

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ УСЛОВИЙ ФОРМИРОВАНИЯ ДИСКРЕТНОГО БРИЗЕРА С ЖЁСТКИМ ТИПОМ НЕЛИНЕЙНОСТИ В КРИСТАЛЛЕ Pt_3Al

А.М. Ерёмин¹, И.С. Луценко¹, П.В. Захаров¹, М.Д. Старостенков²

¹Алтайский государственный гуманитарно-педагогический университет им. В.М. Шукишина, Бийск

²Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова, Барнаул

Посредством метода молекулярной динамики в кристалле стехиометрического состава A_3B , на примере интерметаллида Pt_3Al , осуществлялся поиск условий формирования дискретного бризера с жестким типом нелинейности. В качестве межатомной функции взаимодействия использовался потенциал, полученный методом погруженного атома. Моделирование производилось с использованием пакета LAMMPS Molecular Dynamics Simulator. Известно, что подобного рода солитоны способны транспортировать энергию вдоль плотноупакованных направлений кристаллов и тем самым влиять на структурные и энергетические трансформации материала. В работе рассмотрен ряд способов задания начальных условий для формирования дискретного бризера с жестким типом нелинейности. Были получены результаты свидетельствующие о возможности формирования такого типа дискретного бризера, а также дискретного бризера с мягким типом нелинейности. Время жизни полученных дискретных бризеров с жестким типом нелинейности не велико и составляет порядка сотни периодов колебаний атомов. Подтверждена возможность перехода дискретного бризера с жестким типом нелинейности в дискретный бризер с мягким типом нелинейности. Полученные результаты могут быть полезны при трактовке таких эффектов, как эффект малых доз и эффект дальнего действия.

Ключевые слова: дискретный бризер, квази-бризер, молекулярная динамика, нелинейная динамика.

ВВЕДЕНИЕ

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 квазибризерах 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. Далее будем использовать понятие дискретный бризер, квазибризер и квазидискретный бризер как синонимы.

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 фоновом 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 фонового спектра. Дискретные бризеры с мягким типом нелинейности могут возбуждаться в биатомных кристаллах, например, в щелочно-галогенидных кристаллах со структурой NaCl [3-5], в упорядоченных сплавах с большой разницей атомных масс компонент, например, в Pt_3Al [6-9], а также в графене и графене. Дискретные бризеры с жестким типом нелинейности могут существовать в одномерных и двумерных кристаллах с Морзе-Винерским взаимодействием, а также в чистых металлах с ГЦК, ОЦК и ГПУ структурами [10-11]. На данный момент применение экспериментальных методов при изучении дискретных бризеров в кристаллах остается крайне проблематичным в виду локализации объектов на малом количестве атомов и быстротечности процессов. Имеющиеся экспериментальные данные носят косвенный характер.

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 [12]. Есть все основания полагать, что ДБ найдут свое место при объяснении различных физических явлений в кристаллах.

В данной работе предпринята попытка анализа условий формирования дискретных бризеров с жестким типом нелинейности в кристаллах стехиометрического состава A_3B , на примере Pt_3Al с использованием метода молекулярной динамики на основе компьютерного моделирования.

В качестве метода исследования в нашей работе выбран метод молекулярной динамики. Выбор метода обусловлен рядом факторов. Дискретные бризеры весьма затруднительно 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. Этот факт обусловлен 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.

ОПИСАНИЕ МОДЕЛИ И МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

Моделирование проводилось с использованием пакета молекулярной динамики LAMMPS Molecular Dynamics Simulator [13]. Исследуемая модель представляла собой объёмный ГЦК кристалл стехиометрии A_3B . Как частный случай рассматривался кристалл Pt_3Al , содержащий 96000 атомов (см. рис. 1). Вдоль всех осей накладывались периодические граничные условия.

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 . Также сплавы с данной структурой являются наиболее часто модельными и 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 [14].

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 [15].

