

ДИСКРЕТНЫЕ БРИЗЕРЫ В БЛИЗИ ПОВЕРХНОСТИ ИНТЕРМЕТАЛЛИДНОГО СПЛАВА Pt₃Al

П.В. Захаров^{1,2}, Е.А. Корзникова³, С.В. Дмитриев^{3,4*}

¹Алтайский государственный гуманитарно-педагогический университет им. В.М. Шукшина,
659333, Бийск, Россия

²Алтайский государственный технический университет, 656038, Барнаул, Россия

³Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, 450001, Уфа, Россия

⁴Национальный исследовательский Томский государственный университет, 634050, Томск, Россия

*e-mail: dmitriev.sergey.v@gmail.com

Аннотация. Известно, что бездефектные кристаллы с широкой щелью в фононном спектре могут поддерживать щелевые дискретные бризеры (ДБ), то есть пространственно локализованные колебательные моды большой амплитуды с частотами в щели фононного спектра. К числу таких кристаллов относится интерметаллид Pt₃Al, щель в фононном спектре которого появляется из-за большой разницы атомных масс компонент. В настоящей работе методом молекулярной динамики впервые исследуются ДБ вблизи атомно гладкой поверхности ориентации (100) этого кристалла. Показано, что свойства ДБ существенно зависят от состава крайней атомной плоскости, которая для рассматриваемого кристалла может состоять из атомов Pt или из атомов Pt и Al в равной пропорции. Полученные результаты могут иметь важное значение для физики поверхности.

Ключевые слова: молекулярная динамика, биатомные кристаллы, дискретный бризер.

1. Введение

Дискретные бризеры (ДБ) представляют собой колебательные моды большой амплитуды в нелинейных решетках, не имеющих дефектов [1-4]. В последнее десятилетие они привлекают все большее внимание исследователей, специализирующихся в физике твердого тела и в материаловедении [5-23]. Имеются экспериментальные работы, где обсуждается возможность идентификации ДБ в кристаллах [5,24-27], однако основным методом их исследования на сегодняшний день являются методы атомистического компьютерного моделирования, чему способствует развитие компьютерных технологий, метода молекулярной динамики, а также создание реалистичных потенциалов межатомного взаимодействия.

Отметим, что ДБ традиционно рассматриваются в объеме трехмерных кристаллов [5-27] или вдали от краев двумерных кристаллов [28-38]. В наших недавних работах впервые исследовался щелевой ДБ на краю однородно растянутой графеновой наноленты «кресло» [39,40] и было показано, что конфигурация таких ДБ сильно отличается от ДБ внутри листа графена. Следует отметить, что ДБ на краю листа графена существует в одномерной дискретной среде, с направлением трансляции вдоль края листа. По аналогии с этим можно предположить о существовании ДБ на или вблизи атомарно-гладкой (сингулярной) плоской грани трехмерного кристалла. Интересно, что до сих пор попытки поиска таких ДБ не делались, во всяком случае, авторам данной работы они не

известны. В случае существования таких ДБ, они располагаются в двумерной дискретной среде, неколлинеарные трансляционные вектора которой параллельны поверхности кристалла.

Итак, до настоящего времени в чистых металлах и упорядоченных сплавах исследовались только ДБ, локализованные в объеме трехмерных кристаллов [8-15,41-49]. Основной целью настоящей работы является молекулярно-динамическое исследование возможности существования и свойств ДБ вблизи поверхности кристалла Pt_3Al , имеющего сверхструктуру $L1_2$ на основе ГЦК решетки.

2. Описание модели

Рассматриваемая модель представляет собой ГЦК кристалл Pt_3Al со сверхструктурой $L1_2$ (Рис. 1). Кубическая трансляционная ячейка ГЦК кристалла содержит 4 атома, обозначенные на Рис. 1 буквами А, В, С и D. Атомы платины занимают подрешетки А, В и С, а атомы алюминия подрешетку D. Количество атомов в рассматриваемой модели составляло 108 000. По двум направлениям (X и Z) использовались периодические граничные условия, вдоль третьего направления (Y) они не применялись и, следовательно, грани расчетной ячейки параллельные плоскости XZ представляли собой свободные поверхности.

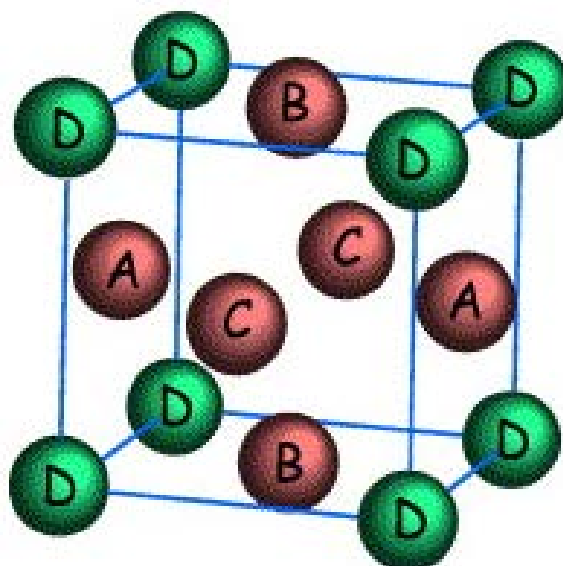


Рис. 1. Кубическая трансляционная ячейка ГЦК решетки. В кристалле Pt_3Al со сверхструктурой $L1_2$ атомы платины занимают подрешетки А, В и С, а атомы алюминия подрешетку D.

