrum.

Дискретный бризер (ДБ) представляет собой нелинейные локализованные незатухающие колебания большой амплитуды атомов идеального кристалла [1]. Стоит отметить, что для большинства моделей реальных кристаллов, имеет смысл говорить не о ДБ, а о квази-бризерах или квазидискретных бризерах (КДБ) [2], в силу отсутствия возможности задания идеальных начальных условий для всех атомов, участвующих в колебаниях. Данное ограничение приводит к конечному времени жизни КДБ

и разбросу частот атомов входящих в состав дискретного бризера.

При этом в работе [2] говорится, что присутствие в решении членов с малыми амплитудами, частоты которых отличаются от основной бризерной частоты, не является причиной потери их устойчивости. Тем не менее, КДБ имеют ограниченное время жизни в реальных моделях кристаллов, которое зависит от начальной конфигурации атомов и свойств рассматриваемого материала.

По характеру зависимости частоты от амплитуды, ДБ можно разделить на два типа: с мягким типом нелинейности и жестким типом нелинейности. У дискретных бризеров с мягким типом нелинейности частота уменьшается с увеличением амплитуды, и по этой причине, они могут существовать только в кристаллах, имеющих щель в фонном спектре. Для дискретных бризеров с жестким типом нелинейности имеет место обратная зависимость, то есть их частота увеличивается с увеличением амплитуды, при этом они могут иметь частоты, как в щели, так и выше фонного спектра. Дискретные бризеры с мягким типом нелинейности могут возбуждаться в биатомных кристаллах, например, в щелочно-галогидных кристаллах со структурой NaCl [3], [4], в упорядоченных сплавах с большой разницей атомных масс компонент, например, в Pt₃Al [5]–[14], а также в графене и графене. Дискретные бризеры с жестким типом нелинейности могут существовать в одномерных и двумерных кристаллах с Морзевским взаимодействием, а также в чистых металлах с ГЦК, ОЦК и ГПУ структурой [15]–[16]. Исследования, связанные с ДБ, в последнее время вышли на более высокий уровень. Результаты многочисленных недавних работ говорят о том, что ДБ существуют практически во всех кристаллах [17]. Есть все основания полагать, что ДБ найдут свое место при объяснении различных физических явлений в кристаллах.

Дискретный бризер, как строго периодический во времени объект, получается при численном моделировании лишь в случае идеальной настройки начальных условий задачи Коши на некоторое многообразие малой размерности в многомерном пространстве всех возможных начальных значений координат отдельных частиц и их скоростей. Такую точную настройку трудно осуществить даже при проведении вычислительного эксперимента. Тем более это практически невозможно сделать при постановке любых физических экспериментов, особенно в тех случаях, когда бризероподобные объекты возникают спонтанно [18]–[19].

В связи с этим, в работе [2] была выдвинута концепция квази-бризеров, как некоторых локализованных в пространстве, но не строго периодических во времени динамических объектов. При этом был сформулирован определенный

критерий близости квази-бризера к соответствующему ему точному бризеру, основанный на вычислении среднеквадратичного отклонения $\eta(t_k)$ частот колебаний отдельных частиц бризера, найденных на некотором интервале в окрестности момента t_k , и вычислении среднеквадратичного отклонения частот колебаний выделенной j -й частицы бризера на различных временных интервалах.

Целью данной работы является проведение статистической оценки сравнения точных дискретных бризеров квази-бризерными модельными решениями. В качестве метода исследования в нашей работе выбран метод молекулярной динамики. Выбор метода обусловлен рядом факторов. ДБ весьма трудно наблюдать в натурном эксперименте в виду того, что они не являются топологическими дефектами, имеют время жизни порядка нескольких тысяч периодов атомных колебаний, что составляет около 0,1 нс, кроме того, в металлах они могут перемещаться со значительными скоростями. В то же время, компьютерное моделирование стало весьма продуктивным методом исследования в физике конденсированного состояния и в материаловедении. Это обусловлено постоянным ростом мощности и доступности вычислительных машин, разработкой и программной реализацией численных методов. Одним из наиболее эффективных методов изучения ДБ является метод молекулярной динамики, опирающийся на хорошо апробированные межатомные потенциалы. Говоря более подробно о методе молекулярной динамики, следует отметить, что он позволяет решать задачи, касающиеся проблем структурно энергетических трансформаций, как в кристаллических, так и в некристаллических материалах. Кроме того, данный метод позволяет рассчитать многие свойства системы, как термодинамические (например, энергию, давление, энтропию), так и кинетические (коэффициенты диффузии, частоты колебаний атомов). Причем в данном методе динамика процессов исследуется в реальном времени.

