

ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ ВЫСОКОАМПЛИТУДНЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ CuPt₇

¹ЕРЁМИН А. М., ¹ЗАХАРОВ П. В., ²СТАРОСТЕНКОВ М. Д., ³МАНАКОВ Н. А.,
¹ЧЕРЕДНИЧЕНКО А. И.

¹ Алтайский государственный гуманитарно-педагогический университет им. В.М. Шукшина, 659333, Алтайский край, г. Бийск, ул. Короленко, 53

² Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова, 656038, Алтайский край, г. Барнаул, пр. Ленина, 46

³ Оренбургский государственный университет, 460018, г. Оренбург, пл. Победы, 13

АННОТАЦИЯ. В работе анализируются структура и свойства кристалла CuPt₇ на предмет возможности существования нелинейных высокоамплитудных колебаний легкой компоненты сплава посредством метода молекулярной динамики. Рассчитаны и проанализированы плотности фоновых состояний кристалла для двух видов его структур. Продемонстрировано, что фоновая система кристалла имеет узкую запрещенную зону для триклинной структуры. Выявлены зависимости возможности существования высокоамплитудных колебаний от начальных условий. Показано, что такие колебания возможны при начальном отклонении атома Cu из положения равновесия на величину более 0,95 Å для ГЦК CuPt₇. Такие колебания не являются дискретными бризерами. Для таких осцилляторов получены их время существования, объем запасенной энергии и прочие характеристики, позволяющие охарактеризовать нелинейные высокоамплитудные колебания решетки.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: нелинейная мода, дискретный бризер, колебания решетки, ГЦК кристалл, молекулярная динамика.

ВВЕДЕНИЕ

Концепция локализации энергии на узлах идеальных кристаллов активно начала развиваться с работ [1, 2], в дальнейшем данное направление переросло в теорию дискретных бризеров и сопутствующих направлений [3]. Такие объекты как дискретные бризеры могут стать основой для реализации ряда идей, в частности идеи теплового транзистора, предложенного Manley в работе [4], или радиочастотных фильтров, магнетометров и т.д. [5 – 9]. С понятием дискретный бризер тесно связано понятие нелинейной локализованной моды, в ранних работах они часто использовались как синонимы. Здесь мы рассмотрим оба этих термина применительно к высокоамплитудным колебаниям решетки кристалла CuPt₇.

Выбор объекта исследования в виде сплава CuPt₇ обусловлен рядом факторов. В первую очередь сплавы на основе Pt обладают рядом интересных свойств, к которым можно отнести устойчивость к коррозии и высокую температуру плавления, что делает их перспективными к применению в условиях космоса. Однако интенсивное внешнее воздействие в виде облучения может приводить к возбуждению таких объектов как дискретные бризеры с мягким типом нелинейности [10 – 12]. Они могут вносить вклад в свойства данных кристаллов [13 – 18]. Под дискретными бризерами понимают пространственно локализованные высокоамплитудные возбуждения кристаллической решетки, вызванные ангармоничностью межатомных сил, что приводит к зависимости частоты колебаний атомов от их амплитуд. Для существования таких объектов в кристаллах необходимо соответствие кристалла ряду требований: это наличие запрещенной зоны в фоновом спектре кристалла, а также, в случае биатомных кристаллов, существенной разницы в массах компонент сплава. В то же время стоит отметить, что могут существовать так называемые погруженные дискретные бризеры, частота которых может входить в

фононный спектр кристалла [3]. В случае, если частота уменьшается при увеличении амплитуды колебаний, говорят о дискретных бризерах с мягким типом нелинейности, если увеличивается – о дискретных бризерах с жестким типом нелинейности.

В отличие от дискретных бризеров, нелинейные локализованные моды имеют относительно небольшое время жизни, порядка нескольких десятков периодов колебаний решетки. Они достаточно быстро рассеивают свою энергию в виде тепловых колебаний решетки на соседние атомы. Однако их время существования на порядок превосходит обычные тепловые колебания, что вызвано ангармоничностью межатомных сил.

МОДЕЛЬ И МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

Рассматриваемые нами модели представляет собой объемный ГЦК кристалл CuPt₇, который содержал 23328 частиц (рис. 1), взаимодействующих посредством потенциала, полученного методом погруженного атома (EAM-потенциал) [19]. Рассматривались два варианта решетки с ортогональными базисными векторами (рис. 1, *a*) и тригональная конфигурация (рис. 1, *b*) [20].

