

## Делокализованные нелинейные колебательные моды и их влияние на свойства бинарного сплава NiTi

Д. В. Бачурин<sup>1</sup>✉, Р. Т. Мурзаев<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Россия  
E-mail: ✉dvbachurin@mail.ru, murzaevrt@gmail.com

Поступила в редакцию 23.09.2025, принята к публикации 24.10.2025,  
опубликована онлайн 24.10.2025

**Аннотация.** Цель работы — исследование поведения стабильных однокомпонентных делокализованных нелинейных колебательных мод в простых кубических подрешётках титана и никеля и их влияния на свойства бинарного сплава NiTi. **Методы.** Все расчёты проводятся при помощи молекулярно-динамического метода с использованием многочастичных потенциалов взаимодействия. **Результаты.** Представленные в работе семнадцать колебательных мод характеризуются устойчивыми периодическими колебаниями. Для большинства мод характерен жёсткий тип нелинейности, при котором частота атомных колебаний увеличивается с ростом амплитуды. Устойчивые моды способны аккумулировать энергию в интервале 0.1–1.5 эВ на атом в титановой подрешётке и 0.1–1.0 эВ на атом в никелевой подрешётке. Возбуждение колебательных мод в подрешётках Ni и Ti приводит к уменьшению удельной теплоёмкости для мод с жёстким типом нелинейности и к возрастанию для мод с мягким типом нелинейности. Наличие мод приводит к возникновению положительных сжимающих напряжений, величина которых пропорциональна амплитуде вектора смещения атомов. **Заключение.** Полученные данные позволяют лучше понять сложное поведение колебательных мод и их влияние на свойства бинарного сплава NiTi.

**Ключевые слова:** бинарный сплав NiTi; делокализованные нелинейные колебательные моды; нелинейная динамика; молекулярно-динамическое моделирование.

**Благодарности.** Работа выполнена в рамках государственного задания Института проблем сверхпластичности металлов РАН, финансируемого Министерством науки и высшего образования Российской Федерации, регистрационный номер 124022900108-3.

**Для цитирования:** Бачурин Д. В., Мурзаев Р. Т. Делокализованные нелинейные колебательные моды и их влияние на свойства бинарного сплава NiTi // Известия вузов. ПНД. 2026. DOI: 10.18500/0869-6632-003198. EDN: LKYLUV

Статья опубликована на условиях Creative Commons Attribution License (CC-BY 4.0).

## Delocalized nonlinear vibrational modes and their effect on the properties of binary NiTi alloy

D. V. Bachurin<sup>1</sup>✉, R. T. Murzaev<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Institute for Metals Superplasticity Problems, Russian Academy of Sciences, Russia

E-mail: ✉dvbachurin@mail.ru, murzaevrt@gmail.com

Received 23.09.2025, accepted 24.10.2025, available online 24.10.2025

**Abstract.** The purpose of this work is to investigate the behavior of stable one-component delocalized nonlinear vibrational modes in simple cubic titanium and nickel sublattices, as well as their influence on the properties of the binary NiTi alloy. *Methods.* All calculations were performed using the molecular dynamics method with many-body interatomic potentials. *Results.* Seventeen vibrational modes are shown to exhibit stable periodic oscillations. Most of them demonstrate a hard type of nonlinearity, where the frequency of atomic vibrations increases with amplitude. Stable modes are capable of accumulating energy in the range of 0.1–1.5 eV per atom in the titanium sublattice and 0.1–1.0 eV per atom in the nickel sublattice. Excitation of vibrational modes in the Ni and Ti sublattices leads to a decrease in specific heat for modes with hard type of nonlinearity and to an increase for modes with soft type of nonlinearity. The presence of modes leads to the emergence of positive compressive stresses, the magnitude of which is proportional to the atomic displacement vector. *Conclusion.* The obtained results provide new insights into the complex behavior of vibrational modes and their impact on the properties of the binary NiTi alloy.

**Keywords:** binary NiTi alloy; delocalized nonlinear vibrational modes; nonlinear dynamics; molecular dynamics modeling.

**Acknowledgements.** The work was accomplished in terms of the State Assignment of the Institute for Metals Superplasticity Problems of the Russian Academy of Sciences financed by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation, Registration No. 124022900108-3.

*This is an open access article distributed under the terms of Creative Commons Attribution License (CC-BY 4.0).*

### Введение

Нелинейные решетки представляют собой системы, в которых сила взаимодействия между соседними частицами нелинейно связана с их смещением от положения равновесия. В отличие от линейных решеток, где взаимодействие подчиняется закону Гука, нелинейные решетки широко распространены в физических системах, таких как кристаллы, полимеры и биологические макромолекулы [1, 2]. Нелинейность может быть обусловлена ангармоническими потенциалами, геометрическими ограничениями или взаимодействием с внешними полями [3–5]. Такие решетки играют ключевую роль в изучении механических и термических свойств, переноса энергии, фазовых переходов, а также в разработке оптических устройств и волноводов [6–8].

Важным следствием нелинейности является возникновение локализованных колебательных мод, известных как дискретные бризеры или внутренние локализованные моды [9, 10]. Эти моды могут существовать в бездефектных кристаллических решетках и влиять на их макроскопические свойства [11]. Высокоамплитудные колебательные моды широко исследовались в нелинейных решетках Шрёдингера [12, 13] и Ферми-Паста-Улама-Цингоу [14–16], а также в ГЦК [17–20], ОЦК [21–23], ГПУ металлах [24, 25], ковалентных кристаллах [26, 27] и интерметаллидах [28, 29]. Для существования дискретных бризеров их частота должна находиться вне фононного спектра кристалла, чтобы избежать рассеяния колебательной энергии через взаимодействие с фононами решетки.

Бачурин Д. В., Мурзаев Р. Т.  
Известия вузов. ПНД, 2026

Чечин и Сахненко разработали теорию бушей нелинейных нормальных мод, также называемых делокализованными нелинейными колебательными модами (ДНКМ). Эти моды определяются на основе точечной группы симметрии кристаллической решетки [30–32]. Между ДНКМ и дискретными бризерами существует тесная связь: последние могут возникать вследствие модуляционной неустойчивости ДНКМ с частотами, выходящими за пределы фононного спектра [33, 34]. С развитием терагерцевой лазерной техники стало возможным возбуждать ДНКМ напрямую, что делает их перспективными для фотонных технологий [35, 36].

ДНКМ удобно классифицировать по их пространственной размерности и числу компонент. В одномерных ДНКМ возбужденные атомы образуют цепочки, которые делокализованы в одном направлении и локализованы в двух других. Двумерные ДНКМ простираются по двум пространственным направлениям, но локализованы вдоль третьего. Аналогично, трёхмерные ДНКМ занимают весь объём кристалла. Для однокомпонентных ДНКМ характерна только одна величина атомных смещений от положений равновесия, тогда как колебательные моды с  $n$  независимыми параметрами называются  $n$ -компонентными модами.

ДНКМ оказывают влияние на механические свойства материала, его теплопроводность и фазовые переходы. До сих пор наибольшее внимание уделялось одномерным ДНКМ, для которых подробно изучено их влияние на свойства атомных цепочек [15, 16, 37–39]. Двумерные ДНКМ широко исследовались в различных типах кристаллических решёток [14, 18–20, 24, 40, 41], в то время как систематическое изучение трёхмерных ДНКМ началось лишь сравнительно недавно и проводилось в основном в однокомпонентных материалах [42–46].

