

Научная статья

1.3.8. Физика конденсированного состояния (физико-математические науки)

УДК 538.913; 539.8

doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2022.04.002

ОЦЕНКА ВЛИЯНИЯ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ НА ФОНОННЫЙ СПЕКТР КРИСТАЛЛА И ВОЗМОЖНОСТЬ ВОЗБУЖДЕНИЯ НЕ ЛИНЕЙНЫХ МОД**Иван Сергеевич Луценко¹, Артем Владимирович Маркидонов², Павел Васильевич Захаров^{3†}, Михаил Дмитриевич Старостенков⁴**^{1, 4} Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова, пр. Ленина, 46, 656038, Барнаул, Россия² Филиал Кузбасского государственного технического университета им. Т.Ф. Горбачева в г. Прокопьевске, ул. Ноградская, 19а, 653039, Прокопьевск, Россия³ Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, ул. Политехническая, 29, 195251, Санкт-Петербург, Россия³ Алтайский государственный гуманитарно-педагогический университет им. В.М. Шукшина, ул. Владимира Короленко, 53, 659333, Бийск, Россия¹ lucenko.Iwan@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0002-4540-1217>² markidonov_artem@mail.ru <https://orcid.org/0000-0002-4566-528X>³ zakharovpv1@rambler.ru[†], <https://orcid.org/0000-0002-6410-1594>⁴ genphys@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-6326-7613>

Аннотация. Динамика решетки кристаллов определяется многими факторами, в том числе дефектами структуры и внешними условиями. В данной работе нами рассмотрено поведение плотности фононных состояний кристалла при различной концентрации точечных дефектов и температурах. Рассмотрен кристалл стехиометрии A_3B , на примере Pt_3Al , в котором возможно существования запрещенной зоны в фононном спектре кристалла. Модель представляла собой расчетную ячейку, содержащую от 10^3 до 10^5 атомов. Частицы взаимодействовали посредством многочастичного потенциала, полученного методом погруженного атома. При этом накладывались периодические граничные условия, чтобы избежать краевых и поверхностных эффектов. Далее производилось удаление нужной доли атомов Al и/или Pt с последующей релаксацией модели не менее 20 пикосекунд и нагревом до необходимой температуры. Расчет спектров кристаллов производился непосредственно с данных, полученных при расчетах, т.е. рассчитывалась частота каждого атома и весь диапазон полученных значений разбивался на 100 интервалов для определения плотности их распределения. Такой подход менее точен теоретических расчетов, однако позволяет отслеживать динамику спектра, к тому же теоретический расчет сложных конфигураций решетки с дефектами крайне затруднителен. Тем самым в работе получены качественные результаты, позволяющие оценить изменение плотности фононных состояний решетки при наличии точечных дефектов. Полученные зависимости свидетельствуют о том, что с ростом температуры и концентрации дефектов увеличивается вероятность возбуждения мод, частоты которых близки к собственным частотам дискретных бризеров в данном кристалле.

Ключевые слова: нелинейная мода, фононный спектр, молекулярная динамика, дискретный бризер, квази-бризер, моделирование, LAMMPS.

Благодарности: ИСЛ благодарит за поддержку проект РНФ № 21-12-00275. ПВЗ благодарит за поддержку Министерство просвещения РФ в рамках государственного задания АГПУ им. В.М. Шукшина на выполнение НИР № государственной регистрации темы 122050400046-8. Часть результатов работы получена с использованием вычислительных ресурсов Суперкомпьютерного центра Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.

Для цитирования: Луценко И.С., Маркидонов А.В., Захаров П.В., Старостенков М.Д. Оценка влияния точечных дефектов на фононный спектр кристалла и возможность возбуждения не линейных мод // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2022. Т. 19, № 4. С. 437–444. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2022.04.002.

Original article

EVALUATION OF THE EFFECT OF POINT DEFECTS ON THE PHONON SPECTRUM OF A CRYSTAL AND THE POSSIBILITY OF EXCITATION OF NONLINEAR MODES

Ivan S. Iutsenko¹, Artem V. Markidonov², Pavel V. Zakharov^{3†}, Mikhail D. Starostenkov⁴^{1,4} I.I. Polzunov Altai State Technical University, Lenin Pr., 46, Barnaul, 656038, Russia² Branch of the T.F. Gorbachev Kuzbass State Technical University in Prokopyevsk, Nogradskaya Str., 19a, Prokopyevsk, 653039, Russia³ Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, Polytechnicheskaya Str., 29, St. Petersburg, 195251, Russia³ Shukshin Altai State University for Humanities and Pedagogical University, V. Korolenko Str., 53, 659333, Biysk, Russia¹ lucenko.Iwan@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0002-4540-1217>² markidonov_artem@mail.ru <https://orcid.org/0000-0002-4566-528X>³ zakharovpvl@rambler.ru[†], <https://orcid.org/0000-0002-6410-1594>⁴ genphys@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-6326-7613>

