

ИССЛЕДОВАНИЕ НЕЛИНЕЙНЫХ ВЫСОКОАМПЛИТУДНЫХ КОЛЕБАНИЙ РЕШЁТКИ В СПЛАВАХ Al_nPt_m

А.И. Чередниченко¹, А.М. Ерёмин², А.Э. Васильев³, М.Д. Старостенков⁴, П.В. Захаров³

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

²Бийский технологический институт (филиал) Алтайского государственного технического университета им.

И.И. Ползунова, Бийск

³Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург

⁴Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова, Барнаул

Используя метод молекулярной динамики в работе проведено исследование существования дискретного бризера в модельных кристаллах на основе Al и Pt с различной стехиометрией. В этих кристаллах рассчитан фонный спектр, а так же проведен анализ возможности существования дискретных бризеров в объеме кристалла на атомах Al. Моделирование осуществлялось на основе применения компьютерной программы LAMMPS Molecular Dynamics Simulator. Модели сплавов Al и Pt с различной кристаллической структурой созданы на основе материалов из базы данных The Materials Project. Кристаллы необходимых для моделирования размеров получены на основе элементарных ячеек из базы материалов с помощью приложения Atomsk. Для расчетов межатомного взаимодействия применялся EAM-потенциал, который был получен методом погружённого атома.

Ключевые слова: молекулярная динамика, нелинейная локализованная мода, дискретный бризер, фонный спектр, LAMMPS Molecular Dynamics Simulator, Atomsk, метод погружённого атома (EAM).

ВВЕДЕНИЕ

Вопросы, связанные с нелинейной динамикой кристаллических решеток, занимают важную роль в физике конденсированного состояния, как с чисто теоретической точки зрения, так и из практического интереса. Именно нелинейными связями определяются многие свойства решеток, в том числе теплопроводность, например, эффект баллистической теплопередачи в дискретных структурах [1]. Так же примечательным является эффект нелинейной супратрансмиссии [2, 3], обеспечивающий передачу энергии при внешних гармонических воздействиях на частотах из запрещенной области спектра рассматриваемой системы. Всё это перспективные тонкие эффекты, которые могут существенно повысить эффективность имеющихся устройств и заложить основы для новых, работающих на других физических принципах. В первую очередь это чувствительные датчики, частотные фильтры, тепловые диоды, вентили для потоков энергии в дискретных структурах.

В данной работе целью явилось исследование возможности существования нелинейных высокоамплитудных долгоживущих мод в сплавах различной структуры на основе Pt и Al (представлены в таблице 1). Методом исследования выступил метод молекулярной динамики.

Выбор системы Pt-Al обусловлен рядом факторов. Так имеются работы, в которых для некоторых систем на основе этих элементов исследуются нелинейные моды, что говорит о возможности существования

таких объектов как дискретные бризеры. Сами же сплавы системы Pt-Al применяются в большом количестве сфер как функциональные, так и конструкционные материалы в виду их уникальных механических свойств.

Уделим внимание понятию дискретных бризеров и локализованных мод [4-14]. В целом, говоря о таких объектах, следует отметить, что в реалистичных моделях кристаллов, как и в натурных экспериментах, невозможно обеспечить идеальные условия. Это приводит к тому, что точные математические нелинейные объекты (точные решения дифференциальных уравнений) не могут априори существовать в таких системах. Однако в виду сложившейся терминологии их часто называют аналогично точным решениям в математических моделях. Будем учитывать это в нашей работе.

И так, под дискретным бризером можно понимать периодическую во времени колебательную моду, она должна быть пространственно-локализована и иметь на порядок большую амплитуду в сравнении с тепловыми колебаниями атомов. Существование таких нелинейных локализованных пространственных мод в различных физических системах подкреплено достаточно большой экспериментальной доказательной базой [15]. Они делятся на два – мягкий и жесткий по типу нелинейности. Это разделение продиктовано особенностями зависимости их частоты от их амплитуды. При мягком типе нелинейности дискретного бризера подразумевается уменьшение частоты с увеличением его амплитуды. Такой тип дискретных бризеров может быть реализован в кристаллах имеющих щель в фонном

спектре, причём их частота находится в щели фононного спектра. Эти дискретные бризеры ещё называют щелевыми. В свою очередь дискретные бризеры жесткого типа имеют частоты, которые могут попадать в щель фононного спектра, а также они могут находиться и выше спектра.