В связи с этим целью настоящей работы является изучение методом молекулярной динамики однокомпонентных ДНКМ, возбуждаемых во всём объёме бинарного сплава NiTi. Выбор NiTi обусловлен его структурой, представляющей собой две вложенные друг в друга простые кубические решётки, что позволяет возбуждать моды в каждой из них. Данный материал имеет весьма перспективные применения в области медицины, материалов с эффектом памяти форм [47–49].

## 1. Методика

**1.1. Трёхмерные колебательные моды в простой кубической решетке** Семнадцать стабильных однокомпонентных ДНКМ, полученных на основе теории бушей нелинейных нормальных мод [30, 32, 50], представлены на рис. 1 для простой кубической решетки. Эти ДНКМ отличаются делокализованным характером, распространяясь по всей бесконечной кристаллической решетке и проявляясь в виде периодических смещений атомов. Для возбуждения указанных ДНКМ задаются начальные смещения атомов. На рис. 1 показаны две соседние плоскости (001), обозначенные как (001)' и (002)', параллельные плоскости  $(x, y)$ . Компоненты смещений  $\Delta x$  и  $\Delta y$  в этих плоскостях обозначены черными стрелками, а компонента  $\Delta z$  — красными точками (для смещения в сторону наблюдателя) и синими крестиками (для смещения от наблюдателя). Все ненулевые компоненты смещений атомов от их равновесных положений в решетке имеют одинаковую амплитуду  $A$ , вследствие чего все изучаемые в настоящей работе моды являются однокомпонентными.

ДНКМ 1, 4, 8, 12 и 23 характеризуются единственной ненулевой компонентой вектора смещения, где только  $|\Delta y| = A$  или  $|\Delta z| = A$ , при этом остальные компоненты равны нулю. Длина вектора смещения атомов равна  $D = A$ . ДНКМ 2, 5, 7, 9, 11, 13 и 24 имеют две ненулевые компоненты и длину вектора смещения равную  $D = \sqrt{2}A$ . Для ДНКМ 3,

6, 10, 14 и 25 характерно наличие трех ненулевых компонент вектора смещения, то есть  $|\Delta x| = |\Delta y| = |\Delta z| = A$ , а длина вектора смещения в этом случае составляет  $D = \sqrt{3}A$ . Все перечисленные ДНКМ обладают короткими длинами волн, а их волновой вектор находится на границе первой зоны Бриллюэна.

Семнадцать стабильных трехмерных ДНКМ классифицированы по числу ненулевых компонент смещений атомов. А именно, группа I включает моды с одной ненулевой компонентой (ДНКМ 1, 4, 8, 12, 23). Группа II охватывает моды с двумя ненулевыми компонентами (ДНКМ 2, 5, 7, 9, 11, 13, 24). В группу III входят моды с тремя ненулевыми компонентами (ДНКМ 3, 6, 10, 14, 25). Для ясности в настоящей работе сохранена ранее использовавшаяся нумерация ДНКМ [46, 51].

**1.2. Методика молекулярно-динамического моделирования** Бинарный сплав NiTi имеет упорядоченную структуру B2, в котором массы составляющих элементов близки друг к другу: масса атома титана составляет 82% массы атома никеля. В структуре B2 атомы никеля занимают позиции простой кубической решетки, тогда как атомы титана располагаются в центрах подрешетки никеля, образуя собственную кубическую подрешетку.

Молекулярно-динамическое моделирование выполнено с использованием программного пакета LAMMPS [52, 53]. Все расчёты проводились с применением межатомного потенциала, разработанного в рамках модифицированного метода погруженного атома (MEAM) [54]. Равновесные параметры решётки, полученные с использованием выбранного потенциала, равны  $a = b = c = 2.97 \text{ \AA}$ .

Расчетная ячейка состоит из  $10 \times 10 \times 10$  трансляционных ячеек решетки NiTi, что составляет 2000 атомов. При моделировании применялись периодические граничные условия во всех трех ортогональных направлениях. Шаг интегрирования по времени составил 1 фс. Общая длительность моделирования составила 10000 шагов по времени. Такое относительно короткое время моделирования обусловлено акцентом на изучение возможности возбуждения ДНКМ и их влияния на свойства сплава NiTi, а не на анализ времени жизни, **которое при определенных параметрах может достигать порядка нескольких десятков пикосекунд**. Стабильность ДНКМ оценивалась по их периодическим колебаниям в течение нескольких периодов. Интегрирование уравнений движения осуществлялось с использованием алгоритма Верле, при этом тепловые флуктуации атомов не учитывались для исключения влияния температуры. В ходе моделирования использовался термодинамический ансамбль NVE, предполагающий постоянство числа атомов ( $N$ ), объема ( $V$ ) и энергии ( $E$ ).

Амплитуды начальных смещений атомов, применяемых для возбуждения семнадцати однокомпонентных колебательных мод (см. рис. 1), варьировались от 0.001 до 0.376 Å с шагом 0.01 Å. Изначально смещались атомы одной подрешётки, в то время как атомы другой подрешётки оставались неподвижными. Начальные скорости всех атомов устанавливались равными нулю.

## 2. Результаты

ДНКМ 1–14 и 23–25 являются стабильными, поскольку обеспечивают устойчивые периодические колебания по всему объему моделируемого кристалла NiTi при возбуждении как в подрешетке никеля, так и в подрешетке титана, при этом атомы соседней подрешетки остаются неподвижными в своих равновесных положениях. Отметим, что в нестабильных ДНКМ 15–22, которые в настоящей работе не рассматриваются, происходит перенос колебательной энергии от одной изначально возбуждённой подрешётки к другой при всех