Abstract. The crystal lattice dynamics is determined by many factors, including structural defects and external conditions. In this work, we have considered the behavior of the density of phonon states of a crystal at different concentrations of point defects and temperatures. A crystal of A_3B stoichiometry is considered, using Pt_3Al as an example, in which the existence of a band gap in the phonon spectrum of the crystal is possible. The model was a computational cell containing from 10^3 to 10^5 atoms. The particles interacted by means of a many-particle potential obtained by the embedded atom method. In this case, periodic boundary conditions were imposed in order to avoid edge and surface effects. Next, the required fraction of Al and/or Pt atoms was removed, followed by relaxation of the model for at least 20 picoseconds and heating to the required temperature. The crystal spectra were calculated directly from the data obtained in the calculations, i.e. the frequency of each atom was calculated, and the entire range of the obtained values was divided into 100 intervals to determine the density of their distribution. This approach is less accurate than theoretical calculations, but it makes it possible to track the dynamics of the spectrum; moreover, the theoretical calculation of complex lattice configurations with defects is extremely difficult. Thus, qualitative results have been obtained in the work, which make it possible to estimate the change in the density of phonon states of the lattice in the presence of point defects. The dependences obtained indicate that with an increase in temperature and defect concentration, the probability of excitation of modes increases, the frequencies of which are close to the natural frequencies of discrete breathers in a given crystal.

Keywords: nonlinear mode, phonon spectrum, molecular dynamics, discrete breather, quasi-breather, modeling, LAMMPS.

Acknowledgements: ISL thanks for the support of the project of the Russian Science Foundation No. 21-12-00275. PVZ thanks the Ministry of Education Support of the Russian Federation within the framework of the state task of the ASPU. V.M. Shukshin for the implementation of research work No. state shock registration of the topic 122050400046-8. The part of results of the work were obtained using computational resources of Peter the Great Saint-Petersburg Polytechnic University Supercomputing Center (www.spbstu.ru).

For citation: Iutsenko, I. S., Markidonov, A. V., Zakharov, P. V. & Starostenkov, M. D. (2022). Evaluation of the effect of point defects on the phonon spectrum of a crystal and the possibility of excitation of nonlinear modes. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 4(19), 437–444. (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2022.04.002.

Введение

Нелинейная динамика решеток кристаллов играет важную роль в формировании их механических свойств. Особо ярко это проявляется в системах далеких от равновесия и при интенсивных внешних воздействиях в виде потоков частиц, излучения или внешних осциллирующих полях. Нелинейные колебания узлов кристаллической решетки могут иметь различную природу. Наиболее хорошо изученными явля-

ются моды на дефектных структурах, например, на атомах замещения. В тоже время ангармонизм связей может позволить сформировать условия для существования нелинейных мод в бездефектной решетке – дискретных бризеров (ДБ) [1].

Дискретные бризеры как физические объекты были экспериментально обнаружены в различных средах. Об их существовании в реальных кристаллах на данный момент можно судить лишь по косвенным признакам, ввиду

быстрого протекания данных процессов и их микроскопических размеров. Тем не менее, являясь, по сути, динамическими дефектами, бризеры способны оказывать существенное воздействие на структуру кристалла и его физические свойства. Например, влиять на локальное расширение структуры, теплопроводность, теплоемкость и т.д. [2-6]. Говоря о дискретных бризерах, следует отметить, что выделяют относительно большое количество видов таких объектов в зависимости от топологии решетки, типа нелинейности, мерности объектов и количества вовлеченных узлов решетки. Здесь мы основное внимание сосредоточим на ДБ мягкого типа нелинейности, ядром которого является один атом легкой подрешетки кристалла. Это один из простейших случаев, однако, он наиболее вероятен к реализации в реальных системах в силу меньших ограничений, накладываемых на начальные условия.