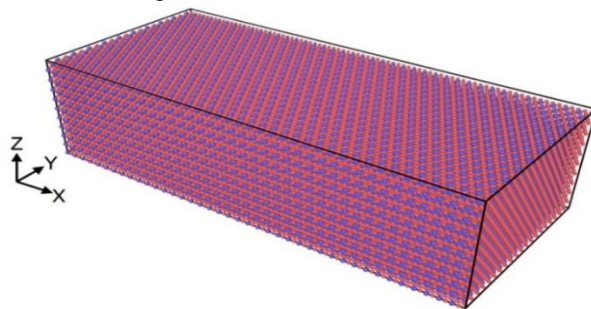


Рис. 1. Объёмный вид кристалла Pt_3Al , содержащего 96000 частиц, ось X ориентирована вдоль кристаллографического направления $\langle 1\bar{1}0 \rangle$, $Y - \langle 1\bar{1}\bar{2} \rangle$, $Z - \langle 111 \rangle$

Выбор потенциала и обоснованность его использования для конкретной задачи является важным этапом при моделировании. Рассмотрим более подробно процесс построения ЕАМ потенциала методом предложенным, авторами работы [15].

Полная энергия E кристалла может быть выражено как

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

где φ_{ij} представляет парную энергию между атомами i и j отделенными друг от друга расстоянием r_{ij} , а F_i энергия вложения связанная с вложенным атомом i в локальном местоположении с электронной плотностью ρ_i . Электронная 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 .

ЕАМ-потенциал чистого элемента состоит из трех функций: парной энергии φ , электронной плотности ρ , и энергии вложения F . Для сплава ЕАМ-потенциал содержит не только три функции φ , ρ , и F для каждого из составляющих элементов, но также парная энергия φ_{ab} между разными элементами a и b ($a \neq b$). В результате функции φ , ρ , и F приспособленные для

элементарных металлов не могут быть непосредственно применены к сплаву или многослойным системам. Тем не менее, путем нормализации ЕАМ-потенциалов и введения модели сплава, процедура обобщения ЕАМ-потенциалов и их расстояния обрезки была предложена Zhou [15]. Эта процедура дает возможность построения ЕАМ-потенциалов сплавов из ЕАМ-потенциалов для отдельных элементов. Такие потенциалы сплавов использовались при молекулярном моделировании и дали хорошие результаты в экспериментах.

В этой модели ЕАМ-потенциала сплава, обобщенные элементные парные потенциалы описываются:

$$\varphi(r) = \frac{A_{\text{exp}}[-\alpha(r/r_e-1)]}{1+(r/r_e-k)^{20}} - \frac{B_{\text{exp}}[-\beta(r/r_e-1)]}{1+(r/r_e-\lambda)^{20}},$$

где r_e равновесное расстояние между соседними атомами, A , B , α , β – четыре регулируемых параметра, а k и λ два дополнительных параметра для обрезки. Функция электронной плотности взята в той же форме, что и располагающий элемент в парном потенциале с теми же значениями, т.е.

$$f(r) = \frac{f_e \exp[-\beta(r/r_e-1)]}{1+(r/r_e-\lambda)^{20}}.$$

Парный потенциал между различными видами а и b тогда строится как

$$\varphi^{ab}(r) = \frac{1}{2} \left[\frac{f^b(r)}{f^a(r)} \varphi^{aa}(r) + \frac{f^a(r)}{f^b(r)} \varphi^{bb}(r) \right]$$

Функции энергии вложения, которые хорошо работают в широком диапазоне электронных плотностей, требуют трех уравнений для того, чтобы показать три различных диапазона электронных плотностей. Эти уравнения

$$F(\rho) = \sum_{i=0}^3 F_{ni} \left(\frac{\rho}{\rho_n} - 1 \right)^i, \quad \rho < \rho_n, \rho_n = 0,85\rho_e,$$

$$F(\rho) = \sum_{i=0}^3 F_i \left(\frac{\rho}{\rho_n} - 1 \right)^i,$$

$$\rho_n \leq \rho < \rho_0, \rho_0 = 1,15\rho_e,$$

$$F(\rho) = F_e \left[1 - \ln \left(\frac{\rho}{\rho_s} \right) \right] \left(\frac{\rho}{\rho_s} \right)^\eta, \quad \rho_0 \leq \rho.$$

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 они дают достаточно хорошие решения.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Для существования квази-бризера важно распределение фононных мод, т.е. фононный спектр кристалла. На рис. 2 показаны фононные спектры ячейки кристалла Pt_3Al , рассчитанный для данной модели и потенциала.