Как уже отмечалось основным методом выступает метод молекулярной динамики. Этот метод является классическим при решении обозначенных задач. В основе метода лежит решение дифференциальных уравнений движения для каждой частицы системы. Определяющим фактором в этом случае является выбор межатомного потенциала, который определяет взаимодействие частиц. Этот метод позволяет исследовать кинетику процесса в реальном времени, что несомненно, является плюсом при изучении динамики решеток. К тому же все термодинамические микро- и макро- параметры доступны для анализа, тем самым обеспечивая более полный анализ процессов.

МОДЕЛЬ И МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

В работе были созданы модели сплавов Al и Pt с различной кристаллической структурой. Структуры созданы на основе материалов из базы данных The Materials Project [16]. Кристаллы сплавов Al_nPt_m имеют параметры, представленные в таблице 1. Кристаллы необходимых для моделирования размеров получены на основе элементарных ячеек из базы материалов с помощью программы AtomsK [17].

Модели кристаллов представляют собой прямоугольные параллелепипеды, фрагменты ячеек которых показаны на рис. 1. Сами модели содержали от 5000 до 10000 атомов, что достаточно для изучения обозначенных свойств решеток. Для каждого из сплавов были рассчитаны фононные спектры (рис. 2). Расчеты проводились двумя способами: по собственной методике и по методике, рассмотренной в работе [18].

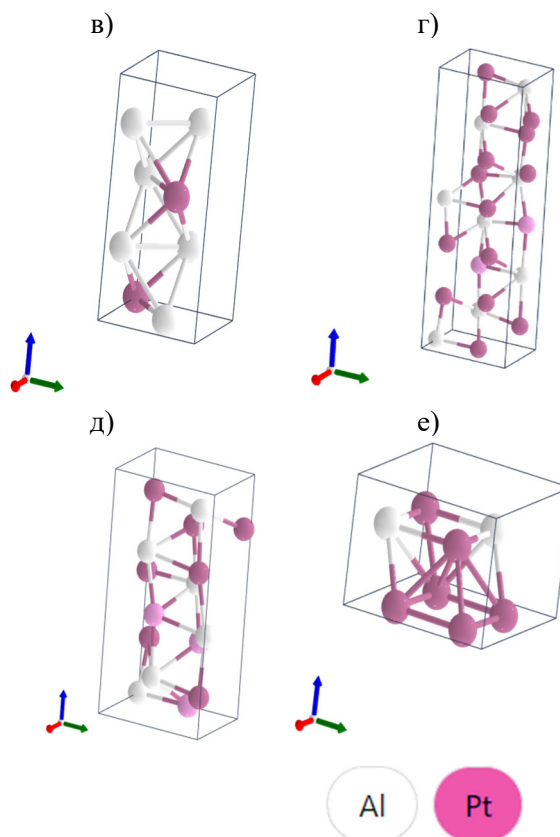
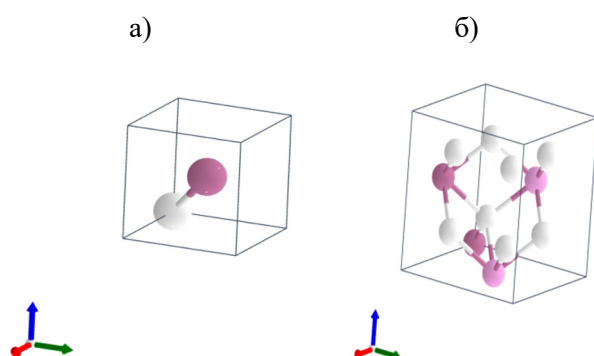


Рис. 1. Элементарные ячейки сплавов: а) AlPt, б) Al_2Pt_2 , в) Al_3Pt_3 , г) $AlPt_2$, д) Al_3Pt_5 , е) $AlPt_3$

Моделирование осуществлялось на основе применения компьютерной программы LAMMPS Molecular Dynamics Simulator [19]. Для расчетов применялся EAM-потенциал межатомного взаимодействия, полученный по методике, предложенной авторами работы [20].

