

Научная статья

01.04.07 – Физика конденсированного состояния (физико-математические науки)

УДК 538.913

doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2021.02.006

**АНАЛИЗ ЕАМ И МЕАМ ПОТЕНЦИАЛОВ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ
ЛОКАЛИЗОВАННЫХ СОСТОЯНИЙ КРИСТАЛЛОВ Ni_3Al И Pt_3Al** **Антон Иванович Чередниченко^{1†}, Павел Васильевич Захаров²,
Михаил Дмитриевич Старостенков³, Александр Михайлович Ерёмин⁴, Гоцзян Донг⁵**^{1,4} Алтайский государственный гуманитарно-педагогический университет им. В.М. Шукшина, ул. Владимира Короленко, 53, 659333, Бийск, Россия² Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, ул. Политехническая, 29, 195251, Санкт-Петербург, Россия³ Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова, пр. Ленина, 46, 656038, Барнаул, Россия⁵ Яньшанский университет, Циньхуандао, 066004, Китай[†] anton.chered@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-8974-7538>zakharovpvl@rambler.ru, <https://orcid.org/0000-0002-6410-1594>genphys@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-6326-7613>eam77@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0002-3453-2860>dgi@ysu.edu.cn, <https://orcid.org/0000-0001-9123-8599>

Аннотация. Построение термодинамических компьютерных моделей реальных сплавов базируется в первую очередь на выборе потенциала взаимодействия частиц. Зачастую от выбора потенциала во многом зависит конечный результат. Потенциал должен качественно и максимально точно численно описывать основные свойства рассматриваемых материалов. Целью данной работы является численный анализ свойств кристаллов Ni_3Al и Pt_3Al при использовании потенциалов, полученных методом погруженного атома. Рассматриваются классические потенциалы типа ЕАМ, а также модифицированные потенциалы МЕАМ с учетом направленных связей. Произведены расчеты параметров решетки, фононных спектров, упругих констант, а также температур плавления предложенных ГЦК интерметаллидов со сверхструктурой L1_2 . Максимально точное описание свойств кристаллов потенциалами позволяет строить реалистичные термодинамические модели, обладающие необходимой степенью достоверности при изучении локализованных состояний кристаллических решеток. Рассматриваемые в работе сплавы имеют широкое применение, в том числе при интенсивных внешних воздействиях. Это приводит к проявлению нелинейности связей и формированию различных локализованных состояний как в объеме кристаллов, так и на его поверхности. В частности, возможно формирование уединенных вол, нелинейных локализованных мод, дефектных структур. Полученные результаты свидетельствуют о том, что все рассмотренные потенциалы удовлетворительно описывают основные свойства и могут быть использованы при исследовании динамики решетки в объеме кристалла. В тоже время при исследовании поверхностных эффектов и при граничных параметрах температуры и давления предпочтительными выглядят потенциалы МЕАМ.

Ключевые слова: потенциал взаимодействия, метод погруженного атома, локализованные состояния, молекулярная динамика, нелинейная динамика.

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект № 21-12-00275.

Для цитирования: Чередниченко А.И., Захаров П.В., Старостенков М.Д., Ерёмин А.М., Донг Г. Анализ ЕАМ и МЕАМ потенциалов для моделирования локализованных состояний кристаллов Ni_3Al и Pt_3Al // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2021. Т. 18, № 2. С. 188–195. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2021.02.006.

Original article

ANALYSIS OF EAM AND MEAM POTENTIALS FOR MODELING LOCALIZED STATES OF Ni_3Al AND Pt_3Al CRYSTALS

Anton I. Cherednichenko^{1†}, Pavel V. Zakharov², Mikhail D. Starostenkov³,
Alexander M. Eremin⁴, Guojiang Dong⁵

^{1,4} Shukshin Altai State University for Humanities and Pedagogy, Vladimira Korolenko Str., 53, Biysk, 659333, Russia

² Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, Polytechnicheskaya Str., 29, St. Petersburg, 195251, Russia

³ I.I. Polzunov Altai State Technical University, Lenin Pr., 46, Barnaul, 656038, Russia

⁵ Yanshan University, Qinhuangdao, 066004, China

[†] anton.chered@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-8974-7538>