Для моделирования межатомного взаимодействия использовался потенциал, полученный методом погруженного атома (ЕАМ). Для рассматриваемого сплава потенциал генерировался с использованием программного обеспечения предложенного Zhou [50]. Потенциалы хорошо воспроизводят основные свойства сплава, такие как: постоянная решетки, упругие постоянные, объемный модуль, энергия образования вакансии и энергия сублимации [50].

Для возбуждения ДБ с мягким типом нелинейности в объеме интерметаллида Pt_3Al достаточно вывести из положения равновесия один атом легкой подрешетки (Al) в определенном направлении на не слишком малое, но и не слишком большое расстояние, чтобы проявились эффекты ангармонизма межатомных связей, но не возникло дефекта кристаллической структуры. При этом начальные смещения всех прочих атомов равны

нулю, как и начальные скорости всех атомов в расчетной ячейке. Такие же начальные условия использовались в данной работе, но прикладывалось начальное смещение к одному из атомов Al вблизи свободной поверхности. Направление начального смещения было либо параллельно, либо перпендикулярно свободной поверхности.

Кристалл может иметь разные поверхности с невысокой потенциальной энергией. В настоящей работе рассмотрена только поверхность с кристаллографической ориентацией (100). Из Рис. 1 видно, что в кристалле Pt₃Al чередуются моноатомные плоскости (100) из атомов Pt и биатомные плоскости состава PtAl. В этом случае возможна свободная поверхность, заканчивающаяся либо атомами платины, либо атомами платины и алюминия в равной пропорции. В работе изучены оба типа поверхности. Перед возбуждением ДБ кристалл со свободной поверхностью подвергался релаксации, которая приводила к изменению межплоскостных расстояний для атомных плоскостей вблизи поверхности.

Расчеты проводились при нулевой температуре, то есть тепловые колебания атомов не вводились.

3. Результаты моделирования

Прежде всего, представим известный результат о ДБ в объеме кристалла Pt₃Al. На Рис. 2 слева показана зависимость частоты ДБ, локализованного на одном атоме Al вдали от поверхности кристалла Pt₃Al, от его амплитуды. Справа представлена плотность фонных состояний кристалла, имеющая щель в диапазоне частот от 5,8 до 8,3 ТГц. Видно, что частота ДБ лежит в щели фонного спектра, снижаясь с ростом его амплитуды, что характеризует мягкий тип нелинейности данной колебательной моды.

Перейдем к рассмотрению ДБ вблизи поверхности ориентации (100) кристалла Pt₃Al. На Рис. 3а, б показана одна биатомная плоскость атомов (100), параллельная координатной плоскости XY. Атомы Pt (Al) изображены темным (светлым) цветом. На Рис. 3а показан вариант поверхности, когда верхний слой состоит из атомов Pt. Атом Al с номером 1 в нулевой момент времени выводился из положения равновесия либо в направлении X, либо в направлении Y. На Рис. 3б плоскость на поверхности биатомная. Атом Al на поверхностном слое в нулевой момент времени отклонялся в направлении Y.

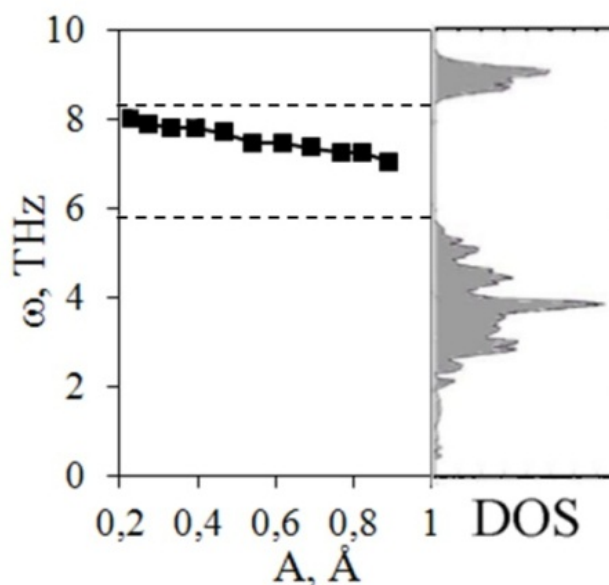


Рис. 2. Слева показана зависимость частоты ДБ, локализованного на одном атоме Al в объеме кристалла Pt₃Al, от его амплитуды. Справа представлена плотность фонных состояний кристалла, имеющая щель в диапазоне частот от 5,8 до 8,3 ТГц.

В процессе релаксации структуры, как уже отмечалось, изменялись межплоскостные расстояния. Они представлены на Рис. 3в и 3г для поверхностей, заканчивающихся платиной и алюминием, соответственно. Отметим, что в случае поверхности с атомами Pt, равновесное межплоскостное расстояние растет с удалением от поверхности быстро выходя на значение в объеме материала, в то время как для биатомной крайней плоскости следует отметить, что межатомное расстояние между первой и второй плоскостью больше, чем в объеме кристалла.

