

Научная статья

1.3.8. Физика конденсированного состояния (физико-математические науки)

УДК 548.12

doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2024.03.011

КРИСТАЛЛОГЕОМЕТРИЯ ЗАПОЛНЕНИЯ КООРДИНАЦИОННЫХ СФЕР В НАНОЧАСТИЦАХ СПЛАВА СОСТАВА A_3B , ФОРМИРУЮЩЕГО СВЕРХСТРУКТУРУ $D0_3$

Михаил Дмитриевич Старостенков^{1†}, Цзян Би², Чжоюнь Ян³, Гоцзян Донг⁴,
Сухайб Латиф Садаа⁵, Наталья Михайловна Гурова⁶, Сергей Леонидович Кустов⁷

^{1, 5, 6, 7} Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова, пр. Ленина, 46, 656038, Барнаул, Россия

^{2, 3, 4} Яньшанский университет, Западный проспект Хэбэй № 438, 066004, Циньхуандао, Китай

¹ genphys@mail.ru[†], <https://orcid.org/0000-0002-6326-7613>

² bijiang198905@163.com

³ yzy@ysu.edu.cn

⁴ dgj@ysu.edu.cn, <https://orcid.org/0000-0001-9123-8599>

⁵ suhayb.baghdad@gmail.com

⁶ gurova.nmg@yandex.ru

⁷ ksl72@inbox.ru

Аннотация. В кристаллической структуре высокоэнтропийных многокомпонентных сплавов в качестве составляющих компонентов наблюдаются наночастицы интерметаллидов и упорядочивающихся сплавов. Среди возможных интерметаллических фаз на основе ОЦК решетки можно выделить четыре типа сверхструктур – $B2$ (состав AB), $B32$ (состав AB), $D0_3$ (состав A_3B) и $C11_b$ (состав A_2B , тетрагональная упаковка). В настоящей работе предлагается простой метод упаковки зародышей интерметаллической фазы сверхструктуры $D0_3$, формирующихся в первых 21 координационных сферах. Методика позволяет конструировать идеальную кристаллогеометрию зародышей сверхструктуры в последовательности координационных сфер. Очевидно, что в реальности, особенно при очень малых размерах, идеальная упаковка оказывается нестабильной, и при переходе к равновесию будут возникать упаковки с некристаллическими осями симметрии пятого и седьмого порядка. Однако предлагаемая процедура позволяет построить идеальную кристаллогеометрию зародышей сверхструктуры. Реальная конфигурация наночастиц может быть достигнута подключением последующей процедуры релаксации материала с использованием методов молекулярной динамики. В работе используется представление о семи правильных многогранниках: куб, кубооктаэдр, усеченный куб, усеченный кубооктаэдр, ромбокубооктаэдр, октаэдр, усеченный октаэдр.

Ключевые слова: кристаллическая структура, сверхструктура, наночастица, координационная сфера, упаковка.

Для цитирования: Старостенков М.Д., Би Ц., Ян Ч., Донг Г., Сухайб Латиф Садаа, Гурова Н.М., Кустов С.Л. Кристаллогеометрия заполнения координационных сфер в наночастицах сплава состава A_3B , формирующего сверхструктуру $D0_3$ // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2024. Т. 21, № 3. С. 367–378. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2024.03.011.

Original article

CRYSTALLOGEOMETRY OF FILLING COORDINATION SPHERES IN NANOPARTICLES OF AN ALLOY OF COMPOSITION A_3B FORMING THE $D0_3$ SUPERSTRUCTURE

Mikhail D. Starostenkov^{1†}, Jiang Bi², Zhuoyun Yang³, Guojiang Dong⁴, Suhayb Lateef Sadaa⁵,
Natalia M. Gurova⁶, Sergey L. Kustov⁷

^{1, 5, 6, 7} I.I. Polzunov Altai State Technical University, Lenin Pr., 46, Barnaul, 656038, Russia