Табл. 1. Сплавы Al_nPt_m

Сплав	Пространственная группа	Сингония
AlPt	$Pm\bar{3}m$	Кубическая
$AlPt(1)$	$P2_1\bar{3}$	Кубическая
Al_2Pt	$Fm\bar{3}m$	Кубическая
Al_3Pt	$I4/mmm$	Тетрагональная
Al_3Pt_2	$P\bar{3}m1$	Тригональная
$Al_3Pt_2(1)$	$P\bar{3}m1$	Тригональная
Al_3Pt_5	$Pbam$	Орторомбическая
Al_2Pt_8	$I4_1/a$	Тетрагональная
$AlPt_2$	$Pmma$	Орторомбическая
$AlPt_2(1)$	$Pnma$	Орторомбическая
$AlPt_3$	$P4/mbm$	Тетрагональная
$AlPt_3(1)$	$Pm\bar{3}m$	Кубическая
$AlPt_3(2)$	$I4/mcm$	Тетрагональная
$AlPt_3(3)$	$P4/mbm$	Тетрагональная

Для расчёта энергии взаимодействия между атомами в математической химии используется метод погружённого атома. В основу этого метода положена конструктивная функция H . Эта функция представляет собой сумму функций $\rho(r_{ij})$, которые зависят от расстояния между рассматриваемым i -м атомом и его j -ми соседями. Функция ρ является электронной плотностью, рассматриваемой структуры.

$$E_i = H_a [\sum_{i \neq j} \rho_a(r_{ij})] + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \varphi_{\alpha\beta}(r_{ij}). (1)$$

В функциональной зависимости (1) r_{ij} – расстояние между i -м и j -м атомами, ρ_a – вклад в плотность заряда электронов от j -го атома в месте расположения i -го атома, $\varphi_{\alpha\beta}$ – функция парного потенциала. Функция H носит название функции «погружения», её значение равно энергии, необходимой для помещения i -го атома типа α в электронное облако.

ЕАМ-потенциал является многочастичным потенциалом. Сумма вклада от большого числа атомов составляет плотность электронного облака. В связи с этим, на практике для уменьшения сложности и времени расчетов достаточно часто уменьшают количество соседей. В данном случае радиус обрезки составил 10 Å.

Далее в объеме каждого кристалла атомам легкой подрешетки задавались смещения вдоль следующих кристаллографических направлений в соответствии с осями: $X-\langle 100 \rangle$, $Y-\langle 010 \rangle$, $Z-\langle 001 \rangle$. Это приводило к возможности возбуждения высокоамплитудных колебаний. А величина смещения в 0,8 Å обеспечивала проявление нелинейной составляющей в динамике атомов.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Рассмотрим результаты расчета фоновых спектров для выбранных моделей. В фоновых спектрах сплавов Al_3Pt , $\text{AlPt}(1)$, AlPt_2 , $\text{AlPt}_2(1)$, AlPt_3 , Al_3Pt_5 можно говорить о наличии щели (рис. 2). Тем самым они являются перспективными для поиска дискретных бризеров с мягким типом нелинейности.