Одним из наиболее фундаментальных вопросов является вопрос самопроизвольного зарождения в кристаллах подобных объектов. В литературе приводятся различные способы генерации колебаний сходных с ДБ. В работах [7-9] рассмотрено зарождение бризеров под действием излучения и тепловых флуктуаций. В [10] демонстрируется иная причина для образования ДБ – Ян-Теллеровское искажения решетки. При искажении квазимолекул возникает значительная нелинейность, вызывающая в свою очередь локализованные колебания нескольких частиц. Авторами замечено, что данная структура обладает значительным временем жизни, причём солитон сохраняется даже при распаде исходной квазимолекулы. О появлении бризеров при высоких температурах говорят авторы работы [11]. Одним из важнейших критериев для возможности появления бризеров они указывают наличие запрещенной зоны в фононном спектре. В этом случае возможным становится появление так называемых щелевых бризеров. Возможность их существования в кристаллах Pt_3Al уже была ранее продемонстрирована в работах [12-15]. Так же нами изучено поведение локализованных мод вблизи дефектов кристаллов, в этом смысле следует говорить о квази-бризерах [16-18].

Как известно, при достижении температуры Дебая для данной системы, в ней возбуждаются все поддерживаемые моды. В виду того, что реальные кристаллы всегда содержат топологические дефекты, способные взаимодейст-

вовать с бризерами и другими солитонами, обмениваясь с ними энергией, необходимо изучить возможность спонтанного возбуждения нелинейных мод на дефектах с собственными частотами ДБ. Целью данной работы является исследование плотностей частотных спектров кристалла стехиометрии A_3B , на примере Pt_3Al , при наличии дефектов и разных температур.

Модель и методика эксперимента

Моделирование производилось методом молекулярной динамики при помощи программного пакета LAMMPS. Для описания взаимодействия был использован хорошо зарекомендовавший себя потенциал, полученный методом погруженного атома (ЕАМ). Для исключения влияния поверхности были использованы периодические граничные условия по всем осям.

Модель представляет собой кристалл Pt_3Al , число атомов составляло от 10^3 до 10^5 частиц. Частицы взаимодействовали посредством ЕАМ потенциала [19]. При моделировании рассматривались различные варианты точечных дефектов: вакансии, межузельные атомы и пары Френкеля, расположенные как на атомах каждой из подрешёток по отдельности, так и вместе. Концентрации дефектов варьировались так, чтобы их количество находилось в диапазоне от 1 до 30% от общего числа атомов. Моделирование проводилось при различных температурах расчётной ячейки от 150 К до 600 К. Задание нужной температуры происходило посредством придания скоростей атомам в соответствии с распределением Максвелла по скоростям. При разговоре о колебаниях атомов крайне важным является значение температуры Дебая. В работе [18] представлены зависимости данного параметра от абсолютной температуры и давления. В соответствии с приведенными данными можно говорить о том, что для нашей модели значение температуры Дебая находится в диапазоне от 400 К до 450 К. Таким образом моделирование производилось как при температурах ниже порогового значения, так и выше него.

Для анализа использовалось программное обеспечение, рассчитывающее период и частоту колебаний всех атомов по модельным данным. Расчетные значения частот были получены для всех атомов ячейки вместе и по отдельности для каждой подрешетки. Для корректно-

го анализа из экспериментальных групп были исключены граничные слои атомов, что позволило избежать обнаружения ложных мод из-за перемещения атомов с одной стороны кристалла на другую, вызванных периодическими граничными условиями.

Результаты и обсуждение

При обсуждении нелинейных мод и дискретных бризеров крайне важен фононный спектр кристалла. Для исследуемого сплава ФС содержит оптическую и акустическую ветви, между которыми расположена запрещенная частотная зона (рис.1а [20]). Распределение частот для данной модели кристалла (рис.1б) несколько отличается. Здесь приведен анализ по элементам частот сплава, видно, что оптическая ветвь формируется лёгкой подрешёткой алюминия, а акустическая тяжёлой подрешёт-

кой платины. Отсутствие ярко выраженной запрещённой зоны в модельном кристалле вполне соответствует экспериментальным данным и ряду расчетных работ [21-23]. К тому же метод снятия мгновенного слежка частот с реалистичной модели очевидно допускает наличие неучтенных частот, а также накладываются ограничение на низкочастотную часть спектра в виду размерного фактора ячейки и времени расчета частоты колебания каждого атома. Дискретные бризеры в Pt_3Al могут формироваться на атомах алюминия, при этом их частота должна находиться в щели спектра. Таким образом, если в спектре конкретного кристалла с дефектами присутствует смещение в сторону запрещенной зоны, то можно говорить о том, что данные моды на дефектах могут передать свою колебательную энергию в бездефектную часть кристалла, тем самым способствуя формированию ДБ.

