

Molecular dynamic analysis of energy transport in a Pt_3Al crystal under the impact in the spectrum gap frequency

P. V. Zakharov^{†,1,2}, S. V. Dmitriev^{2,3}, E. A. Korznikova^{2,4}

[†]zakharovpvl@rambler.ru

¹Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, Saint Petersburg, 195251, Russia

²Institute for Metals Superplasticity Problems, RAS, Ufa, 450001, Russia

³Institute of Physics of Molecules and Crystals, Ufa Federal Research Center, RAS, Ufa, 450075, Russia

⁴Ufa State Aviation Technical University, Ufa, 450008, Russia

Constant search for new mechanisms of energy transport associated with a decrease in losses results in the active investigation of the possibilities of generating mobile excitations at frequencies outside the phonon spectrum. The effect of energy transfer at frequencies outside the band, possible in case if the excitation amplitude exceeds the critical value, was previously actively studied in reduced dimension systems. In this work, for the first time, the possibility and features of energy transfer at frequencies outside the phonon spectrum of a crystal are studied on the Pt_3Al biatomic lattice, the corresponding excitations in which are created through the implementation of harmonic vibrations at frequencies lying in the phonon spectrum gap. It was found that as a result of the initial impact, the parameters of which lie in the band gap, at the first stage, discrete breathers are formed on aluminum atoms lying in the immediate vicinity of the impact zone. The threshold value of the energy required to excite breathers, determined by the amplitude and frequency of exposure, decreases as the frequency approaches the boundary of the slit in the spectrum. At the second stage, after the end of the harmonic action, a soliton-like wave is formed, moving along the crystal with an average speed of 4.5 km/s. The wave velocity is practically independent of the initial disturbance amplitude. The shape and amplitude of the moving wave are weakly dependent on the initial frequency. Significant differences in the profile and a tendency to bimodality were revealed only when exposed to frequencies close to the lower limit of the spectrum. The results obtained contribute to a fundamental understanding of the features of the propagation of elastic disturbances in nonlinear media in case of forbidden zones region impacts.

Keywords: phonon band, discrete breather, soliton, realistic potential, nonlinear dynamics, crystal lattice.

УДК: 538.913

Молекулярно-динамический анализ транспорта энергии в кристалле Pt_3Al при воздействии в запрещенной зоне спектра

Захаров П. В.^{†,1,2}, Дмитриев С. В.^{2,3}, Корзникова Е. А.^{2,4}

¹Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт Петербург, 195251, Россия

²Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа, 450001, Россия

³Институт физики молекул и кристаллов Уфимского федерального исследовательского центра РАН, Уфа, 450075, Россия

⁴Уфимский государственный авиационный технический университет, Уфа, 450008, Россия

На фоне постоянного поиска новых механизмов транспорта энергии, ассоциированных уменьшением потерь, начинается активное исследование возможностей генерации мобильных возбуждений на частотах вне фононного спектра. Эффект передачи энергии на частотах вне спектра при условии, что амплитуда возбуждения превышает критическое значение ранее был активно исследован в системах пониженной размерности. В данной работе впервые изучаются возможность и особенности передачи энергии на частотах вне фононного спектра кристалла на примере биатомной решетки Pt_3Al , соответствующие возбуждения в которой создаются посредством реализации гармонических колебаний на частотах, лежащих в щели фононного спектра. Установлено, что в результате начального воздействия, параметры которого лежат в области запрещенной зоны, на первом этапе происходит формирование дискретных бризеров на атомах алюминия, лежащих в непосредственной близости от зоны воздействия. Пороговое

значение энергии, необходимое для возбуждения бризеров, определяемое амплитудой и частотой воздействия, уменьшается по мере приближения частоты к границе щели в спектре. На втором этапе после окончания гармонического воздействия формируется солитоноподобная волна, движущаяся по кристаллу со средней скоростью 4.5 км/сек. Скорость волны практически не зависит от начальной амплитуды возмущения. Форма и амплитуда движущейся волны слабо зависят от начальной частоты. Значительные отличия профиля и склонность к бимодальности были выявлены только при воздействии на частотах, приближенных к нижней границе спектра. Полученные результаты вносят вклад в фундаментальное понимание особенностей распространения упругих возмущений в нелинейных средах в области запрещенных зон воздействия.

Ключевые слова: фононный спектр, дискретный бризер, солитон, кристаллические решетки, нелинейная динамика.

1. Введение

Активное развитие науки и технологий приводит к тому, что использование материала все чаще ассоциировано с выходом его из равновесного состояния. При этом особое значение приобретает нелинейная природа межатомных взаимодействий и связанных с ним явлений. Одним из таких явлений является супратрансмиссия — передача энергии на частотах, находящихся вне фононного спектра кристалла [1,2]. Проявление супратрансмиссии в кристаллических решетках вызывает интерес с момента начала активного изучения данного эффекта [1–4], который объясняется с точки зрения возбуждения нелинейных локализованных мод при внешнем гармоническом воздействии [4]. Изучение супратрансмиссии является важным в ключе возможности использования данного явления в разработке новых механизмов транспорта энергии с пониженным коэффициентом потерь.