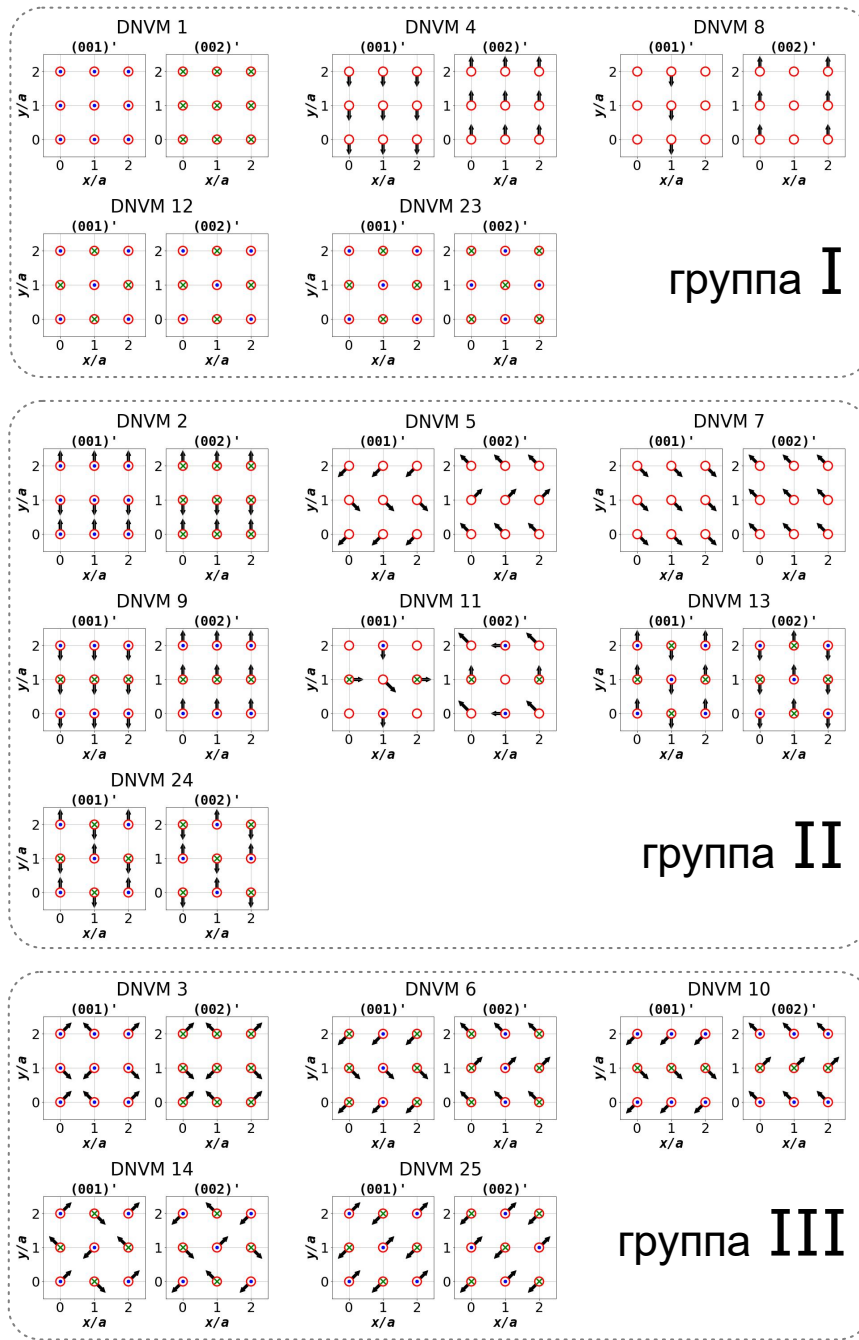


Рис. 1. Семнадцать стабильных однокомпонентных ДНКМ используемых для возбуждения простых кубических подрешеток атомов титана или никеля в бинарном сплаве NiTi. Смещения атомов представлены в двух соседних плоскостях, обозначенных как  $(001)'$  и  $(002)'$ , параллельных плоскости  $(x, y)$ . Красными кружками показаны только атомы одной кубической подрешетки. Компоненты смещений атомов  $\Delta x$  и  $\Delta y$  вдоль соответствующих осей от равновесных решеточных положений показаны черными стрелками. Компоненты смещений  $\Delta z$ , направленные к наблюдателю или от него, отмечены синими точками или зелеными крестиками, соответственно

Fig. 1. Seventeen stable one-component DNVMs used to excite simple cubic sublattices of titanium or nickel atoms in the binary NiTi alloy. Atomic displacements are represented in two adjacent planes, labeled  $(001)'$  and  $(002)'$ , parallel to the  $(x, y)$  plane. Red circles show only atoms of one cubic sublattice. The  $\Delta x$  and  $\Delta y$  components of atomic displacements along the corresponding axes from the equilibrium lattice positions are shown by black arrows. The  $\Delta z$  components of displacements directed toward or away from the observer are marked by blue dots and green crosses, respectively

начальных амплитудах.

На рис. 2а представлена зависимость смещения атомов  $\Delta r$  от времени моделирования для стабильной ДНКМ 4, возбужденной в подрешетке никеля с начальными амплитудами  $A_z = 0.051$  и  $A_z = 0.151$  Å. В интервале от 0 до 3 пс наблюдаются периодические колебания атомов никеля с сохранением начальной амплитуды. Атомы подрешетки титана остаются при этом невозбужденными, что подтверждается горизонтальными линиями на рис. 2, которые для двух начальных амплитуд накладываются одна на другую. На рис. 2б показана та же зависимость, но в этом случае ДНКМ 4 возбуждается в подрешетке титана. Как хорошо видно, атомы титана совершают периодические колебания, а у атомов никеля в соседней подрешетке смещения отсутствуют. Это указывает на то, что стабильные ДНКМ, возбужденные в одной подрешетке, даже при значительных начальных амплитудах, не передают колебательную энергию атомам соседней подрешетки. Аналогичные результаты были получены при возбуждении других стабильных ДНКМ 1–14 и 23–25 в обеих подрешетках.

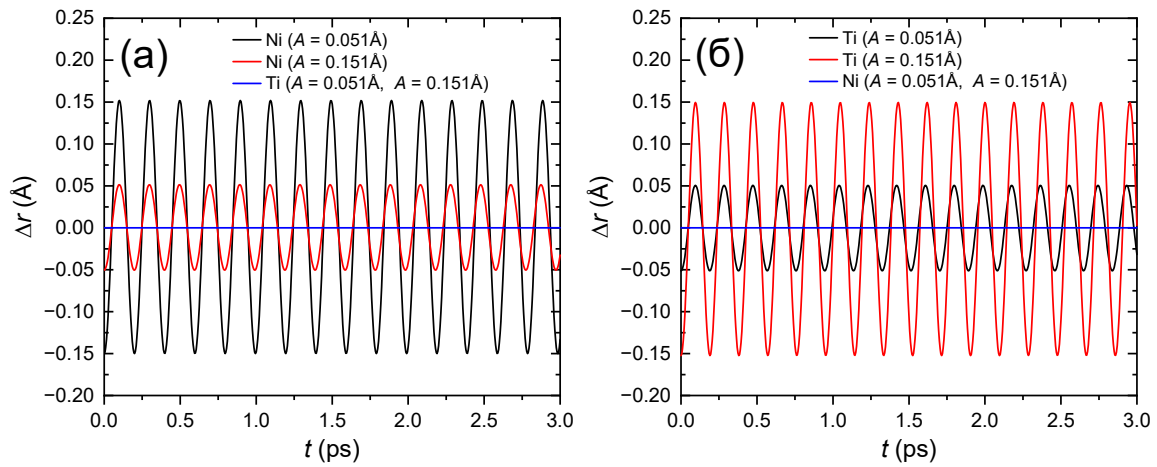


Рис. 2. Зависимость смещения колеблющегося атома от времени моделирования для стабильной ДНКМ 4 (группа I), возбужденной в подрешетке (а) никеля и (б) титана в бинарном сплаве NiTi. Расчеты приведены для двух начальных амплитуд  $A = 0.051$  и  $A = 0.151$  Å

Fig. 2. The dependence of the displacement of an oscillating atom on simulation time for a stable DNVN 4 excited in (a) nickel and (b) titanium sublattices of the binary NiTi alloy. Calculations are given for two initial amplitudes  $A = 0.051$  and  $A = 0.151$  Å

Зависимость частоты колебаний от начальной амплитуды для семнадцати стабильных ДНКМ для групп I, II и III представлена на рис. 3. В целом, различные группы ДНКМ демонстрируют качественно похожие частотные характеристики. ДНКМ 1 и 23 (группа I), 2 и 24 (группа II), а также 3, 6, 10, 14 и 25 (группа III) характеризуются жестким типом нелинейности, при которой частота атомных колебаний возрастает с увеличением амплитуды. ДНКМ 5, 7, 9, 11 и 13 (группа II) демонстрируют довольно слабую зависимость частоты от амплитуды в широком интервале начальных амплитуд. ДНКМ 4, 8 и 12 (группа I) показывают мягкий тип нелинейности при возбуждении обеих подрешеток. ДНКМ 10 для подрешетки никеля и ДНКМ 9, 13 и 25 для подрешетки титана начинают проявлять мягкую нелинейность при амплитудах  $A > 0.3$  Å, что обусловлено значительным отклонением атомов от равновесных положений. Это связано с наличием двух или трёх ненулевых компонент вектора смещения в модах групп II и III, что вызывает большие смещения атомов по сравнению со смещениями в группе I, приводя к мягкой нелинейности. Кроме того, такое поведение объясняется уменьшением длительности устойчивых периодических коле-

баний при увеличении амплитуды, что приводит к передаче энергии соседним атомам и разрушению характерной для ДНКМ структуры смещений.

