

Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2022. Т. 19. № 1. С. 77–84
Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedenia (Basic Problems of Material Science (BPMS)). 2022; 1(19): 77–84

Научная статья

1.3.8. Физика конденсированного состояния (физико-математические науки)

УДК 539.3

doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2022.01.009

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ В ДВУМЕРНЫХ И ТРЕХМЕРНЫХ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУРАХ

Александр Сергеевич Семенов^{1†}, Мария Николаевна Семенова²,
Юрий Владимирович Бебихов³, Максим Вилевич Хазимуллин⁴

^{1, 2, 3} Северо-Восточный федеральный университет, Политехнический институт (филиал) в Мирном, ул. Тихонова, 5/1, 678170, Мирный, Саха (Якутия), Россия

⁴ Институт физики молекул и кристаллов, Уфимский федеральный исследовательский центр РАН, пр. Октября, 151, 450054, Уфа, Россия

¹ sash-alex@yandex.ru[†], <https://orcid.org/0000-0001-9940-3915>

² mariya_semyonova86@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-7298-0226>

³ bebikhov.yura@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-8366-4819>

⁴ maxim@anrb.ru, <https://orcid.org/0000-0002-9713-7067>

Аннотация. В работе представлены результаты математического моделирования процессов молекулярной динамики в двумерных и трехмерных кристаллических структурах при помощи потенциала Леннарда-Джонса в пакете программ MatLab. В теоретической части описаны дифференциальные уравнения для моделирования, их начальные и граничные условия, а также разностная аппроксимация. В качестве метода моделирования выбран принцип молекулярно-динамического моделирования при помощи одного из парных потенциалов. В практической части смоделировано хаотическое движение (перемещение) атомов в двумерной и трехмерной кристаллических решетках. Показано распределение по расчетной ячейке и выход атомов за её пределы. Определено соотношение энергий связи в реальных металлах и расчетной модели. Определен потенциал взаимодействия, который получился положительным. Получены амплитудно-фазочастотные характеристики, прошедшие проверку на устойчивость.

Ключевые слова: математическое моделирование, молекулярная динамика, потенциал Леннарда-Джонса, пакет программ MatLab, кристаллическая решетка, металлы и упорядоченные сплавы, энергия взаимодействия.

Благодарности: Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-22-00810, <https://rscf.ru/project/22-22-00810>.

Для цитирования: Семёнов А.С., Семёнова М.Н., Бебихов Ю.В., Хазимуллин М.В. Моделирование процессов молекулярной динамики в двумерных и трехмерных кристаллических структурах // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2022. Т. 19, № 1. С. 77–84. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2022.01.009.

Original article

SIMULATION OF MOLECULAR DYNAMICS PROCESSES IN 2D AND 3D CRYSTAL STRUCTURES

Alexander S. Semenov^{1†}, Maria N. Semenova², Yuriy V. Bebikhov³, Maksim V. Khazimullin⁴^{1,2,3} Mirny Polytechnic Institute (branch) of the North-Eastern Federal University, Tikhonova St., 5/1, Mirny, 678174, Russia⁴ Institute of Molecule and Crystal Physics, Ufa Federal Research Centre of RAS, Pr. Oktyabrya, 151, Ufa, 450054, Russia¹ sash-alex@yandex.ru[†], <https://orcid.org/0000-0001-9940-3915>² mariya_semyonova86@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-7298-0226>³ bebikhov.yura@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-8366-4819>⁴ maxim@anrb.ru, <https://orcid.org/0000-0002-9713-7067>

Abstract. The paper provides the results of mathematical simulation of molecular dynamics processes in 2D and 3D crystal structures using the Lennard-Jones potential in the MatLab software package. The theoretical part describes the differential equations for simulation, their initial and boundary conditions, and the difference approximation. The molecular dynamics simulation principle technique using one of the paired potentials was chosen. In the practical part, the chaotic motion (migration) of atoms in 2D and 3D crystal lattices has been simulated. The distribution over the computational cell and the migration of atoms beyond its limits are shown. The dependence between the bound energies in real metals and the computational model has been determined. The potential of interaction has been determined, which turns out to be positive. The amplitude-phase-frequency characteristics are obtained, which have passed the stability test.