При начальном отклонении атома под номером 1 (см Рис. 3а) вдоль оси Y он через несколько пикосекунд передает свою энергию атому под номером 2. Атом с номером 2 лежит на 4й атомной плоскости от поверхности и, согласно Рис. 3в, межплоскостное расстояние уже близко к значению в объеме кристалла. Поэтому характеристики ДБ на атоме 2 соответствуют ДБ в объеме кристалла. Процесс перехода колебаний от атома 1 к атому 2 показан на Рис. 3д. Отметим, что перекачка энергии начинается практически сразу, и через 5-10 периодов колебаний основная часть энергии атома 1 передается атому 2. Этим обусловлена зависимость частоты от амплитуды для атома под номером 2, показанная на Рис. 4а круглыми символами, она идентична характеристиками ДБ в объеме (см. Рис. 2).

При возбуждении атома 1 на Рис. 3а вдоль оси X (или вдоль эквивалентного направления Z), ДБ оставался устойчивым продолжительное время, и его амплитудно-частотная характеристика также соответствовала ДБ в объеме кристалла. Это связано с тем, что данная поляризация ДБ не чувствительна к присутствию близкой поверхности, поскольку межатомные расстояния в направлениях X и Z практически такие же, как в объеме кристалла. Время жизни данных ДБ велико и достигает нескольких наносекунд.

В случае биатомной плоскости на поверхности кристалла (Рис. 3б), устойчивые колебания были возможны только перпендикулярно поверхности, то есть вдоль оси Y (на рисунке показано стрелочками). Попытки возбудить ДБ в других направлениях приводили к рассеиванию энергии по кристаллу в виде тепловых колебаний атомов. Это обусловлено значительным отличием межплоскостного расстояния для двух крайних плоскостей от величины в объеме кристалла. В результате этого существенно изменяется зависимость частоты ДБ от амплитуды, представленная на Рис. 4а квадратными символами. Видно, что частота ДБ лежит в фоновом спектре кристалла, уменьшаясь с ростом амплитуды ДБ. Такое уменьшение частоты ДБ объясняется смягчением (уменьшением жесткости) межатомных связей с увеличением межатомного расстояния.

На Рис. 4б приведены зависимости энергии ДБ от амплитуды колебаний для поверхности Pt (круглые символы) и для поверхности PtAl (квадратные символы). Примечательным является то, что для возбуждения ДБ перпендикулярно поверхности PtAl требуется значительно меньше энергии, чем для бризера на атоме 2 вблизи поверхности Pt. Бризер на поверхности PtAl может локализовать 0,6 эВ, в то время как ДБ в объеме и ДБ локализованный вблизи поверхности Pt до 2,1 эВ.