^{2, 3, 4} Yanshan University, West Hebei Avenue No. 438, Qinhuangdao, 066004, China

¹ genphys@mail.ru[†], <https://orcid.org/0000-0002-6326-7613>

² bijiang198905@163.com

³ yzy@ysu.edu.cn⁴ dgj@ysu.edu.cn, <https://orcid.org/0000-0001-9123-8599>⁵ suhayb.baghdad@gmail.com⁶ gurova.nmg@yandex.ru⁷ ksl72@inbox.ru

Abstract. In the crystal structure of high-entropy multicomponent alloys, nanoparticles of intermetallic compounds and ordering alloys are observed as constituent components. Among the possible intermetallic phases based on the bcc lattice, four types of superstructures can be distinguished: B2 (composition AB), B32 (composition AB), D0₃ (composition A₃B) and C11_b (composition A₂B, tetragonal packing). In this work, we propose a simple method for packing nuclei of the intermetallic phase of the D0₃ superstructure, which are formed in the first 21 coordination spheres. The technique makes it possible to construct the ideal crystal geometry of superstructure nuclei in a sequence of coordination spheres. It is obvious that in reality, especially at very small sizes, the ideal packing turns out to be unstable, and during the transition to equilibrium, packings with non-crystalline symmetry axes of the fifth and seventh order will appear. However, the proposed procedure makes it possible to construct the ideal crystal geometry of superstructure nuclei. The actual configuration of nanoparticles can be achieved by connecting a subsequent material relaxation procedure using molecular dynamics methods. The work uses the idea of seven regular polyhedra: cube, cuboctahedron, truncated cube, truncated cuboctahedron, rhombicuboctahedron, octahedron, truncated octahedron.

Keywords: crystal structure, superstructure, nanoparticle, coordination sphere, packaging.

For citation: Starostenkov, M. D., Bi, J., Yang, Z., Dong, G., Suhayb Lateef Sadaa, Gurova, N. M. & Kustov, S. L. (2024). Crystallogometry of filling coordination spheres in nanoparticles of an alloy of composition A₃B forming the D0₃ superstructure. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedenia (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 21(3), 367–378. (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2024.03.011.

Введение

В многокомпонентных сплавах и соединениях при определенном порядке заполнения координационных сфер возникает многообразие свойств таких материалов, в отличие от чистых однокомпонентных и многокомпонентных неупорядоченных материалов. Такие системы обладают определенным набором свойств, таких как пластичность, прочность, коррозионная или радиационная стойкость, жаропрочность и другие. Только на основе двухкомпонентных систем могут быть созданы десятки тысяч различных типов структур. С увеличением числа компонентов возможные наборы сверхструктур растут в геометрической прогрессии [1, 2].

Одним из основных факторов вызывающих возникновение фаз со сверхструктурой является симметрия, определяющая кристаллографию сверхструктур, возможные смещения атомов в элементарной ячейке, искажения самих элементарных ячеек, механизмы взаимопревращений и разрушений сверхструктур [3]. В последнее время появилось множество работ посвященных многокомпонентным высокоэнтропийным сплавам [4]. В таких сплавах обнаруживаются наночастицы различных типов сверхструктур [5].

Представляется интересным проследить эволюцию кристаллогеометрии зародышей сверхструктур и выяснить их стабильность в

зависимости от размеров, релаксации при изменении температуры, изменения сверхструктуры при релаксации.

При этом предполагается, что стартовая конфигурация создается в модели идеальной кристаллогеометрической сверхструктуры. В случае формирования сверхструктур на основе ОЦК решетки наиболее характерными сверхструктурами являются четыре варианта упорядоченных фаз – сверхструктура B2, установленная в системе Cu–Zn эквиатомного состава; сверхструктура B32 (элементарная ячейка имеет по сравнению с ОЦК решеткой объем увеличенный в 8 раз); сверхструктура типа C11_b – представляется стопкой из трех элементарных ячеек в направлении оси Z; сверхструктура D0₃ – элементарная ячейка удвоена по всем координационным направлениям. Объемные центры заняты только атомами сорта B.