Вслед за первыми работами последовали исследования возможности применения супратрансмиссии в различных сферах. В частности, для передачи двоичного сигнала в дискретных системах [5,6]. Поиск вклада супратрансмиссии в динамику оптических волноводов приводит к построению моделей движения солитонов в них [7,8]. Рассматриваемый эффект исследован, в том числе, с позиции эволюции физических свойств системы, так, в частности, в работе [9] рассматривается вопрос переноса тепла волнами супратрансмиссии. Авторами показано, что возможна передача энергии из менее нагретой области в более нагретую. Можно отметить, что явление передачи энергии на частотах вне спектра наблюдалось и изучалось в системах различной природы и масштаба от монокристаллов до многокомпонентных систем. [10–14], в том числе в неупорядоченных дискретных структурах и новых материалах [15–23]. Так, в [16] показано, что из-за пространственной асимметрии структуры минимальная граница амплитуд воздействия, в результате которых инициируется эффект супратрансмиссии, может существенно смещаться при одновременном воздействии возбуждения структуры с разных концов. В продолжении анализа данного эффекта в работе [23] авторами выявлен интересный факт, который свидетельствует о возникновении эффекта супратрансмиссии в листе деформированного графена без ограничений по минимальному значению амплитуды воздействия.

Обсуждая природу эффекта супратрансмиссии, необходимо затронуть вопрос о нелинейных локализованных

модах, поддерживаемых рассматриваемыми системами. Именно они участвуют в непосредственной передаче энергии в глубь кристалла. Такие моды в бездефектных решетках принято называть дискретными бризерами (ДБ) [24]. Существуют различные подходы к классификации данных объектов. Наиболее общий из них заключается в разделении на два типа по зависимости частоты от амплитуды колебаний: мягкий тип при уменьшении частоты с увеличением амплитуды и жесткий тип при увеличении частоты с ростом амплитуды. Также возможна классификация по расположению в пространстве, характеру колебаний, способам локализации, природе дискретных структур и т.д. Детально ДБ рассмотрены в ряде обзоров и исследовательских работ [25–27]. Актуальным вопросом является установление вклада таких объектов в макроскопические свойства дискретных структур и более глубокое понимание их природы [28–40]. В том числе продолжают вызывать интерес магнитные солитоны в виде дискретных бризеров, исследование различных видов решений и алгоритмов их численного поиска [28–30]. Оригинальным выглядит обсуждение согласия полуаналитических расчетов и результатов численных экспериментов в модели DNA Joeyux-Buyukdagli [31]. Лидирующие позиции при этом традиционно занимают оптические системы [40], где наиболее развито практическое применение солитонов в целом. Продолжаются исследования в атомистических моделях металлов и сплавов, а также их влияние на различные макроскопические свойства структур [33–40]. Например, в работе [38] впервые показано, что ДБ могут как увеличивать теплоемкость кристаллов, так и уменьшать ее, в зависимости от их типа.

Изучение описанных выше эффектов в моделях реальных сплавов является актуальной и важной задачей, нацеленной на интеграцию теоретических знаний в практическое русло. В данной работе рассматривается модель сплава стехиометрии A_3B со сверхструктурой $L1_2$, с реалистичным межатомным ЕАМ-потенциалом, полученным по методике, предложенной в работе [41], для интерметаллида Pt_3Al . В целом сплавы на базе Pt и Al применяются в широком спектре научных и технических задач в виду их особых физико-химических свойств [42–44], в том числе и при интенсивных внешних воздействиях для Pt_3Al [45–47].

В работах [48,49] нами было показано для Pt_3Al проявление эффекта супратрансмиссии. Установлено смещение границы поглощения при увеличении амплитуды воздействия. В [50] исследуется распространение сгенерированных волн в данном кристалле в зависимости

от характеристик внешнего воздействия, и делается вывод об определяющей роли дискретных бризеров с мягким типом нелинейности в формирование уединенных волн. В данной работе целью изучения является механизм генерации уединенных волн в кристалле стехиометрии A_3B для различных направлений в диапазоне частот запрещенной области фононного спектра.

2. Модель и методика эксперимента

Как сказано выше, нами осуществлялось моделирование кристалла состава A_3B со сверхструктурой $L1_2$ посредством метода молекулярной динамики. Данный метод был выбран как наиболее универсальный инструмент симуляции различных физических процессов в кристаллических решетках, в том числе анализ нелинейных явлений [1–6], распространения дефектов, структурно-фазовых переходов [7, 8] анализа механических свойств материала при различных внешних воздействиях [9–11] и многих других. За основу был выбран кристалл Pt_3Al . Модель содержала от 3×10^5 до 1.2×10^6 частиц, а линейные размеры вдоль направления внешнего воздействия достигали 0.1–0.5 мкм. Такие размеры модели необходимы для исследования не только механизмов возникновения супратрансмиссии в данном кристалле, но и для изучения динамики распространения сформированных возмущений структуры. Схематично модель представлена на Рис. 1а.