Keywords: mathematical modeling, molecular dynamics, Lennard-Jones potential, MatLab software package, crystal lattice, metals and ordered alloys, interaction energy.

Acknowledgements: The study was supported by the Russian Science Foundation grant No. 22-22-00810, <https://rscf.ru/en/project/22-22-00810>.

For citation: Semenov, A. S., Semenova, M. N., Bebikhov, Yu. V. & Khazimullin, M. V. (2022). Simulation of molecular dynamics processes in 2D and 3D crystal structures. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 1(19), 77–84. (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2022.01.009.

Введение

К настоящему моменту ведутся активные исследования в области молекулярно-динамического моделирования в рамках изучения нелинейной динамики кристаллических решеток с помощью линейных и нелинейных локализованных и делокализованных колебательных мод [1-3], среди которых можно выделить дискретные бризеры [4-6], способные объяснить, например, аномалию температурной зависимости теплоемкости урана [7]. В связи с большим количеством подобных экспериментов становится всё более актуальным поиск новых методов моделирования таких сложных систем, которым может стать математическое моделирование в среде MatLab [8], отличающееся быстродействием и небольшой ресурсозатратностью в вычислительном плане. Направление описанных результатов исследования находится в общем тренде приоритетов стратегии научно-технологического развития

РФ в области перехода к передовым цифровым, интеллектуальным производственным технологиям, роботизированным системам, новым материалам и способам конструирования, а также позволит получить ряд новых важных результатов актуальных для развития таких направлений как энергоэффективность и энергосбережение, входящих в приоритетные направления модернизации российской экономики.

В настоящей работе авторами впервые будет применен пакет программ MatLab для моделирования перемещения атомов в двумерной и трехмерной кристаллических решетках при помощи потенциала взаимодействия Леннарда-Джонса. Также впервые будет определена зависимость энергии связи в исследуемых моделях и её сравнение с данными полученными авторами ранее для реальной ячейки ГПУ металла бериллия [Be], подтверждающими высокую точность моделирования с погрешностью не многим более 3%.

Методы и методики моделирования

В основу метода молекулярной динамики положено модельное представление о молекулярной системе, являющейся многоатомной. В ней все атомы представлены материальными точками. В классическом случае их движение будет описываться уравнениями Ньютона [9, 10]. Эволюцию такой модели опишем системой дифференциальных уравнений движения:

$$\begin{cases} m_i \cdot \frac{d\vec{v}_i}{dt} = \vec{F}_i + \vec{F}_i^{ext} \\ \frac{d\vec{r}_i}{dt} = \vec{v}_i \end{cases}, \quad (1)$$

где $m_i, \vec{v}_i, \vec{r}_i$ – масса, скорость и радиус-вектор соответственно; \vec{F}_i – сила взаимодействия с остальными частицами; \vec{F}_i^{ext} – сила взаимодействия с внешними полями, $i = 1 \dots N$; N – количество точечных частиц.

Зная координаты и скорости всех N частиц в начальный момент времени $t = 0$: $(\vec{r}_i, \vec{v}_i)_{t=0}$, можем произвести интегрирование системы уравнений (1).

Система (1) представляет собой систему обыкновенных дифференциальных уравнений, поэтому для ее решения требуются только начальные условия, граничные условия отсутствуют.

При молекулярно-динамическом моделировании (МДМ) необходимо рассчитать траектории огромного количества частиц, обеспечив как вычислительную эффективность, так и требования точности. Для этого применим алгоритм Верле в скоростной форме [11], формулируемый из условий известности всех величин на момент времени t_k с переходом к следующему моменту времени $t_{k+1} = t_k + \Delta t$ по формулам:

$$\begin{cases} \vec{v}_*^{k+1/2} = \vec{v}^k \cdot (1 - \Delta t / 2) + \vec{a}^k \cdot \Delta t / 2 \\ \vec{r}^{k+1} = \vec{r}^k + \vec{v}_*^{k+1/2} \cdot \Delta t \\ \vec{a}^{k+1} = -grad(U^{k+1}) / m \\ \vec{v}^{k+1} = (\vec{v}_*^{k+1/2} + \vec{a}^k \cdot \Delta t / 2) / (1 + \Delta t / 2) \end{cases}, \quad (2)$$

где верхний индекс k – номер шага по времени; U – потенциальная энергия взаимодействия системы.