Модель и методика эксперимента

Моделирование проводилось с использованием пакета молекулярной динамики [20]. Исследуемая модель представляла собой объемный ГЦК кристалл стехиометрии A₃B.

Как частный случай рассматривался кристалл Pt_3Al , содержащий 50000 атомов (рис. 1).

Сплавы стехиометрии A_3B со сверхструктурой $L1_2$ являются самыми многочисленными. Поиск известных в настоящее время систем, обладающих $L1_2$ структурой, позволил выявить порядка 190 таких фаз в области состава A_3B . Сплавы с данной структурой наиболее часто выбираются для фундаментальных исследований с целью разработки структурно-физических основ создания новых конструкционных и функциональных материалов с различными уникальными свойствами. Сплавы с $L1_2$ структурой являются основой разработки существующих в настоящее время суперсплавов [21].

Для моделирования межатомного взаимодействия использовался потенциал полученный методом погруженного атома (ЕАМ). В вычислительной химии модель погружённого атома используется для приближенного описания энергии взаимодействия между двумя атомами. ЕАМ потенциал генерировался для данного сплава с использованием программного обеспечения предложенного Zhou [22]. Выбор потенциала и обоснованность его использования для конкретной задачи является важным этапом при моделировании.

Полная энергия E кристалла может быть выражено как

$$E = \frac{1}{2} \sum_{i,j,i \neq j} \varphi_{ij}(r_{ij}) + \sum_i F_i(\rho_i), \quad (1)$$

где φ_{ij} представляет парную энергию между атомами i и j отделенными друг от друга рас-

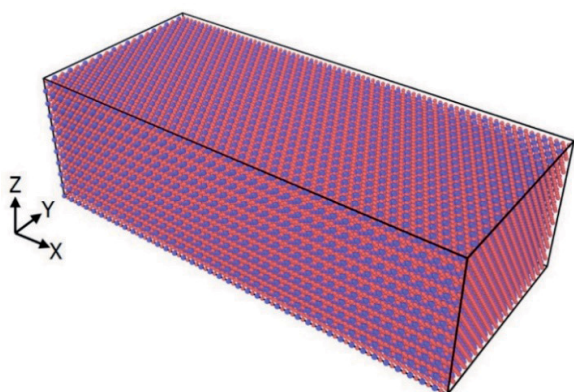


Рисунок 1 – Объемный вид кристалла Pt_3Al , содержащего 50000 частиц, ось X ориентирована вдоль кристаллографического направления $\langle 100 \rangle$, $Y - \langle 010 \rangle$, $Z - \langle 001 \rangle$

стоянием r_{ij} , а F_i энергия вложения связанная с вложенным атомом i в локальном местоположении с электронной плотностью ρ_i . Электронную плотность можно рассчитать по формуле

$$\rho_i = \sum_{j,j \neq i} f_j(r_{ij}),$$

где $f_j(r_{ij})$ – электронная плотность на участке атома i находящегося на расстоянии r_{ij} от атома j . Потенциалы, применяемые в этой модели, хорошо подогнаны к основным свойствам материалов, таким как постоянные решетки, упругие постоянные, объемные модули, энергии образования вакансий и энергии сублимации, и дают достаточно хорошие решения [22]. Процесс подготовки модели состоял из первоначальной релаксации кристалла со свободными граничными условиями вдоль всех осей при температурах 500 К с последующим охлаждением до 0 К, что позволяло исключить влияние тепловых колебаний на бризеры в кристалле. Возбуждение модельного квази-бризера наблюдалось при отклонении атома Al вдоль направления $\langle 100 \rangle$.