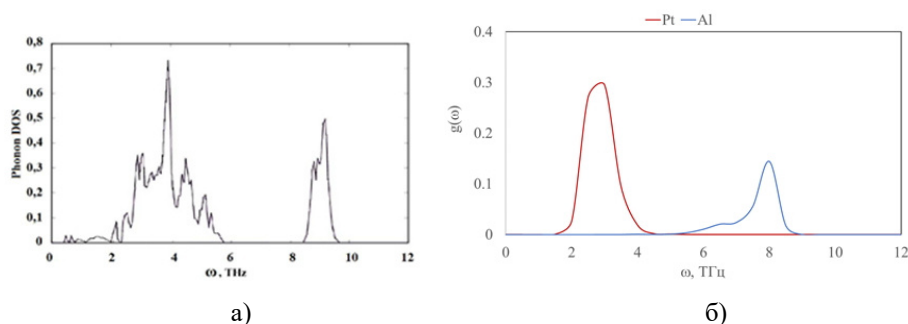


Рис.1. Плотность фононных состояний: а) рассчитанная средствами LAMMPS, который включает необходимые для этих целей процедуры, базирующиеся на преобразовании Фурье автокорреляционных функций перемещений атомов от времени [20], б) рассчитанная в рамках предложенного алгоритма при температуре 450 K

Fig.1. Density of phonon states: a) calculated by LAMMPS, which includes the procedures necessary for these purposes, based on the Fourier transform of the autocorrelation functions of atomic displacements versus time [20], b) calculated using the proposed algorithm at a temperature of 450 K

Далее рассмотрим вклад различного вида дефектов в плотность фононных состояний кристалла. Для этого будем поочередно внедрять вакансии, межузельные атомы и пары Френкеля. Рассмотрим влияние вакансий. Важно выделить, что процесс нагрева ячейки и дальнейшее ее релаксация существенно отличаются, т.к. в процессе нагрева дефекты становятся центрами локализации энергии более интенсивно. Соответственно эта накопленная энергия далее будет рассеяна по ячейке. В том числе это может приводить к формированию ДБ в бездефектной части кристалла.

На рис.2 продемонстрировано влияние процентной доли вакансий на распределение частот колебаний атомов при температуре

150 K. Так вакансии на атомах алюминия способствуют появлению колебаний в запрещенной зоне значительно больше, чем вакансии платины.

Для достижения подобного эффекта с атомами платины, их необходимо удалить в количестве не менее 15 %. Смешанные группы вакансий ожидаемо демонстрируют средние значения. Повышение температуры ячейки меняет эффект вносимый вакансиями, в этом случае вакансии алюминия вносят вклад в перестройку спектра меньший нежели платины. Одной из вероятных причин такого поведения системы является значительно возрастающая кинетическая энергия платины по сравнению с алюминием.

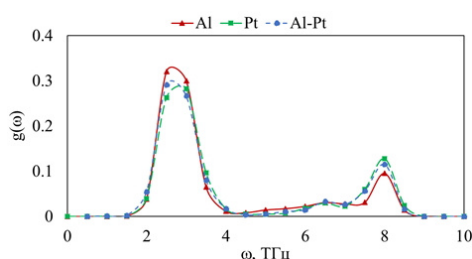


Рис.2. Распределение частот при различных конфигурациях вакансий

Fig.2. Frequency distribution for various configurations of vacancies

Рассмотрим далее роль температуры при различных концентрациях и, собственно, саму температуру, как фактор. На рис.3 показана зависимость распределения частот от температуры при концентрации вакансий 5 %. В целом наблюдается тенденция смещения частот в меньшую сторону с ростом температуры как для случая вакансий Al, так и платины. Из об-

щей картины выделяется распределение для 150K с вакансиями Al. Возможной причиной такой ситуации может быть меньшая дисторсия кристаллической решетки при низких температурах. Для вакансий, образованных удалением атомов Pt, такой ситуации не наблюдалась. В этом случае реализовывалась общая тенденция, состоящая в том, что с ростом температуры происходит смещение спектра в низкочастотную область.

Изменение концентрации вакансий (рис.4) оказывали большее влияние, нежели повышение температуры, при относительно низких концентрациях дефектов. Это наиболее ярко проявляется для Pt, т.к. удаление тяжелых атомов из узлов приводит к большим искажениям кристалла, внося существенное изменение в частотный спектр кристалла. В такой ситуации не целесообразно говорить о возможности возбуждения ДБ, т.к. решетка в этом случае серьезно искажена по всему объему.