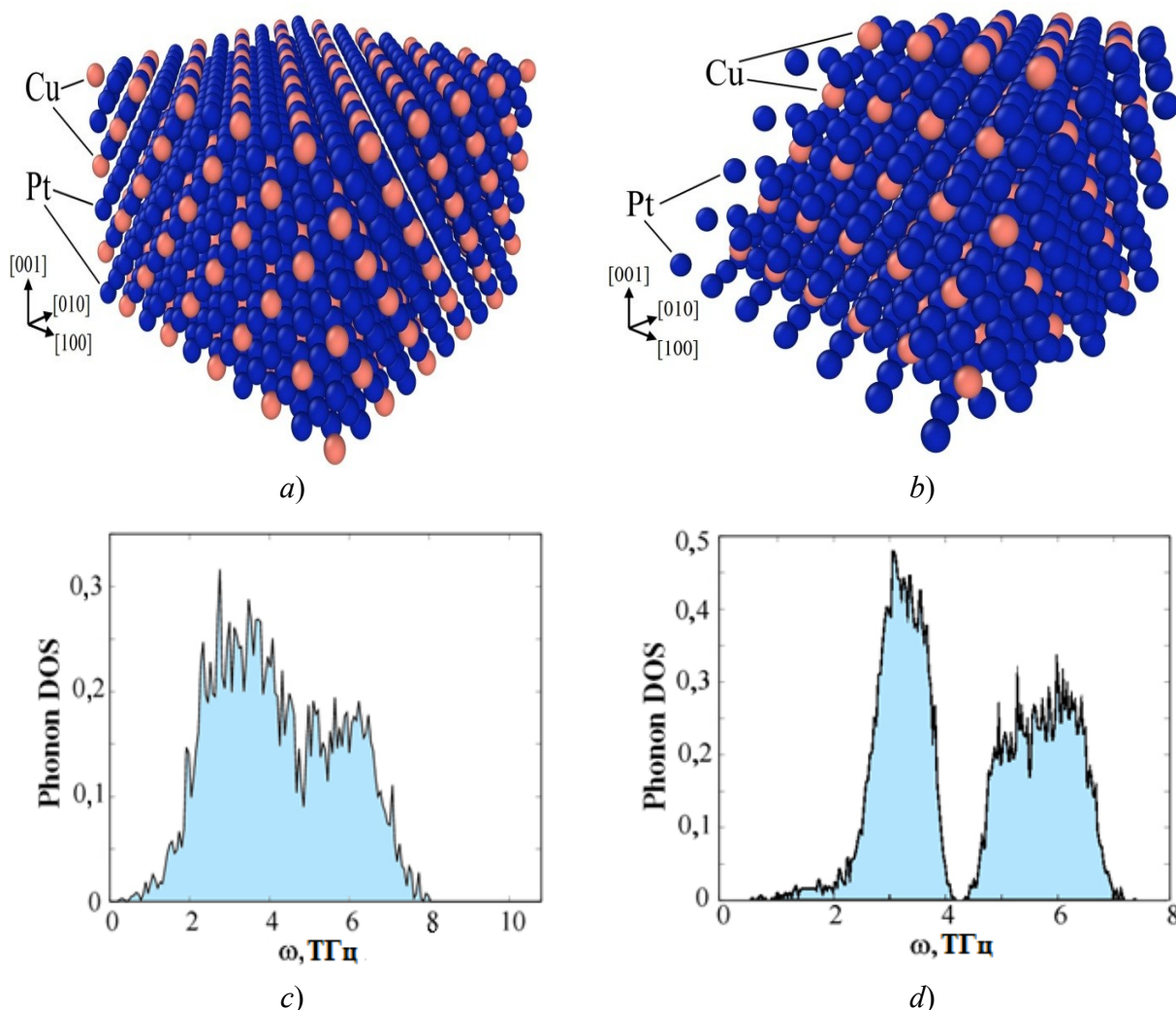


Рис. 1. Структура кристалла CuPt₇:

a) – с ортогональными базисными векторами; *b*) – тригональная структура [19];
c), *d*) – соответствующие плотности фононных состояний моделей кристаллов