В работах [6, 7] был представлен простой алгоритм определения заполнения координационных сфер кристаллических решеток на основе простой кубической решетки, решетки ОЦК и ГЦК; тетрагональной решетки. Для конкретных сверхструктур на основе системы B2, B32 были представлены методики в работах [8, 9].

В настоящей работе предложенный механизм применяется для конструирования сверхструктуры D0₃. В металлических сплавах данную сверхструктуру обнаружили Хассел и Нильсен (в Fe₃Al) и Брэдли с соавторами (в Fe₃Si). Предполагается, что такие фазы могут

наблюдаться в системах Li – (Be, Mg, Ca, Sr), (Be, Mg, Ca, Si) – (La, Ce, Dr, Nb, Se), Cu – (Si, Ge) [3].

Методика представления алгоритма конструирования заполнения координационных сфер в зародышах сверхструктуры $D0_3$

В серии работ была представлена простая процедур определения заполнения координационных сфер для кристаллических решеток кубической симметрии – простой кубической решетки (ПК), объемно – кубической решетки (ОЦК), гранецентрированной кубической решетки (ГЦК).

В сверхструктуре $D0_3$ заполняется различный набор компонентов относительно центров в узлах А и В (состав A_3B). Упаковки узлов в ячейках с параметрами $(2a, 2a, 2a)$ приводится на рис.1.

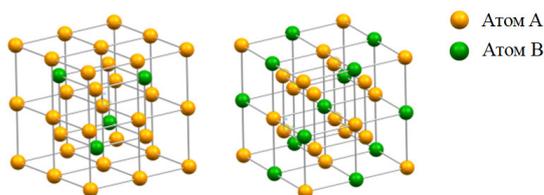


Рис.1. Упаковка узлов с компонентами сплава А и В в сверхструктуре $D0_3$

Fig.1. Packing of units with alloy components A and B in the $D0_3$ superstructure

В таблицах 1 и 2 представлены заполнения атомами компонентов относительно узлов А и В.

Кристаллография зародышей наночастиц сверхструктуры $D0_3$

Согласно определениям, данным в [6, 7], распределение узлов в любой координационной сфере может быть представлено в виде одного из двух правильных многогранников Платона (октаэдр – О, куб – К) или пяти полуправильных фигур Архимеда (кубооктаэдр – КО, усеченный октаэдр – УО, ромбокубооктаэдр – РКО, усеченный куб – УК и усеченный кубооктаэдр – УКО), а также комбинациями вложенных и повернутых на некоторый угол данных многогранников. Каждому «простому» пространственному многограннику соответствует координационное число по числу вершин, определяемое в индексах Миллера (h, k, l) по схеме: октаэдр $(h \neq k = l = 0)$, число узлов – 6), кубооктаэдр $(h = k \neq l = 0)$, число узлов – 12), куб $(h = k = l = 0)$, число узлов – 8), усеченный октаэдр $(h \neq k \neq l = 0)$, число узлов – 24), ромбокубооктаэдр $(h > k = l \neq 0)$, число узлов – 24), усеченный куб $(h < k = l \neq 0)$, число узлов – 24), усеченный кубооктаэдр $(h \neq k \neq l = 0)$, число узлов – 48).

Алгоритм, позволяющий описать распределения узлов по координационным сферам, был представлен в [10, 11]. Радиус координационной сферы связан с ее номером n_i в случае простой кубической решетки соотношением

$$Z_i = a_{nk} \cdot (n_i)^{1/2}, \quad (1)$$

где a_{nk} – параметр решетки, $R_i = Z_i / a_{nk}$.