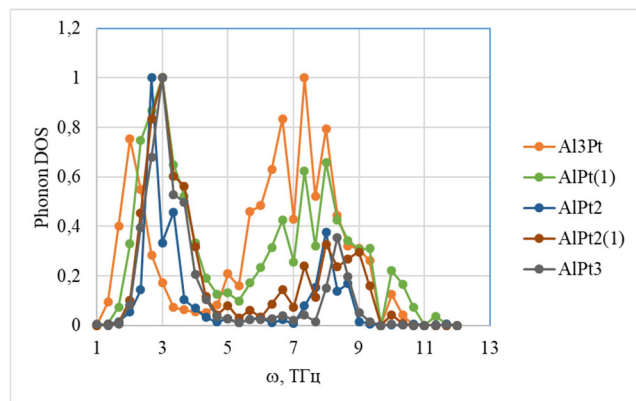


Рис. 2. Фононные спектры

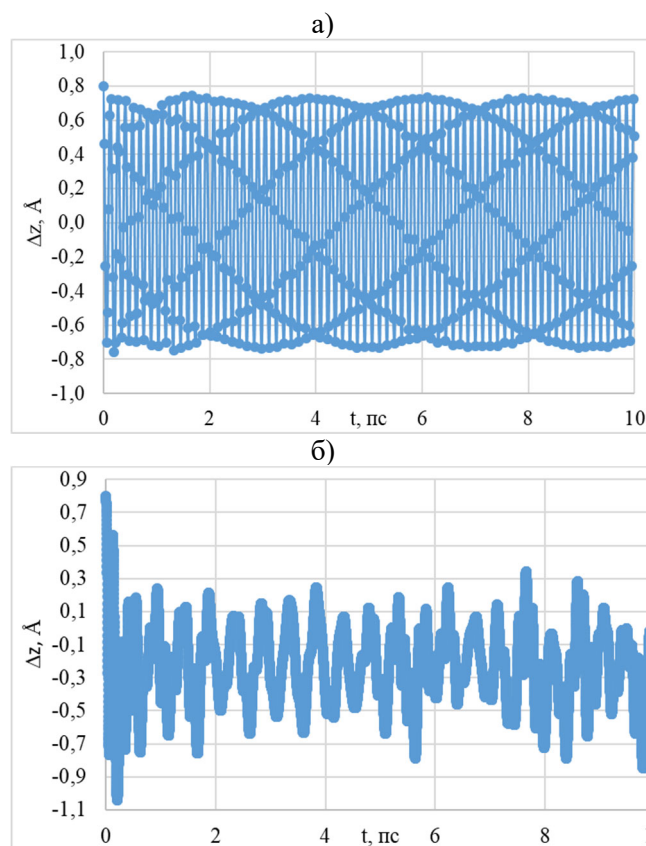


Рис. 3. Зависимость координаты дискретного бризера по оси Z от времени в кристалле: а) AlPt_3 , б) Al_3Pt_5

Было выявлено, что дискретные бризеры, запущенные вдоль осей X, Y, Z в сплавах AlPt_3 , $\text{AlPt}_3(1)$, $\text{AlPt}_3(2)$, $\text{AlPt}_3(3)$ достаточно устойчивы и существуют в течение времени, существенно превышающего 10 пс (рис. 3). Дискретные бризеры имеют мягкий тип нелинейности, их частота составила порядка 7 ТГц и попадает в щель фононного спектра. Эти результаты хорошо согласуются с прошлыми нашими результатами для кристаллов с такой стехиометрией [21-25].

В сплаве Al_3Pt_5 осциллятор, запущенный вдоль оси Z можно описать как нелинейные высокоамплитудные колебания. Его частота равна 5 ТГц, что так же соответствует щели в спектре. Видимо причиной нестабильности колебаний является неоптимальное начальное отклонение, которое приводит к смещению соседних атомов. Поиск условий для формирования бризера в этом кристалле будет осуществлен в последующих наших работах. В остальных сплавах колебания были неустойчивы и достаточно быстро разрушались.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе методом молекулярной динамики проанализированы фононные спектры для кристаллов состава Al_nPt_m . Показано, что ряд кристаллов в рамках рассматриваемого формализма и межатомного

потенциала [20], могут иметь щель. Данное условие в совокупности с нелинейностью связей может обеспечить существование высокоамплитудных локализованных мод, например, дискретных бризеров. Это было показано для соответствующих сплавов таблицы 1: AlPt_3 , $\text{AlPt}_3(1)$, $\text{AlPt}_3(2)$, $\text{AlPt}_3(3)$. Что подтверждает наши прошлые работы именно по этому сплаву. Так же установлено, что в сплаве Al_3Pt_5 возможно существование продолжительных высокоамплитудных возбуждений на атоме Al, которые будут рассмотрены детально в последующих работах.