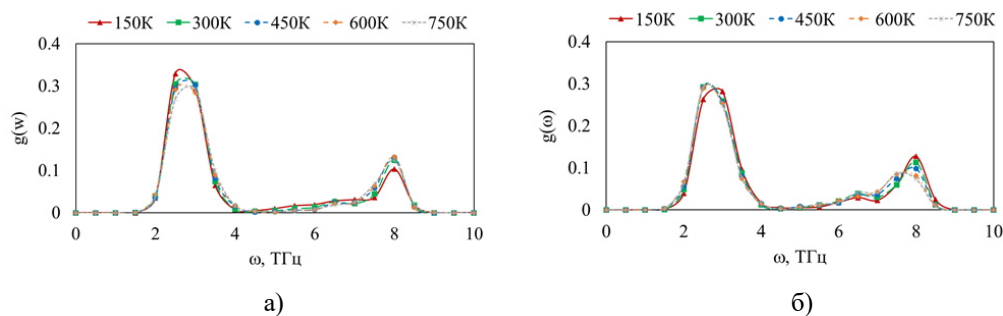


Рис.3. Распределение фононных мод в кристалле Pt_3Al при различных температурах: а) концентрация вакансий Al 5 %, б) концентрация вакансий Pt 5 %

Fig.3. The distribution of phonon modes in a Pt_3Al crystal at different temperatures: а) concentration of vacancies Al 5 %, б) concentration of vacancies Pt 5 %

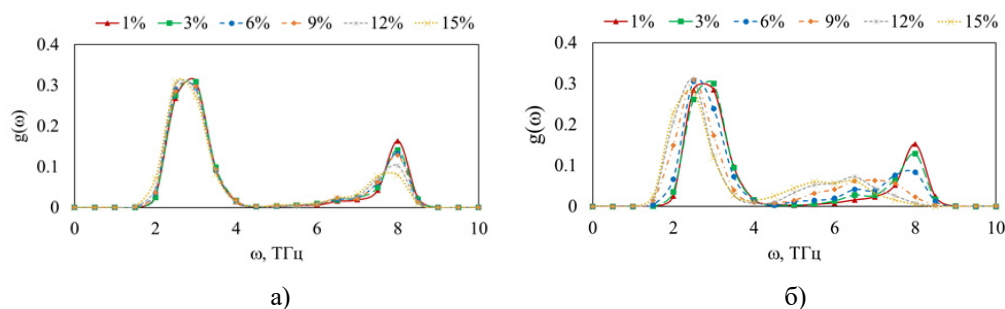


Рис.4. Распределение фононных мод в кристалле Pt_3Al при различных концентрациях вакансий при температуре 450 K: а) вакансии Al; б) вакансии Pt

Fig.4. The distribution of phonon modes in a Pt_3Al crystal at various concentrations of vacancies at a temperature of 450 K: а) Al vacancies; б) Pt vacancies

Атомы внедрения имеют отличное от вакансий влияние на фононный спектр (рис.5).

Главным образом это выражается в том, что не имеет большого различия тип внедряемых ато-

мов, они оказывают сходное воздействие. Также важно отметить, что данные дефекты способствуют смещению частот выше основного спектра. Большее влияние в случае атомов внедрения при любых температурах оказывают атомы платины.

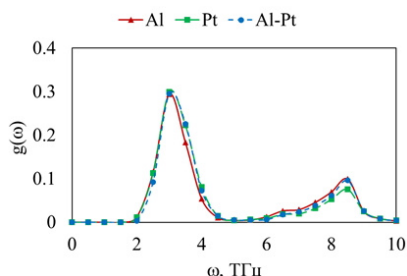


Рис.5. Распределение частот при температуре 300 К при различных атомах внедрения, концентрация внедренных атомов 5 %

Fig.5. Frequency distribution at a temperature of 300 K for various absorption atoms, the concentration of interstitial atoms is 5 %

Пары Френкеля, являясь комбинацией межузельных атомов и вакансий, оказывают на распределение частот воздействие среднее между двумя этими типами дефектов. При этом влияние пар Френкеля закономерно ниже, нежели у «чистых» дефектов, ввиду их частичной аннигиляции в процессе симуляции. Для всех видов и конфигураций дефектов увеличение температуры оказывает сходное влияние. Повышение температуры увеличивает количество атомов с низкими частотами. Таким образом, дефекты, в данном случае выступают в роли условного «конденсатора» накапливая и распределяя тепловую энергию.