² zakharovpv1@rambler.ru, <https://orcid.org/0000-0002-6410-1594>

³ genphys@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-6326-7613>

⁴ eam77@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0002-3453-2860>

⁵ dgj@ysu.edu.cn, <https://orcid.org/0000-0001-9123-8599>

Abstract. The construction of thermodynamic computer models of real models of base alloys, first of all, the choice of particles is offered. For the option, the final result largely depends on the choice. The potential should qualitatively and as accurately as possible numerically describe the properties of the materials under consideration. The aim of this work is a numerical analysis of the properties of Ni_3Al and Pt_3Al crystals using the potentials obtained by the embedded atom method. Classical potentials of the EAM type are considered, as well as modified MEAM potentials with allowance for directional couplings. Calculations of the lattice parameters, phonon spectra, elastic constants, as well as the temperature melting of the proposed fcc intermetallic compounds with the L_{12} superstructure have been performed. The most accurate characterization of crystals allows one to build realistic thermodynamic models with a high degree of reliability in the study of localized states of crystal lattices. The alloys considered in this work are widely used, including under intense external influences. This leads to the manifestation of nonlinearity of bonds and the formation of various localized states both in the volume and on its surface. In particular, the formation of local waves, nonlinear structures, and defect structures is possible. The results obtained indicate that all the considered potentials are satisfactorily described for the main properties and can be used to study the dynamics of the lattice in the bulk of the crystal. At the same time, when studying surface effects and at boundary parameters of temperature and pressure, the MEAM potentials look preferable.

Keywords: interaction potential, embedded atom method, localized states, molecular dynamics, nonlinear dynamics.

Acknowledgements: This work was financially supported by the Russian Science Foundation, project No. 21-12-00275.

For citation: Cherednichenko, A. I. Zakharov, P. V. Starostenkov, M. D., Eremin, A. M. & Dong, G. (2021). Analysis of EAM and MEAM potentials for modeling localized states of Ni_3Al and Pt_3Al crystals. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 2(18), 188–195. (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2021.02.006.

Введение

Атомистическое моделирование является действенным способом исследования процессов на атомном уровне в физике конденсированных сред. Задачи, решаемые этим подходом, включает в себя широкий спектр физических условий. Определяющим фактором физико-механических свойств металлов является их структура, т.е. конфигурация атомов в кристаллической решетке. Большинство современных исследований направлено на изучение высокоэнтропийных систем, состоящих из атомов различных химических элементов. Многокомпонентные сплавы широко применяются в раз-

личных отраслях промышленности. Варьируя их состав и концентрацию элементов, можно добиться совершенно новых свойств, выраженных, например, в улучшение пластичности, прочности, электропроводности. Разработка новых сплавов по стехиометрическому составу, количеству компонентов, концентрации элементов является важной теоретической и практической задачей, отвечающей стратегическим приоритетам развития. В свою очередь натурные эксперименты, требуют значительных финансовых и временных затрат, а многовариантность задачи может свести результативность таких исследований к минимуму. Именно это является одним из определяющих факторов

применения методов прямого компьютерного моделирования в поисковых задачах многокомпонентных систем. Одним из таких методов является метод молекулярной динамики.

Отправной точкой при построении модели является описание взаимодействия ее частиц. Именно эта составляющая часть программы определяет свойства материалов. В физике конденсированных сред применяются различные потенциалы. Это обусловлено тем, что разработать общий потенциал, который будет описывать все свойства металла или сплава с высокой точностью, практически невозможно. Большинство исследователей стремится использовать потенциалы, которые наиболее качественно отображают свойства материала, изучаемые в работе. Верификация потенциала проводится в сравнении с известными из экспериментальных данных параметрами материала. Одной из проблем является отсутствие экспериментальных данных для сложных систем, даже многие бинарные сплавы изучены слабо. Это приводит к большому числу потенциалов, стремящихся описать те или иные свойства таких систем. Из большого многообразия межатомных потенциалов необходимо выбирать оптимальный для каждого конкретного случая. В то же время необходимо учитывать простоту построения и скорость счета. Так парные потенциалы, обладая понятной и простой методикой построения не в полной мере могут описывать свойства материалов, например, с ковалентными связями. Также такие потенциалы непригодны для описания свободной поверхности металлов и сплавов. В свою очередь в данной работе мы рассмотрим потенциалы, лишенные данных недостатков, полученные методом погруженного атома [1]. Полная энергия E кристалла для данных потенциалов может быть