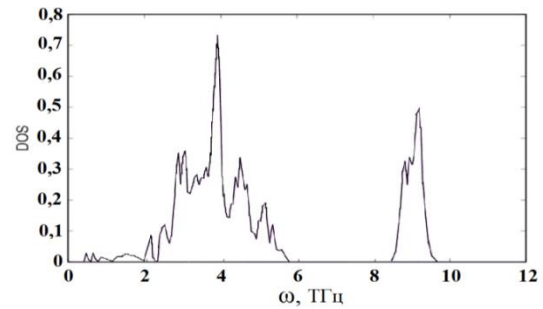


Рис. 2. Плотность фононных состояний кристалла Pt_3Al

Процесс подготовки модели состоял из первоначальной релаксации кристалла, что позволяло исключить влияние тепловых колебаний на бризер в кристалле. Далее в одной из плоскостей кристалла (111), вдоль направления $\langle 1\bar{1}0 \rangle$ ряду атомов придавали некоторые начальные смещения. Рассматривалась группа из десяти атомов Al. На рис. 3 стрелками показано направления отклонений группы атомов Al в кристалле Pt_3Al . В таблице 1, для примера, приведены некоторые числовые значения конфигураций смещений атомов Al в кристалле Pt_3Al и время затухания ДБ с жестким типом нелинейности.

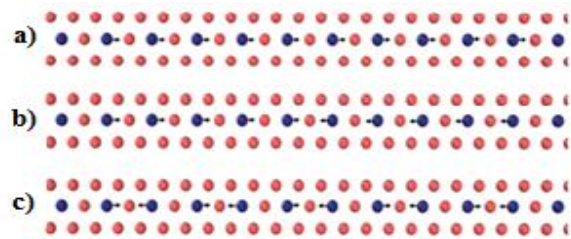


Рис. 3. Направления отклонения атом Al из положения равновесия

Табл. 1. Некоторые числовые значения конфигураций смещений атомов Al в кристалле Pt_3Al и время затухания ДБ с жестким типом нелинейности

Конфигурации смещений атомов Al в Å	Время затухания ДБ с жестким типом нелинейности в пс
0,8 -0,8 0,8 -0,8 0,8 -0,8 0,8 -0,8 (см. рис. 3с)	9
0,6 -0,6 0,6 -0,6 0,8 -0,8 0,6 -0,6 0,6 -0,6 (см. рис. 3с)	9
0,4 -0,4 0,4 -0,4 0,8 -0,8 0,4 -0,4 0,4 -0,4 (см. рис. 3с)	6
0,2 -0,2 0,2 -0,2 0,8 -0,8 0,2 -0,2 0,2 -0,2 (см. рис. 3с)	5
-0,65 -0,68 -0,71 -0,74 -0,8 0,8 0,74 0,71 0,68 0,65 (см. рис. 3б)	11
-0,62 -0,65 -0,68 -0,71 -0,8 0,8 0,71 0,68 0,65 0,62 (см. рис. 3б)	9
-0,56 -0,59 -0,62 -0,65 -0,8 0,8 0,65 0,62 0,59 0,56 (см. рис. 3б)	5
0,59 0,62 0,65 0,68 0,8 0,8 0,68 0,65 0,62 0,59 (см. рис. 3а)	12
0,56 0,59 0,62 0,65 0,8 0,8 0,65 0,62 0,59 0,56 (см. рис. 3а)	10
0,50 0,53 0,56 0,59 0,8 0,8 0,59 0,56 0,53 0,50 (см. рис. 3а)	6

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Как видно из приведенных выше результатов время жизни таких объектов в рассматриваемой модели не велико и составляет не более 150 периодов колебаний атомов, входящих в состав ДБ. Однако, отметим, что при затухании таких колебаний, энергия рассеивалась не полностью. Зачастую формировались ДБ с мягким типом нелинейности, локализованные на единичных атомах. Такие результаты сопоставимы с результатами в работе [16], полученным в модели, где атомы взаимодействовали посредством парного потенциала Морзе.