Полученные результаты будут полезны при дальнейшем исследовании сплавов на основе Pt и Al. Разработанные модели будут применены при дальнейших исследованиях нелинейных эффектов в кристаллах различной стехиометрии.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Kuzkin, V. A., and A. M. Krivtsov, "Ballistic resonance and thermalization in the Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou chain at finite temperature," *Physical Review E*, 101, pp. 042209, 2020.
2. Медведев, Н.Н. Локализованные колебательные моды в двумерной модели упорядоченного сплава Pt_3Al / Н.Н. Медведев, М.Д. Старостенков, П.В. Захаров, О.В. Пожидаева // Письма в Журнал технической физики. – 2011. – Т. 37, № 3. – С. 7–15.
3. Чердниченко, А.И. Нелинейная супратрансмиссия в кристалле Pt_3Al при интенсивном внешнем воздействии / А.И. Чердниченко, П.В. Захаров, М.Д. Старостенков, А.М. Ерёмин, М.О. Сысоева // Компьютерные исследования и моделирование. – 2019. – Т. 11, № 1. – С. 109–117.
4. Flach, S., and C. R. Willis, "Discrete breathers," *Physics Reports*, vol. 295, pp. 181, 1998.
5. Flach, S., and A. V. Gorbach, "Computational studies of discrete breathers – from basics to competing length scales," *International Journal of Bifurcation and Chaos. Chaos*, vol. 16, pp. 1645, 2006.
6. Sato, M., and A. J. Sievers, "Direct observation of the discrete character of intrinsic localized modes in an antiferromagnet," *Nature*, vol. 432, pp. 486, 2004.
7. Archilla, J. F. R., Y. Zolotaryuk, Y. A. Kosevich, and Y. Doi, "Nonlinear waves in a model for silicate layers," *Chaos*, 28(8), pp. 083119, 2018.
8. Korznikova, E. A., V. A. Kuzkin, A. M. Krivtsov, A. A. Kudreyko, and S. V. Dmitriev, "Equilibration of sinusoidal modulation of temperature in linear and nonlinear chains," *Physical Review E*, 102(6), pp. 062148, 2020.
9. Semenov, A. S., R. T. Murzaev, Y. V. Bebikhov, A. A. Kudreyko, and S. V. Dmitriev, "New types of one-dimensional discrete breathers in a two-dimensional lattice," *Letters on Materials*, 10(2), pp. 185–188, 2020.
10. Kistanov, A. A., S. V. Dmitriev, A. S. Semenov, V. I. Dubinko, and D. A. Terent'ev, "Interaction of propagating discrete breathers with a vacancy in a two-dimensional crystal," *Technical Physics Letter*, 40, pp. 657–661, 2014.
11. Terentyev, D. A., A. V. Dubinko, V. I. Dubinko, S. V. Dmitriev, E. E. Zhurkin, and M. V. Sorokin, "Interaction of discrete breathers with primary lattice defects in bcc Fe," *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 23, pp. 085007, 2015.
12. Manley, M. E., A. Alatas, F. Trouw, B. M. Leu, J. W. Lynn, Y. Chen, and W. L. Hults, "Intrinsic nature of thermally activated dynamical modes in α -U Nonequilibrium mode creation by x-ray and neutron scattering," *Physical Review B*, 77, pp. 214305, 2008.
13. Захаров, П.В. Молекулярно-динамический анализ транспорта энергии в кристалле Pt_3Al при воздействии в запрещенной зоне спектра / П.В. Захаров, С.В. Дмитриев, Е.А. Корзникова // Письма о материалах. – 2021. – Т. 11, № 3(43). – С. 338–344.
14. Баимова, Ю.А. Двумерные кластеры Дискретных бризеров в графене / Ю.А. Баимова, А.Б. Ямилова, И.П. Лобзенко, С.В. Дмитриев, Г.М. Чечин // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2014. – Т.11, № 4/2. – С. 599–604.
15. Дмитриев, С.В. Дискретные бризеры в кристаллах / С.В. Дмитриев, Е.А. Корзникова, Ю.А. Баимова, М.Г. Веларде // Успехи физических наук. – 2016. – Т. 186, №5. – С. 471–488.
16. The Materials Project [Офф. сайт]. – URL: <https://materialsproject.org/materials> (дата обращения: 14.01.2023).
17. AtomsK [Офф. Сайт]. – URL: <https://atomsk.univ-lille.fr> (дата обращения: 14.01.2023).
18. Kruglov, I., O. Sergeev, and A. Yanilkin, "Energy-free machine learning force field for aluminum," *Scientific Reports*, 7, pp. 8512, 2017.
19. LAMMPS Molecular Dynamics Simulator [Офф. сайт]. – URL: <http://lammps.sandia.gov/> (дата обращения: 14.01.2023).
20. Zhou, X. W., R. A. Johnson, and H. N. G. Wadley, "Misfit-energy-increasing dislocations in vapor-deposited CoFe/NiFe multilayers," *Physical Review B*, 69(14), pp. 144113, 2004.
21. Захаров, П.В. Моделирование взаимодействия дискретных бризеров различного типа в нановолокне кристалла Pt_3Al / П.В. Захаров, М.Д. Старостенков, С.В. Дмитриев, Н.Н. Медведев, А.М. Ерёмин // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2015. – Т. 148, вып. 2(8). – С. 252–257.
22. Медведев, Н.Н. Взаимодействие дискретного бризера в 3D модели Pt_3Al / Н.Н. Медведев, М.Д. Старостенков, П.В. Захаров // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2015. – Т. 12, № 1. – С. 62–67.
23. Захаров, П.В. Компьютерное моделирование нелинейной локализованной колебательной моды большой амплитуды в кристалле Pt_3Al с бивакансией Pt / П.В. Захаров, А.М. Ерёмин, М.Д. Старостенков, А.В. Маркидонов // Компьютерные исследования и моделирование. – 2015. – Т. 7, № 5. – С. 1089–1096.
24. Захаров, П.В. Влияние упругой деформации всестороннего растяжения-сжатия на характеристики дискретного бризера в кристалле Pt_3Al / П.В. Захаров, М.Д. Старостенков, А.М. Ерёмин // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2016. – Т. 13, № 2. – С. 225–331.
25. Мурзаев, Р.Т. Пространственные локализованные колебания в слабоустойчивых состояниях металлических систем / Р.Т. Мурзаев, А.С. Семенов, А.И. Потеев, М.Д. Старостенков, П.В. Захаров, В.В. Кулагина, С.В. Дмитриев // Известия вузов. Физика. – 2021. – Т. 64, № 2. – С. 91–99.