С помощью пакета программ MatLab было смоделировано поведение (хаотическое движение) N -го количества атомов в кристаллической решетке методом молекулярной динамики. Ранее авторы для подобных целей использовали непосредственно программы МД моделирования, к примеру, пакет LAMMPS [12-15]. Для реализации расчетов выбрали скоростную схему Верле. В общем виде формулы выглядят следующим образом:

$$\begin{cases} \vec{r}(t + \Delta t) = \vec{r}(t) + \vec{v}\Delta t + \vec{a}\Delta t^2 / 2 \\ \vec{v}(t + \Delta t / 2) = \vec{v} + \vec{a}\Delta t / 2 \\ \vec{a}(t) = -grad(U(\vec{r}(t))) / 2 \\ \vec{v}(t + \Delta t) = \vec{v}(t + \Delta t / 2) + \vec{a}\Delta t / 2 \end{cases}. \quad (3)$$

Здесь U – потенциал Леннарда-Джонса [16, 17], который был выбран из множества других парных потенциалов, как оптимально подходящий для условий нашей задачи:

$$U = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right], \quad (4)$$

где σ – значение межатомного расстояния, при котором $\varphi(\sigma) = 0$, ε – глубина потенциальной ямы, расположенной на расстоянии $\sigma\sqrt{2}$.

Моделирование производилось в двумерном (2D) и трехмерном (3D) пространствах, поэтому градиент в третьей формуле принимался сначала по двум, а затем по трем направлениям. Преобразование потенциала $U(\vec{r}(t))$ в $U(x(t), y(t))$ и $U(x(t), y(t), z(t))$ осуществлялось по формулам:

$$\begin{cases} \vec{r}_{2D} = x\vec{i} + y\vec{j} \\ \vec{r}_{3D} = x\vec{i} + y\vec{j} + z\vec{k} \end{cases}. \quad (6)$$

В качестве исходных данных были выбраны 25 атомов с размером кристаллической решетки (ячейки) 5×5 для 2D моделирования и 125 атомов с размером ячейки $5 \times 5 \times 5$ для 3D моделирования. На рис.1а представлены двумерная и трехмерная расчетные кристаллические решетки с параметрами L, W, H, r . Характерный вид потенциала Леннарда-Джонса показан на рис.1б. Для ускорения расчётов будем обрывать потенциал на расстоянии $r_c = 2,5 \cdot \sigma$. Такой выбор обусловлен тем, что на этом расстоянии значение энергии взаимодействия составляет лишь $\approx 0,0163$ от глубины ямы ε . Па-

параметры ε и σ можно найти через коэффициент Джоуля-Томсона, либо сравнивая экспериментальное значение коэффициента вязкости со

значением, полученным из формулы для потенциальной энергии. Для некоторых веществ они есть в книге [18].

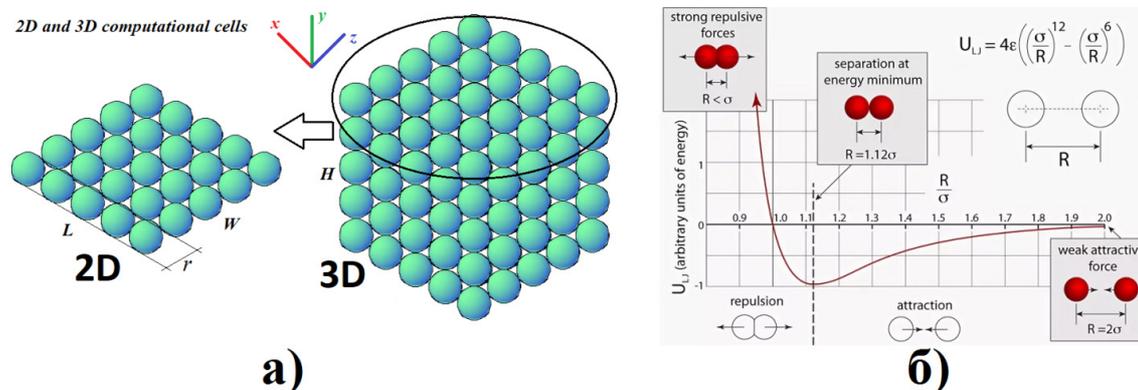


Рис.1. Структура расчетной ячейки для 2D и 3D моделирования (а). Характерный вид потенциала Леннарда-Джонса (б)