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

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

Следующим шагом развития потенциалов ЕАМ стало включение в них направленных связей. Этот подход был апробирован при моделировании свойств кристаллического крем-

ния. Подобная модификация дала основу для универсального полуэмпирического метода (МЕАМ). Принципиальное отличие ЕАМ и МЕАМ заключается в том, что фоновая электронная плотность в методе МЕАМ включает в себя вклады парциальных электронных плотностей. Такой подход позволил рассматривать монокристаллы, сплавы различных металлов, полупроводниковые соединения с ковалентными связями и ряд других типов соединений.

Способность ЕАМ-потенциалов описывать свойства моделируемых систем, не вошедшие в подгоночную выборку, является ключевым преимуществом ЕАМ-потенциалов [2]. В качестве примеров успешного применения данных потенциалов для изучения свойств никелевых и платиновых сплавов приведем ряд работ. Так в работе [3] рассматривается процесс одноосного растяжения, при котором потенциалы ЕАМ показали, что дислокации генерируются и уничтожаются поочередно, что приводит к колебаниям предельного напряжения во время процесса растяжения. В [4] изучены процессы плавления нанопроволоки, а также их стабильность. Также метод погруженного атома был применен для исследования поверхностной энергии и многослойной релаксации различных металлов [5]. Для системы Ni-Al со структурным типом В2 в работе [6] построен ЕАМ-потенциал. Как показано, исследуемый сплав обладает высокой жаропрочностью, низкой плотностью и высокой коррозионной стойкостью, вследствие чего в последние годы возрос интерес к фундаментальным свойствам таких сплавов.

Целью данной работы является анализ потенциалов ЕАМ и МЕАМ ГЦК систем Ni-Al и Pt-Al со сверхструктурой $L1_2$ для моделирования локализованных состояний кристаллов методом молекулярной динамики. Под локализованными состояниями нами понимаются уединенные волны, дискретные бризеры и прочие солитоноподобные объекты в кристаллических решетках.

В частности нами активно изучались дискретные бризеры в таких системах как с помощью парного потенциала Морзе [7-9] так и многочастичных потенциалов [10, 11], построенных по методике [12]. Однако тенденции изучения таких объектов требуют учета поверхностных эффектов, а также критических значений температур и давлений в кристаллах. Несомненно, необходимо провести верификацию применяемых нами потенциалов с учетом вышеописанных факторов. Для этого будут

проанализированы такие базовые свойства как параметр решетки, упругие константы, температура плавления, а также будет получена плотность фононных состояний кристаллов.

Модель и методика эксперимента

Нами рассматривались EAM потенциалы для Ni_3Al , входящий в стандартный набор программного пакета LAMMPS [13], а также полученные по методике из [12], для Pt_3Al только из [12]. MEAM потенциалы брались из базы данных [14]. Рассмотрим подробнее особенности построения потенциалов по методике, предложенной Zhou [12]. EAM-потенциал чистого элемента состоит из трех функции: парной энергии ϕ , электронной плотности ρ , и энергии вложения F . Для сплава EAM-потенциал содержит не только три функции ϕ , ρ и F для каждого из составляющих элементов, но также парную энергию ϕ_{ab} между разными элементами a и b ($a \neq b$). В результате ϕ , ρ и F , приспособленные для элементарных металлов, не могут быть непосредственно применены к сплаву или многослойным системам. Тем не менее, путем нормализации EAM-потенциалов и введения модели сплава, процедура обобщения EAM-потенциалов и их расстояния обрезки была предложена Zhou [12]. Эта процедура дает возможность построения EAM-потенциалов сплавов из EAM-потенциалов для отдельных элементов. Такие потенциалы сплавов использовались при молекулярном моделировании и дали хорошие результаты в экспериментах.