В отличие от точных дискретных бризеров, квази-бризеры являются не строго периодическими во времени динамическими объектами, хотя и локализованными в пространстве. Они возникают при любых достаточно малых отклонениях от точных бризерных решений в многомерном пространстве всех возможных начальных условий при решении задачи Коши для исходных дифференциальных уравнений, поскольку в этом случае не происходит полного подавления вкладов от колебаний периферийных частиц со своими собственными частотами. Таким образом, «ослабление диктатуры» со стороны ядра бризера (в случае рассматриваемого нами простейшего симметричного бризера, ядро образует одна центральная частица, а в случае антисимметричного бризера – две его центральные частицы) приводит к наличию в бризерном решении малых вкладов, имеющих разные частоты. Эти малые вклады можно обнаружить в колебаниях всех частиц цепочки, в частности, и центральных. Если найти достаточно точно частоты колебаний всех частиц квази-бризера, вычисленные на некотором временном интервале вблизи $t = t_k$, то они не будут строго одинаковыми. В свете этого найдём среднеквадратичные отклонения $\eta(t_k)$ частоты

колебаний различных частиц бризера от средней бризерной частоты ω :

$$\bar{\omega}(t_k) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \omega_i(t_k), \quad (2)$$

$$\eta(t_k) = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (\omega_i(t_k) - \bar{\omega}(t_k))^2}{N(N-1)}}. \quad (3)$$

Чем больше величина $\eta(t_k)$, тем больше отличается квази-бризерное решение от точного бризерного решения, для которого $\eta(t_k)=0$ в любой момент времени t_k .

Результаты и обсуждение

Для существования квази-бризера в первую очередь важно распределение фоновых мод, т. е. фоновый спектр кристалла. На рисунке 2 показаны фоновые спектры ячейки кристалла Pt₃Al.

На рисунке 3 приведена зависимость среднеквадратичного отклонения модельного квази-бризера η от времени его существования t_k (в пс).

Графики, описывающие поведение среднеквадратичного отклонения $\eta(t_k)$ как функции времени t_k для некоторых видов квази-бризеров,