Существуют различные типы конфигураций отклонения группы атомов Al для возникновения ДБ с жестким типом нелинейности в модельном кристалле Pt_3Al , но наиболее устойчивое время жизни этих нелинейных локализованных колебательных мод не превосходит 12 пс.

В работе рассмотрен механизм поиска дискретных бризеров с жестким типом нелинейности в кристаллах стехиометрического состава A_3B . Полученные результаты могут быть полезны при поиске подобных объектов в других кристаллах и соединениях.

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

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Flach, S., and A.V. Gorbach, "Discrete breathers advancer in theory and application," *Physical Review*, 467, pp. 1-116, 2008.
2. Chechin, G.M., G.S. Dzhelauhova, and E.A. Mehonoshina, *Physical Review E*, vol. 74, P. 036608, 2006.
3. Дмитриев, С.В., и Л.З. Хадеева, "Характеристики щелевых дискретных бризеров в кристаллах со структурой NaCl," *Известия вузов. Прикладная нелинейная динамика*, т. 18, №6, С. 85–92, 2010.
4. Khadeeva, L.Z., and S.V. Dmitriev, "Discrete breathers in crystals with NaCl," *Physical Review B*, 81, pp. 214306, 2010.
5. Дмитриев, С.В., и Ю.А. Баимова, "Влияние упругой деформации на фононный спектр и на характеристики щелевых дискретных бризеров в кристалле со структурой NaCl," *Письма в Журнал технической физики*, т. 37, № 10, С. 13-20, 2011.
6. Медведев, Н.Н., М.Д. Старостенков, П.В. Захаров, и О.В. Пожидаева, "Локализованные колебательные моды в двумерной модели упорядоченного сплава Pt_3Al ," *Письма в журнал технической физики*, т. 37, вып. 3, С. 7–15, 2011.

7. Захаров, П.В., М.Д. Старостенков, А.М. Ерёмин, и А.В. Маркидонов, "Поведение нелинейной локализованной моды вблизи комплексов вакансий в кристалле Pt_3Al ," *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*, т. 11, № 2, С. 260–264, 2014.

8. Захаров, П.В., М.Д. Старостенков, С.В. Дмитриев, Н.Н. Медведев, и А.М. Ерёмин, "Моделирование взаимодействия дискретных бризеров различного типа в нановолокне кристалла Pt_3Al ," *Журнал экспериментальной и теоретической физики*, т. 148, вып. 2(8), С. 252-257, 2015.

9. Старостенков, М.Д., А.И. Потекаев, С.В. Дмитриев, П.В. Захаров, А.М. Ерёмин, и В.В. Кулагина, "Динамика дискретных бризеров в кристалле Pt_3Al ," *Известия вузов. Физика*, т. 58, № 9, С. 136-140, 2015.

10. Кистанов, А.А., Р.Т. Мурзаев, С.В. Дмитриев, В.И. Дубинко, и В.В. Хижняков, "Движущиеся дискретные бризеры в монокристаллическом двумерном кристалле," *Письма в журнал экспериментальной и теоретической физики*, т. 99, вып. 6, С. 403-408, 2014.

11. Кистанов, А.А., А.С. Семенов, и С.В. Дмитриев, "О задании начальных условий для моделирования движущихся дискретных бризеров в монокристаллическом двумерном кристалле," *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*, т. 11, № 2, С. 223-227, 2014.

12. Дмитриев, С.В., Е.А. Корзникова, Ю.А. Баимова, и М.Г. Веларде, "Дискретные бризеры в кристаллах," *Успехи физических наук*, т. 186, №5, С. 471-488, 2016.