Fig.1. The structure of the computational cell for 2D and 3D modeling (a). Typical view of the Lennard-Jones potential (b)

Результаты моделирования

Основными результатами моделирования являются: получение графической зависимости энергий связи между настоящей моделью и стандартными данными для ячейки ГПУ металла; получение устойчивых амплитудно-фазочастотных характеристик; выявление положительного значения потенциала Леннарда-Джонса и вычисление его выборочного среднего значения; выявление единичных случаев покидания атомами зоны расчетной ячейки в результате хаотического перемещения.

В идеальных условиях наличие межатомного взаимодействия делает невозможными не-

зависимые смещения отдельных атомов, и их коллективное движение приобретает характер колебательного процесса, распространяющегося в виде волн по кристаллу. В действительности колебания кристалла не являются строго гармоническими. Несмотря на малый энгармонизм, при слабых возбуждениях нормальные колебания кристалла оказываются связанными друг с другом. При сильном возбуждении смещения атомов не малы, и описывающие их уравнения становятся нелинейными. В таких условиях возможны движения, существенно отличающиеся от гармонических колебаний.

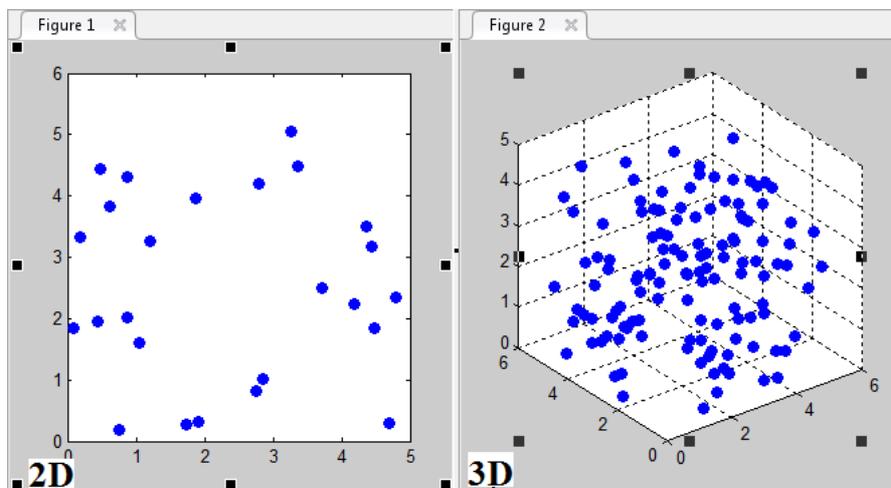


Рис.2. Двумерное (2D) и трехмерное (3D) распределение атомов в ячейке

Fig.2. Two-dimensional (2D) and three-dimensional (3D) distribution of atoms in a cell

На рис.2 изображено двумерное и трехмерное распределение атомов по расчетной ячейке. Видно, что перемещения не являются симметричными. Такое поведение может характеризоваться квазилокальными колебаниями – вид дефекта, охватывающего весь кристалл. В результате дефект может превратиться в квазичастицу – дефектон, свободно перемещающуюся

в кристалле. Согласно результатам моделирования такое перемещение может превышать пять межатомных расстояний, как авторами считалось ранее. Из множества экспериментов были выявлены такие (рис.3), в которых зона перемещения атомов выходит за пределы расчетной ячейки, как для двумерного (а) так и для трехмерного моделирования (б).