Чердниченко Антон Иванович – преподаватель кафедры математики, физики, информатики Алтайского государственного гуманитарно-педагогического университета им. В.М. Шукшина, Тел. +7 (3854) 33 74 38, E-mail: anton.chered@mail.ru

Ерёмин Александр Михайлович – доцент кафедры естественно-научных дисциплин Бийского технологического института (филиал) Алтайского государственного технического университета им. И.И. Ползунова, кандидат физико-математических наук, доцент, Тел. + 7 (3854) 43 53 29, E-mail: eam77@yandex.ru

Васильев Александр Электроневич – доцент кафедры физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, кандидат физико-математических наук, доцент, Тел. +7 (812) 552 78 17, E-mail: vasiliev_ae@spbstu.ru

Старостенков Михаил Дмитриевич – профессор кафедры физики Алтайского государственного технического университета им. И.И. Ползунова, доктор физико-математических наук, профессор, Тел. +7 (3852) 29 08 52, E-mail: genphys@mail.ru

Захаров Павел Васильевич – профессор кафедры физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, доктор физико-математических наук, доцент, Тел. +7 (812) 552 78 17, E-mail: zakharovpvl@rambler.ru

INVESTIGATION OF NONLINEAR HIGH-AMPLITUDE LATTICE OSCILLATIONS IN Al_nPt_m ALLOYS

A.I. Cherednichenko¹, A.M. Eremin², A.E. Vasiliev³, M.D. Starostenkov⁴, P.V. Zakharov³

¹The Shukshin Altai State Humanities Pedagogical University, Biysk

²Biysk Technological Institute (branch) of Altai State Technical University, Biysk, Russia

³St. Petersburg Polytechnic University of Peter the Great, St. Petersburg

⁴Altai State Technical University, Barnaul

Abstract – Using the method of molecular dynamics, we studied the existence of a discrete breather in model crystals based on Al and Pt with different stoichiometry. In these crystals, the phonon spectrum was calculated, and an analysis was made of the possibility of the existence of discrete breathers in the bulk of the crystal on Al atoms. The simulation was carried out on the basis of the computer program LAMMPS Molecular Dynamics Simulator. Models of Al and Pt alloys with different crystal structures are based on materials from The Materials Project database. The crystals of the sizes necessary for modeling were obtained on the basis of elementary cells from the database of materials using the Atomsk application. To calculate the interatomic interaction, the EAM potential was used, which was obtained by the embedded atom method.