13. LAMMPS Molecular Dynamics Simulator [Электронный ресурс]. - Официальный сайт. - URL: <http://lammps.sandia.gov/> (дата посещения: 04.03.2015)

14. Dmitriev, S.V., and Y.A. Baimova, "Effect of elastic deformation on phonon spectrum and characteristics of gap discrete breathers in crystal with NaCl-type structure," *Technical Physics Letters*, , 37(5), pp. 451-454, 2011.

15. Zhou, X. W., R.A. Johnson, and H. N. G. Wadley, *Physical Review B*, vol. 69, pp. 144113, 2004.

16. Медведев, Н.Н., М.Д. Старостенков, П.В. Захаров, и С.В. Дмитриев, "Возбуждение двух типов дискретных бризеров в компьютерной 3D-модели Pt_3Al ," *Письма в журнал технической физики*, т. 41, № 20, С. 50-57, 2015.

Ерёмин Александр Михайлович – к. ф.-м. н., доцент, доцент кафедры математики, физики, информатики ФГБОУ ВО АГТПУ им. В.М. Шукина тел. (3854)337438, e-mail: eam77@yandex.ru

Луценко Иван Сергеевич – студент 5 курса ФГБОУ ВО АГТПУ им. В.М. Шукина тел. (3854)337438, e-mail: Lucenko.Iwan@yandex.ru

Захаров Павел Васильевич – к. ф.-м. н., доцент, доцент кафедры математики, физики, информатики ФГБОУ ВО АГТПУ

COMPUTER MODELING OF THE CONDITIONS OF FORMATION OF A DISCRETE BREATHER WITH A RIGID TYPE OF NONLINEARITY IN Pt_3Al CRYSTAL

A.M. Eremin¹, I.S. Lucenko¹, P.V. Zakharov¹, M.D. Starostenkov²

¹The Shukshin Altai State Humanities Pedagogical University, Biysk

²Altai State Technical University, Barnaul

Abstract – By means of the molecular dynamics method in a crystal of the stoichiometric composition A_3B , using the example of Pt_3Al intermetallic, the conditions for the formation of a discrete breather with a rigid type of nonlinearity were searched. As the interatomic interaction function, we used the potential obtained by the immersed atom method. The simulation was performed using the LAMMPS Molecular Dynamics Simulator package. It is known that such solitons are capable of transporting energy along close-packed crystal directions, and thus the influence of the structural and energy transformations of the material. A number of methods for specifying initial conditions for the formation of a discrete breather with a rigid type of nonlinearity are considered. Results have been obtained in the form of discrete breathing, as well as a soft type of nonlinearity. The lifetime of the known discrete breathers with the type of nonlinearity. The possibility of a transition from a discrete breather with a rigid type of nonlinearity. The results can be useful in treating such effects as the effect of small doses and the long-range effect.

Index terms: discrete breather, quasi-breather, molecular dynamics, nonlinear dynamics.