Как показано на рис. 3, при малых амплитудах частотные отклики для подрешёток Ni и Ti разделяются на четыре группы. Предыдущие исследования однокомпонентных колебательных мод в ГЦК решётке показали, что различные частоты фононов соответствуют различным точкам зоны Бриллюэна [42]. Частоты всех исследованных ДНКМ находятся в интервалах 4.3–5.3 ТГц для подрешётки никеля и 5.3–6.1 ТГц для подрешётки титана. При возбуждении подрешётки никеля ДНКМ 23–25 имеют наименьшие частоты (4.3 ТГц), а ДНКМ 12–14 — наивысшие (5.3 ТГц). При возбуждении подрешётки титана ДНКМ 4–11 характеризуются наименьшими частотами (5.3 ТГц), а ДНКМ 12–14 имеют самые высокие частоты (6.1 ТГц).

На рис. 4 представлена зависимость полной энергии (суммы потенциальной и кинетической компонент) на атом от начальной амплитуды для семнадцати стабильных однокомпонентных ДНКМ. Во всём интервале начальных амплитуд полная энергия увеличивается пропорционально квадрату смещения атомов от их равновесных положений в решётке. Абсолютные значения векторов смещения для групп I, II и III соотносятся как  $1 : \sqrt{2} : \sqrt{3}$ , что определяет соответствующую пропорцию полной энергии  $1 : 2 : 3$ . Следовательно, моды группы III обладают наивысшей энергией, за ними следуют моды группы II с меньшей энергией, а моды группы I характеризуются минимальной энергией.

Анализ кривых для подрешётки никеля выявил, что минимальная и максимальная полные энергии составляют 0.11 эВ для ДНКМ 8 и 0.98 эВ для ДНКМ 14 соответственно. Для подрешётки титана максимальная энергия достигает 1.02 эВ для ДНКМ 3, а минимальная — 0.10 эВ для ДНКМ 8. ДНКМ 14 демонстрирует максимальную энергию 0.98 эВ, за ней следуют ДНКМ 3 (0.95 эВ) и ДНКМ 6 и 10 (0.81 эВ). При возбуждении ДНКМ 3 в подрешётке титана её энергия достигает значений 1.02 эВ, а ДНКМ 14 и 25 — 0.86 и 0.89 эВ соответственно. В отличие от бинарного сплава  $\text{Ni}_3\text{Al}$ , где ранее наблюдалось чёткое разделение энергетических зависимостей по группам [46], для  $\text{NiTi}$  такое разделение отсутствует. Моды из соседних групп часто имеют близкие значения энергии. Кроме того, в пределах одной группы могут наблюдаться значительные различия в энергии на атом, например, между ДНКМ 14 и 25 (0.98 и 0.65 эВ для никеля) и ДНКМ 3 и 10 (1.02 и 0.70 эВ для титана). Эти результаты для  $\text{NiTi}$  отличаются от полученных ранее для однокомпонентных ДНКМ, возбужденных в подрешётке алюминия для сплава  $\text{Ni}_3\text{Al}$ , где моды одной группы накапливают схожие значения энергии [46].

Оценка нелинейности ДНКМ проводилась путём определения отношения полной энергии системы  $E_{total}$  к средней кинетической энергии за период колебаний  $\bar{E}_k$ . А именно  $C = E_{total}/\bar{E}_k = 1 + \bar{E}_p/\bar{E}_k$ , где  $\bar{E}_p$  — средняя потенциальная энергия за период. В гармонических системах имеет место равенство  $\bar{E}_k = \bar{E}_p$ , что приводит к  $C = 2$ . Однако в нелинейных системах средняя кинетическая энергия за период колебаний не равна средней потенциальной энергии за тот же период, вследствие чего  $C \neq 2$ . Таким образом, отклонение значения  $C$  от 2 служит характеристикой нелинейности колебательных мод и связано с теплоёмкостью кристалла, поскольку показывает долю кинетической энергии в полной энергии системы.

На рис. 4 представлена зависимость отношения  $C$  от начальной амплитуды для семнадцати стабильных однокомпонентных ДНКМ, возбуждённых в подрешётках никеля и титана. При малых начальных амплитудах  $A < 0.06$  Å нелинейность ДНКМ слабо выражена для обеих подрешёток, при этом значения  $C$  изменяются менее чем на 1%. Однако с увеличением амплитуды ДНКМ с жёстким типом нелинейности демонстрируют снижение отношения  $C$ , тогда как моды с мягким типом нелинейности показывают его увеличение.

