

## **ХАРАКТЕРИСТИКИ ЩЕЛЕВЫХ ДИСКРЕТНЫХ БРИЗЕРОВ В КРИСТАЛЛАХ СО СТРУКТУРОЙ NaCl**

*Л.З. Хадеева, С.В. Дмитриев*

Методом молекулярной динамики исследуется влияние соотношения масс анионов и катионов на фононные спектры кристалла со структурой NaCl и на условия существования и свойства щелевых дискретных бризеров. Показано, что дискретные бризеры легко возбудить при отношении масс легкого к тяжелому компоненту менее 0.2, когда щель в фононном спектре достаточно велика. При соотношении масс равном 0.1 обнаружено существование, по меньшей мере, трех типов устойчивых дискретных бризеров, различающихся числом атомов с большой амплитудой колебаний и поляризацией колебаний.

*Ключевые слова:* Нелинейная динамика решетки, локализация энергии, дискретный бризер, ионный кристалл, фононный спектр.

## **CHARACTERISTICS OF GAP DISCRETE BREATHERS IN CRYSTALS WITH NaCl STRUCTURE**

*L.Z. Khadeeva, S.V. Dmitriev*

Molecular dynamics method is used to study the effect of mass ratio of anions and cations on the phonon spectra of the crystal with NaCl structure and on the discrete breathers existence conditions and properties of gap discrete breathers. We show that discrete breathers can be easily excited for the mass ratio less than 0.2, when the gap in the phonon spectrum is wide enough to support them. When the mass ratio is equal to 0.1 we could find at least three types of stable discrete breathers, differed by the number of large amplitude atoms and by polarization of oscillation.

*Keywords:* Nonlinear lattice dynamics, energy localization, discrete breather, ionic crystal, phonon spectrum.