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

$$\phi(r) = \frac{A \exp[-\alpha(r/r_e - 1)]}{1 + (r/r_e - \lambda)^{20}} - \frac{B \exp[-\beta(r/r_e - 1)]}{1 + (r/r_e - \lambda)^{20}}, \quad (1)$$

где r_e равновесное расстояние между соседними атомами, A , B , α , β – четыре регулируемых параметра, а k и λ два дополнительных параметра для обрезки. Функция электронной плотности имеет вид:

$$f(r) = \frac{f_c \exp[-\beta(r/r_e - 1)]}{1 + (r/r_e - \lambda)^{20}}. \quad (2)$$

Такой подход позволяет получить относительно быстро потенциал межатомного взаимодействия для различных элементов.

Результаты и обсуждение

Основной характеристикой является параметр решетки. На рис. 1а и б приведена подгонка параметров решетки для сплавов Ni_3Al и Pt_3Al соответственно.

Данный параметр является базовым при разработке потенциалов, поэтому в большинстве случаев он соответствует экспериментальному значению. Отклонение возникли у потенциала, полученного методом [12]. В связи с тем, что там применяется механизм смешивания потенциалов, описанный выше. Так для Ni_3Al параметр решетки равен 3,57 Å, однако для потенциала EAM (Zhou) он равен 3,65 Å. Для Pt_3Al по экспериментальным данным параметр решетки составляет 3,87 Å, такое же значение получено для MEAM потенциала, для потенциала EAM (Zhou) он равен 3,92 Å.

Далее приведена таблица упругих констант, рассчитанных нами, а также известные экспериментальные данные.

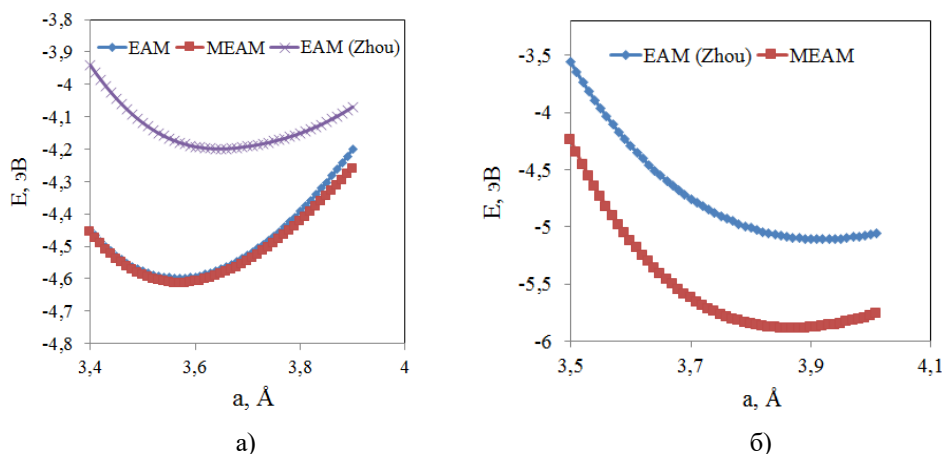


Рис.1. Зависимость потенциальной энергии от межатомного расстояния для различных потенциалов: а) Ni_3Al , б) Pt_3Al

Таблица 1. Упругие константы для Ni_3Al и Pt_3Al

	C_{11} , ГПа	C_{12} , ГПа	C_{44} , ГПа
Ni_3Al (EAM)	255,82	135,24	124,17
Ni_3Al (EAM Zhou)	151,26	117,69	46,46
Ni_3Al (MEAM)	232,91	151,67	107,54
Ni_3Al [15, 16]	224	148	125
Pt_3Al (EAM Zhou)	301,24	212,31	71,98
Pt_3Al (MEAM)	300,11	184,51	100,51
Pt_3Al [17]	436	220	140