Все значения R_i^2 являются натуральными числами, образующими множество координационных индексов. Некоторые натуральные числа не представимы суммой квадратов трех координационных чисел. Такие числа принято называть «нулевыми» координационными сферами. Общее правило нахождения таких номеров удовлетворяет формуле

$$N = (8\mu - 1)4\nu, \quad (2)$$

где $\mu, \nu \in N$ – множество натуральных чисел. Реальный номер координационной сферы связан с R^2 соотношением

$$n_i = R^2 - f_i \{ (8\mu - 1) \}, \quad (3)$$

здесь R^2 – включает число пропущенных «нулевых» координационных сфер. Цифра 8 соответствует числу узлов примитивной ячейки ПК.

Порядок заполнения классов представляется схемой [12, 13]:

$$\begin{aligned} f(8\mu - 7) : & \begin{cases} (2l \pm 1, 0, 0) \rightarrow \text{О} \\ (2l \pm 1, 4p, 0) \rightarrow \text{УО} \\ (2l \pm 1, 2p, 2k) \rightarrow \text{УК, УКО, РКО} \end{cases} \\ f(8\mu - 6) : & \begin{cases} (2l \pm 1, 2p \pm 1, 0) \rightarrow \text{КО, УО} \\ (4l, 2p \pm 1, 2k \pm 1) \rightarrow \text{УКО, УО} \end{cases} \\ f(8\mu - 5) : & \{ (2l \pm 1, 2p \pm 1, 2k \pm 1) \rightarrow \text{РКО, УК, УКО, К} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 f(8\mu-4) &: \begin{cases} (2l, 0, 0) \rightarrow O \\ (2l, 2p, 0) \rightarrow KO \\ (2l, 2p, 2k) \rightarrow K, PKO, UK, UKO \\ (4l, 4p, 2k) \rightarrow UK, PKO, UKO \end{cases} \\
 f(8\mu-3) &: \begin{cases} (2l, 2p \pm 1, 0) \rightarrow YO \\ (2l, 2p \pm 1, 2k) \rightarrow UKO, UK, PKO \end{cases} \\
 f(8\mu-2) &: \{(2l, 2p \pm 1, 2k \pm 1) \rightarrow PKO, UK, UKO\} \\
 f(8\mu-0) &: \begin{cases} (2l, 2p, 0) \rightarrow KO, YO \\ (4l, 0, 0) \rightarrow O \\ (4l, 4p, 4k) \rightarrow K, PKO, UK, UKO \\ (4l, 2p, 2k) \rightarrow UK, PKO, UKO, \end{cases}
 \end{aligned}$$

где $l, p, k = 1, 2, 3, \dots$

Как видно из схемы, любая координационная сфера представляется одним или комбинациями базовых многогранников.

Для решетки ОЦК схема заполнения имеет вид: $f(8\mu-5)$, $f(8\mu-4)$, $f(8\mu-0)$ с тем же набором многогранников.

В таблице 1 представлена связь номера координационной сферы с параметром R^2 , индексами координат, типом связи, числом узлов и типом многогранников.

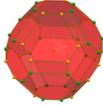
Таблица 1. Связь номера координационной сферы с параметром R^2 , индексами координат, типом связи, числом узлов, типом многогранников

Table 1. Relationship between the number of the coordination sphere and the parameter R^2 , coordinate indices, type of connection, number of nodes, type of polyhedra

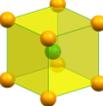
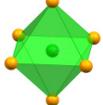
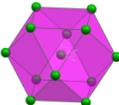
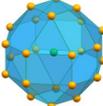
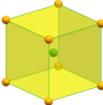
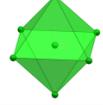
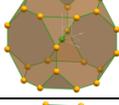
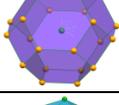
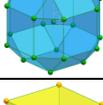
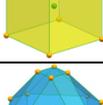
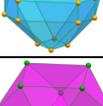
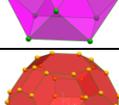
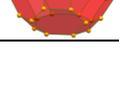
Атом А находится в центре