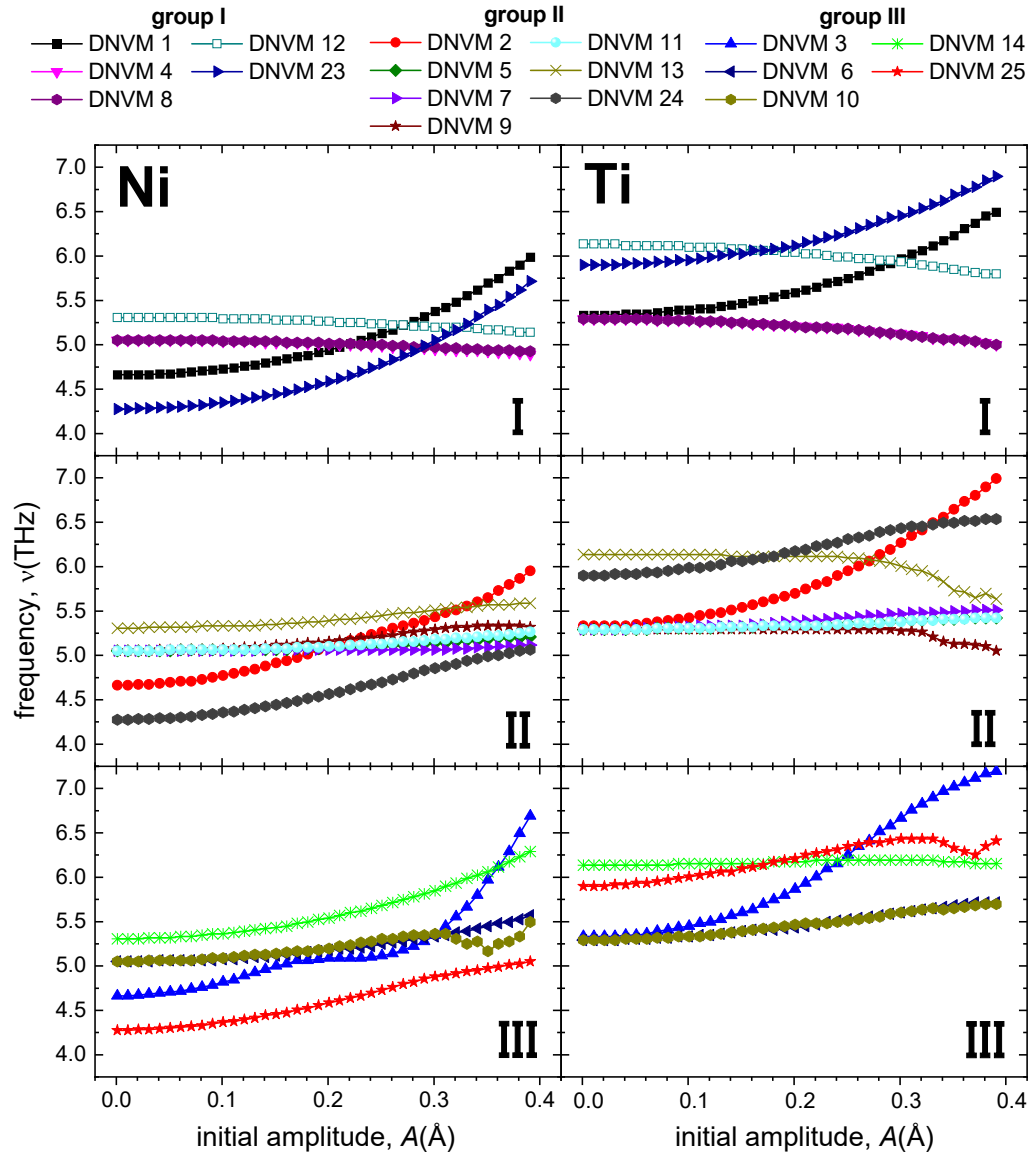


Рис. 3. Частотные характеристики семнадцати стабильных однокомпонентных ДНКМ, возбужденных в простых кубических подрешётках никеля (слева) и титана (справа) в бинарном сплаве NiTi. Для удобства данные разделены на три группы (I, II, III) по количеству ненулевых компонентов вектора смещения (см. подробности в тексте). Символы "Ni" и "Ti" указывают на подрешётку с возбуждёнными атомами

Fig. 3. Frequency characteristics of seventeen stable one-component DNVMs excited in simple cubic sublattices of nickel (left) and titanium (right) in the binary NiTi alloy. For convenience, the data are divided into three groups (I, II, III) by the number of nonzero components of the displacement vector (see text for details). The symbols "Ni" and "Ti" indicate the sublattice with excited atoms

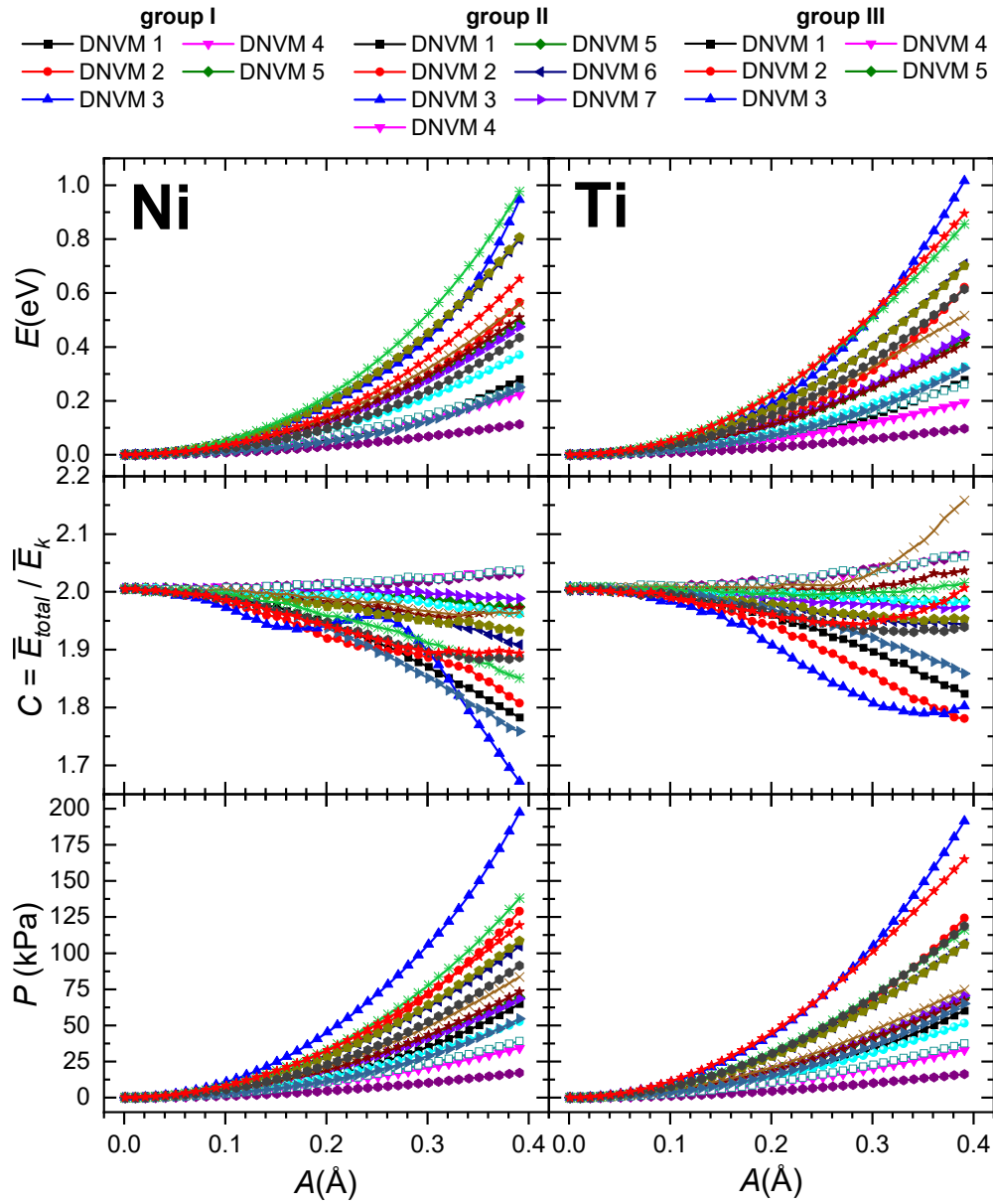


Рис. 4. Зависимость полной энергии на атом, отношение  $C$  и гидростатическое давление как функции начальной амплитуды, рассчитанные для семнадцати стабильных однокомпонентных ДНКМ, возбужденных в подрешётках никеля и титана в бинарном сплаве NiTi. Символы "Ni" и "Ti" указывают на подрешётку с возбуждёнными атомами

Fig. 4. Total energy per atom, the ratio  $C$ , and hydrostatic pressure as functions of the initial amplitude calculated for seventeen stable one-component DNVMs excited in the nickel and titanium sublattices in the binary NiTi alloy. The symbols "Ni" and "Ti" indicate the sublattice with excited atoms

Кроме того, как отмечалось ранее, некоторые ДНКМ могут изменять тип нелинейности с ростом амплитуды, и отношение  $C$  реагирует на эти изменения соответствующим образом.