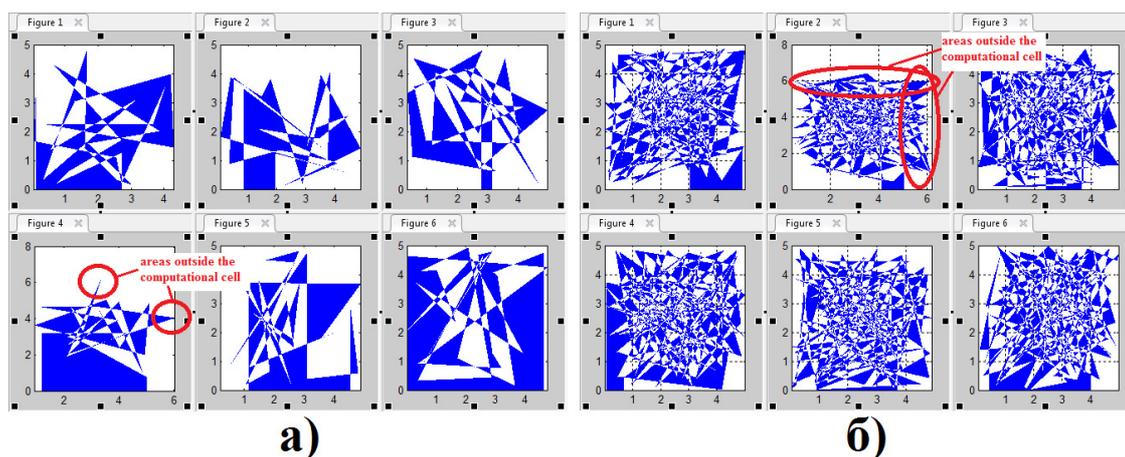


Рис.3. Выход атомов из расчетной ячейки для двумерного (а) и трехмерного (б) моделирования

Fig.3. Escape of atoms from the computational cell for two-dimensional (a) and three-dimensional (b) simulation

При сравнении энергий связи, полученных в результате моделирования, со стандартными данными для ГПУ металлов, мы увидели большую абсолютную и относительную погрешности при моделировании дальних взаимодействий. На рис.4 исследованы взаимодействия близлежащих атомов. По осям абсцисс и ординат откладываются квантили расчетного значе-

ния и смоделированного результата энергии связи для ГПУ металла. Так для ГПУ металла бериллия [Be], который авторы изучали в работе [19], погрешность моделирования составила немногим более 3%. Таким образом, мы подтвердили, что потенциал Леннарда-Джонса хорошо применим для парных близлежащих взаимодействий.

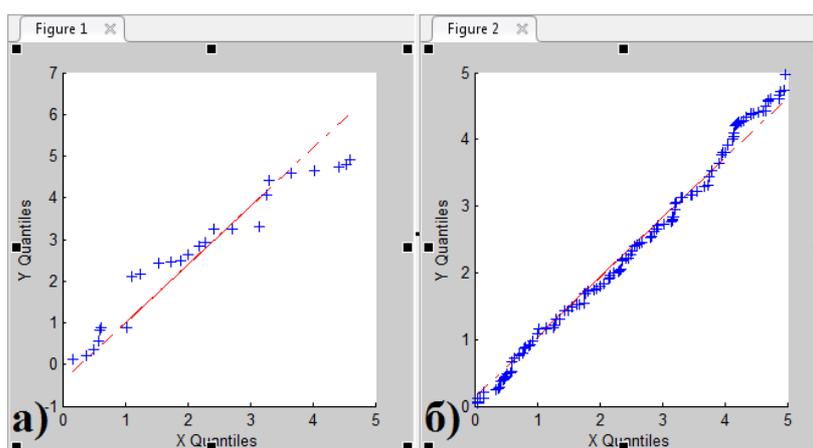


Рис.4. Сравнение энергий связи в результате математического моделирования в среде MatLab с данными компьютерного моделирования в пакете молекулярно-динамического моделирования LAMMPS для двумерного (а) и трехмерного (б) моделирования

Fig.4. Comparison of binding energies as a result of mathematical modeling in the MatLab environment with computer simulation data in the LAMMPS molecular dynamics modeling package for two-dimensional (a) and three-dimensional (b) modeling

В результате моделирования получили положительное значение потенциала, выборочное среднее значение которого определили по формуле:

$$\bar{U} = \frac{\sum_{i=1}^n U_i}{n} = 1,0978, \quad (6)$$

где n – объем выборки, U_i – i -й элемент выборки. 9 в физике кристаллов. Разработанная программа математического моделирования была апробирована в учебном процессе в курсах физики [20], а также получено свидетельство о государственной регистрации данной программы для ЭВМ [21].