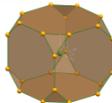
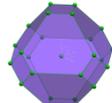
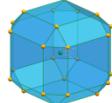
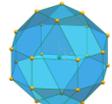
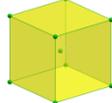
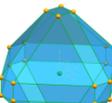
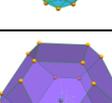
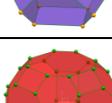
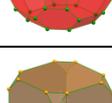
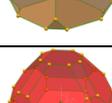
№	Индексы узлов	R^2	Тип связей	Число узлов	Тип многогранников
1	(1/2, 1/2, 1/2)	3/4	A-A A-B	4 4	
2	(1, 0, 0)	1	A-A	6	
3	(1, 1, 0)	2	A-A	12	
4	(3/2, 1/2, 1/2)	11/4	A-A A-B	12 12	
5	(1, 1, 1)	3	A-A	8	
6	(2, 0, 0)	4	A-A	6	
7	(3/2, 3/2, 1/2)	19/4	A-A A-B	12 12	
8	(2, 1, 0)	5	A-A	24	

9	(2, 1, 1)	6	A-A	24	
10	(3/2, 3/2, 3/2)	27/4	A-A A-B	4 4	
	(5/2, 1/2, 1/2)	27/4	A-A A-B	12 12	
11	(2, 2, 0)	8	A-A	12	
12	(5/2, 3/2, 1/2)	35/4	A-A A-B	24 24	
13	(2, 2, 1)	9	A-A	24	
	(3, 0, 0)	9	A-A	6	
14	(3, 1, 0)	10	A-A	24	
15	(5/2, 3/2, 3/2)	43/4	A-A A-B	12 12	
16	(3, 1, 1)	11	A-A	24	
17	(2, 2, 2)	12	A-A	8	
18	(5/2, 5/2, 1/2)	51/4	A-A A-B	12 12	
	(7/2, 1/2, 1/2) (latest addition)	51/4	A-A A-B	12 12	
19	(3, 2, 0)	13	A-A	24	
20	(3, 2, 1)	14	A-A	48	
21	(5/2, 5/2, 3/2)	59/4	A-A A-B	12 12	

	$(7/2, 3/2, 1/2)$ (latest addition)	59/4	A-A A-B	24 24	
--	--	------	------------	----------	---