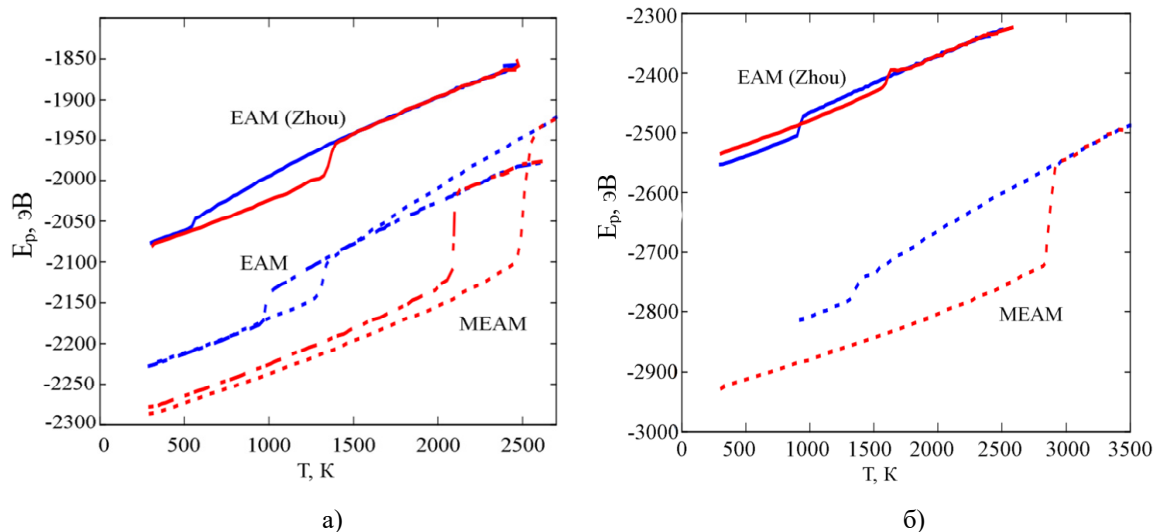
По этому параметру наиболее близкие значения к экспериментальным показал потенциал MEAM для Ni_3Al , в то время как остальные потенциалы показали удовлетворительные результаты хотя бы по одной из констант.

Следующим важным параметром является температура плавления сплава. Для ее определения применялась следующая схема. В начале модель при температуре в 300 К находится в равновесном состоянии в течение 1000 пс. После этого происходит нагревание модели от 300 К до 3500 К в течение 3000 пс. Затем модель в течение 1000 пс остается при температу-

ре 3500 К. В конце расчетов модель охлаждается с 3500 К до 300 К. После завершения моделирования, используя данные из файла LAMMPS, была построена кривая потенциальная энергия-температура (рис.2). Температуры плавления рассчитаны по формуле:

$$T = T_{\text{нагр.}} + T_{\text{охл.}} - \sqrt{T_{\text{нагр.}} \cdot T_{\text{охл.}}}, \quad (3)$$

где T – температура плавления, $T_{\text{нагр.}}$ – температура плавления при нагревании модели, $T_{\text{охл.}}$ – температура при охлаждении модели. Результаты приведены в таблице 2.

Рис.2. Зависимость потенциальной энергии кристалла от температуры: а) Ni_3Al , б) Pt_3Al Таблица 2. Рассчитанные значения температуры плавления для Ni_3Al и Pt_3Al и соответствующие экспериментальные значения

Сплав (потенциал)	Расчетное, К	Экспериментальное, К
Ni_3Al (EAM)	1627	1663 [18]
Ni_3Al (EAM Zhou)	1965	
Ni_3Al (MEAM)	1981	
Pt_3Al (EAM Zhou)	1284	1829 [19]
Pt_3Al (MEAM)	2231	

Наиболее близкие к экспериментальным значения получены для Ni_3Al посредством потенциала EAM, входящего в набор LAMMPS. Два других потенциала показали примерно одинаковое завышенное значение для этого сплава. Для сплава Pt_3Al оба потенциала дали расхождение с экспериментальными данными. Так MEAM потенциал завысил температуру плавления на 400 K, а EAM потенциал занизил на 545 K.

Для таких локализованных объектов как дискретный бризер важным является распределение фононных мод. Экспериментальные данные для Ni_3Al свидетельствуют об отсутствии щели в спектре кристалла, поэтому более подробно рассмотрим Pt_3Al , т.к. для него экспериментальные данные разнятся и допускают возможность наличия запрещенной зоны в кристалле. Плотность фононных состояний решеток позволяет говорить о потенциальных условиях для формирования локализованных мод в запрещенной зоне, поэтому этот параметр является одним из наиболее важных. На рис.3 приведены соответствующие графики.