Выбор потенциала и обоснованность его использования для конкретной задачи является важным этапом при моделировании. Полная энергия E кристалла может быть выражена как: $E = \frac{1}{2} \sum_{i,j,i \neq j} \phi_{ij}(r_{ij}) + \sum_i F_i(\rho_i)$, 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 . Электронную плотность можно рассчитать по формуле: $\rho_i = \sum_{j,j \neq i} f_j(r_{ij})$, где $f_j(r_{ij})$ – электронная плотность на участке атома i , находящегося на расстоянии r_{ij} от атома j . Моделирование осуществлялось посредством пакета LAMMPS [21]. Уравнения движения атомов интегрировались с использованием численной схемы четвертого порядка точности с шагом интегрирования 0,5 фс.

Для расчетов плотности фононных состояний также использовался программный пакет LAMMPS, который включает необходимые для этих целей процедуры, базирующиеся на преобразовании Фурье автокорреляционных функций перемещений атомов от времени.

Результаты для решетки с ортогональными базисными векторами приведен на рис. 1, c , для тригональной структуры на рис. 1, d .

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЯ

Анализ структуры кристалла и рассчитанного фононного спектра позволяет говорить о возможном существовании таких объектов, как дискретный бризер с мягким типом нелинейности в CuPt₇. Так в кристалле, представленном на рис. 1, b , присутствует запрещенная зона, что является необходимым условием для существования дискретного бризера. Кроме того более легкие атомы меди окружены тяжелыми атомами платины, что также должно оказывать благоприятное влияние на локализацию колебаний легкой подрешетки. Однако масса меди меньше массы платины менее чем в 3 раза, что зачастую недостаточно для формирования условия существования дискретного бризера.

Далее была получена зависимость частоты колебаний атомов Cu от амплитуды для обоих приведенных типов сингоний кристаллов. В качестве примера рассмотрим колебания вдоль направления $\langle 001 \rangle$.

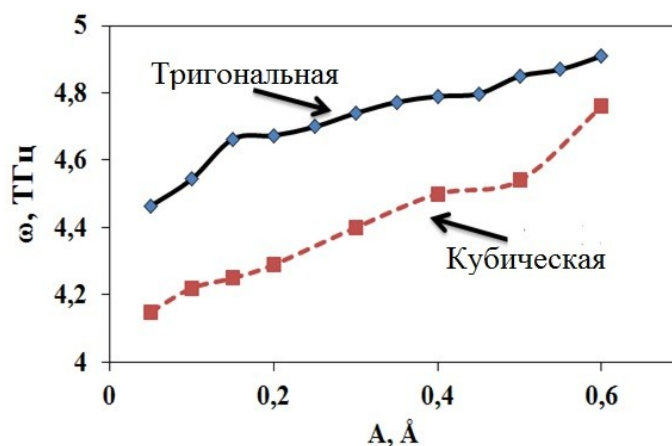


Рис. 2. Зависимость частоты колебаний атома Cu в кристалле CuPt₇ от амплитуды для тригональной и кубической сингоний решеток CuPt₇

Полученные результаты на рис. 2 говорят о жестком типе нелинейности колебаний для обоих сингоний кристалла CuPt₇, что не позволяет попасть частоте колебаний атома меди в запрещенную зону фононного спектра для тригональной сингонии кристалла. Тем самым, исключается возможность возбуждения дискретных бризеров с мягким типом нелинейности. При этом отметим, что при достаточно больших амплитудах, для этих структур кристаллов наблюдались продолжительные, но затухающие колебания атомов Cu. Наиболее ярко это проявлялось в кубическом кристалле, в силу более высокого порядка симметрии. В этом случае можно говорить не о дискретных бризерах, а о нелинейных высокоамплитудных колебаниях узлов решетки в бездефектном кристалле CuPt₇.

Далее на примере кубического кристалла рассмотрим особенности таких нелинейных мод в CuPt_7 . Частоты их колебаний лежат в спектре кристалла, поэтому достаточно быстро происходит рассеивание энергии на соседние атомы и далее по всему кристаллу. На рис. 3 приведена зависимость координаты атома от времени, вдоль направления $\langle 001 \rangle$ для различных начальных амплитуд: $0,3 \text{ \AA}$; $0,5 \text{ \AA}$; $0,73 \text{ \AA}$; $0,96 \text{ \AA}$; $1,1 \text{ \AA}$. Наиболее устойчивые колебания атома меди были получены для начальных амплитуд $0,96 \text{ \AA}$. Для других начальных амплитуд колебания затухают гораздо быстрее.