Index terms: molecular dynamics, nonlinear localized mode, discrete breather, phonon spectrum, LAMMPS Molecular Dynamics Simulator, Atomsk, embedded atom method (EAM).

REFERENCES

1. Kuzkin, V. A., and A. M. Krivtsov, "Ballistic resonance and thermalization in the Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou chain at finite temperature," *Physical Review E*, 101, pp. 042209, 2020.
2. Medvedev, N.N. Localized vibrational modes in a two-dimensional model of an ordered Pt_3Al alloy / N.N. Medvedev, M.D. Starostenkov, P.V. Zakharov, O.V. Pozhidaeva // *Letters to the Journal of Technical Physics*. - 2011. - V. 37, no. 3. - P. 7-15.
3. Cherednichenko, A.I. Nonlinear supratransmission in a Pt_3Al crystal under intense external action / A.I. Cherednichenko, P.V. Zakharov, M.D. Starostenkov, A.M. Eremin, M.O. Sysoeva // *Computer Research and Modeling*. - 2019. - V. 11, no. 1. - P. 109–117.
4. Flach, S., and C. R. Willis, "Discrete breathers," *Physics Reports*, vol. 295, pp. 181, 1998.
5. Flach, S., and A. V. Gorbach, "Computational studies of discrete breathers – from basics to competing length scales," *International Journal of Bifurcation and Chaos. Chaos*, vol. 16, pp. 1645, 2006.
6. Sato, M., and A. J. Sievers, "Direct observation of the discrete character of intrinsic localized modes in an antiferromagnet," *Nature*, vol. 432, pp. 486, 2004.
7. Archilla, J. F. R., Y. Zolotaryuk, Y. A. Kosevich, and Y. Doi, "Nonlinear waves in a model for silicate layers," *Chaos*, 28(8), pp. 083119, 2018.
8. Korznikova, E. A., V. A. Kuzkin, A. M. Krivtsov, A. A. Kudreyko, and S. V. Dmitriev, "Equilibration of sinusoidal modulation of temperature in linear and nonlinear chains," *Physical Review E*, 102(6), pp. 062148, 2020.
9. Semenov, A. S., R. T. Murzaev, Y. V. Bebikhov, A. A. Kudreyko, and S. V. Dmitriev, "New types of one-dimensional discrete breathers in a two-dimensional lattice," *Letters on Materials*, 10(2), pp. 185–188, 2020.
10. Kistanov, A. A., S. V. Dmitriev, A. S. Semenov, V. I. Dubinko, and D. A. Terent'ev, "Interaction of propagating discrete breathers with a vacancy in a two-dimensional crystal," *Technical Physics Letter*, 40, pp. 657–661, 2014.
11. Terentyev, D. A., A. V. Dubinko, V. I. Dubinko, S. V. Dmitriev, E. E. Zhurkin, and M. V. Sorokin, "Interaction of discrete breathers with primary lattice defects in bcc Fe," *Modeling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 23, pp. 085007, 2015.
12. Manley, M. E., A. Alatas, F. Trouw, B. M. Leu, J. W. Lynn, Y. Chen, and W. L. Hults, "Intrinsic nature of thermally activated dynamical modes in α -U Nonequilibrium mode creation by x-ray and neutron scattering," *Physical Review B*, 77, pp. 214305, 2008.
13. Zakharov, P.V. Molecular Dynamics Analysis of Energy Transport in a Pt_3Al Crystal under Exposure in the Spectrum Forbidden Zone / P.V. Zakharov, S.V. Dmitriev, E.A. Korznikova // *Letters on materials*. - 2021. - V. 11, no. 3 (43). - P. 338–344.
14. Baimova, Yu.A. Two-dimensional clusters of discrete breathers in graphene / Yu.A. Baimova, A.B. Yamilova, I.P. Lobzenko, S.V. Dmitriev, G.M. Chechin // *Fundamental problems of modern materials science*. - 2014. - V. 11, no. 4/2. - P. 599-604.
15. Dmitriev, S.V. Discrete breathers in crystals / S.V. Dmitriev, E.A. Korznikova, Yu.A. Baimova, M.G. Velarde // *Uspekhi fizicheskikh nauk*. - 2016. - V. 186, no. 5. - P. 471-488.
16. The Materials Project [Offic. website]. – URL: <https://materialsproject.org/materials> (date of access: 01.14.2023).
17. Atomsk [Offic. Website]. – URL: <https://atomsk.univ-lille.fr> (date of access: 01.14.2023).
18. Kruglov, I., O. Sergeev, and A. Yanilkin, "Energy-free machine learning force field for aluminum," *Scientific Reports*, 7, pp. 8512, 2017.
19. LAMMPS Molecular Dynamics Simulator [Offic. website]. – URL: <http://lammps.sandia.gov/> (date of access: 01.14.2023).
20. Zhou, X. W., R. A. Johnson, and H. N. G. Wadley, "Misfit-energy-increasing dislocations in vapor-deposited CoFe/NiFe multilayers," *Physical Review B*, 69(14), pp. 144113, 2004.
21. Zakharov, P.V. Simulation of the interaction of discrete breathers of various types in a nanofiber of a Pt_3Al crystal / P.V. Zakharov, M.D. Starostenkov, S.V. Dmitriev, N.N. Medvedev, A.M. Eremin // *Journal of Experimental and Theoretical Physics*. - 2015. - V. 148, no. 2(8). - P. 252–257.
22. Medvedev, N.N. Discrete breather interaction in 3D Pt_3Al model / N.N. Medvedev, M.D. Starostenkov, P.V. Zakharov // *Fundamental problems of modern materials science*. - 2015. - V. 12, no. 1. - P. 62–67.
23. Zakharov, P.V. Computer simulation of a nonlinear localized high-amplitude vibrational mode in a Pt_3Al crystal with a Pt divacancy / P.V. Zakharov, A.M. Eremin, M.D. Starostenkov, A.V. Markidonov // *Computer Research and Modeling*. - 2015. - V. 7, no. 5. - P. 1089–1096.