Заключение

В работе методом молекулярной динамики проведено исследование распределения частот атомов кристалла Pt_3Al при различных точечных дефектах структуры и температурных режимах. Установлено, что при внедрении вакансий возможно смещение плотности фононного спектра кристалла в сторону меньших частот для акустической ветви спектра, тем самым увеличивая вероятность возбуждения колебаний на частотах из запрещенной зоны ФС идеального кристалла, и появление дискретных бризеров. Межузельные атомы при концентрациях до 5 % оказывают аналогичный эффект. Дальнейшее увеличение концентрации таких дефектов приводит к смещению также и в более высокие

частоты, тем самым уширяя оптическую ветвь. Повышение температуры в общем случае увеличивает эффект и ускоряет его проявление.

Список литературы

1. Flach S., Willis C.R. Discrete Breathers // *Phys. Rep.* 1998. V. 295. P. 181–264.
2. Korznikova E.A., Morkina A.Y., Singh M., Krivtsov A.M., Kuzkin V.A., Gani V.A., Bebikhov V.A., Dmitriev S.V. Effect of discrete breathers on macroscopic properties of the Fermi-Pasta-Ulam chain // *Eur. Phys. J. B.* 2020. V. 93 P. 123.
3. Bussmann-Holder A., Bishop A.R. Inhomogeneity, local mode formation, and the breakdown of the Bloch theorem in complex charge transfer systems as a consequence of discrete breather formation // *Physical Review B.* 2004. V. 70. P. 184303.
4. Murzaev R.T., Babicheva R.I., Zhou K., Korznikova E.A., Fomin S.Y., Dubinko V.I., Dmitriev S.V. Discrete breathers in alpha-uranium // *Eur. Phys. J. B.* 2016. V. 89. P. 168.
5. Singh M., Morkina A.Y., Korznikova E.A., Dubinko V.I., Terentiev D.A., Xiong D., Naimark O.B., Gani V.A., Dmitriev S.V. Effect of Discrete Breathers on the Specific Heat of a Nonlinear Chain // *Journal of Nonlinear Science.* 2021. V. 31 P. 12.
6. Upradhyaya A., Semenova M.N., Kudreyko A., Dmitriev S.V. Chaotic discrete breathers and their effect on macroscopic properties of triangular lattice // *Chaotic discrete breathers and their effect on macroscopic properties of triangular lattice.* 2022. V. 112. P. 106541.
7. Dubinko V.I., Piazza F. On the role of disorder in catalysis driven by discrete breathers // *Letters on Materials.* 2014. N 4. P. 273–278.
8. Dubinko V.I., Dubinko A.V. Modification of reaction rates under irradiation of crystalline solids: Contribution from intrinsic localized modes // *Nuclear Inst. and Methods in Physics Research, B.* 2013. V. 303. P. 133–135.
9. Schlman L.S., Mihokova E., Scardicchio A., Facchi P. Slow Relaxation, Confinement, and Solitons // *Phys. Rev. Lett.* 2002. V. 88. P. 224101.
10. Baimova J.A., Dmitriev S.V., Zhou K. Discrete breather clusters in strained graphene // *Europhysics Letters.* 2012. V. 100. P. 36005.
11. Kistanov A.A., Dmitriev S.V. Spontaneous Excitation of Discrete Breathers in Crystals with the NaCl Structure at Elevated Temperatures // *Lattice Dynamics.* 2012. V. 54. P. 1545–1548.
12. Старостенков М.Д., Захаров П.В., Медведев Н.Н. Изучение посредством двумерной модели возможности существования нелиней-

ных локализованных колебаний на границе биметалла Pt-Al // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2011. Т. 8, № 4 С. 40–44.

13. Starostenkov M.D., Potekaev A.I., Dmitriev S.V., Zakharov P.V., Eremin A.M., Kulagina V.V. Dynamics of discrete breathers in a Pt₃Al crystal // *Russian physics journal*. 2016. V. 58, N 9. P. 1353–1357.

14. Маркидонов А.В., Захаров П.В., Старостенков М.Д., Медведев Н.Н. Механизмы кооперативного поведения атомов в кристаллах: монография. Новокузнецк: Изд-во Филиал Кузбасского государственного технического университета им. Т.Ф. Горбачева в г. Новокузнецке, 2016. 219 с.

15. Захаров П.В., Дмитриев С.В., Старостенков М.Д., Еремин А.М., Корзникова Е.А. Стационарные квазибризеры в моноатомных металлах с ГЦК-структурой // *Журнал экспериментальной и теоретической физики*. 2017. Т. 152, № 5. С. 1073–1080.