Заключение

В результате математического моделирования процессов молекулярной динамики в двумерных и трехмерных кристаллических структурах было выполнено: описание кристаллических решеток, систем уравнений движения, начальных и граничных условий, вычисление разностной аппроксимации, выбор методов и методик моделирования, выбор потенциала Леннарда-Джонса, представление его графической интерпретации; представление вычислительного алгоритма для математического моделирования, приведение результатов моделирования в среде MatLab, отображение кода программы с двумя циклами, представление численных и графических параметров и характеристик, проведение обсуждения результатов работы.

Основными результатами моделирования являются: двумерное и трехмерное распределение атомов по расчетной ячейке, доказывающее возможность перемещения свыше пяти межатомных расстояний; получение графической зависимости энергий связи между настоящей моделью и стандартными данными для ячейки ГПУ металла с погрешностью немногим более 3%.

Список литературы

1. Семёнова М.Н., Семёнов А.С., Дмитриев С.В. Некоторые физические свойства делокализованных нелинейных колебательных мод в графене // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2019. Т. 16, № 4. С. 501–510.
2. Щербинин С.А., Семёнова М.Н., Семёнов А.С., Корзникова Е.А., Чечин Г.М., Дмитриев С.В. Динамика трехкомпонентной делока-

лизованной нелинейной колебательной моды в графене // *Физика твердого тела*. 2019. Т. 61, № 11. С. 2163–2168.

3. Ryabov D.S., Chechin G.M., Upadhyaya A., Korznikova E.A., Dubinko V.I., Dmitriev S.V. Delocalized nonlinear vibrational modes of triangular lattices // *Nonlinear Dynamics*. 2020. V. 102, N 4. P. 2793–2810.

4. Korznikova E.A., Morkina A.Y., Singh M., Krivtsov A.M., Kuzkin V.A., Gani V.A., Bebikhov Y.V., Dmitriev S.V. Effect of discrete breathers on macroscopic properties of the Fermi-Pasta-Ulam chain // *European Physical Journal B*. 2020. V. 93, N 7. P. 123.

5. Semenov A.S., Murzaev R.T., Bebikhov Yu.V., Kudreyko A.A., Dmitriev S.V. New types of one-dimensional discrete breathers in a two-dimensional lattice // *Письма о материалах*. 2020. Т. 10, № 2. С. 185–188.

6. 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, N 1. P. 12.

7. 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 // *European Physical Journal B*. 2016. V. 89, N 7. P. 168.

8. Semenova M., Vasileva A., Lukina G., Popova U. Solving differential equations by means of mathematical simulation in Simulink app of MatLab software package // *Lecture Notes in Civil Engineering*. 2022. V. 180. P. 417–431.

9. Полетаев Г.М., Старостенков М.Д., Зоря И.В., Ильина М.А. Молекулярно-динамическое исследование миграции точечных дефектов в упорядоченном сплаве CuPt в условиях деформации // *Деформация и разрушение материалов*. 2019. № 3. С. 2–7.

10. Полетаев Г.М., Зоря И.В., Старостенков М.Д., Бибихов Ю.В., Ракитин Р.Ю. Исследование методом молекулярно-динамического моделирования скольжения краевой дислокации в никеле и серебре при наличии примесных атомов легких элементов // *Деформация и разрушение материалов*. 2019. № 7. С. 8–13.

11. Verlet L. Computer “Experiments” on Classical Fluids. I. Thermodynamical Properties of Lennard-Jones Molecules // *Physical Review*. 1967. V. 159. P. 98–103.

12. Krylova K.A., Korznikova E.A., Semenov A.S., Bachurin D.V., Dmitriev S.V. Linking tracks in mica crystals with phase transitions in a bistable

lattice // *European Physical Journal B*. 2020. V. 93, N 2. P. 23.

13. Мурзаев Р.Т., Семенов А.С., Потекаев А.И., Старостенков М.Д., Захаров П.В., Кулагина В.В., Дмитриев С.В. Пространственно локализованные колебания в слабоустойчивых состояниях металлических систем // *Известия высших учебных заведений. Физика*. 2021. Т. 64, № 2. С. 91–99.

14. Poletaev G.M., Bebikhov Yu.V., Semenov A.S., Starostenkov M.D. Self-diffusion in melts of Ni-Al and Ti-Al systems: molecular dynamics study // *Письма о материалах*. 2021. Т. 11, № 4. С. 438–441.