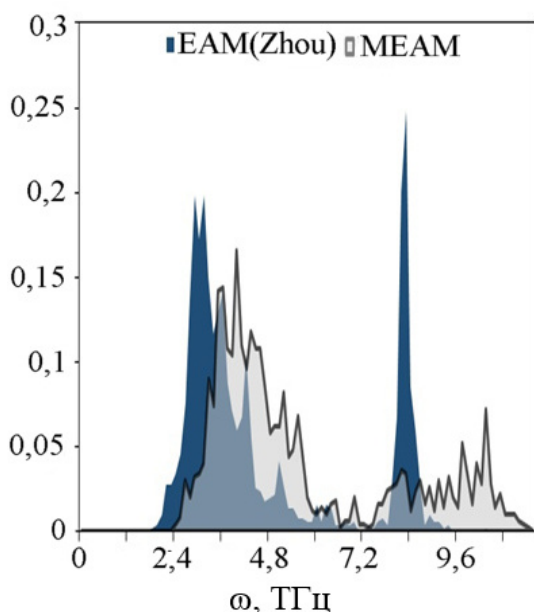


Рис.3. Плотность фононных состояний кристалла Pt_3Al для двух типов потенциалов

Отметим, что низкочастотная часть спектра слабо охвачена в силу особенностей расчета спектра непосредственно с молекулярно-динамической модели. Полученный профиль плотности фононного спектра кристалла для обоих потенциалов свидетельствуют о возможности наличия запрещенной зоны.

Заключение

В работе проведен анализ пяти потенциалов (три для Ni_3Al , два для Pt_3Al), полученных методом погруженного атома с целью выявления наиболее подходящих для исследования динамики решеток интерметаллических сплавов Ni_3Al и Pt_3Al .

Рассчитаны упругие константы, температуры плавления, постоянные решеток и плотности фононных состояний. Полученные результаты свидетельствуют о том, что все рассмотренные потенциалы удовлетворительно описывают основные свойства и при исследовании динамики решетки в объеме кристалла могут быть использованы. В тоже время при исследовании поверхностных эффектов и при граничных термодинамических параметрах предпочтительными выглядят потенциалы MEAM.

Список литературы

1. Daw M.S., Foiles S.M., Baskes M.I. The embedded-atom method: a review of theory and applications // Materials Science Reports. 1993. V. 9, Issues 7-8. P. 251–310.
2. Волегов П.С., Герасимов Р.М., Давлятин Р.П. Модели молекулярной динамики: обзор EAM-потенциалов. Часть 2. Потенциалы для многокомпонентных систем // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. 2018. № 2. С. 114–132.
3. Hui Li, Wan Du, Yi Liu Molecular dynamics study of tension process of Ni-based superalloy // Acta Metallurgica Sinica. 2020. V. 33. P. 41–750.
4. Jing Shang, Fan Yang, Fan Yang, Fan Yang, Fan Yang Size effect on the plastic deformation of pre-void Ni/ Ni_3Al interface under uniaxial tension: A molecular dynamics simulation // Computational Materials Science. 2018. V. 148. P. 200–206.
5. Ning Ting Yu, Oingliang Ye Yiyang Multi-layer relaxation at the surface of fcc metals: Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, Al // Surface Science. 1988. V. 206, Issues 1-2. P. 857–863.
6. Mishin Y., Mehl M.J., Papaconstantopoulos D.A. Embedded-atom potential for B2-NiAl // Physical Review B. 2002. V. 65, N 22. P. 224114.
7. Захаров П.В., Старостенков М.Д., Дмитриев С.В., Медведев Н.Н., Ерёмин А.М.

Моделирование взаимодействия дискретных брызгов различного типа в нановолокне кристалла Pt_3Al // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 2015. Т. 148, № 2. С. 252–257.

8. Старостенков М.Д., Захаров П.В., Медведев Н.Н. Изучение посредством двумерной модели возможности существования нелинейных локализованных колебаний на границе биметалла $Pt-Al$ // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2011. Т. 8, № 4. С. 40–44.

9. Захаров П.В., Ерёмин А.М., Старостенков М.Д., Маркидонов А.В. Компьютерное моделирование нелинейной локализованной моды большой амплитуды в кристалле Pt_3Al с бивакансией Pt // Компьютерные исследования и моделирование. 2015. Т. 7, № 5. С. 1089–1096.