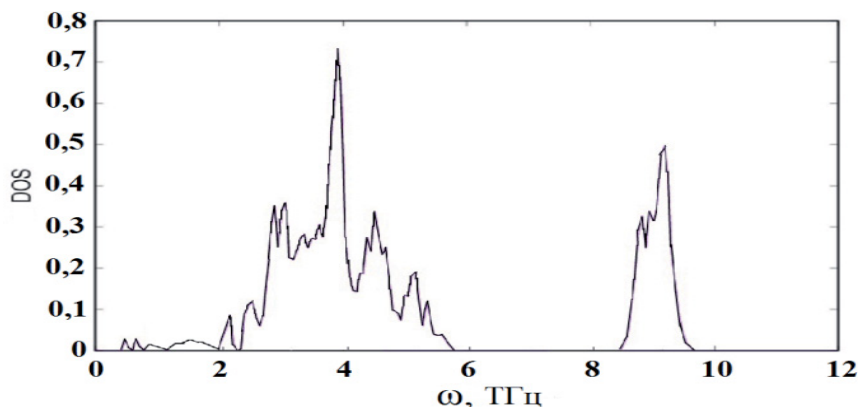


Рисунок 2 – Фоновый спектр кристалла Pt₃Al

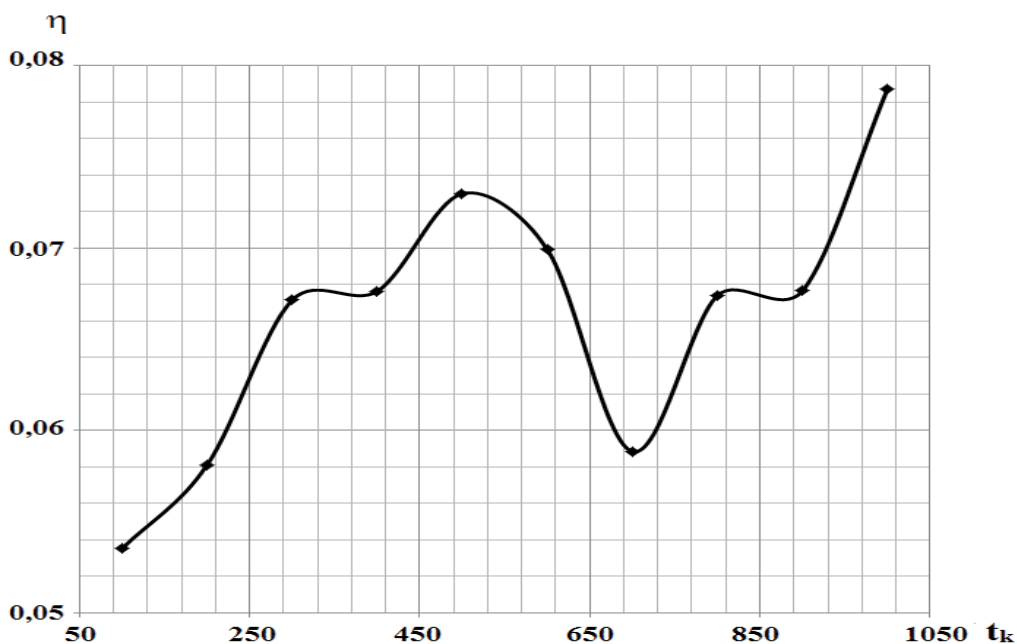


Рисунок 3 – Зависимость $\eta(t_k)$

в частности, для бризеров Джеймса, приведем в работе [2].

Среднеквадратичное отклонение характеризует меру рассеяния данных. В нашем случае это отклонение частот периферийных атомов модельного квази-бризера от частоты ядра квази-бризера. Среднее квадратическое отклонение дает абсолютную оценку меры разброса.

Также в рамках данной модели были рассчитаны следующие статистические характеристики и зависимости: группированный статистический ряд абсолютных и относительных частот, полигон абсолютных и относительных частот, гистограмма относительных частот, оценка математического ожидания и дисперсии исходной выборки.

Рассматривалась выборка из 10 элементов $(x_1, x_2, \dots, x_{10})$: {частоты квазибризера}: 7,76231₀₀₁ 7,71635₀₀₂ 7,68689₀₀₃ 7,72135₀₀₄ 7,71036₀₀₅ 7,74677₀₀₆ 7,83961₀₀₇ 7,75357₀₀₈ 7,76333₀₀₉ 7,73160₀₁₀.

Построим группированный статистический ряд абсолютных частот. Это последовательность пар чисел $(x_1^*, n_1^*), (x_2^*, n_2^*), \dots, (x_m^*, n_m^*)$, где x_k^* – центр k -го интервала группировки и n_k^* – число элементов выборки, попавших в k -й интервал. Числа n_k^* ($k = 1, \dots, m$) – абсолютные частоты. Минимальный и максимальный элемент выборки, это 3-й и 7-й элементы соответственно, $x_{\min} = 7,68689$ и $x_{\max} = 7,83961$. Находим длину интервала группировки $h = (x_{\max} - x_{\min})/m =$

$(7,83961 - 7,68689)/10 = 0,01527$. Здесь $m = 10$ – число интервалов группировки. Правые границы интервалов группировки: $x_k = x_{\min} + kh$ ($k = 1, \dots, 10$). Получаем: (7,70216 7,71743); (7,73270 7,74798); (7,76325 7,77852); (7,79379 7,80907); (7,82434 7,83961).

Для каждого интервала группировки (x_{k-1}, x_k) находим число n_k^* элементов выборки, попавших в этот интервал. Важно чтобы каждый элемент выборки был отнесен к одному и только к одному интервалу, а если значение элемента попадает на границу интервала, то будем относить его к интервалу с младшим номером. Минимальный элемент всегда относим к первому интервалу, максимальный к последнему. Для упрощения работы воспользуемся таблицей 1.

Убеждаемся, что сумма всех абсолютных частот n_k^* равна объему выборки 10. Группированный статистический ряд абсолютных частот квазибризера приведен в таблице 2.

Полигон абсолютных частот группированного статистического ряда абсолютных частот – это ломаная с вершинами в точках (x_k^*, n_k^*) показан на рис. 4. Следует тщательно выбрать масштабы и начальные точки на осях, чтобы полигон был максимально наглядным. На оси абсцисс выбираем начальную точку чуть левее точки $x_1^* = 7,69452$, и такой масштаб, чтобы на оси поместился интервал $[x_1^*, x_{10}^*] = [7,69452, 7,83197]$ и отчетливо различались точки x_k^* . На

Таблица 1 – Вспомогательная таблица для расчёта группированного статистического ряда абсолютных частот квази-бризера

Номер интервала k	Центр интервала x_k^*	Границы интервала	Попало в интервал n_k^*	Номера элементов попавших в интервал
1	7,69452	7,68689 ... 7,70216	1	3
2	7,70979	7,70216 ... 7,71743	2	2 5
3	7,72507	7,71743 ... 7,73270	2	4 10
4	7,74034	7,73270 ... 7,74798	1	6
5	7,75561	7,74798 ... 7,76325	2	1 8
6	7,77088	7,76325 ... 7,77852	1	9
7	7,78616	7,77852 ... 7,79379	0	
8	7,80143	7,79379 ... 7,80907	0	
9	7,81670	7,80907 ... 7,82434	0	
10	7,83197	7,82434 ... 7,83961	1	7