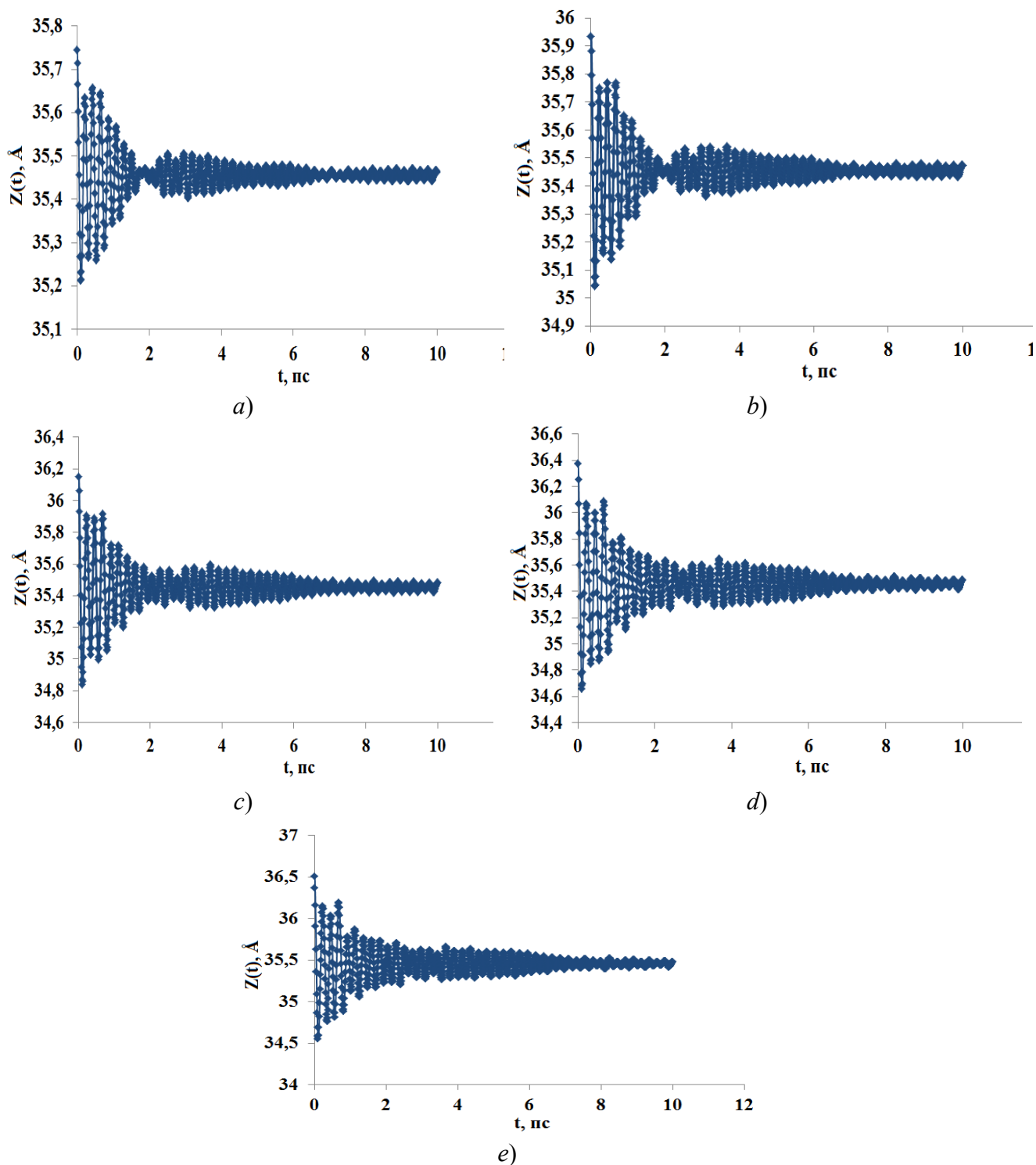


Рис. 3. Изменение координаты атома Cu от времени относительно положения равновесия для начальных амплитуд:
a) – $0,3 \text{ \AA}$; b) – $0,5 \text{ \AA}$; c) – $0,73 \text{ \AA}$; d) – $0,96 \text{ \AA}$; e) – $1,1 \text{ \AA}$