15. Bebikhov Y.V., Dmitriev S.V. Peierls-Nabarro potential for kinks in nonlinear chains // *IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering*. 2020. V. 1008(1). 012066.

16. Jones J.E. On the Determination of Molecular Fields. II. From the Equation of State of a Gas // *Proceedings of the Royal Society A*. 1924. V. 106. P. 463–477.

17. Sunagatova I.R., Subkhangulova A.M., Semenova M.N., Borisov D.I., Semenov A.S., Dmitriev S.V. Properties of one-dimensional nonlinear vibrational modes in triangular lattice with Lennard-Jones interactions // *IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering*. 2020. V. 1008. 012073.

18. Qian X.-S. *Physical mechanics* Moscow: Mir, 1965. 544 p.

19. Бачурина О.В., Мурзаев Р.Т., Семенов А.С., Корзникова Е.А., Дмитриев С.В. Свойства движущихся дискретных бризеров в бериллии // *Физика твердого тела*. 2018. Т. 60, № 5. С. 978–983.

20. Татаринев П.С., Яковлева В.Д., Ким Д.Ч., Егорова А.А., Корзникова Е.А., Семенов А.С. Сборник лабораторных работ по разделу «Механика» курса «Физика». М.: Издательство «Спутник», 2021. 175 с.

21. Семёнов А.С., Семёнова М.Н., Якушев И.А., Бебихов Ю.В. Программа математического моделирования физических процессов в металлах и упорядоченных сплавах. Свидетельство о регистрации программы для ЭВМ № 2021615775 от 13.04.2021.

Информация об авторах

А. С. Семёнов – кандидат физико-математических наук, доцент, директор Политехнического института (филиала) Северо-Восточного федерального университета им. М.К. Аммосова в г. Мирном.

М. Н. Семёнова – кандидат физико-математических наук, доцент Политехнического института (филиала) Северо-Восточного федерального университета им. М.К. Аммосова в г. Мирном.

Ю. В. Бебихов – кандидат физико-математических наук, доцент Политехнического института (филиала) Северо-Восточного федерального университета им. М.К. Аммосова в г. Мирном.

М. В. Хазимуллин – кандидат физико-математических наук, научный сотрудник Института физики молекул и кристаллов, Уфимского федерального исследовательского центра.

References

1. Semenova, M. N., Semenov, A. S. & Dmitriev, S. V. (2019). Some physical properties of delocalized nonlinear vibrational modes in graphene. *Fundamental'nye problemy sovremennoy materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 16(4), 501–510. (In Russ.).

2. Shcherbinin, S. A., Semenova, M. N., Semenov, A. S., Korznikova, E. A., Chechin, G. M. & Dmitriev, S. V. (2019). Dynamics of a three-component delocalized nonlinear vibrational mode in graphene. *Fizika tverdogo tela*, 61(11), 2163–2168. (In Russ.).

3. Ryabov, D. S., Chechin, G. M., Upadhyaya, A., Korznikova, E. A., Dubinko, V. I. & Dmitriev, S. V. (2020). Delocalized nonlinear vibrational modes of triangular lattices. *Nonlinear Dynamics*, 102(4), 2793–2810.

4. Korznikova, E. A., Morkina, A. Y., Singh, M., Krivtsov, A. M., Kuzkin, V. A., Gani, V. A. & Bebikhov, Y. V., Dmitriev S. V. (2020). Effect of discrete breathers on macroscopic properties of the Fermi-Pasta-Ulam chain. *European Physical Journal B*, 93(7), 123.

5. Semenov, A. S., Murzaev, R. T., Bebikhov, Yu. V., Kudreyko, A. A. & Dmitriev, S. V. (2020). New types of one-dimensional discrete breathers in a two-dimensional lattice. *Letters on Materials*, 10(2), 185–188.

6. 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(1), 12.