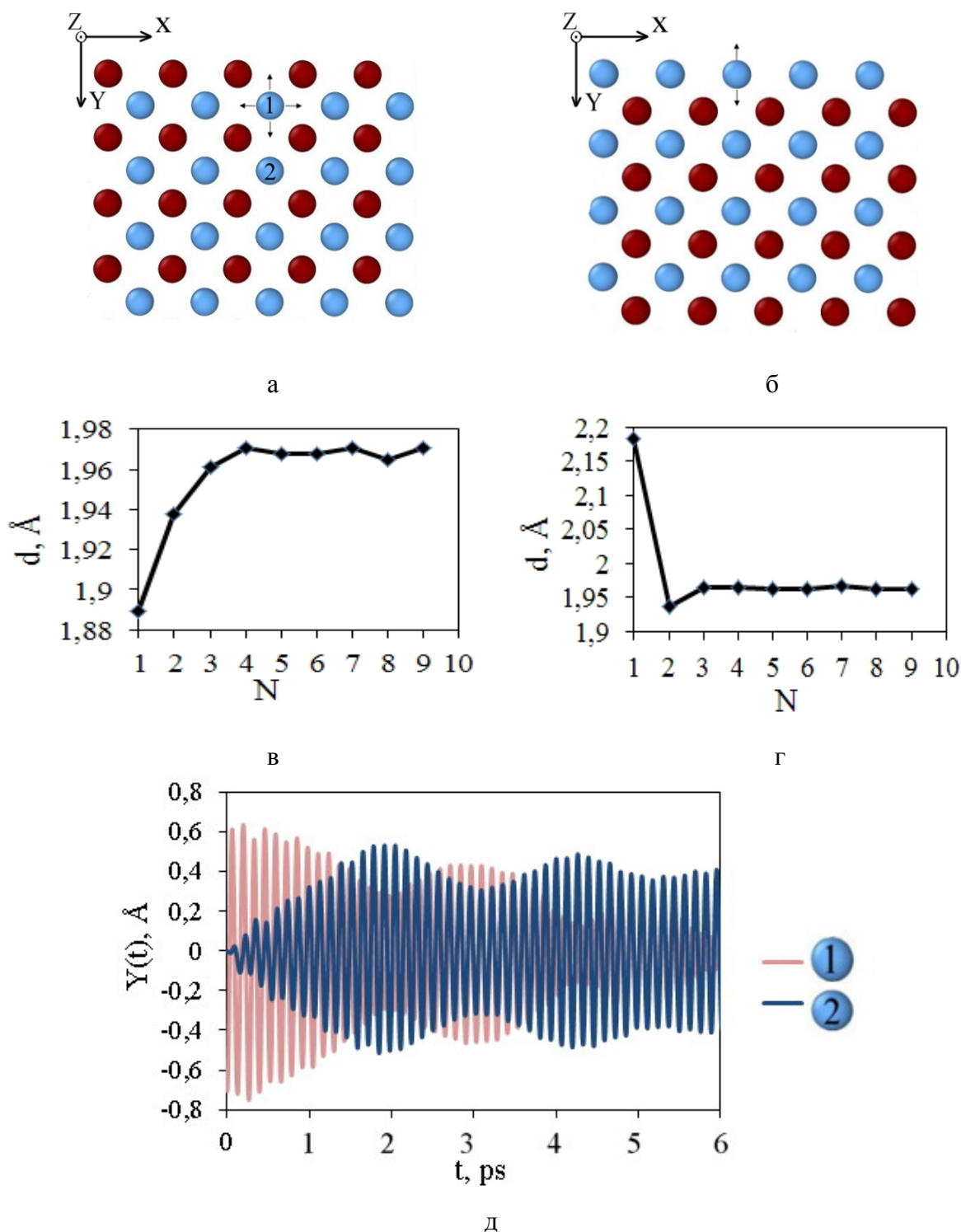


Рис. 3. (а, б) атомы одной биатомной плоскости (100) кристалла Pt₃Al. Ось X направлена вдоль $\langle 010 \rangle$, ось Y вдоль $\langle 001 \rangle$ и ось Z вдоль $\langle 100 \rangle$. Верхний край рисунка – свободная поверхность.

а) плоскость на поверхности состоит из атомов Pt, б) плоскость на поверхности имеет состав PtAl. Стрелками показаны возможные направления устойчивых колебаний ДБ.

На в) и г) показана зависимость расстояния между соседними атомными плоскостями, параллельными XZ, с удалением от поверхности, где N – порядковый номер атомных слоев от поверхности вглубь кристалла. д) Y – компоненты перемещения атомов 1 и 2, показанных на а), как функции времени.

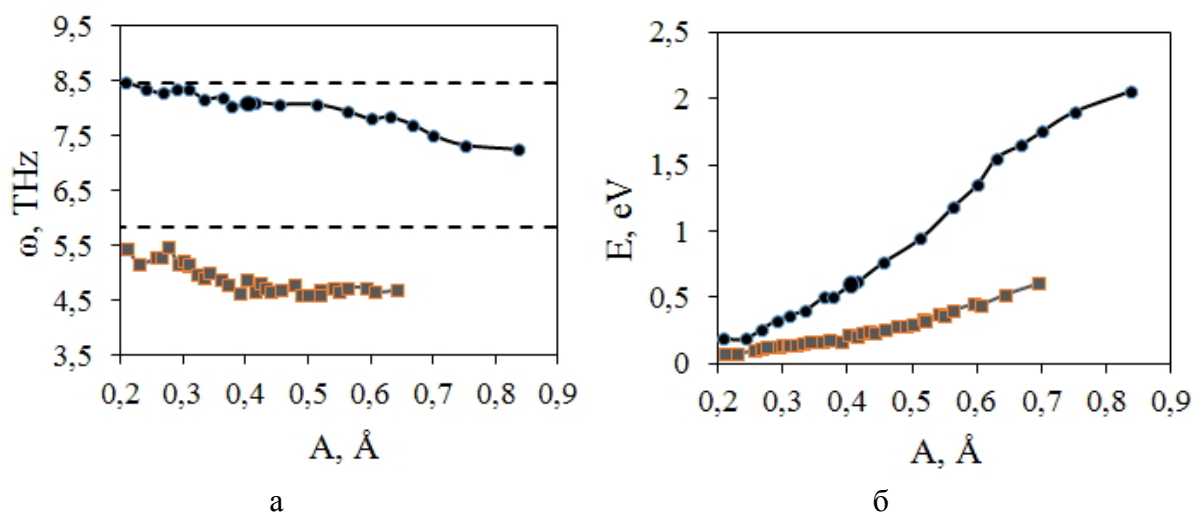


Рис. 4. а) зависимость частоты от амплитуды для ДБ на атоме 2, Рис. 3а, вблизи поверхности Pt (круглые символы) и для ДБ на поверхности PtAl (квадратные символы), для случая на Рис. 2б.

б) Зависимость энергии ДБ от его амплитуды колебаний: круглые (квадратные) символы соответствуют ДБ вблизи поверхности Pt (PtAl).

4. Заключение

Проведенные молекулярно-динамические расчеты показали, что вблизи поверхности и на поверхности ориентации (100) кристалла Pt₃Al могут существовать ДБ локализованные на одном атоме алюминия. Свойства ДБ существенно отличаются в случае поверхности заканчивающейся атомами Pt и атомами Pt и Al в равной пропорции. В первом случае ДБ, возбужденный максимально близко к поверхности в направлении к нормали к поверхности, быстро (за 5-10 колебаний) передает свою энергию атому, находящемуся дальше от поверхности, порождая ДБ со свойствами близкими к ДБ в объеме кристалла. Во втором случае ДБ, осциллирующий вдоль нормали к поверхности, имеет частоту в фоновом спектре кристалла ниже щели. Энергия ДБ на поверхности PtAl существенно (в три-четыре раза) меньше энергии в объеме кристалла или вблизи поверхности Pt. Вблизи поверхности Pt оказывается возможным существование ДБ с колебаниями вдоль поверхности, при этом его характеристики близки к характеристикам ДБ в объеме кристалла.