10. Zakharov P.V., Korznikova E.A., Dmitirev S.V., Ekomasov E.G., Zhou K. Surface discrete breathers in Pt_3Al intermetallic alloy // Surface Science. 2019. V. 679. P. 1–5.

11. Чередниченко А.И., Захаров П.В., Старостенков М.Д., Сысоева М.О., Ерёмин А.М. Нелинейная супратрансмиссия в кристалле Pt_3Al при интенсивном внешнем воздействии // Компьютерные исследования и моделирование. 2019. Т. 11, № 1. С. 109–117.

12. Zhou X.W., Johnson R.A., Wadley H.N.G. Misfit-energy-increasing dislocations in vapor-deposited $CoFe/NiFe$ multilayers // Physical Review B. 2004. V. 69. P. 144113.

13. LAMMPS Molecular Dynamics Simulator [Электронный ресурс] / Официальный сайт <http://lammps.sandia.gov/> (дата обращения: 26.04.21).

14. [Электронный ресурс] / Официальный сайт https://cmse.postech.ac.kr/home_2nnmeam (дата обращения: 26.04.2021).

15. Kayser F.X., Stassis C. The elastic constants of Ni_3Al at 0 and 23.5 °C // Physica status solidi (a). 1981. V. 64. P. 335–342.

16. Prikhodko S.V., Yang H., Ardell A.J. et al. Temperature and composition dependence of the elastic constants of Ni_3Al // Metall Mater Trans A. 30. 1999. P. 2403–2408.

17. Fu C.L., Yoo M.H. Electronic structure and mechanical behavior of transition-metal aluminides: a first-principles total-energy investigation // Materials Chemistry Physics. 1992. V. 32. P. 25–36.

18. Rao P.V.M., Suryanarayana S.V., Murthy K.S., Naidu S.V.N. The high-temperature thermal

expansion of Ni_3Al measured by X-ray diffraction and dilation methods // Journal of Physics: Condensed Matter. 1989. V. 1(32). P. 5357–5361.

19. Al-Pt Binary Phase Diagram 55-83 at.% [Электронный ресурс] / Официальный сайт [Pthttps://materials.springer.com/isp/phase-diagram/docs/c_0902708](https://materials.springer.com/isp/phase-diagram/docs/c_0902708) (дата обращения 26.04.2021).

Информация об авторах

А. И. Чередниченко – преподаватель кафедры математики, физики, информатики Алтайского государственного гуманитарно-педагогического университета им. В.М. Шукшина.

П. В. Захаров – доктор физико-математических наук, профессор кафедры физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.

М. Д. Старостенков – доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник, профессор, заведующий кафедрой физики Алтайского государственного технического университета им. И.И. Ползунова.

А. М. Ерёмин – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры математики, физики, информатики Алтайского государственного гуманитарно-педагогического университета имени В.М. Шукшина.

Г. Донг – доктор наук, профессор Яньшанского университета.

References

1. Daw, M. S., Foiles, S. M. & Baskes, M. I. (1993). The embedded-atom method: a review of theory and applications. *Materials Science Reports*. 7-8(9). 251–310.

2. Volegov, P. S., Gerasimov, R. M. & Davlyatshin, R. P. (2018). Modeli molekulyarnoj dinamiki: obzor EAM-potencialov. Chast' 2. Potencialy dlya mnogokomponentnyh sistem. *Vestnik Permskogo nacional'nogo issledovatel'skogo politekhnicheskogo universiteta. Mekhanika*. 2. 114–132. (In Russ).

3. Hui Li, Wan Du & Yi Liu. (2020). Molecular dynamics study of tension process of Ni-based superalloy. *Acta Metallurgica Sinica*. 33. 741–750.

4. Jing Shang, Fan Yang, Fan Yang, Fan Yang & Fan Yang. (2018). Size effect on the plastic deformation of pre-void Ni/Ni_3Al interface under uniaxial tension: A molecular dynamics simulation. *Computational Materials Science*. 148. 200–206.