Таблица 2 – Группированный статистический ряд абсолютных частот квазибризера

x_k^*	7,69452	7,70979	7,72507	7,74034	7,75561
n_k^*	1	2	2	1	2
x_k^*	7,77088	7,78616	7,80143	7,81670	7,83197
n_k^*	1	0	0	0	1

оси ординат выбираем начало отсчета в точке 0 и такой масштаб, чтобы на оси поместился интервал $[\min\{n_1^*/n, \dots, n_{10}^*/n\}, \max\{n_1^*/n, \dots, n_{10}^*/n\}] = [0,00000, 0,20000]$ и отчетливо различались точки n_k^*/n . На оси абсцисс размещаем значения x_k^* , а на оси ординат значения n_k^*/n . Наносим точки $(x_1^*, n_1^*/n), (x_2^*, n_2^*/n), \dots, (x_{10}^*, n_{10}^*/n)$ на координатную плоскость и последовательно соединяем их отрезками.

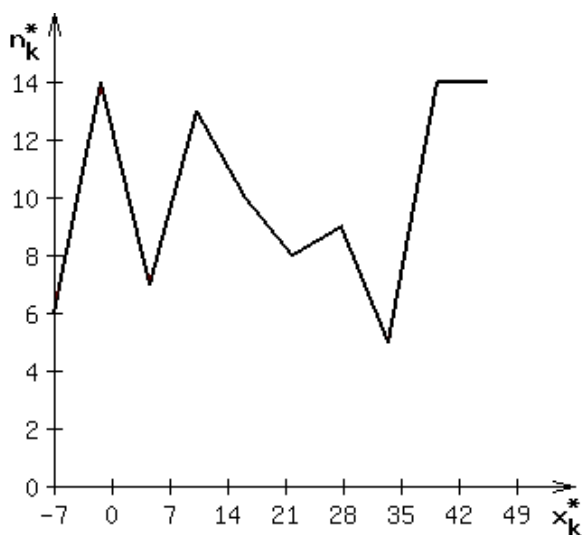


Рисунок 4 – Полигон абсолютных частот квазибризера

Оценка математического ожидания (выборочное среднее) не сгруппированной выборки $(x_1, x_2, \dots, x_{10})$ вычислялась по формуле:

$$M = \frac{x_1 + x_2 + \dots + x_n}{n} = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n x_k \quad (4)$$

Оценка математического ожидания (выборочное среднее) исходной выборки составляет: **7,743215**.

Оценка дисперсии, не сгруппированной выборки $(x_1, x_2, \dots, x_{10})$ вычислялась по формуле:

$$D^* = \frac{(x_1 - M^*)^2 + (x_2 - M^*)^2 + \dots + (x_n - M^*)^2}{n-1} = \frac{1}{n-1} \sum_{k=1}^n (x_k - M^*)^2, \quad (5)$$

где M^* — оценка математического ожидания (выборочное среднее).

Оценка дисперсии исходной выборки составляет: **0,001752**.

Из приведенных числовых данных видно, что отклонение частоты периферийных атомов модельного квази-бризера от частоты ядра квази-бризера крайне незначительно. Причём средняя частота варьируется в пределах от 7,68688603 ТГц до 7,83960979 ТГц, что соответствует щели фононного спектра кристалла Pt₃Al (см. рис. 2). Следовательно, в данной модели с использованием ЕАМ-потенциала квазибризерное решение незначительно отличается от точного бризерного решения [23]–[24].

Заключение

Методом молекулярной динамики в модели кристалла стехиометрии A₃B, на примере Pt₃Al с использованием потенциала межатомного взаимодействия, полученного методом погружённого атома (ЕАМ), рассмотрен дискретный бризер с позиции концепции квази-бризеров. Получены статистические характеристики квази-бризера, а также рассчитаны дополнительные параметры, позволяющие говорить о том, что рассмотренный квази-бризер незначительно отличается от точного бризерного решения и является устойчивым в течении продолжительного времени. Результаты проведенного исследования могут быть полезны при анализе результатов радиационного воздействия, лазерной обработки материалов и т. п.