Полученные результаты показывают возможность локализации энергии на поверхности кристаллов, что может иметь важное значение для физики поверхности.

В последующих работах предполагается изучение взаимодействия ДБ на поверхности кристаллов с краудинами [51,52], выходящими из глубины кристалла на поверхность.

Работа З.П.В. была поддержана грантом Российского научного фонда № 16-12-10175 (получение численных результатов, подготовка рисунков). К.Е.А. благодарит за финансовую поддержку Российский фонд фундаментальных исследований (РФФИ), грант 17-02-00984 (обсуждение результатов моделирования, написание статьи). Д.С.В. благодарит грант Российского научного фонда № 14-13-00982 (постановка задачи, написание статьи).

5. Литература

- [1] A.S. Dolgov // *Soviet Physics of Solid State* **28** (1986) 907.
- [2] A.J. Sievers, S. Takeno // *Physical Review Letters* **61** (1988) 970.

- [3] J.B. Page // *Physical Review B* **41** (1990) 7835.
- [4] S. Flach, A.V. Gorbach // *Physics Reports* **467** (2008) 116.
- [5] S.V. Dmitriev, E.A. Korznikova, J.A. Baimova, M.G. Velarde // *Physics Uspekhi* **59** (2016) 446.
- [6] M.G. Velarde, A.P. Chetverikov, W. Ebeling, S.V. Dmitriev, V.D. Lakhno // *The European Physical Journal B* **89** (2016) 233.
- [7] S.V. Dmitriev // *Nonlinear Theory and Its Applications, IEICE* **8** (2017) 85.
- [8] M. Haas, V. Hizhnyakov, A. Shelkan, M. Klopov, A.J. Sievers // *Physical Review B* **84** (2011) 144303.
- [9] V. Hizhnyakov, M. Haas, A. Shelkan, M. Klopov // *Physica Scripta* **89(4)** (2014) 044003.
- [10] R.T. Murzaev, A.A. Kistanov, V.I. Dubinko, D.A. Terentyev, S.V. Dmitriev // *Computational Material Science* **98** (2015) 88.
- [11] S.V. Dmitriev, A.P. Chetverikov, M.G. Velarde // *Physica Status Solidi (b)* **252** (2015) 1682.
- [12] V. Hizhnyakov, M. Haas, A. Pishtshev, A. Shelkan, M. Klopov // *Nuclear Instruments Methods* **303** (2013) 91.
- [13] R.T. Murzaev, R.I. Babicheva, K. Zhou, E.A. Korznikova, S.Y. Fomin, V.I. Dubinko, S.V. Dmitriev // *The European Physical Journal B* **89(7)** (2016) 168.
- [14] И.П. Лобзенко, А.М. Баязитов, А.П. Четвериков, Р.И. Махмутова, А.А. Кистанов // *Письма о материалах* **6** (2016) 304.
- [15] D.A. Terentyev, A.V. Dubinko, V.I. Dubinko, S.V. Dmitriev, E.E. Zhurkin, M.V. Sorokin // *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* **23(8)** (2015) 085007.
- [16] А.А. Кистанов, Е.А. Корзникова, К.С. Сергеев, Д.А. Шепелев, А.Р. Давлетшин, Д.И. Бокий, С.В. Дмитриев // *Письма о материалах* **6(3)** (2016) 221.
- [17] S.V. Dmitriev, A.A. Kistanov, V.I. Dubinko // *Springer Series Materials* **221** (2015) 205.
- [18] A.A. Kistanov, S.V. Dmitriev, A.P. Chetverikov, M.G. Velarde // *The European Physical Journal B* **87** (2014) 5.
- [19] A.A. Kistanov, A.S. Semenov, S.V. Dmitriev // *Journal of Experimental and Theoretical Physics* **119** (2014) 766.
- [20] A.A. Kistanov, S.V. Dmitriev, A.S. Semenov, V.I. Dubinko, D.A. Terent'ev // *Technical Physics Letters* **40** (2014) 657.
- [21] A.A. Kistanov, R.T. Murzaev, S.V. Dmitriev, V.I. Dubinko, V.V. Khizhnyakov // *Letters to Journal of Experimental and Theoretical Physics* **99** (2014) 353.
- [22] A.P. Chetverikov, I.A. Shepelev, E.A. Korznikova, A.A. Kistanov, S.V. Dmitriev, M.G. Velarde // *Computational Condensed Matter* **13** (2017) 59. <https://doi.org/10.1016/j.cocom.2017.09.004>
- [23] R.T. Murzaev, D.V. Bachurin, E.A. Korznikova, S.V. Dmitriev // *Physics Letters A* **381(11)** (2017) 1003.
- [24] M.E. Manley, A.J. Sievers, J.W. Lynn, S.A. Kiselev, N.I. Agladze, Y. Chen, A. Llobet, A. Alatas // *Physical Review B* **79** (2009) 134304.
- [25] M. Kempa, P. Ondrejko, P. Bourges, J. Ollivier, S. Rols, J. Kulda, S. Margueron, J. Hlinka // *Journal of Physics: Condensed Matter*. **25** (2013) 055403.
- [26] A. J. Sievers, M. Sato, J. B. Page, T. Rossler // *Physical Review B* **88** (2013) 104305.
- [27] M. Kempa, P. Ondrejko, P. Bourges, P. Marton, J. Hlinka // *Physical Review B* **89** (2014) 054308.
- [28] E. Barani, E.A. Korznikova, A.P. Chetverikov, K. Zhou, S.V. Dmitriev // *Physics Letters A* **381(41)** (2017) 3553.
- [29] E. Barani, I.P. Lobzenko, E.A. Korznikova, E.G. Soboleva, S.V. Dmitriev, K. Zhou, A.M. Marjaneh // *The European Physical Journal B* **90** (2017) 38.
- [30] J.A. Baimova // *Letters on Materials* **6** (2016) 31.