24. Zakharov, P.V. Influence of elastic deformation of all-round tension-compression on the characteristics of a discrete breather in a Pt_3Al crystal / P.V. Zakharov, M.D. Starostenkov, A.M. Eremin // Fundamental problems of modern materials science. – 2016. – V. 13, no. 2. – P. 225–331.

25. Murzaev, R.T. Spatial localized oscillations in weakly stable states of metallic systems // R.T. Murzaev, A.S. Semenov, A.I. Potekaev, M.D. Starostenkov, P.V. Zakharov, V.V. Kulagina, S.V. Dmitriev // News of higher educational institutions. Physics. - 2021. - V. 64, no. 2. - P. 91–99.

Cherednichenko Anton Ivanovich – lecturer in the department of mathematics, physics, informatics, Biysk, The Shukshin Altai State Humanities Pedagogical University, +7 (3854) 33 74 38, e-mail: anton.chered@mail.ru

Eremin Alexander Mikhailovich – associate professor of the department of natural sciences, Biysk, Biysk Technological Institute (branch) of the Altai State Technical University, +7 (3854) 43 53 29, e-mail: eam77@yandex.ru

Vasiliev Alexander Electronovich – associate professor of the department of physics, Saint Petersburg, St. Petersburg Polytechnic University of Peter the Great, +7 (812) 552 78 17, e-mail: vasiliev_ae@spbstu.ru

Starostenkov Mikhail Dmitrievich – professor of the department of physics, Barnaul, Altai State Technical University, +7 (3852) 29 08 52, e-mail: genphys@mail.ru

Zakharov Pavel Vasilievich – professor of the department of physics, Saint Petersburg, St. Petersburg Polytechnic University of Peter the Great, +7 (812) 552 78 17, e-mail: zakharovpvl@rambler.ru