Такое поведение зависимости  $C(A)$  объясняется простым механизмом. С увеличением амплитуды колебаний ДНКМ с жёстким типом нелинейности возрастает частота колебаний, что приводит к увеличению средней кинетической энергии  $\bar{E}_k$ . Поскольку отношение  $C$  обратно пропорционально кинетической энергии, увеличение или уменьшение  $\bar{E}_k$  вызывает, соответственно, уменьшение или увеличение  $C$ . Подобное поведение зависимости  $C(A)$  наблюдается и для других колебательных мод в различных кристаллических решётках, включая одномерные цепочки частиц [15, 39, 55], а также двух- и трёхмерные кристаллы [41, 44].

Применение периодических граничных условий и термодинамического ансамбля NVE (постоянный объём) при возбуждении ДНКМ приводит к возникновению внутренних механических напряжений в расчётной ячейке. Эти напряжения изменяются во времени с периодом, равным половине периода колебаний ДНКМ, поэтому для анализа используются их средние значения во времени. Зависимость гидростатического давления от начальной амплитуды для семнадцати стабильных ДНКМ, возбужденных в подрешётках никеля и титана, представлена на рис. 4. Интересно отметить, что гидростатическое давление очень незначительно при низких амплитудах и начинает заметно возрастать при начальных амплитудах выше  $A > 0.05 \text{ \AA}$ . При дальнейшем увеличении амплитуды гидростатическое давление на стенки расчётной ячейки увеличивается, следуя приблизительно квадратичной зависимости. Максимальные и минимальные значения гидростатического давления составляют 197 кПа для ДНКМ 3 и 17 кПа для ДНКМ 8 в подрешётке никеля, и соответственно 191 и 16 кПа в подрешётке титана. Как и в случае полной колебательной энергии (см. рис. 4), чёткое разделение на группы мод отсутствует. В целом, наблюдается корреляция между колебательной энергией мод и создаваемым гидростатическим давлением. Значения давления для ДНКМ одной группы могут существенно различаться. Например, для ДНКМ 3 и 6 (группа III) в подрешётке никеля они равны 197 и 105 кПа, а в подрешётке титана, соответственно, 191 и 106 кПа. Некоторые моды из различных групп, такие как ДНКМ 2 (группа II) и ДНКМ 25 (группа III) для никеля, а также ДНКМ 24 (группа II) и ДНКМ 14 (группа III) для титана, создают близкие значения гидростатического давления. В общем, однокомпонентные ДНКМ, возбужденные в подрешётках никеля и титана, генерируют очень близкие значения гидростатического давления в бинарном сплаве NiTi.

Прямое сопоставление полученных результатов с данными других авторов не представляется возможным, поскольку в настоящее время практически отсутствуют публикации, посвященные изучению ДНКМ в подрешетках бинарных сплавов. Пожалуй единственным исключением является наша предыдущая работа [61], в которой подробно исследовались двадцать пять однокомпонентных ДНКМ, возбужденных в простой кубической подрешетке алюминия во всем объеме бинарного сплава Ni<sub>3</sub>Al. В связи с этим дальнейшие сравнения носят приблизительный характер.

В работе [61] было установлено, что устойчивые периодические колебания поддерживаются только шестнадцатью ДНКМ 1–4, 6, 7, 9, 12–15, 18, 20, 23–25, тогда как девять ДНКМ 5, 8, 10, 11, 16, 17, 19, 21, 22 оказались нестабильными. Таким образом, в отличие от сплава NiTi, для Ni<sub>3</sub>Al характерен другой набор стабильных и нестабильных колебательных мод, что обусловлено различиями в симметрии кристаллической решетки, влияющей на динамику атомов для некоторых ДНКМ. Отметим, что ДНКМ 1–4, 6, 7, 9, 12–14, 23–25 демонстрируют устойчивость, а ДНКМ 16, 17, 19, 21, 22 — нестабильность в обоих бинарных сплавах.

Значения полной колебательной энергии, аккумулируемой ДНКМ в Ni<sub>3</sub>Al, сравнимы с аналогичными значениями для NiTi. Однако, в отличие от Ni<sub>3</sub>Al, различия в полной



энергии внутри одной группы мод значительно выше в NiTi. ДНКМ, возбуждаемые в NiTi, вызывают существенные отклонения в параметре  $C$ , что свидетельствует о более выраженной нелинейности и более значительном вкладе в удельную теплоемкость кристалла. Важно отметить, что в настоящей работе и в публикации [61] использовалась расчетная ячейка одинакового размера, что делает такое сравнение корректным. Таким образом, одни и те же ДНКМ, возбуждаемые на структурно эквивалентных подрешетках различных бинарных сплавов, могут обладать различными амплитудно-частотными характеристиками и оказывать различное влияние на свойства кристалла. На данном этапе исследования невозможно утверждать, что исследованные ДНКМ будут вести себя сходным образом в любом бинарном сплаве с аналогичной кристаллической решеткой. Этот вопрос требует дополнительного рассмотрения.

Изучение ДНКМ в бинарных сплавах методами молекулярной динамики с использованием многочастичных межатомных потенциалов остается относительно узкоспециализированной областью, и детализированные данные для других сплавов крайне ограничены. Значительная часть предыдущих исследований опиралась на упрощенные парные межатомные потенциалы, такие как потенциалы Морзе или  $\beta$ -Ферми-Паста-Улам-Цингоу ( $\beta$ -FPUT), которые не в полной мере учитывают сложность связей в реальных материалах, особенно в металлических сплавах, где многочастичные эффекты и угловые зависимости играют ключевую роль [14, 16, 41, 43, 56–61]. Это существенно ограничивает возможности количественного сравнения результатов указанных исследований с настоящей работой.

## Заключение

С использованием метода молекулярной динамики в бинарном сплаве NiTi были возбуждены однокомпонентные трёхмерные ДНКМ в кубических подрешётках никеля и титана. Эти семнадцать колебательных мод поддерживают стабильные периодические колебания. При возбуждении мод в одной подрешётке их энергия локализуется в этой подрешётке и не передаётся в другую. В исследованном интервале амплитуд стабильные ДНКМ могут накапливать колебательную энергию от 0.11 до 0.98 эВ в подрешётке никеля и от 0.10 до 1.02 эВ в подрешётке титана на атом. Величина накопленной энергии определяется количеством ненулевых компонентов вектора смещения атомов и пропорциональна квадрату их начального смещения. Возбуждение ДНКМ приводит к снижению удельной теплоёмкости кристалла (отношение полной энергии к кинетической) для мод с жёстким типом нелинейности, тогда как для мод с мягкой нелинейностью теплоёмкость возрастает. Возбуждение стабильных ДНКМ в подрешётках никеля и титана приводит к возникновению гидростатического давления, пропорционального длине вектора смещения атомов. При этом давление, вызванное ДНКМ из группы III, превосходит давление от мод групп I и II.

## Список литературы

1. Shi JC, Zeng LW, Chen JB. Two-dimensional localized modes in saturable quintic nonlinear lattices. *Nonlinear Dynamics*. 2023;111(14):13415–13424.
2. Russell FM, Archilla JFR. Intrinsic localized modes in polymers and hyperconductors. *Low Temperature Physics*. 2022;48(12):1009–1014.
3. Abbagari S, Houwe A, Akinyemi L, Bouetou TB. Modulated wave patterns brought by higher-order dispersion and cubic-quintic nonlinearity in monoatomic chains with anharmonic potential. *Wave Motion*. 2023;123:103220.
4. Hall DA. Review nonlinearity in piezoelectric ceramics. *Journal of Materials Science*. 2001;36(19):4575–4601.