16. Захаров П.В., Еремин А.М., Старостенков М.Д. Влияние межузельных атомов на квази-бризерные моды в кристалле стехиометрии АЗВ с морзевским взаимодействием // *Химическая физика и мезоскопия*. 2016. Т. 18, № 1. С. 114–121.

17. Захаров П.В., Еремин А.М., Манаков Н.А., Старостенков М.Д., Маркидонов А.В. Поведение квазибризерной моды в кристалле Pt₃Al при наличии точечных дефектов // *Вестник Оренбургского государственного университета*. 2015. № 9(184). С. 38–44.

18. Wei N., Zhang Ch., Hou S. Theoretical study of the elastic and thermodynamic properties of Pt₃Al with the L1₂ structure under high pressure // *Condensed Matter Physics* 2015. V. 18, N 4. P. 43601.

19. Zhou X.W., Johnson R.A., Wadley H.N.G. Misfit-energy-increasing dislocations in vapor-deposited CoFe/NiFe multilayers // *Phys. Rev. B*. 2004. V. 69. P. 144113.

20. Захаров П.В., Старостенков М.Д., Корзникова Е.А., Еремин А.М., Луценко И.С., Дмитриев С.В. Возбуждение волн солитонного типа в кристаллах стехиометрии АЗВ // *Физика твёрдого тела*. 2019. Т. 61, № 11. С. 2183–2188.

21. Medvedev N.N., Starostenkov M.D., Manley M.E. Energy localization on the Al sublattice of Pt₃Al with L1₂ order // *J. Appl. Phys.* 2013. N 114. P. 213506.

22. Chauke H.R., Minisini B., Drautz R., Ngueyn-Manh D. Theoretical investigation of the Pt₃Al ground state // *Intermetallics*. 2010. N 18. P. 417–421.

23. Pan Y. Insight into the Mechanical Properties and Fracture Behavior of Pt₃Al Coating by Experiment and Theoretical Simulation // *Journal of Materials Engineering and Performance* 2021. V. 30. P. 2661–2668.

Информация об авторах

И. С. Луценко – аспирант Алтайского государственного технического университета им. И.И. Ползунова.

А. В. Маркидонов – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой филиала Кузбасского государственного технического университета им. Т.Ф. Горбачева в г. Прокопьевске.

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

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

References

1. Flach, S. & Willis, C. R. (1998). Discrete Breathers. *Phys. Rep.*, 295, 181–264.

2. Korznikova, E. A., Morkina, A. Y., Singh, M., Krivtsov, A. M., Kuzkin, V. A., Gani, V. A., Bebxhov, V. A. & Dmitriev, S. V. (2020). Effect of discrete breathers on macroscopic properties of the Fermi-Pasta-Ulam chain. *Eur. Phys. J. B*, 93, 123.

3. Bussmann-Holder, A. & Bishop, A. R. (2004). Inhomogeneity, local mode formation, and the breakdown of the Bloch theorem in complex charge transfer systems as a consequence of discrete breather formation. *Physical Review B*, 70, 184303.

4. Murzaev, R. T., Babicheva, R. I., Zhou, K., Korznikova, E. A., Fomin, S. Y., Dubinko, V. I. & Dmitriev, S. V. (2016). Discrete breathers in alpha-uranium. *Eur. Phys. J. B*, 89, 168.

5. Singh, M., Morkina, A. Y., Korznikova, E. A., Dubinko, V. I., Terentiev, D. A., Xiong, D., Naimark, O. B., Gani, V. A. & Dmitriev, S. V. (2021). Effect of Discrete Breathers on the Specific Heat of a Nonlinear Chain *Journal of Nonlinear Science*, 31, 12.

6. Upadhyaya, A., Semenova, M. N., Kudreyko, A. & Dmitriev, S. V. (2022). Chaotic discrete breathers and their effect on macroscopic properties of triangular lattice. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, 112, 106541.