В качестве основного инструмента моделирования использовался пакет LAMMPS [62], для визуализации результатов применялась OVITO [63], а также программное обеспечение собственной разработки. Фононный

спектр (Рис. 1б) в модели рассчитан посредством оригинальной методики на базе молекулярно-динамического моделирования при температуре 300 К. В отличие от работы [50], где использовались встроенные процедуры на основе преобразования Фурье автокорреляционных функций перемещений атомов от времени. Результаты хорошо совпали в области запрещенной зоны, которая в данном кристалле находится в интервале частот 6.7–7.9 ТГц.

В целом модель кристалла представляла из себя параллелепипед, одна из сторон которого существенно больше двух других. Именно вдоль данного направления осуществлялось гармоническое воздействие на кристалл. Так, вдоль осей X и Y откладывалось по 15 элементарных ячеек кристалла, а вдоль оси Z — от 250 до 1250.

В данной работе проведено сравнение распространения супратрансмиссионных солитоноподобных волн для двух случаев ориентации кристалла. В первом случае ось Z соответствовала кристаллографическому направлению [001], во втором [110]. Область воздействия представляла собой несколько слоев атомов, в пределах которой в течение первых 5 пс осуществляли движение по синусоидальному закону с заданной амплитудой и частотой. С другой стороны ячейки располагался демпфер с жестко зафиксированным положением атомов с целью избегания движения ячейки как целого. Диапазон частот гармонического колебания охватывал частоты запрещенной зоны кристалла: 6.6–8.28 ТГц. Значение амплитуд воздействия было разным. Так, для направления [001] значения варьировались от 0.15 до 0.3 Å, а для более плотноупакованного направления [110] — от 0.05 до 0.16 Å. Это обусловлено различным

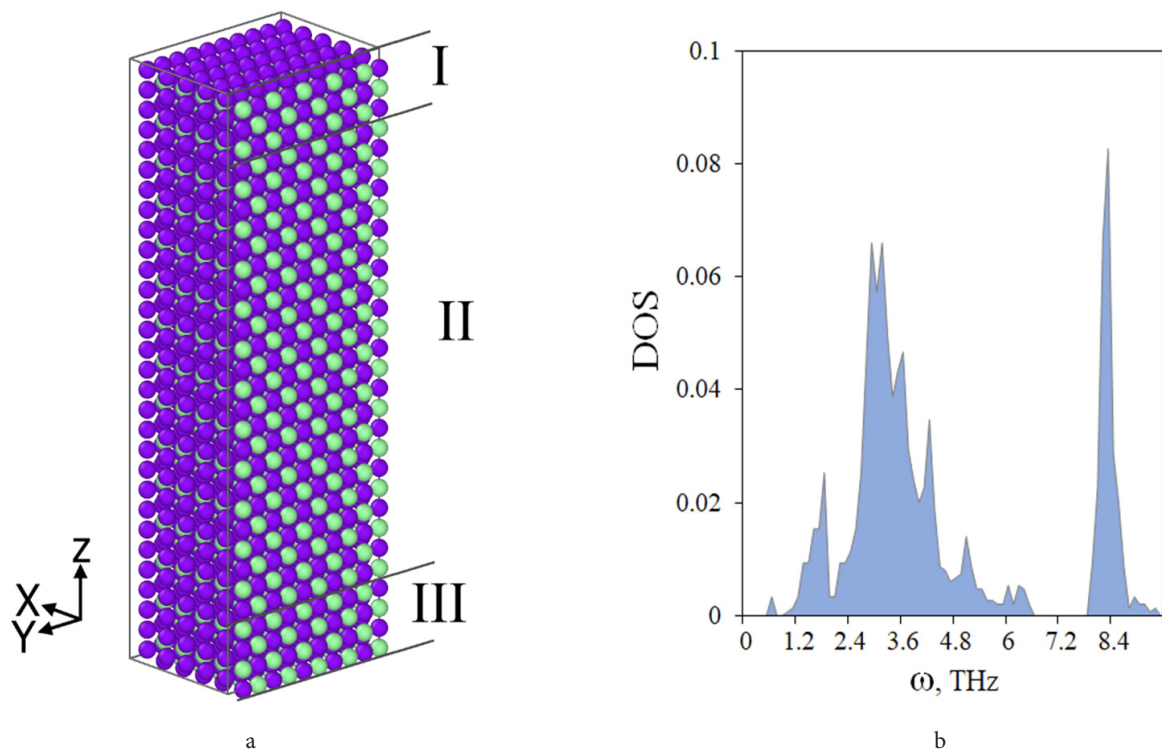


Рис. 1. (Color online) Схематическое изображение модели, где I обозначена область гармонического воздействия, II — область поглощения, III — демпферная часть (а). Плотность фононных состояний модели кристалла стехиометрии A_3B (б).

Fig. 1. (Color online) Schematic representation of the model, where I denotes the region of harmonic action, II is the absorption region, III is the damping part (a); phonon band of the Pt_3Al stoichiometry crystal model (b).

расстоянием между двумя соседними плоскостями вдоль выбранных направлений, равных 1.96 и 1.39 Å для первого и второго случая соответственно. Изменение амплитуды воздействия в данном случае является инструментом контроля интенсивности внешнего воздействия на кристалл с целью избежания преждевременного разрушения решетки. Время воздействия во всех случаях составляло 5 пс.