06.02.2018

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Алтайского края в рамках научного проекта № 18-42-220002

Список литературы:

1. Flach, S. Discrete breathers advancer in theory and application / S. Flach, A.V. Gorbach // *Phys. Rep.* – 2008. – Т. 467. – С. 1–116.
2. Chechin G.M. Quasibreathers as a generalization of the concept of discrete breathers / G.M. Chechin, G.S. Dzhelauhova, E.A. Mehonoshina // *Phys. Rev. E.* – 2006. – Т. 74. – С. 36608.
3. Дмитриев, С.В. Характеристики щелевых дискретных бризеров в кристаллах со структурой NaCl / С.В. Дмитриев, Л.З. Хадеева // *Известия вузов. Прикладная нелинейная динамика.* – 2010. – Т. 18. – №6. – С. 85–92.
4. Khadeeva, L.Z. Discrete breathers in crystals with NaCl / L.Z. Khadeeva, S.V. Dmitriev // *Phys. Rev. B.* – 2010. – Т. 81. – С. 214306.
5. Старостенков, М.Д. Изучение посредством двумерной модели возможности существования нелинейных локализованных колебаний на границе биметалла Pt-Al / М.Д. Старостенков, П.В. Захаров, Н.Н. Медведев // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения.* – 2011. – Т. 8. – №4. – С. 40–44.
6. Расщепление вакансионной поры в зернограничной области ударной послекаскадной волной / А.В. Маркидонов и др. // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения.* – 2013. – Т. 10. – №3. – С. 443–450.
7. Локализация энергии в упорядоченных конденсированных системах: сплавы состава A3B со сверхструктурой L12 / Н.Н. Медведев и др. // *Известия высших учебных заведений. Физика.* – 2014. – Т. 57. – №3. – С. 92–100.
8. Влияние бивакансии Pt в кристалле Pt3Al на нелинейную локализованную моду большой амплитуды [Электронный ресурс] / П.В. Захаров и др. // Университетский комплекс как региональный центр образования, науки и культуры: материалы Всероссийской научно-методической конференции (с международным участием); Оренбург. гос. ун-т. – Электрон. дан. – Оренбург: ОГУ, 2015. – Электрон. опт. диск (CD-ROM). – С. 1055–1061.
9. Моделирование взаимодействия дискретных бризеров различного типа в нановолокне кристалла Pt3Al / П.В. Захаров и др. // *Журнал экспериментальной и теоретической физики.* – 2015. – Т. 148. – Вып. 2(8). – С. 252–257.
10. Старостенков, М.Д. Динамика дискретных бризеров в кристалле Pt3Al / М.Д. Старостенков // *Известия высших учебных заведений. Физика.* – 2015. – Т. 58. – №9. – С. 136–140.
11. Компьютерное моделирование нелинейной локализованной колебательной моды большой амплитуды в кристалле Pt3Al с бивакансией Pt / П.В. Захаров и др. // *Компьютерные исследования и моделирование.* – 2015. – Т. 7. – №5. – С. 1089–1096.
12. Возбуждение щелевых дискретных бризеров в кристалле состава A3B потоком частиц / П.В. Захаров и др. // *Физика твердого тела.* – 2017. – Т. 59. – №2. – С. 217–222.
13. Захаров, П.В. Стационарные квазибризеры в моноатомных металлах с ГЦК-структурой / П.В. Захаров // *Журнал экспериментальной и теоретической физики.* – 2017. – Т. 152. – Вып. 5(11). – С. 1073–1080.
14. Влияние свободной поверхности кристалла на характеристики дискретного бризера / П.В. Захаров и др. // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения.* – 2017. – Т. 14. – №2. – С. 165–171.
15. Движущиеся дискретные бризеры в моноатомном двумерном кристалле / А.А. Кистанов и др. // *Письма в журнал экспериментальной и теоретической физики.* – 2014. – Т. 99. – Вып. 6. – С. 403–408.
16. Кистанов, А.А. О задании начальных условий для моделирования движущихся дискретных бризеров в моноатомном двумерном кристалле / А.А. Кистанов, А.С. Семенов, С.В. Дмитриев // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения.* – 2014. – Т. 11. – №2. – С. 223–227.
17. Дискретные бризеры в кристаллах / С.В. Дмитриев и др. // *Успехи физических наук.* – 2016. – Т. 186. – №5. – С. 471–488.
18. Sato, M. Nonlinear energy localization and its manipulation in micromechanical oscillator arrays / M. Sato, B.E. Hubbard, A.T. Sievers // *Reviews of Modern Physics.* – 2006. – Т. 78. – С. 13.
19. Rossler, T. Optical creation of vibrational intrinsic localized modes in anharmonic lattices with realistic interatomic potentials / T. Rossler, J.B. Page // *Physical Review B.* – 2000. – Т. 62. – С. 11460.
20. Официальный сайт LAMMPS Molecular Dynamics Simulator [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://lammps.sandia.gov/> (дата обращения: 14.05.2018).
21. Dmitriev, S.V. Effect of elastic deformation on phonon spectrum and characteristics of gap discrete breathers in crystal with NaCl-type structure / S.V. Dmitriev, Y.A. Baimova // *Technical Physics Letters.* – 2011. – Т. 37(5). – С. 451–454.
22. Zhou, X.W. Misfit-energy-increasing dislocations in vapordeposited CoFe/NiFe multilayers / X.W. Zhou, R.A. Johnson, H.N.G. Wadley // *Physical Review B.* – 2004. – Т. 69. – С. 144113.
23. Ерёмин, А.М. Статистические характеристики квази-бризера с мягким типом нелинейности в кристаллах стехиометрии A3B / А.М. Ерёмин, П.В. Захаров, М.Д. Старостенков // *Химическая физика и мезоскопия.* – 2016. – Т. 18. – №4. – С. 565–573.
24. Analysis of Statistical Characteristics of Quasi-Breather with Soft-Type of Nonlinearity in the Crystals of A3B Stoichiometry / P.V. Zakharov and др. // *Key Engineering Materials.* – 2017. – Т. 743. – С. 86–90.