7. Dubinko, V. I. & Piazza, F. (2014). On the role of disorder in catalysis driven by discrete breathers *Letters on Materials*, 4, 273–278.
8. Dubinko, V. I. & Dubinko, A. V. (2013). Modification of reaction rates under irradiation of crystalline solids: Contribution from intrinsic localized modes. *Nuclear Inst. and Methods in Physics Research*, B, 303, 133–135.
9. Schlman, L. S., Mihokova, E., Scardicchio, A. & Facchi, P. (2002). Slow Relaxation, Confinement, and Solitons. *Phys. Rev. Lett*, 88, 224101.
10. Baimova, J. A., Dmitriev, S. V. & Zhou, K. (2012). Discrete breather clusters in strained graphene. *Europhysics Letters*, 100, 36005.
11. Kistanov, A. A. & Dmitriev, S. V. (2012). Spontaneous Excitation of Discrete Breathers in Crystals with the NaCl Structure at Elevated Temperatures. *Lattice Dynamics*, 54, 1545–1548.
12. Starostenkov, M. D., Zaharov, P. V. & Medvedev, N. N. (2011). Izuchenie posredstvom dvumernoj modeli vozmozhnosti sushchestvovaniya nelinejnyh lokalizovannyh kolebanij na granice bimetallov Pt-Al. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 8(4), 40–44. (In Russ.).
13. Starostenkov, M. D., Potekaev, A. I., Dmitriev, S. V., Zakharov, P. V., Eremin, A. M. & Kulagina, V. V. (2016). Dynamics of discrete breathers in a Pt₃Al crystal. *Russian physics journal*, 58(9), 1353–1357.
14. Markidonov, A. V., Zaharov, P. V., Starostenkov, M. D. & Medvedev, N. N. (2016). Mekhanizmy kooperativnogo povedeniya atomov v kristallakh: monografiya. Filial Kuzbasskogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta im. T.F. Gorbacheva v g. Novokuznecke. P. 219. (In Russ.).
15. Zaharov, P. V., Dmitriev, S. V., Starostenkov, M. D., Eremin, A. M. & Korznikova, E. A. (2017). Stacionarnye kvazibrizery v monoatomnyh metallah s GCK-strukturami. *Zhurnal eksperimental'noj i teoreticheskoy fiziki*, 152(5), 1073–1080. (In Russ.).
16. Zaharov, P. V., Eremin, A. M. & Starostenkov, M. D. (2016). Vliyanie mezhuzel'nyh atomov na kvazibrizernye mody v kristalle stekhiometrii A₃B s morzevskim vzaimodejstviem. *Himicheskaya fizika i mezoskopiya*, 18(1), 114–121. (In Russ.).
17. Zaharov, P. V., Eremin, A. M., Manakov, N. A., Starostenkov, M. D. & Markidonov, A. V. (2015). Povedenie kvazibrizernoj mody v kristalle Pt₃Al pri nalichii tochechnykh defektov. *Vestnik Orenburgskogo gosudarstvennogo universiteta*, 9(184), 38–44. (In Russ.).
18. Wei, N., Zhang, Ch., Hou, S. (2015). Theoretical study of the elastic and thermodynamic properties of Pt₃Al with the L1₂ structure under high pressure. *Condensed Matter Physics*, 18(4), 43601.
19. Zhou, X. W., Johnson, R. A. & Wadley, H. N. G. (2004). Misfit-energy-increasing dislocations in vapor-deposited CoFe/NiFe multilayers. *Phys. Rev. B*, 69, 144113.
20. Zaharov, P. V., Starostenkov, M. D., Korznikova, E. A., Eremin, A. M., Lutsenko, I. S. & Dmitriev, S. V. (2019). Vozbuzhdeniye voln solitonno tipa v kristallakh stekhiometrii A₃B. *Fizika tvordogo tela*, 61(11), 2183–2188. (In Russ.).
21. Medvedev, N. N., Starostenkov, M. D. & Manley, M. E. (2013). Energy localization on the Al sublattice of Pt₃Al with L1₂ order. *J. Appl. Phys.*, 114, 213506.
22. Chauke, H.R., Minisini, B., Drautz, R. & Ngueyn-Manh, D. (2010). Theoretical investigation of the Pt₃Al ground state. *Intermetallics*, 18, 417–421.
23. Pan, Y. (2021). Insight into the Mechanical Properties and Fracture Behavior of Pt₃Al Coating by Experiment and Theoretical Simulation *Journal of Materials Engineering and Performance*, 30, 2661–2668.

Information about the authors

I. S. Lutsenko – Postgraduate, I.I. Polzunov Altai State Technical University.

A. V. Markidonov – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Head of Department, Branch of the T.F. Gorbachev Kuzbass State Technical University in Prokopyevsk.

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

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

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

Статья поступила в редакцию 14.11.2022; одобрена после рецензирования 24.11.2022; принята к публикации 29.11.2022.

The article was received by the editorial board on 14 Nov. 22; approved after reviewing 24 Nov. 22; accepted for publication 29 Nov. 22.