5. Zhang YN, Wu JY, Jia LN, Qu Y, Yang YY, Jia BH, Moss DJ. Graphene Oxide for Nonlinear Integrated Photonics. *Laser Photonics Reviews*. 2023;17(3):2200512.
6. Sun T, Shao LH, Zhang K. Anomalous heat conduction and thermal rectification in weak nonlinear lattices. *The European Physical Journal B*. 2023;96(7):99.
7. Ren BQ, Arkhipova AA, Zhang YQ, Kartashov YV, Wang HG, Zhuravitskii SA, Skryabin NN, Dyakonov IV, Kalinkin AA, Kulik SP, Kompanets VO, Chekalin SV, Zadkov VN. Observation of nonlinear disclination states. *Light: Science & Applications*. 2023;12(1):194.
8. Kang J, Liu T, Yan M, Yang DD, Huang XJ, Wei RS, Qiu JR, Dong GP, Yang ZM, Nori F. Observation of Square-Root Higher-Order Topological States in Photonic Waveguide Arrays. *Laser Photonics Reviews*. 2023;17(6):2200499.
9. Dolgov AS. On localization of oscillations in nonlinear crystal structure. *Soviet Physics - Solid State*. 1986;28:907.
10. Sievers AJ, Takeno S. Intrinsic Localized Modes in Anharmonic Crystals. *Physical Review Letters*. 1988;61(8):970–973.
11. Dmitriev SV, Korznikova EA, Baimova YA, Velarde MG. Discrete breathers in crystals. *Physics - Uspekhi*. 2016;59(5):446–461.
12. Dorignac J, Zhou J, Cambell DK. Discrete breathers in nonlinear Schrodinger hypercubic lattices with arbitrary power nonlinearity. *Physica D*. 2008;237(4):486–504.
13. Gómez-Gardeñes J, Floría LM, Bishop AR. Discrete breathers in two-dimensional anisotropic nonlinear Schrodinger lattices. *Physica D*. 2006;216(1):31–43.
14. Babicheva RI, Semenov AS, Soboleva EG, Kudreyko AA, Zhou K, Dmitriev SV. Discrete breathers in a triangular beta-Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou lattice. *Physical Review E*. 2021;103(5):052202.
15. Korznikova EA, Morkina AY, Singh M, Krivtsov AM, Kuzkin VA, Gani VA, Bebikhov YV, Dmitriev SV. Effect of discrete breathers on macroscopic properties of the Fermi-Pasta-Ulam chain. *The European Physical Journal B*. 2020;93(7):123.
16. Kolesnikov ID, Shcherbinin SA, Bebikhov YV, Korznikova EA, Shepelev IA, Kudreyko AA, Dmitriev SV. Chaotic discrete breathers in bcc lattice. *Chaos, Solitons & Fractals*. 2024;178:114339.
17. Bachurina OV. Linear discrete breather in fcc metals. *Computational Materials Science*. 2019;160:217–221.
18. Bachurina OV. Plane and plane-radial discrete breathers in fcc metals. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. 2019;27(5):055001.
19. Bachurina OV, Kudreyko AA. Two-dimensional discrete breathers in fcc metals. *Computational Materials Science*. 2020;182:109737.
20. Bachurina OV, Kudreyko AA. Two-component localized vibrational modes in fcc metals. *The European Physical Journal B*. 2021;94(11):1–9.
21. Haas M, Hizhnyakov V, Shelkan A, Klopov M, Sievers AJ. Prediction of high-frequency intrinsic localized modes in Ni and Nb. *Physical Review B*. 2011;84(14):144303.
22. Krylova KA, Lobzenko IP, Semenov AS, Kudreyko AA, Dmitriev SV. Spherically localized discrete breathers in bcc metals V and Nb. *Computational Materials Science*. 2020;180:109695.
23. Murzaev RT, Kistanov AA, Dubinko VI, Terentyev DA, Dmitriev SV. Moving discrete breathers in bcc metals V, Fe and W. *Computational Materials Science*. 2015;98:88–92.
24. Bachurina OV, Murzaev RT, Kudreyko AA, Dmitriev SV, Bachurin DV. Atomistic study of two-dimensional discrete breathers in hcp titanium. *The European Physical Journal B*. 2022;95(7):104.
25. Bachurina OV, Murzaev RT, Semenov AS, Korznikova EA, Dmitriev SV. Properties of Moving Discrete Breathers in Beryllium. *Physics of the Solid State*. 2018;60(5):989–994.
26. Murzaev RT, Bachurin DV, Korznikova EA, Dmitriev SV. Localized vibrational modes in diamond. *Physics Letters A*. 2017;381(11):1003–1008.

27. Voulgarakis NK, Hadjisavvas G, Kelires PC, Tsironis GP. Computational investigation of intrinsic localization in crystalline Si. *Physical Review B*. 2004;69(11):113201.
28. Zakharov PV, Starostenkov MD, Dmitriev SV, Medvedev NN, Eremin AM. Simulation of the Interaction between Discrete Breathers of Various Types in a Pt3Al Crystal Nanofiber. *Journal of Experimental and Theoretical Physics*. 2015;121(2):217–221.
29. Zakharov PV, Korznikova EA, Dmitriev SV, Ekomasov EG, Zhou K. Surface discrete breathers in Pt3Al intermetallic alloy. *Surface Science*. 2019;679:1–5.
30. Sakhnenko VP, Chechin GM. Symmetry selection rules in nonlinear dynamics of atomic systems. *Doklady Physics*. 1993;38:219.
31. Sakhnenko VP, Chechin GM. Bushes of Modes and Normal Vibrations in Nonlinear Dynamical-Systems with Discrete Symmetry. *Doklady Akademii Nauk*. 1994;338(1):42–45.
32. Chechin GM, Sakhnenko VP. Interactions between normal modes in nonlinear dynamical systems with discrete symmetry. Exact results. *Physica D*. 1998;117(1–4):43–76.
33. Daumont I, Dauxois T, Peyrard M. Modulational instability: First step towards energy localization in nonlinear lattices. *Nonlinearity*. 1997;10(3):617–630.
34. Doi Y, Nakatani A, Yoshimura K. Modulational instability of zone boundary mode and band edge modes in nonlinear diatomic lattices. *Physical Review E*. 2009;79(2):026603.
35. Zhang XC, Shkurinov A, Zhang Y. Extreme terahertz science. *Nature Photonics*. 2017;11(1):16–18.
36. Hafez HA, Chai X, Ibrahim A, Mondal S, Férachou D, Ropagnol X, Ozaki T. Intense terahertz radiation and their applications. *Journal of Optics*. 2016;18(9):093004.
37. Chechin GM, Ryabov DS, Zhukov KG. Stability of low-dimensional bushes of vibrational modes in the Fermi-Pasta-Ulam chains. *Physica D*. 2005;203(3–4):121–166.
38. Chechin GM, Sizintsev DA, Usoltsev OA. Nonlinear atomic vibrations and structural phase transitions in strained carbon chains. *Computational Materials Science*. 2017;138:353–367.
39. Morkina AY, Singh M, Bebikhov YV, Korznikova EA, Dmitriev SV. Variation of the Specific Heat in the Fermi–Pasta–Ulam Chain due to Energy Localization. *Physics of the Solid State*. 2023;64:446–454.
40. Abdullina DU, Semenova MN, Semenov AS, Korznikova EA, Dmitriev SV. Stability of delocalized nonlinear vibrational modes in graphene lattice. *The European Physical Journal B*. 2019;92(11):249.
41. Upadhyaya A, Semenova MN, Kudreyko AA, Dmitriev SV. Chaotic discrete breathers and their effect on macroscopic properties of triangular lattice. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*. 2022;112:106541.
42. Shcherbinin SA, Krylova KA, Chechin GM, Soboleva EG, Dmitriev SV. Delocalized nonlinear vibrational modes in fcc metals. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*. 2022;104:106039.
43. Babicheva RI, Semenov AS, Shcherbinin SA, Korznikova EA, Kudreyko AA, Vivegananthan P, Zhou K, Dmitriev SV. Effect of the stiffness of interparticle bonds on properties of delocalized nonlinear vibrational modes in an fcc lattice. *Physical Review E*. 2022;105(6):064204.
44. Morkina AY, Bachurin DV, Dmitriev SV, Semenov AS, Korznikova EA. Modulational Instability of Delocalized Modes in fcc Copper. *Materials*. 2022;15(16):5597.
45. Bachurina OV, Murzaev RT, Shcherbinin SA, Kudreyko AA, Dmitriev SV, Bachurin DV. Multi-component delocalized nonlinear vibrational modes in nickel. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. 2023;31:075009.
46. Bachurina OV, Murzaev RT, Shcherbinin SA, Kudreyko AA, Dmitriev SV, Bachurin DV. Delocalized nonlinear vibrational modes in Ni3Al. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*. 2024;132:107890.