References:

1. Flach S., Gorbach A.V. Discrete breathers advancer in theory and application. *Phys. Rep.*, 2008, vol. 467, pp. 1–116.
2. Chechin G.M., Dzhelauhova G.S., Mehonoshina E.A. Quasibreathers as a generalization of the concept of discrete breathers. *Phys. Rev. E.*, 2006, vol. 74, p. 36608.
3. Dmitriev S.V., Hadeeva L.Z. Characteristics of discrete discrete breathers in crystals with NaCl structure. *Izvestiya vuzov. Prikladnaya nelinejnaya dinamika* [News of universities. Applied nonlinear dynamics], 2010, vol. 18, no. 6, pp. 85–92.
4. Khadeeva L.Z., Dmitriev S.V. Discrete breathers in crystals with NaCl. *Phys. Rev. V.*, 2010, vol. 81, p. 214306.
5. Starostenkov M.D., Zaharov P.V., Medvedev N.N. Study by means of a two-dimensional model of the possibility of the existence of nonlinear localized oscillations at the Pt-Al bimetal boundary. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya* [Fundamental problems of modern materials science], 2011, vol. 8, no. 4, pp. 40–44.
6. Markidonov A.V. et al. Splitting of a vacancy pore in a grain-boundary region by a shock post-stage wave. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya* [Fundamental problems of modern materials science], 2013, vol. 10, no. 3, pp. 443–450.
7. Medvedev N.N. et al. Energy localization in ordered condensed systems: alloys of composition A3B with L12 superstructure. *Izvestiya vysshih uchebnyh zavedenij. Fizika* [Proceedings of higher educational institutions. Physics], 2014, vol. 57, no. 3, pp. 92–100.
8. Zakharov P.V. et al. Effect of Pt bivacancy in a Pt3Al crystal on a nonlinear localized mode of large amplitude. *Universitetskij kompleks kak regional'nyj centr obrazovaniya, nauki i kul'tury: materialy Vserossijskoj nauchno-metodicheskoy konferencii (s mezhduнародnym uchastiem); Orenburg. gos. un-t* [University complex as a regional center for education, science and culture: materials of the All-Russian Scientific and Methodological Conference (with international participation); Orenburg. state un-t]. Orenburg: OGU, 2015, pp. 1055–1061.
9. Zakharov P.V. et al. Simulation of the interaction of discrete breathers of various types in a Pt3Al crystal nanofiber. *ZHurnal ehksperimental'noj i teoreticheskoy fiziki* [Journal of Experimental and Theoretical Physics], 2015, vol. 148, iss. 2 (8), pp. 252–257.