Для анализа характера распространения волн фиксировались координаты, скорости, силы вдоль распространения волны, а также рассчитывались значения кинетической и потенциальной энергии атомов. Для графического представления результатов производилось осреднение параметров. Так, для оценки энергии выбирались три ряда, содержащих атомы обоих сортов, и для каждой плоскости усреднение производилось по этим рядам. Дополнительные визуализаторы применялись из стандартного набора функций OVITO [62].

3. Результаты и обсуждения

На первом этапе обсудим процесс формирования уединенной волны вдоль направления [001]. Для этих целей отследим зависимость распределения энергии вдоль ячейки на атомах Pt для различных моментов времени (Рис. 2). Выбор рядов платины обусловлен тем, что основная энергия волны сосредоточена именно на них [50]. Стрелкой на рисунке показано направление распространения возмущения среды вдоль оси Z. Продемонстрирован интервал от 2.5 до 10.5 пс для частоты 7.27 ТГц. Значение частоты выбрано примерно

в середине запрещенной зоны, чтобы избежать возмущений, вызванных близостью к ее границам. Характерным является изменение формы волны в течении этого периода времени. На начальных этапах мы видим два пика и более широкий профиль, далее второй пик сглаживается, и амплитуда волны увеличивается. В итоге через 8–10 пс формируется устойчивый профиль волны, который с течением времени практически не изменяется.

Проанализируем влияние частоты воздействия на характер возмущения. Рассмотрим энергетический профиль волны на значительном удалении от зоны воздействия порядка 0.25 мкм. Для преодоления данного расстояния волнам потребовалось 55 пс, тем самым скорость таких волн составляет величину порядка 4.5 км/с. При этом отметим, что частота воздействия на скорость практически не влияет. Существенные отличия в профиле первой уединенной волны наблюдаются для частот, близких к нижней границе запрещенной зоны. Так, для частоты 6.85 ТГц, мы видим значительное увеличение амплитуды и характерный бимодальный профиль. В то время как все оставшиеся волны имеют более близкое друг к другу значение амплитуды (Рис. 3а). Причиной этого может являться поведение дискретных бризеров вблизи зоны воздействия. Основная энергия от внешнего воздействия на первых этапах аккумулируется именно кластерами дискретных бризеров в ближайшем к зоне воздействия слое Al (Рис. 4). На рисунке показана средняя энергия, приходящаяся на атом, для ближайших трех приповерхностных слоев (два Al, и один Pt) к

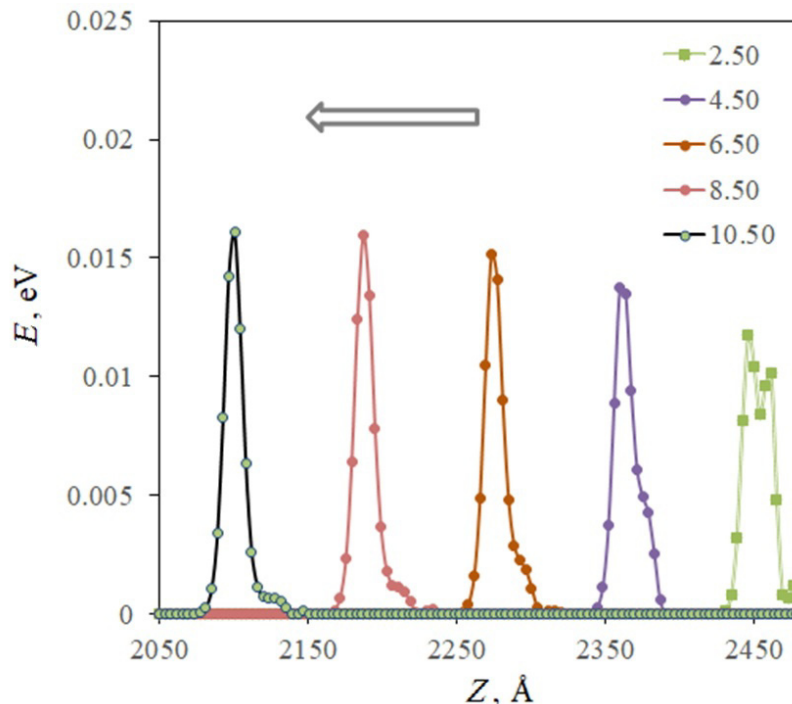


Рис. 2. (Color online) Процесс формирования уединенной волны вдоль направления [001]: частота воздействия 7.27 ТГц, амплитуда 0.18 Å, шаг 2 пс. Стрелкой показано направление распространения возмущения среды.

Fig. 2. (Color online) The process of formation of a solitary wave along the [001] direction: harmonic excitation frequency 7.27 THz, amplitude 0.18 Å, step 2 ps. The arrow shows the direction of the wave propagation in the lattice.