47. Ostropiko ES., Konstantinov A.Y. Effect Stress-induced martensite formation under high strain rate loading in TiNi shape memory alloy. *Письма о материалах*. 2024;14(2):143.
48. Rubanik VV, Bahrets DA, Rubanik jr. VV, Urban VI, Dorodeiko VG, Andreev VA, Chekan NM, Akula IP Effect Mechanical properties of TiNi medical alloy with bioinert coatings. *Письма о материалах*. 2023;13(4):353.
49. Resnina NN, Ivanov AM, Belyaev FS, Volkov AE, Belyaev SP Simulation of recoverable strain variation during isothermal holding of the Ni<sub>51</sub>Ti<sub>49</sub> alloy under various regimes. *Письма о материалах*. 2023;13(1):33.
50. Sakhnenko VP, Chechin GM. Groups of modes and normal oscillations for nonlinear dynamical systems with discrete symmetry. *Doklady Akademii Nauk*. 1994;338(1):42–45.
51. Bachurina OV, Kudreyko AA, Dmitriev SV, Bachurin DV. Impact of delocalized nonlinear vibrational modes on the properties of NiTi. *Physics Letters A*. 2025;555:130769.
52. Thompson AP, Aktulga HM, Berger R, Bolintineanu DS, Brown WM, Crozier PS, Veld PJI, Kohlmeyer A, Moore SG, Nguyen TD, Shan R, Stevens MJ, Tranchida J, Trott C, Plimpton SJ. LAMMPS-a flexible simulation tool for particle-based materials modeling at the atomic, meso, and continuum scales. *Computer Physics Communications*. 2022;271:108171.
53. LAMMPS. <http://lammps.sandia.gov>.
54. Kim YK, Kim HK, Jung WS, Lee BJ. Development and application of Ni-Ti and Ni-Al-Ti<sub>2</sub>NN-MEAM interatomic potentials for Ni-base superalloys. *Computational Materials Science*. 2017;139:225–233.
55. Singh M, Morkina AY, Korznikova EA, Dubinko VI, Terentiev DA, Xiong DX, Naimark OB, Gani VA, Dmitriev SV. Effect of Discrete Breathers on the Specific Heat of a Nonlinear Chain. *Journal of Nonlinear Science*. 2021;31(1):12.
56. Bachurin DV, Murzaev RT, Abdullina DU, Semenova MN, Bebikhov YV, Dmitriev SV. Chaotic discrete breathers in bcc lattice: Effect of the first- and second interactions. *Physica D*. 2024;470:134344.
57. Bebikhov YV, Naumov EK, Semenova MN, Dmitriev SV. Discrete breathers in a fl-FPUT square lattice from in-band external driving. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*. 2024;132.
58. Shcherbinin SA, Bebikhov YV, Abdullina DU, Kudreyko AA, Dmitriev SV. Delocalized nonlinear vibrational modes and discrete breathers in a body centered cubic lattice. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*. 2024;135:108033.
59. Shepelev IA, Soboleva EG, Kudreyko AA, Dmitriev SV. Influence of the relative stiffness of second-neighbor interactions on chaotic discrete breathers in a square lattice. *Chaos, Solitons & Fractals*. 2024;183:114885.
60. Shcherbinin SA, Kazakov AM, Bebikhov YV, Kudreyko AA, Dmitriev SV. Delocalized nonlinear vibrational modes and discrete breathers in  $\beta$ -FPUT simple cubic lattice. *Physical Review E*. 2024;109(1):014215.
61. Naumov EK, Bebikhov YV, Ekomasov EG, Soboleva EG, Dmitriev SV. Discrete breathers in square lattices from delocalized nonlinear vibrational modes. *Physical Review E*. 2023;107:034214.



*Бачурин Дмитрий Владимирович* — родился в Уфе (1978). Окончил с отличием физико-математический факультет Башкирского государственного педагогического университета (2000). Доктор физико-математических наук (2021). Старший научный сотрудник лаборатории «Нелинейная физика и механика материалов» Института проблем сверхпластичности металлов РАН. Научные интересы — нелинейная динамика кристаллической решетки, прочность и пластичность материалов, дефекты кристаллического строения, нанокристаллические материалы, ультразвуковая обработка материалов, границы зерен в металлах, дискретно-дислокационное и молекулярно-динамическое моделирование. Опубликовал свыше более 70 научных статей в центральных реферируемых отечественных и зарубежных журналах.

Россия, 450001 Уфа, ул. Халтурина, 39  
Институт проблем сверхпластичности металлов РАН  
E-mail: dvbachurin@mail.ru  
ORCID: 0000-0001-8995-211X  
AuthorID (eLibrary.Ru): 40984



*Мурзаев Рамиль Тухфатович* — родился в Баймаке БАССР (1979). Окончил физический факультет Башкирского государственного университета по специальности «Теоретическая физика» (2001). Кандидат физико-математических наук (2011). С 2021 года является заведующим лаборатории «Нелинейная физика и механика материалов» Института проблем сверхпластичности металлов РАН. Научные интересы — ультразвуковая обработка материалов, дефекты кристаллического строения, границы зерен в металлах, нелинейная динамика кристаллической решетки, нанокристаллические материалы, дискретно-дислокационное и молекулярно-динамическое моделирование. Опубликовал более 100 научных статей в центральных реферируемых отечественных и зарубежных журналах.

Россия, 450001 Уфа, ул. Халтурина, 39  
Институт проблем сверхпластичности металлов РАН  
E-mail: murzaevrt@gmail.com  
ORCID: 0000-0002-2691-7031  
AuthorID (eLibrary.Ru): 799822