REFERENCES

1. Flach, S., and A.V. Gorbach, "Discrete breathers: advances in theory and application," *Physical Review*, 467, pp. 1-116, 2008.
2. Chechin, G.M., G.S. Dzhelauhova, and E.A. Mehonoshina, *Physical Review E*, vol. 74, P. 036608, 2006.
3. Dmitriev, S.V., and L.Z. Khadeeva, "Characteristics of slit discrete breathers in crystals with NaCl structure," *Izvestiya vuzov. Prikladnaya nelineynaya dinamika*, Vol. 18, No. 6, C. 85-92, 2010.
4. Khadeeva, L.Z., and S.V. Dmitriev, "Discrete breathers in crystals with NaCl," *Physical Review B*, 81, pp. 214306, 2010.
5. Dmitriev, S.V., and Yu.A. Baimova, "Influence of elastic deformation on the phonon spectrum and on the characteristics of slit discrete breathers in a crystal with NaCl structure," *Pisma v Zhurnal tekhnicheskoy fiziki*, vol. 37, No. 10, P. 13-20, 2011.
6. Medvedev, N.N., M.D. Starostenkov, P.V. Zakharov, and O.V. Pozhidaeva, "Localized vibrational modes in a two-dimensional model of an ordered Pt_3Al alloy," *Pisma v Zhurnal tekhnicheskoy fiziki*, vol. 37, no. 3, pp. 7-15, 2011.
7. Zakharov, P.V., M.D. Starostenkov, A.M. Eremin, and A.V. Markidonov, "Behavior of a nonlinear localized mode near vacancy complexes in a Pt_3Al crystal," *Fundamentalnyye problemyi sovremennogo materialovedeniya*, Vol. 11, No. 2, P. 260-264, 2014.
8. Zakharov, P.V., M.D. Starostenkov, S.V. Dmitriev, N.N. Medvedev, and A.M. Eremin, "Simulation of the interaction of discrete breathers of various types in the nanofiber of Pt_3Al crystal," *Zhurnal eksperimentalnoy i teoreticheskoy fiziki*, v. 148, no. 2 (8), pp. 252-257, 2015.
9. Starostenkov, M.D., A.I. Potekayev, S.V. Dmitriev, P.V. Zakharov, A.M. Eremin, and V.V. Kulagina, "Dynamics of discrete breathers in a Pt_3Al crystal," *Izvestiya vuzov. Fizika*, Vol. 58, No. 9, pp. 136-140, 2015.
10. Kistanov, A.A., R.T. Murzaev, S.V. Dmitriev, V.I. Dubinko, and V.V. Khizhnyakov, "Moving discrete breathers in a monoatomic two-dimensional crystal," *Pisma v zhurnal eksperimentalnoy i teoreticheskoy fiziki*, Vol. 99, no. 6, pp. 403-408, 2014.
11. Kistanov, A.A., A.S. Semenov, and S.V. Dmitriev, "On the specification of initial conditions for the simulation of moving discrete breathers in a monoatomic two-dimensional crystal," *Fundamentalnyye problemyi sovremennogo materialovedeniya*, Vol. 11, No. 2, P. 223-227, 2014.
12. Dmitriev, S.V., E.A. Korznikova, Yu.A. Baimova, and M.G. Velarde, "Discrete breathers in crystals," *Uspehi fizicheskikh nauk*, vol. 186, No. 5, p. 471-488, 2016.
13. LAMMPS Molecular Dynamics Simulator [Electronic resource]. - Official site. - URL: <http://lammmps.sandia.gov/> (date of visit: 04/03/2015)
14. Dmitriev, S.V., and Y.A. Baimova, "Effect of elastic deformation on the phonon spectrum and characteristics of the gap discrete breathers in a crystal with a NaCl-type structure," *Technical Physics Letters*, 37 (5), pp. 451-454, 2011.
15. Zhou, X. W., R.A. Johnson, and H. N. G. Wadley, *Physical Review B*, vol. 69, pp. 144113, 2004.
16. Medvedev, N.N., M.D. Starostenkov, P.V. Zakharov, and S.V. Dmitriev, "Excitation of Two Types of Discrete Breathers in the 3D Computer Model Pt_3Al ," *Pisma v zhurnal tekhnicheskoy fiziki*, Vol. 41, No. 20, P. 50-57, 2015.

Eremin Alexander Mikhailovich – associate professor at the chair of mathematics, physics, informatics, Biysk, The Shukshin Altai State Humanities Pedagogical University, (3854)337438, e-mail: eam77@yandex.ru

Lucenko Ivan Sergeevich – student, Biysk, The Shukshin Altai State Humanities Pedagogical University, (3854)337438, e-mail: Lucenko.Iwan@yandex.ru

Zakharov Pavel Vasilievic – associate professor at the char of mathematics, physics, informatics, Biysk, The Shukshin Altai State Humanities Pedagogical University, (3854)337438, e-mail: zakharovpvl@rambler.ru

Starostenkov Mikhail Dmitrievich – professor, head of the department of physics, Barnaul, Altai State Technical University, (3852)290852, e-mail: genphys@mail.ru