- [31] J.A. Baimova, R.T. Murzaev, A.I. Rudskoy // *Physics Letters A* **381** (2017) 3049.
- [32] J.A. Baimova, R.T. Murzaev, I.P. Lobzenko, S.V. Dmitriev, K. Zhou // *Journal of Experimental and Theoretical Physics* **122** (2016) 869.
- [33] I.P. Lobzenko, G.M. Chechin, G.S. Bezuglova, Y.A. Baimova, E.A. Korznikova, S.V. Dmitriev // *Physics of the Solid State* **58(3)** (2016) 633.
- [34] J.A. Baimova, E.A. Korznikova, I.P. Lobzenko, S.V. Dmitriev // *Reviews on Advanced Material Science* **42** (2015) 68.
- [35] G.M. Chechin, S.V. Dmitriev, I.P. Lobzenko, D.S. Ryabov // *Physical Review B* **90** (2014) 045432.
- [36] I. Evazzade, I.P. Lobzenko, E.A. Korznikova, I.A. Ovid'ko, M.R. Roknabadi, S.V. Dmitriev // *Physical Review B* **95(3)** (2017) 035423.
- [37] S.V. Dmitriev // *Journal of Micromechanics and Molecular Physics* **1** (2016) 1630001.
- [38] E.A. Korznikova, S.Y. Fomin, E.G. Soboleva, S.V. Dmitriev // *Letters to Journal of Experimental and Theoretical Physics* **103(4)** (2016) 277.
- [39] E.A. Korznikova, J.A. Baimova, S.V. Dmitriev // *Europhysics Letters* **102** (2013) 60004.
- [40] E.A. Korznikova, A.V. Savin, Y.A. Baimova, S.V. Dmitriev, R.R. Mulyukov // *Letters to Journal of Experimental and Theoretical Physics* **96(4)** (2012) 222.
- [41] P.V. Zakharov, M.D. Starostenkov, A.M. Eremin, E.A. Korznikova, S.V. Dmitriev // *Physics of the Solid State* **59** (2017) 223.
- [42] P.V. Zakharov, A.M. Eremin, M.D. Starostenkov, I.S. Lucenko // *Key Engineering Materials* **743** (2017) 86.
- [43] П.В. Захаров, М.Д. Старостенков, А.М. Еремин, А.И. Чередниченко // *Письма о материалах* **6** (2016) 294.
- [44] M.D. Starostenkov, A.I. Potekaev, S.V. Dmitriev, P.V. Zakharov, A.M. Eremin, V.V. Kulagina, // *Russian Physics Journal* **58** (2016) 1353.
- [45] N.N. Medvedev, M.D. Starostenkov, P.V. Zakharov, S.V. Dmitriev // *Technical Physics Letters* **41** (2015) 994.
- [46] N.N. Medvedev, M.D. Starostenkov, A.I. Potekaev, P.V. Zakharov, A.V. Markidonov, A.M. Eremin // *Russian Physics Journal* **57** (2014) 387.
- [47] N.N. Medvedev, M.D. Starostenkov, P.V. Zakharov, O.V. Pozidaeva // *Technical Physics Letters* **37** (2011) 98.
- [48] A.M. Iskandarov, N.N. Medvedev, P.V. Zakharov, S.V. Dmitriev // *Computational. Material Science* **47** (2009) 429.
- [49] P.V. Zakharov, M.D. Starostenkov, S.V. Dmitriev, N.N. Medvedev, A.M. Eremin // *Letters to Journal of Experimental and Theoretical Physics* **121** (2015) 217.
- [50] X.W. Zhou, R.A. Johnson, H.N.G. Wadley // *Physical Review B* **69** (2004) 144113.
- [51] S.V. Dmitriev, N.N. Medvedev, A.P. Chetverikov, K. Zhou, M.G. Velarde // *Physica status solidi (RRL) - Rapid Research Letters* **11** (2017) 1700298.
- [52] A.M. Iskandarov, N.N. Medvedev, P.V. Zakharov, S.V. Dmitriev // *Computational. Material Science* **47** (2009) 429.