области воздействия. Соответственно, для реализации процесса передачи энергии вглубь кристалла им нужно преодолеть энергетический барьер, обусловленный наличием запрещенной зоны. Пороговая величина барьера тем выше, чем больше частота гармонического воздействия погружена в запрещенную зону (Рис. 5). Это, в свою очередь, может приводить к потере устойчивости кристаллической решетки и разрушению внешних слоев кристалла. Также это подтверждается и наличием последующих волн, если частоты ближе к оптической

ветви (меньший энергетический барьер), то вслед за первой волной следуют последующие с близким значением амплитуд (Рис. 3б).

Таким образом, в данном направлении процесс формирования уединенных волн состоит из двух этапов, общей продолжительностью порядка 10 пс. На начальной стадии происходит аккумуляция энергии в верхнем слое алюминия в виде кластеров дискретных бризеров, далее достигнув некоторого уровня, энергия передается в кристалл. Следующий этап состоит в формировании

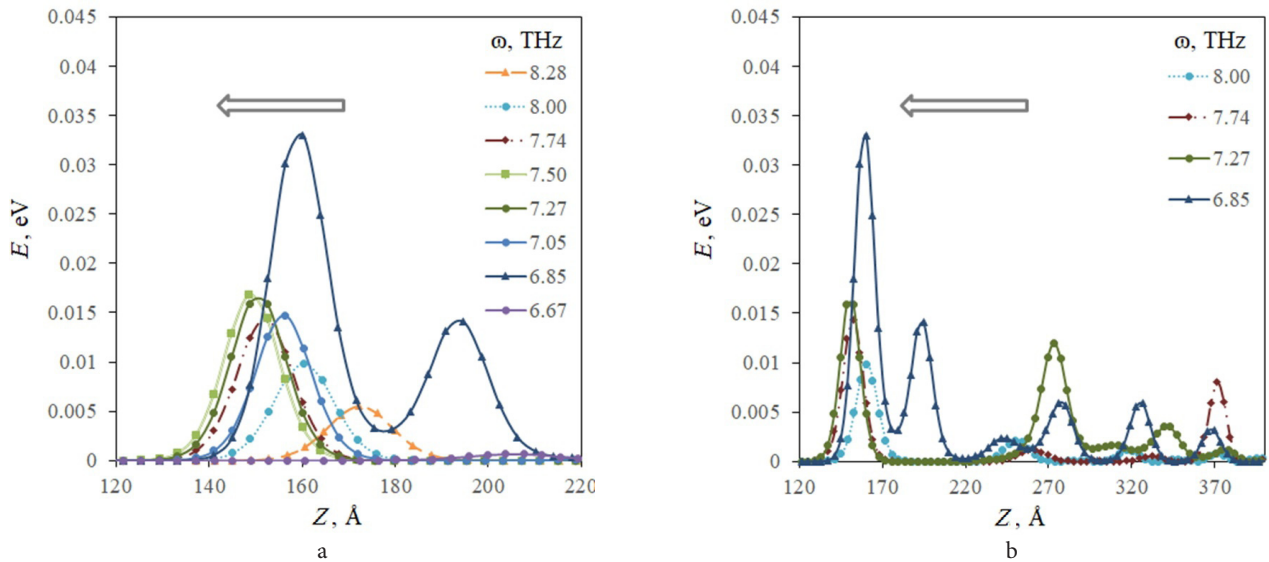


Рис. 3. (Color online) Зависимость распределения энергии, сосредоточенной вдоль ряда Pt, от частоты воздействия через 55 пс: показан первая волна для всех рассматриваемых частот (а), показаны 4 уединенные волны для выбранных частот (б).

Fig. 3. (Color online) Dependence of the energy distribution concentrated along the Pt row on the impact frequency after 55 ps: the first wave is shown for all considered frequencies (a), 4 solitary waves are shown for the selected frequencies (b).

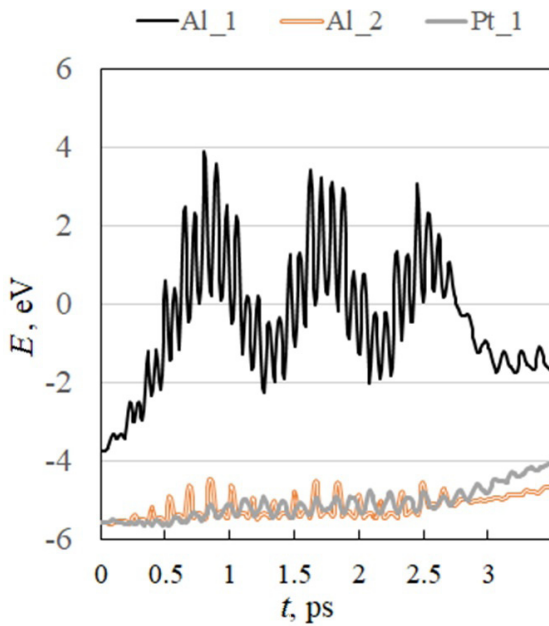


Рис. 4. (Color online) Зависимость полной энергии на атом для трех первых атомных плоскостей от времени. Параметры внешнего воздействия: частота 7.27 ТГц, амплитуда 0.18 Å.

Fig. 4. (Color online) Dependence of the total energy per atom for the first three atomic planes on time. Harmonic impact parameters: frequency 7.27 THz, amplitude 0.18 Å.