По результатам моделирования такие нелинейные моды могут локализовать энергию порядка 1 эВ. Время существования таких колебаний составляет величину порядка 6 – 10 пикосекунд, что на порядок превосходит обычные высокоамплитудные тепловые флуктуации в таких кристаллах. Важно заметить, что основное рассеивание энергии происходит на первых 2 – 5 периодах колебаний. Это вызвано смещением соседних атомов Pt из узлов кристаллической решетки. Дальнейшая релаксация структуры приводит к согласованным колебаниям.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, методом молекулярной динамики в работе изучен кристалл CuPt₇ на предмет существования в нем дискретных бризеров с мягким типом нелинейности и нелинейных долгоживущих мод. Показано, что в данном кристалле невозможно возбуждение бризеров с мягким типом нелинейности. При определенных начальных амплитудах время жизни отдельных мод может существенно превышать среднее время существования высокоамплитудных тепловых колебаний атомов. Носителями таких мод являются атомы Cu, наиболее ярко это проявляется для кристалла с кубической сингонией в виду более высокого порядка симметрии.

Полученные результаты могут быть полезны при создании материалов с заранее заданными свойствами, в частности, управление тепловыми потоками в материалах, теплоемкостью кристаллов, откликом материала на различные внешние воздействия. Исследуемое явление локализации энергии также может внести вклад в теорию колебаний решетки и дискретных бризеров, что дополнит имеющуюся картину солитоноподобных объектов в идеальных решеточных структурах.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ и правительства Алтайского края в рамках научного проекта № 18-42-220002 p_a.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Долгов А. С. О локализации колебаний в нелинейной кристаллической структуре // Физика твердого тела. 1986. Т. 28, № 6. С. 1641-1644.
2. Sievers A. J., Takeno S. Intrinsic localized modes in anharmonic crystals // Physical Review Letters, 1988, vol. 61, no. 8, pp. 970-973.
3. Дмитриев С. В., Корзникова Е. А., Баймова Ю. А., Веларде М. Г. Дискретные бризеры в кристаллах // Успехи физических наук. 2016. Т. 186, № 5. С. 471-488. <https://doi.org/10.3367/UFNr.2016.02.037729>
4. Manley M. E., Sievers A. J., Lynn J. W., Kiselev S. A., Agladze N. I., Chen Y., Llobet A., Alatas A. Intrinsic localized modes observed in the high temperature vibrational spectrum of NaI // Physical Review B, 2009, vol. 79, iss. 13, pp. 134304.
5. Канаков О. И., Флах С., Шалфеев В. Д. Введение в теорию дискретных бризеров // Известия высших учебных заведений. Прикладная нелинейная динамика. 2008. Т. 16, № 3. С. 112-128.
6. Eisenberg H. S., Silberberg Y., Morandotti R., Boyd A. R., Aitchison J. S. Discrete spatial optical solitons in waveguide arrays // Physical Review Letters, 1998, vol. 81, iss. 16, pp. 3383.
7. Kivshar Yu. S., Agrawal G. P. Optical solitons: From Fibers to Photonic Crystals. Amsterdam: Academic Press, 2003. 540 p.
8. Miroshnichenko A. E., Flach S., Fstul M. V., Zolotaryuk Y., Page J. B. Breathers in Josephson junction ladders: resonances and electromagnetic wave spectroscopy // Physical Review E, 2001, vol. 64, pp. 066601.
9. Schwarz U. T., English L. Q., Sievers A. J. Experimental generation and observation of intrinsic localized spin wave modes in an antiferromagnet // Physical Review Letters, 1999, vol. 83, iss. 1, pp. 223.
10. Захаров П. В., Старостенков М. Д., Ерёмин А. М., Корзникова Е. А., Дмитриев С. В. Возбуждение щелевых дискретных бризеров в кристалле состава A₃B потоком частиц // Физика твердого тела. 2017. Т. 59, № 2. С. 217-222. <http://dx.doi.org/10.21883/FTT.2017.02.44037.281>
11. Eremin A. M., Zakharov P. V., Starostenkov M. D. Statistical characteristics of a quasi-breather with a hard type of nonlinearity in a CuAu crystal // Materials Physics and Mechanics, 2018, vol. 40, iss. 1, pp. 104-111.
12. Zakharov P. V., Korznikova E. A., Dmitirev S. V., Ekomasov E. G., Zhou K. Surface discrete breathers in Pt₃Al intermetallic alloy // Surface Science, 2019, vol. 679, pp. 1-5.
13. Медведев Н. Н., Старостенков М. Д., Маркидонов А. В., Захаров П. В. Волны, возникающие при рекомбинации пар френкеля в двумерных модельных решетках металлов и их влияние на дрейф агрегатов точечных дефектов // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2009. Т. 6, № 2. С. 8-13.