SURFACE DISCRETE BREATHERS IN THE Pt₃Al INTERMETALLIC ALLOY

P.V. Zakharov^{1,2}, E.A. Korznikova³, S.V. Dmitriev^{3,4*}

¹Altai State Humanitarian and Pedagogical University. V.M. Shukshin,
659333, Biysk, Russia

²Altai State Technical University, 656038, Barnaul, Russia

³Institute for Metal Superplasticity Problems of RAS, 450001, Ufa, Russia

⁴National Research Tomsk State University, 634050, Tomsk, Russia

*e-mail: dmitriev.sergey.v@gmail.com

Abstract. It is known that defect-free crystals having a wide gap in the phonon spectrum can support gap discrete breathers (DB) being spatially localized large amplitude vibrational modes with frequencies within the band gap. One of examples of such crystal type is the intermetallic alloy Pt₃Al with a gap in the phonon spectrum caused by large difference in the atomic masses of the components. In the present work, the first attempts of the molecular dynamics modelling studies of the DB close to atomically smooth (100) orientation surface of the crystal is presented. It is shown that properties of the DB depend essentially on the composition of the surface atomic plane, which for the considered crystal can consist of Pt atoms or both of Pt and Al atoms in equal proportions. The results obtained can significantly contribute to the development of surface physics science.

Keywords: molecular dynamics, biatomic crystals, discrete breathers

References

- [1] A.S. Dolgov // *Soviet Physics of Solid State* **28** (1986) 907.
- [2] A.J. Sievers, S. Takeno // *Physical Review Letters* **61** (1988) 970.
- [3] J.B. Page // *Physical Review B* **41** (1990) 7835.
- [4] S. Flach, A.V. Gorbach // *Physics Reports* **467** (2008) 116.
- [5] S.V. Dmitriev, E.A. Korznikova, J.A. Baimova, M.G. Velarde // *Physics Uspekhi* **59** (2016) 446.
- [6] M.G. Velarde, A.P. Chetverikov, W. Ebeling, S.V. Dmitriev, V.D. Lakhno // *The European Physical Journal B* **89** (2016) 233.
- [7] S.V. Dmitriev // *Nonlinear Theory and Its Applications, IEICE* **8** (2017) 85.
- [8] M. Haas, V. Hizhnyakov, A. Shelkan, M. Klopov, A.J. Sievers // *Physical Review B* **84** (2011) 144303.
- [9] V. Hizhnyakov, M. Haas, A. Shelkan, M. Klopov // *Physica Scripta* **89(4)** (2014) 044003.
- [10] R.T. Murzaev, A.A. Kistanov, V.I. Dubinko, D.A. Terentyev, S.V. Dmitriev // *Computational Material Science* **98** (2015) 88.
- [11] S.V. Dmitriev, A.P. Chetverikov, M.G. Velarde // *Physica Status Solidi (b)* **252** (2015) 1682.
- [12] V. Hizhnyakov, M. Haas, A. Pishtshev, A. Shelkan, M. Klopov // *Nuclear Instruments Methods* **303** (2013) 91.
- [13] R.T. Murzaev, R.I. Babicheva, K. Zhou, E.A. Korznikova, S.Y. Fomin, V.I. Dubinko, S.V. Dmitriev // *The European Physical Journal B* **89 (7)** (2016) 168.
- [14] I.P. Lobzenko, A.M. Bayazitov, A.P. Chetverikov, R.I. Mahmutova, A.A. Kistanov // *Letters on Materials* **6 (3)** (2016) 304. (in Russian).