7. 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. *European Physical Journal B*, 89(7), 168.
8. Semenova, M., Vasileva, A., Lukina, G. & Popova, U. (2022). Solving differential equations by means of mathematical simulation in Simulink app of MatLab software package. *Lecture Notes in Civil Engineering*, 180, 417–431.
9. Poletaev, G. M., Starostenkov, M. D., Zorya, I. V. & Ilyina, M. A. (2019). Molecular Dynamics Study of the Migration of Point Defects in an Ordered CuPt Alloy under Deformation. *Deformatsiya i razrusheniye materialov*, 3, 2–7. (In Russ.).
10. Poletaev, G. M., Zorya, I. V., Starostenkov, M. D., Bebikhov, Yu. V. & Rakitin, R. Yu. (2019). Investigation by molecular dynamics simulation of edge dislocation slip in nickel and silver in the presence of impurity atoms of light elements. *Deformatsiya i razrusheniye materialov*, 7, 8–13. (In Russ.).
11. Verlet, L. (1967). Computer “Experiments” on Classical Fluids. I. Thermodynamical Properties of Lennard-Jones Molecules. *Physical Review*, 159, 98–103.
12. Krylova, K. A., Korznikova, E. A., Semenov, A. S., Bachurin, D. V. & Dmitriev, S. V. (2020). Linking tracks in mica crystals with phase transitions in a bistable lattice. *European Physical Journal B*, 93(2), 23.
13. Murzaev, R. T., Semenov, A. S., Potekaev, A. I., Starostenkov, M. D., Zakharov, P. V., Kulagina, V. V. & Dmitriev, S. V. (2021). Spatially Localized Oscillations in Weakly Stable States of Metallic Systems. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Fizika*, 64(2), 91–99. (In Russ.).
14. Poletaev, G. M., Bebikhov, Yu. V., Semenov, A. S. & Starostenkov, M. D. (2021). Self-diffusion in melts of Ni-Al and Ti-Al systems: molecular dynamics study. *Letters on Materials*, 11(4), 438–441.
15. Bebikhov, Y. V. & Dmitriev, S. V. (2020). Peierls-Nabarro potential for kinks in nonlinear chains. *IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering*, 1008(1), 012066.
16. Jones, J. E. (1924). On the Determination of Molecular Fields. II. From the Equation of State of a Gas. *Proceedings of the Royal Society A*, 106, 463–477.
17. Sunagatova, I. R., Subkhangulova, A. M., Semenova, M. N., Borisov, D. I., Semenov, A. S. & Dmitriev, S. V. (2020). Properties of one-dimensional nonlinear vibrational modes in triangular lattice with Lennard-Jones interactions. *IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering*, 1008, 012073.
18. Qian, X.-S. (1965). Physical mechanics. Moscow: Mir. P. 544.
19. Bachurina, O. V., Murzaev, R. T., Semenov, A. S., Korznikova, E. A. & Dmitriev, S. V. (2018). Properties of moving discrete breathers in beryllium. *Fizika tverdogo tela*, 60(5), 978–983. (In Russ.).
20. Tatarinov, P. S., Yakovleva, V. D., Kim, D. Ch., Egorova, A. A., Korznikova, E. A. & Semenov, A. S. (2021). Collection of laboratory works on the section “Mechanics” of the course “Physics” (M.: Sputnik Publishing House). P. 175. (In Russ.).
21. Semyonov, A. S., Semyonova, M. N., Yakushev, I. A. & Bebikhov, Yu. V. Program for mathematical modeling of physical processes in metals and ordered alloys. Certificate of registration of the computer program No. 2021615775 dated 04.13.2021. (In Russ.).

Information about the authors

A. S. Semenov – Candidate of physical and mathematical sciences, Associate Professor, Director of the Polytechnic Institute (branch) Ammosov North-Eastern Federal University in Mirny.

M. N. Semenova – Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor of the Polytechnic Institute (branch) Ammosov North-Eastern Federal University in Mirny.

Yu. V. Bebikhov – Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor of the Polytechnic Institute (branch) Ammosov North-Eastern Federal University in Mirny.

M. V. Khazimullin – Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Researcher of the Institute of Molecule and Crystal Physics, Ufa Federal Research Center.

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

Статья поступила в редакцию 17.01.2022; одобрена после рецензирования 27.01.2022; принята к публикации 08.02.2022.

The article was received by the editorial board on 17 Jan. 22; approved after reviewing 27 Jan. 22; accepted for publication 08 Feb. 22.