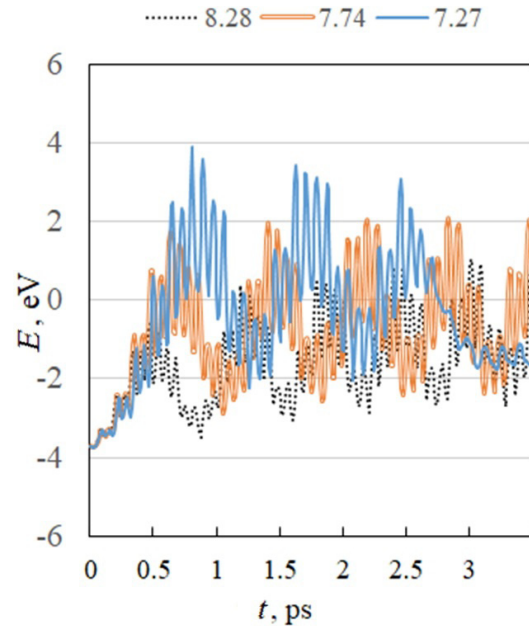


Рис. 5. (Color online) Зависимость полной энергии на атом первого слоя алюминия для частот: 8.28, 7.74, 7.27 ТГц, амплитуда воздействия 0.18 Å.

Fig. 5. (Color online) Dependence of the total energy per atom of the first aluminum layer for frequencies: 8.28, 7.74, 7.27 THz, the impact amplitude is 0.18 Å.

профиля солитоноподобной волны, показанного на Рис. 2. Данная волна, представляющая, по сути, солитон сжатия, способна перемещаться на значительные расстояния, не изменяя свою форму, что позволяет предположить, что возбуждение подобных волн может стать перспективным в ключе поиска новых способов транспорта энергии.

4. Выводы

В работе методом молекулярной динамики рассмотрено возбуждение солитоноподобных волн в биатомном кристалле Pt_3Al путем приложения гармонического воздействия в интервале частот, соответствующих запрещенной зоне фононного спектра данного кристалла. Было установлено, что для реализации процесса энергопереноса необходимо преодоление потенциального барьера. Этот факт связан с тем, что при воздействии в интервале частот вне фононного спектра в структуре возникают дискретные бризеры, на инициирование которых требуется определенное количество энергии. Как видно из Рис. 4 и 5, бризеры возникают на атомах алюминия, что обусловлено их меньшей массой. В рассмотренном интервале частот гармонических воздействий 6.67–8.28 ТГц наиболее эффективное возбуждение дискретных бризеров происходит при воздействии на частотах, близких к верхней границе фононного спектра, что позволяет предположить, что работа именно с этим интервалом частот в дальнейшем позволит разработать новые механизмы беспотерного транспорта энергии.

В дальнейшем цикле работ по данной тематике будет более подробно рассмотрена эволюция структурных параметров в процессе воздействия и при движении солитоноподобной волны, а также определено влияние кристаллографического направления на эффективность переноса энергии.

Благодарности / Acknowledgements. Работа выполнена за счет гранта РФФ № 21-12-00275. Часть результатов работы были получены с использованием вычислительных ресурсов суперкомпьютерного центра Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого. (www.scc.spbstu.ru). / This work was supported by the Russian Science Foundation grant No. 21-12-00275. 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)