14. Захаров П. В., Полетаев Г. М., Старостенков М. Д., Чередниченко А. И. Моделирование прохождения ударных волн через границу раздела двудольных биметаллических частиц Ni-Al // Письма о материалах. 2017. Т. 7, № 3. С. 296-302.
15. Захаров П. В., Дмитриев С. В., Старостенков М. Д., Ерёмин А. М., Корзникова Е. А. Стационарные квазибризеры в монокристаллах металлов с ГЦК-структурой // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 2017. Т. 152, № 5. С. 1073-1080. <https://doi.org/10.7868/S0044451017110220>
16. Захаров П. В., Старостенков М. Д., Дмитриев С. В. Дискретные бризеры в биатомных кристаллах состава АВ и А₃В // Известия Российской академии наук. Серия физическая. 2017. Т. 81, № 11. С. 1471-1476. <https://doi.org/10.7868/S0367676517110072>
17. Потекаев А. И., Старостенков М. Д., Дмитриев С. В., Захаров П. В., Ерёмин А. М., Кулагина В. В. Динамика дискретных бризеров в кристалле Pt₃Al // Известия высших учебных заведений. Физика. 2015. Т. 58, № 9. С. 136-140.
18. Чередниченко А. И., Захаров П. В., Старостенков М. Д., Сысоева М. О., Ерёмин А. М. Нелинейная супратрансмиссия в кристалле Pt₃Al при интенсивном внешнем воздействии // Компьютерные исследования и моделирование. 2019. Т. 11, № 1. С. 109-117.
19. Zhou X. W., Johnson R. A., and Wadley H. N. G. Misfit-energy-increasing dislocations in vapordeposited CoFe/NiFe multilayers // Physical Review B, 2004, vol. 69, iss. 14, pp. 144113.
20. Material Details. CuPt₇. URL: <https://www.materialsproject.org/materials/mp-12608/> (дата обращения 14.07.2019).
21. LAMMPS Molecular Dynamics Simulator. URL: <http://lammps.sandia.gov/> (дата обращения 14.07.2019).

MOLECULAR DYNAMICS STUDY OF HIGH-AMPLITUDE EXCITATIONS OF THE CuPt₇ CRYSTAL LATTICE

¹Eremin A. M., ¹Zakharov P. V., ²Starostenkov M. D., ³Manakov N. A., ¹Cherednichenko A. I.

¹The Shushung Altai State Humanities Pedagogical University, Biysk, Russia

²Altai State Technical University, Barnaul, Russia

³Orenburg State University, Orenburg, Russia

SUMMARY. By method of molecular dynamics in the paper analyzes the structure and properties of the CuPt₇ crystal for the possibility of the existence of nonlinear high-amplitude vibrations of the light alloy component. The densities of phonon states for two types of structures crystal are calculated and analyzed. It is demonstrated that the phonon system of the crystal has a narrow forbidden band for the triclinic structure. The dependences of the possibility of the existence of high-amplitude oscillations on the initial conditions are revealed. It is shown that such oscillations are possible with the initial deviation of the Cu atom from the equilibrium position by more than 0.95 Å for FCC CuPt₇. Such oscillations are not discrete breathers. For such oscillators, their lifetime, the amount of stored energy, and other characteristics that characterize nonlinear high-amplitude lattice vibrations were obtained. The models considered by us are a bulk FCC CuPt₇ crystal, which contained 23328 particles, interacting through the potential obtained by the embedded atom method (EAM potential). Two variants of the lattice with orthogonal basis vectors and the trigonal configuration were considered. The simulation was carried out using the LAMMPS package. The equations of motion of atoms were integrated using a fourth-order numerical scheme of accuracy with an integration step of 0.5 fs. For calculating the density of phonon states, the LAMMPS software package was also used, which includes the necessary procedures for these purposes, based on the Fourier transform of the autocorrelation functions of atom displacements with time. It is shown that excitation of breathers with a soft type of nonlinearity is not possible in this crystal. Moreover, for certain initial amplitudes, the lifetime of individual modes can significantly exceed the average time for the existence of high-amplitude thermal oscillations of atoms. The carriers of such modes are Cu atoms; this is most pronounced for a crystal with a cubic system in the form of a higher order of symmetry. The results obtained can be useful in creating materials with predetermined properties, and can also contribute to the theory of lattice vibrations and discrete breathers.