10. Starostenkov M.D. Dynamics of discrete breathers in a Pt3Al crystal. *Izvestiya vysshih uchebnyh zavedenij. Fizika* [News of higher educational institutions. Physics], 2015, vol. 58, no. 9, pp. 136–140.
11. Zakharov P.V. et al. Computer simulation of a nonlinear localized vibrational mode of large amplitude in a Pt3Al crystal with a Pt bivacancy. *Komp'yuternye issledovaniya i modelirovanie* [Computer research and modeling], 2015, vol. 7, no. 5, pp. 1089–1096.
12. Zakharov P.V. et al. Excitation of discrete discrete breathers in an A3B crystal with a particle flow. *Fizika tverdogo tela* [Solid State Physics], 2017, vol. 59, no. 2, pp. 217–222.
13. Zakharov P.V. Stationary quasi-freezers in monoatomic metals with fcc structure. *Zhurnal ehksperimental'noj i teoreticheskoy fiziki* [Journal of Experimental and Theoretical Physics], 2017, vol. 152, iss. 5 (11), pp. 1073–1080.
14. Zakharov P.V. et al. The influence of the free surface of a crystal on the characteristics of a discrete breather. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya* [Fundamental problems of modern materials science], 2017, vol. 14, no. 2, pp. 165–171.
15. Kistanov A.A. et al. Moving discrete breathers in a monoatomic two-dimensional crystal. *Pis'ma v zhurnal ehksperimental'noj i teoreticheskoy fiziki* [Letters to the journal of experimental and theoretical physics], 2014, vol. 99, iss. 6, pp. 403–408.
16. Kistanov A.A., Semenov A.S., Dmitriev S.V. On setting the initial conditions for modeling moving discrete breathers in a two-dimensional monoatomic crystal. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya* [Fundamental problems of modern materials science], 2014, vol. 11, no. 2, pp. 223–227.
17. Dmitriev S.V. et al. Discrete breathers in crystals. *Uspekhi fizicheskikh nauk* [Successes of the physical sciences], 2016, vol. 186, no. 5, pp. 471–488.
18. Sato M., Hubbard B.E., Sievers A.T. Nonlinear energy localization and micromechanical oscillator arrays. *Reviews of Modern Physics*, 2006, vol. 78, p. 13.
19. Rossler T., Page J.B. Optical creation of vibrational intrinsic systems. *Physical Review B.*, 2000, vol. 62, p. 11460.
20. Oficialniy sait LAMMPS Molecular Dynamics Simulator [The official website of the LAMMPS Molecular Dynamics Simulator]. Available at: <http://lammps.sandia.gov/> (appeal date: 05/14/2018).
21. Dmitriev S.V., Baimova Y.A. Disperse pattern with NaCl-type structure. *Technical Physics Letters*, 2011, vol. 37 (5), pp. 451–454.
22. Zhou X. W., Johnson R.A., Wadley H.N.G. Misfit-energy-increasing dislocations in vapordeposited CoFe / NiFe multilayers. *Physical Review B.*, 2004, vol. 69, p. 144113.
23. Eremin A.M., Zakharov P.V., Starostenkov M.D. Statistical characteristics of a quasi-breather with a soft type of nonlinearity in A3B stoichiometry crystals. *Himicheskaya fizika i mezoskopiya* [Chemical Physics and Mesoscopy], 2016, vol. 18, no. 4, pp. 565–573.
24. Zakharov P.V. et al. Analysis of the Statistical Characteristics of the A3B Stoichiometry. *Key Engineering Materials*, 2017, vol. 743, pp. 86–90.

Сведения об авторах:

Ерёмин Александр Михайлович, доцент кафедры математики, физики, информатики Алтайского государственного гуманитарно-педагогического университета им. В.М. Шукшина, кандидат физико-математических наук, доцент
659333, Бийск, ул. Короленко, д. 53

Захаров Павел Васильевич, доцент кафедры математики, физики, информатики Алтайского государственного гуманитарно-педагогического университета им. В.М. Шукшина, кандидат физико-математических наук, доцент
659333, Бийск, ул. Короленко, д. 53

Манаков Николай Александрович, профессор кафедры физики Оренбургского государственного университета, доктор физико-математических наук, профессор
460018, г. Оренбург, пр-т Победы, д. 13

Старостенков Михаил Дмитриевич, заведующий кафедрой физики Алтайского государственного технического университета им. И.И. Ползунова, доктор физико-математических наук, профессор
656099, г. Барнаул, пр-т Ленина, д. 46