5. Ning Ting Yu & Oingliang Ye Yiyang. (1988). Multilayer relaxation at the surface of fcc metals: Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, Al. *Surface Science*. 1-2(206). 857–863.
6. Mishin, Y., Mehl, M. J. & Papaconstantopoulos, D. A. (2002). Embedded-atom potential for B2-NiAl. *Physical Review B*. 22(65). 224114.
7. Zakharov, P. V., Starostenkov, M. D., Dmitriev, S. V., Medvedev, N. N. & Eremin, A. M. (2015). Modelirovanie vzaimodejstviya diskretnykh brizerov razlichnogo tipa v nanovolokne kristalla Pt_3Al . *Zhurnal eksperimental'noj i teoreticheskoy fiziki*. 2(148). 252–257. (In Russ).
8. Starostenkov, M. D., Zakharov, P. V. & Medvedev, N. N. (2011). Izuchenie posredstvom dvumernoj modeli vozmozhnosti sushchestvovaniya nelinejnykh lokalizovannykh kolebanij na granice bimetalla Pt-Al. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*. 4(8). 40–44. (In Russ).
9. Zakharov, P. V., Eremin, A. M., Starostenkov, M. D. & Markidonov, A. V. (2015). Komp'yuternoe modelirovanie nelinejnoj lokalizovannoj mody bol'shoj amplitudy v kristalle Pt_3Al s bivakansiej Pt. *Komp'yuternye issledovaniya i modelirovanie*. 5(7). 1089–1096. (In Russ).
10. Zakharov, P. V., Korznikova, E. A., Dmitriev, S. V., Ekomasov, E. G. & Zhou, K. (2019). Surface discrete breathers in Pt_3Al intermetallic alloy. *Surface Science*. 679. 1–5.
11. Cherednichenko, A. I., Zakharov, P. V., Starostenkov, M. D., Sysoeva, M. O. & Eremin, A. M. (2019). Nelinejnaya supratransmissiya v kristalle Pt_3Al pri intensivnom vneshnem vozdeystvii. *Komp'yuternye issledovaniya i modelirovanie*. 1(11). 109–117. (In Russ).
12. Zhou, X. W., Johnson, R. A. & Wadley, H. N. G. (2004). Misfit-energy-increasing dislocations in vapor-deposited CoFe/NiFe multilayers. *Physical Review B*. 69. 144113.
13. LAMMPS Molecular Dynamics Simulator Electronic resource] / Official site <http://lammps.sandia.gov/>.
14. Electronic resource] / Official site https://cmse.postech.ac.kr/home_2nnmeam.
15. Kayser, F. X. & Stassis, C. (1981). The elastic constants of Ni_3Al at 0 and 23.5 °C. *Physica status solidi (a)*. 64. 335–342.
16. Prikhodko, S. V., Yang, H. & Ardell, A. J. et al. (1999). Temperature and composition dependence of the elastic constants of Ni_3Al . *Metall Mater Trans A*. 30. 2403–2408.
17. Fu, C. L. & Yoo, M. H. (1992). Electronic structure and mechanical behavior of transition-metal aluminides: a first-principles total-energy investigation. *Materials Chemistry Physics*. 32. 25–36.
18. Rao, P. V. M., Suryanarayana, S. V., Murthy, K. S. & Naidu, S. V. N. (1989). The high-temperature thermal expansion of Ni_3Al measured by X-ray diffraction and dilation methods. *Journal of Physics: Condensed Matter*. 1(32). 5357–5361.
19. Al-Pt Binary Phase Diagram 55-83 at.% Electronic resource] / Official site https://materials.springer.com/isp/phase-diagram/docs/c_0902708.

Information about the authors

A. I. Cherednichenko – Lecturer at the Department of Mathematics, Physics, Informatics, Shukshin Altai State University for Humanities and Pedagogy.

P. V. Zakharov – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor of the Department of Physics, Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University.

M. D. Starostenkov – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Chief Researcher, Professor, Head of Physics department, I.I. Polzunov Altai State Technical University.

A. M. Eremin – Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor of the Department of Mathematics, Physics, Informatics, Shukshin Altai State University for Humanities and Pedagogy.

G. Dong – Doctor of Science, Professor of Yanshan University.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.
The authors declare that there is no conflict of interest.

Статья поступила в редакцию 11.05.2021; одобрена после рецензирования 31.05.2021; принята к публикации 04.06.2021.

The article was received by the editorial board on 11 May 21; approved after reviewing 31 May 21; accepted for publication 04 June 21.