KEYWORDS: nonlinear mode, discrete breather, lattice vibrations, FCC crystal, molecular dynamics.

REFERENCES

1. Dolgov A. S. O lokalizatsii kolebaniy v nelineynoy kristallicheskoj strukture [About localization of vibrations in a nonlinear crystalline structure]. *Fizika tverdogo tela* [Solid State Physics], 1986, vol. 28, no. 6, pp. 1641-1644.
2. Sievers A. J., Takeno S. Intrinsic localized modes in anharmonic crystals. *Physical Review Letters*, 1988, vol. 61, no. 8, pp. 970-973. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.61.970>
3. Dmitriev S. V., Korznikova E. A., Baimova Y. A., Velarde M. G. Discrete breathers in crystals. *Physics-Uspekhi*, 2016, vol. 59, no. 5, pp. 446-461. <https://doi.org/10.3367%2FUFNe.2016.02.037729>
4. Manley M. E., Sievers A. J., Lynn J. W., Kiselev S. A., Agladze N. I., Chen Y., Llobet A., Alatas A. Intrinsic localized modes observed in the high temperature vibrational spectrum of NaI. *Physical Review B*, 2009, vol. 79, iss. 13, pp. 134304. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.79.134304>

5. Kanakov O. I., Flakh S., Shalfeev V. D. Vvedenie v teoriyu diskretnykh brizerov [Introduction to discrete breathers theory]. *Izvestiya vysshih uchebnykh zavedeniy. Prikladnaya nelineynaya dinamika* [Izvestiya VUZ. Applied Nonlinear Dynamics], 2008, vol. 16, no. 3, pp. 112-128.
6. Eisenberg H. S., Silberberg Y., Morandotti R., Boyd A. R., Aitchison J. S. Discrete spatial optical solitons in waveguide arrays. *Physical Review Letters*, 1998, vol. 81, iss. 16, pp. 3383. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.81.3383>
7. Kivshar Yu. S., Agrawal G. P. *Optical solitons: From Fibers to Photonic Crystals*. Amsterdam: Academic Press Publ., 2003. 540 p.
8. Miroschnichenko A. E., Flach S., Fistul M. V., Zolotaryuk Y., Page J. B. Breathers in Josephson junction ladders: resonances and electromagnetic wave spectroscopy. *Physical Review E*, 2001, vol. 64, pp. 066601. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.64.066601>
9. Schwarz U. T., English L. Q., Sievers A. J. Experimental generation and observation of intrinsic localized spin wave modes in an antiferromagnet. *Physical Review Letters*, 1999, vol. 83, iss. 1, pp. 223. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.83.223>
10. Zakharov P. V., Starostenkov M. D., Eremin A. M., Korznikova E. A., Dmitriev S. V. Excitation of gap discrete breathers in an A_3B crystal with a flux of particles. *Physics of the Solid Stat*, 2017, vol. 59, no. 2, pp. 223-228. <https://doi.org/10.1134/S1063783417020342>
11. Eremin A. M., Zakharov P. V., Starostenkov M. D. Statistical characteristics of a quasi-breather with a hard type of nonlinearity in a CuAu crystal. *Materials Physics and Mechanics*, 2018, vol. 40, iss. 1, pp. 104-111. <https://doi.org/10.18720/MPM.4012018.12>
12. Zakharov P. V., Korznikova E. A., Dmitriev S. V., Ekomasov E. G., Zhou K. Surface discrete breathers in Pt_3Al intermetallic alloy. *Surface Science*, 2019, vol. 679, pp. 1-5. <https://doi.org/10.1016/j.susc.2018.08.011>
13. Medvedev N. N., Starostenkov M. D., Markidonov A. V., Zakharov P. V. Volny, vznikayushchie pri rekombinatsii par frenkelya v dvumernykh model'nykh reshetkakh metallov i ikh vliyaniye na dreyf agregatov tochechnykh defektov [Waves arising from the recombination of Frenkel pairs in two-dimensional model metal lattices and their influence on the drift of point defect aggregates]. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya* [Fundamental problems of modern materials science], 2009, vol. 6, no. 2, pp. 8-13.