Литература/References

1. F. Geniet, J. Leon. Physical Review Letters. 89 (13), 134102 (2002). [Crossref](#)
2. F. Geniet, J. Leon. Journal of Physics Condensed Matter. 15 (17), 2933 (2003). [Crossref](#)
3. R. Khomeriki, S. Lepri, S. Ruffo. Physical Review E. 70 (6), 066626 (2004). [Crossref](#)
4. R. Khomeriki. Physical Review Letters. 92(6), 063905 (2004). [Crossref](#)
5. J.E. Macías-Díaz, A. Puri. Physica D: Nonlinear Phenomena. 228 (2), 112 (2007). [Crossref](#)
6. J.E. Macías-Díaz, A. Puri. Physics Letters, Section A: General, Atomic and Solid State Physics. 366 (4-5), 447 (2007). [Crossref](#)
7. H. Susanto, N. Karjanto. Journal of Nonlinear Optical Physics and Materials. 17 (2), 159 (2008). [Crossref](#)
8. R. Khomeriki, J. Leon. Physical Review A – Atomic, Molecular, and Optical Physics. 80 (3), 033822 (2009). [Crossref](#)
9. B.-Q. Ai, D. He, B. Hu. Physical Review E – Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics. 81 (3), 031124 (2010). [Crossref](#)
10. J.E. Macías-Díaz. Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation. 15 (7), 1740 (2010). [Crossref](#)
11. P. Anghel-Vasilescu, J. Dorignac, F. Geniet, J. Leon, M. Taki. Physical Review Letters. 105 (7), 074101 (2010). [Crossref](#)
12. P. Anghel-Vasilescu, J. Dorignac, F. Geniet, J. Leon, A. Taki. Physical Review A – Atomic, Molecular, and Optical Physics. 83 (4), 043836 (2011). [Crossref](#)
13. F. Tao, W. Chen, J. Pan, W. Xu, S. Du. Chaos. Solitons and Fractals. 45 (6), 810 (2012). [Crossref](#)
14. A.B. Togueu Motcheyo, C. Tchawoua, M. Siewe Siewe, J.D. Tchianang Tchameu. Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation. 18 (4), 946 (2013). [Crossref](#)
15. B. Yousefzadeh, A.S. Phani. Journal of Sound and Vibration. 380, 242 (2016). [Crossref](#)
16. Z. Wu, K.W. Wang. Proceedings of SPIE – The International Society for Optical Engineering. 10595, 1059514 (2018). [Crossref](#)
17. Z. Wu, K.W. Wang. Journal of Sound and Vibration. 458, 389 (2019). [Crossref](#)
18. M.R. T. Bidhendi. Proceedings of the ASME Design Engineering Technical Conference. 7, V007T07A017 (2020). [Crossref](#)
19. M.M. Foudjio, F.T. Ndjomatchoua, C.L. Gninzanlong, C. Tchawoua. Chaos. 30 (12), 123122 (2020). [Crossref](#)
20. Q. Zhang, H. Fang, J. Xu. Physical Review E. 101 (4), 042206 (2020). [Crossref](#)
21. J.E. Pechac, M.J. Frazier. Crystals. 11 (2), 94 (2021). [Crossref](#)
22. J.E. Macías-Díaz, A. Bountis. Journal of Computational and Nonlinear Dynamics. 16 (2), 021001 (2021). [Crossref](#)
23. I. Evazzade, I.P. Lobzenko, E.A. Korznikova, I.A. Ovid'Ko, M.R. Roknabadi, S.V. Dmitriev. Physical Review B. 95 (3), 035423 (2017). [Crossref](#)
24. T. Dauxois, M. Peyrard, C.R. Willis. Physica D: Nonlinear Phenomena. 57 (3-4), 267 (1992). [Crossref](#)
25. S. Flach, C.R. Willis. Physics Report. 295 (5), 181 (1998). [Crossref](#)
26. S. Flach, A.V. Gorbach. Physics Reports. 67 (1-3), 1 (2008). [Crossref](#)
27. S.V. Dmitriev, E.A. Korznikova, Y.A. Baimova, M.G. Velarde. Physics-Uspekhi. 59 (5), 446 (2016). [Crossref](#)
28. I.G. Bostrem, V.E. Sinitsyn, A.S. Ovchinnikov, M.I. Fakhretdinov, E.G. Ekomasov. Letters on Materials. 11 (1), 109 (2021). (in Russian) [И.Г. Бострем,