- [15] D.A. Terentyev, A.V. Dubinko, V.I. Dubinko, S.V. Dmitriev, E.E. Zhurkin, M.V. Sorokin // *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* **23** (8) (2015) 085007.
- [16] E.A. Korznikova, A.A. Kistanov, K.S. Sergeev, D.A. Shepelev, A.R. Davletshin, D.I. Bokii, S.V. Dmitriev // *Letters on Materials* **6**(3) (2016) 221. (in Russian).
- [17] S.V. Dmitriev, A.A. Kistanov, V.I. Dubinko // *Springer Series Materials* **221** (2015) 205.
- [18] A.A. Kistanov, S.V. Dmitriev, A.P. Chetverikov, M.G. Velarde // *The European Physical Journal B* **87** (2014) 5.
- [19] A.A. Kistanov, A.S. Semenov, S.V. Dmitriev // *Journal of Experimental and Theoretical Physics* **119** (2014) 766.
- [20] A.A. Kistanov, S.V. Dmitriev, A.S. Semenov, V.I. Dubinko, D.A. Terent'ev // *Technical Physics Letters* **40** (2014) 657.
- [21] A.A. Kistanov, R.T. Murzaev, S.V. Dmitriev, V.I. Dubinko, V.V. Khizhnyakov // *Letters to Journal of Experimental and Theoretical Physics* **99** (2014) 353.
- [22] A.P. Chetverikov, I.A. Shepelev, E.A. Korznikova, A.A. Kistanov, S.V. Dmitriev, M.G. Velarde // *Computational Condensed Matter* **13** (2017) 59. <https://doi.org/10.1016/j.cocom.2017.09.004>
- [23] R.T. Murzaev, D.V. Bachurin, E.A. Korznikova, S.V. Dmitriev // *Physics Letters A* **381**(11) (2017) 1003.
- [24] M.E. Manley, A.J. Sievers, J.W. Lynn, S.A. Kiselev, N.I. Agladze, Y. Chen, A. Llobet, A. Alatas // *Physical Review B* **79** (2009) 134304.
- [25] M. Kempa, P. Ondrejko, P. Bourges, J. Ollivier, S. Rols, J. Kulda, S. Margueron, J. Hlinka // *Journal of Physics: Condensed Matter*. **25** (2013) 055403.
- [26] A.J. Sievers, M. Sato, J.B. Page, T. Rossler // *Physical Review B* **88** (2013) 104305.
- [27] M. Kempa, P. Ondrejko, P. Bourges, P. Marton, J. Hlinka // *Physical Review B* **89** (2014) 054308.
- [28] E. Barani, E.A. Korznikova, A.P. Chetverikov, K. Zhou, S.V. Dmitriev // *Physics Letters A* **381**(41) (2017) 3553.
- [29] E. Barani, I.P. Lobzenko, E.A. Korznikova, E.G. Soboleva, S.V. Dmitriev, K. Zhou, A.M. Marjaneh // *The European Physical Journal B* **90** (2017) 38.
- [30] J.A. Baimova // *Letters on Materials* **6** (2016) 31.
- [31] J.A. Baimova, R.T. Murzaev, A.I. Rudskoy // *Physics Letters A* **381** (2017) 3049.
- [32] J.A. Baimova, R.T. Murzaev, I.P. Lobzenko, S.V. Dmitriev, K. Zhou // *Journal of Experimental and Theoretical Physics* **122** (2016) 869.
- [33] I.P. Lobzenko, G.M. Chechin, G.S. Bezuglova, Y.A. Baimova, E.A. Korznikova, S.V. Dmitriev // *Physics of the Solid State* **58**(3) (2016) 633.
- [34] J.A. Baimova, E.A. Korznikova, I.P. Lobzenko, S.V. Dmitriev // *Reviews on Advanced Material Science* **42** (2015) 68.
- [35] G.M. Chechin, S.V. Dmitriev, I.P. Lobzenko, D.S. Ryabov // *Physical Review B* **90** (2014) 045432.
- [36] I. Evazzade, I.P. Lobzenko, E.A. Korznikova, I.A. Ovid'ko, M.R. Roknabadi, S.V. Dmitriev // *Physical Review B* **95**(3) (2017) 035423.
- [37] S.V. Dmitriev // *Journal of Micromechanics and Molecular Physics* **1** (2016) 1630001.
- [38] E.A. Korznikova, S.Y. Fomin, E.G. Soboleva, S.V. Dmitriev // *Letters to Journal of Experimental and Theoretical Physics* **103**(4) (2016) 277.
- [39] E.A. Korznikova, J.A. Baimova, S.V. Dmitriev // *Europhysics Letters* **102** (2013) 60004.
- [40] E.A. Korznikova, A.V. Savin, Y.A. Baimova, S.V. Dmitriev, R.R. Mulyukov // *Letters to Journal of Experimental and Theoretical Physics* **96**(4) (2012) 222.
- [41] P.V. Zakharov, M.D. Starostenkov, A.M. Eremin, E.A. Korznikova, S.V. Dmitriev // *Physics of the Solid State* **59** (2017) 223.

- [42] P.V. Zakharov, A.M. Eremin, M.D. Starostenkov, I.S. Lucenko // *Key Engineering Materials* **743** (2017) 86.
- [43] P.V. Zakharov, M.D. Starostenkov, A.M. Eremin, A.I. Cherednichenko // *Letters on Materials* **6(3)** (2016) 294. (in Russian).
- [44] M.D. Starostenkov, A.I. Potekaev, S.V. Dmitriev, P.V. Zakharov, A.M. Eremin, V.V. Kulagina, // *Russian Physics Journal* **58** (2016) 1353.
- [45] N.N. Medvedev, M.D. Starostenkov, P.V. Zakharov, S.V. Dmitriev // *Technical Physics Letters* **41** (2015) 994.
- [46] N.N. Medvedev, M.D. Starostenkov, A.I. Potekaev, P.V. Zakharov, A.V. Markidonov, A.M. Eremin // *Russian Physics Journal* **57** (2014) 387.
- [47] N.N. Medvedev, M.D. Starostenkov, P.V. Zakharov, O.V. Pozidaeva // *Technical Physics Letters* **37** (2011) 98.
- [48] A.M. Iskandarov, N.N. Medvedev, P.V. Zakharov, S.V. Dmitriev // *Computational. Material Science* **47** (2009) 429.
- [49] P.V. Zakharov, M. D. Starostenkov, S. V. Dmitriev, N. N. Medvedev, A. M. Eremin // *Letters to Journal of Experimental and Theoretical Physics* **121** (2015) 217.
- [50] X.W. Zhou, R.A. Johnson, H.N.G. Wadley // *Physical Review B* **69** (2004) 144113.
- [51] S.V. Dmitriev, N.N. Medvedev, A.P. Chetverikov, K. Zhou, M.G. Velarde // *Physica status solidi (RRL) - Rapid Research Letters* **11** (2017) 1700298.
- [52] A.M. Iskandarov, N.N. Medvedev, P.V. Zakharov, S.V. Dmitriev // *Computational. Material Science* **47** (2009) 429.