14. Zakharov P. V., Poletaev G. M., Starostenkov M. D., Cherednichenko A. I. Modelirovaniye prokhozhdeniya udarnykh voln cherez granitsu razdela dvudol'nykh bimetallicheskiy chastits Ni-Al [Simulation of the shock waves propagation through the interface of bipartite bimetallic Ni-Al particles]. *Pis'ma o materialakh* [Letters on Materials], 2017, vol. 7, no. 3, pp. 296-302. <https://doi.org/10.22226/2410-3535-2017-3-296-302>
15. Zakharov P. V., Eremin A. M., Starostenkov M. D., Dmitriev S. V., Korznikova E. A. Stationary quasi-breathers in monatomic FCC metals. *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 2017, vol. 125, no. 5, pp. 913-919. <https://doi.org/10.1134/S1063776117100181>
16. Zakharov P. V., Starostenkov M. D., Dmitriev S. V. Discrete breathers in biatomic crystals of AB and A_3B composition. *Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics*, 2017, vol. 81, no. 11, pp. 1322-1326. <https://doi.org/10.3103/S1062873817110211>
17. Potekaev A. I., Starostenkov M. D., Dmitriev S. V., Zakharov P. V., Eremin A. M., Kulagina V. V. Dynamics of discrete breathers in a Pt_3Al crystal. *Russian Physics Journal*, 2016, vol. 58, no. 9, pp. 1353-1357. <https://doi.org/10.1007/s11182-016-0654-6>
18. Cherednichenko A. I., Zakharov P. V., Starostenkov M. D., Sysoeva M. O., Eremin A. M. Nelineynaya supratransmissiya v kristalle Pt_3Al pri intensivnom vneshnem vozdeystvii [Nonlinear supratransmission in a Pt_3Al crystal at intense external influence]. *Komp'yuternye issledovaniya i modelirovaniye* [Computer Research and Modeling], 2019, vol. 11, no. 1, pp. 109-117. <https://doi.org/10.20537/2076-7633-2019-11-1-109-117>
19. Zhou X. W., Johnson R. A., and Wadley H. N. G. Misfit-energy-increasing dislocations in vapordeposited CoFe/NiFe multilayers. *Physical Review B*, 2004, vol. 69, iss. 14, pp. 144113. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.69.144113>
20. Material Details. CuPt₇. URL: <https://www.materialsproject.org/materials/mp-12608/> (accessed June 14, 2019). <https://doi.org/10.17188/1189009>
21. LAMMPS Molecular Dynamics Simulator. URL: <http://lammps.sandia.gov/> (accessed June 14, 2019).

Ерёмин Александр Михайлович, кандидат физико-математических наук, доцент, доцент кафедры математики, физики, информатики АГТПУ им. В.М. Шукина, тел. (3854) 33-74-38, e-mail: eam77@yandex.ru

Захаров Павел Васильевич, доктор физико-математических наук, доцент, заведующий кафедрой математики, физики, информатики АГТПУ им. В.М. Шукина, тел. (3854) 33-74-38, e-mail: zakharovpv@rambler.ru

Старostenkov Михаил Дмитриевич, доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой физики АлтГТУ им. И.И. Ползунова, тел. (3852) 29-08-52, e-mail: genphys@mail.ru

Манаков Николай Александрович, доктор физико-математических наук, профессор, профессор кафедры физики и методики преподавания физики ОГУ, тел. (3532) 37-24-39, e-mail: manakov2004@mail.ru

Чередниченко Антон Иванович, магистрант кафедры математики, физики, информатики АГТПУ им. В.М. Шукина, тел. (3854) 33-74-38, e-mail: anton.chered@mail.ru