- В. Е. Синицын, А. С. Овчинников, М. И. Фахретдинов, Е. Г. Екомасов. Письма о материалах. 11 (1), 109 (2021).] [Crossref](#)
29. W. Feng, L. Wu, B. Tang, K. Deng. International Journal of Theoretical Physics. 60 (4), 1438 (2021). [Crossref](#)
 30. I. G. Bostrem, V. E. Sinitsyn, A. S. Ovchinnikov, E. G. Ekomasov, J. Kishine. AIP Advances. 11 (1), 015208 (2021). [Crossref](#)
 31. C. L. Gninzanlong, F. T. Ndjomatchoua, C. Tchawoua. Physical Review E. 102 (5), 052212 (2021). [Crossref](#)
 32. C. Naveau, G. Vanderhaegen, P. Szriftgiser, G. Martinelli, M. Droques, A. Kudlinski, M. Conforti, S. Trillo, N. Akhmediev, A. Mussot. Frontiers in Physics. 9, 637812 (2021). [Crossref](#)
 33. K. A. Krylova, I. P. Lobzenko, A. S. Semenov, A. A. Kudreyko, S. V. Dmitriev. Computational Materials Science. 180, 109695 (2020). [Crossref](#)
 34. R. T. Murzaev, A. S. Semenov, A. I. Potekaev, M. D. Starostenkov, P. V. Zakharov, V. V. Kulagina, S. V. Dmitriev. Russian Physics Journal. 64 (2), 293 (2021). [Crossref](#)
 35. E. A. Korznikova, A. Y. Morkina, M. Singh, A. M. Krivtsov, V. A. Kuzkin, V. A. Gani, Y. V. Bebikhov, S. V. Dmitriev. European Physical Journal B. 93 (7), 123 (2020). [Crossref](#)
 36. R. Vidhya, P. V. Ranjan, N. R. Shanker. Proceedings of the 7th International Conference on Electrical Energy Systems, ICEES. 9383639, 448 (2021). [Crossref](#)
 37. S. V. Dmitriev, E. A. Korznikova, A. P. Chetverikov. Journal of Experimental and Theoretical Physics. 126, 347 (2018). [Crossref](#)
 38. M. Singh, A. Y. Morkina, E. A. Korznikova, V. I. Dubinko, D. A. Terentiev, D. Xiong, O. B. Naimark, V. A. Gani, S. V. Dmitriev. Journal of Nonlinear Science. 31 (1), 12 (2021). [Crossref](#)
 39. F. Hadipour, D. Saadatmand, M. Ashhadi, A. M. Marjanesh, I. Evazzade, A. Askari, S. V. Dmitriev. Physics Letters, Section A: General, Atomic and Solid State Physics. 384 (4), 126100 (2020). [Crossref](#)
 40. K. S. Sergeev, A. P. Chetverikov, E. del Rio. Nonlinear Dynamics. 102 (3), 1813 (2020). [Crossref](#)
 41. X. W. Zhou, R. A. Johnson, H. N. G. Wadley. Physical Review B. 69, 144113 (2004). [Crossref](#)
 42. B. Rezaee, S. Rastegari, H. Eyvazjamadi. Surface Engineering. 37 (3), 343 (2021). [Crossref](#)
 43. X.-Y. Lang, G.-F. Han, B.-B. Xiao. Advanced Functional Materials. 25 (2), 230 (2015). [Crossref](#)
 44. H. Wan, R. V. Chaudhari, B. Subramaniam. Topics in Catalysis. 55 (3-4), 129 (2012). [Crossref](#)
 45. Y. Pan. Journal of Materials Engineering and Performance. 30 (4), 2661 (2021). [Crossref](#)
 46. Q. Li, B. Wei, Y. Li, J. Xu, J. Li, L. Liu, F. L. Deepak. ACS Sustainable Chemistry and Engineering. 7 (11), 9842 (2019). [Crossref](#)
 47. Y. Pan, M. Wen. Vacuum. 156, 419 (2019). [Crossref](#)
 48. A. I. Cherednichenko, P. V. Zakharov, M. D. Starostenkov, M. O. Sysoeva, A. M. Eremin. Computer Research and Modeling. 11 (1), 109 (2019). (in Russian) [А. И. Чередниченко, П. В. Захаров, М. Д. Старостенков, М. О. Сысоева, А. М. Ерёмин. Компьютерные исследования и моделирование. 11 (1), 109 (2019).] [Crossref](#)
 49. P. V. Zakharov, M. D. Starostenkov, A. M. Eremin. IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. 537 (2), 022031 (2019). [Crossref](#)
 50. P. V. Zakharov, M. D. Starostenkov, E. A. Korznikova, A. M. Eremin, I. S. Lutsenko, S. V. Dmitriev. Physics of the Solid State. 61 (11), 2160 (2019). [Crossref](#)
 51. E. A. Korznikova, D. V. Bachurin, S. Y. Fomin, A. P. Chetverikov, S. V. Dmitriev. Eur. Phys. J. B. 90 (2), 23 (2017). [Crossref](#)
 52. A. V. Savin, E. A. Korznikova, S. V. Dmitriev. Phys. Rev. B. 99, 235411 (2019). [Crossref](#)
 53. I. A. Shepelev, A. P. Chetverikov, S. V. Dmitriev, E. A. Korznikova. Comput. Mater. Sci. 177, 109549 (2020). [Crossref](#)
 54. E. A. Korznikova, I. A. Shepelev, A. P. Chetverikov, S. V. Dmitriev, S. Y. Fomin, K. Zhou. J. Exp. Theor. Phys. 127 (6), 1009 (2018). [Crossref](#)
 55. R. I. Babicheva, I. Evazzade, E. A. Korznikova, I. A. Shepelev, K. Zhou, S. V. Dmitriev. Comput. Mater. Sci. 163 (1), 248 (2019). [Crossref](#)
 56. I. A. Shepelev, S. V. Dmitriev, A. A. Kudreyko, M. G. Velarde, E. A. Korznikova. Chaos Solitons Fractals. 140 (2), 110217 (2020). [Crossref](#)
 57. H.-Y. Chen, N.-T. Tsou. Comput. Model. Eng. Sci. 120 (2), 319 (2019). [Crossref](#)
 58. W.-J. Lee, Y.-C. Lo, A. Yang, K. Chen, N.-Y. Chen. Comput. Model. Eng. Sci. 120 (2), 293 (2019). [Crossref](#)
 59. L. K. Rysaeva, D. V. Bachurin, R. T. Murzaev, D. U. Abdullina, E. A. Korznikova, R. R. Mulyukov, S. V. Dmitriev. Facta Univ. Ser. Mech. Eng. 18 (4), 525 (2020). [Crossref](#)
 60. L. K. Rysaeva, E. A. Korznikova, R. T. Murzaev, D. U. Abdullina, A. A. Kudreyko, J. A. Baimova, D. S. Lisovenko, S. V. Dmitriev. Facta Univ. Ser. Mech. Eng. 18 (1), 1 (2020). [Crossref](#)
 61. R. I. Babicheva, M. Dahanayaka, B. Liu, E. A. Korznikova, S. V. Dmitriev, M. S. Wu, K. Zhou. Mater. Sci. Eng. B Solid-State Mater. Adv. Technol. 259, 114569 (2020). [Crossref](#)
 62. LAMMPS Molecular Dynamics Simulator [Electronic resource]. [Website](#)
 63. A. Stukowski. Modelling and Simulation Materials Science and Engineering. 18, 015012 (2010). [Crossref](#)