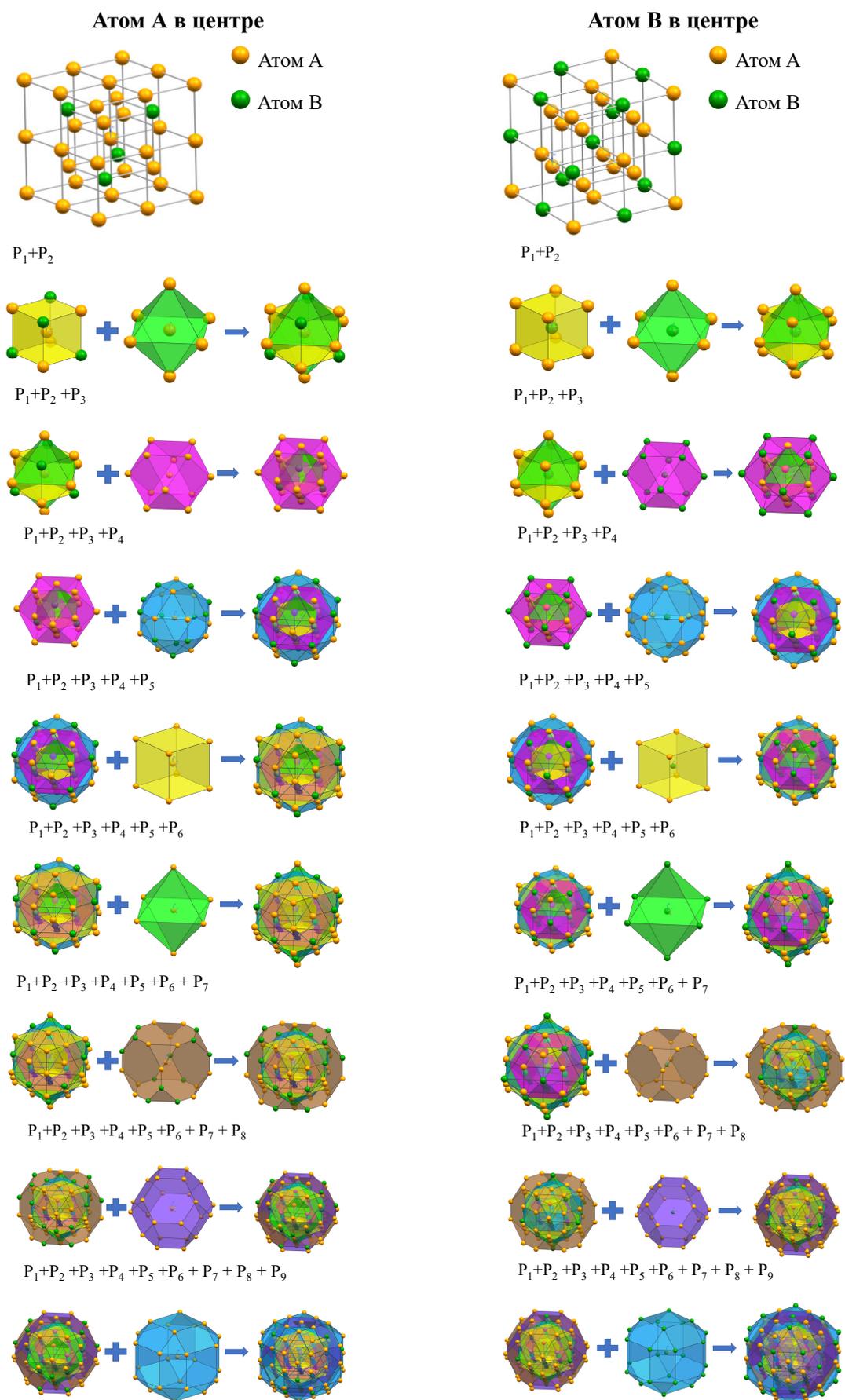
Атом В находится в центре

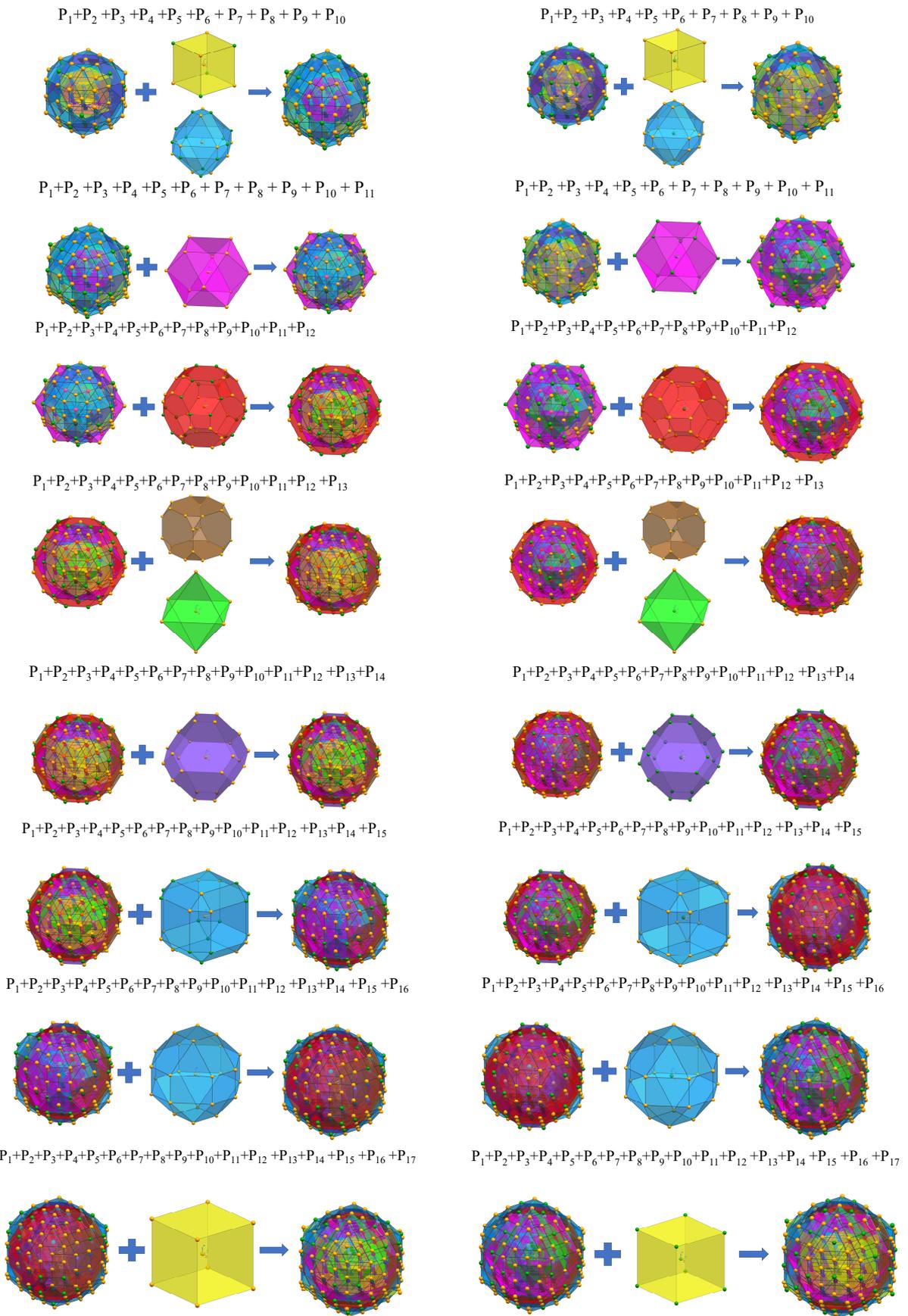
№	Индексы узлов	R^2	Тип связей	Число узлов	Тип многогранников
1	$(1/2, 1/2, 1/2)$	3/4	B-A	8	
2	$(1, 0, 0)$	1	B-A	6	
3	$(1, 1, 0)$	2	B-B	12	
4	$(3/2, 1/2, 1/2)$	11/4	B-A	24	
5	$(1, 1, 1)$	3	B-A	8	
6	$(2, 0, 0)$	4	B-B	6	
7	$(3/2, 3/2, 1/2)$	19/4	B-A	24	
8	$(2, 1, 0)$	5	B-A	24	
9	$(2, 1, 1)$	6	B-B	24	
10	$(3/2, 3/2, 3/2)$	27/4	B-A	8	
	$(5/2, 1/2, 1/2)$	27/4	B-A	24	
11	$(2, 2, 0)$	8	B-B	12	
12	$(5/2, 3/2, 1/2)$	35/4	B-A	48	

13	(2, 2, 1)	9	B-A	24	
	(3, 0, 0)	9	B-A	6	
14	(3, 1, 0)	10	B-B	24	
15	(5/2, 3/2, 3/2)	43/4	B-A	24	
16	(3, 1, 1)	11	B-A	24	
17	(2, 2, 2)	12	B-B	8	
18	(5/2, 5/2, 1/2)	51/4	B-A	24	
	(7/2, 1/2, 1/2) (latest addition)	51/4	B-A	24	
19	(3, 2, 0)	13	B-A	24	
20	(3, 2, 1)	14	B-B	48	
21	(5/2, 5/2, 3/2)	59/4	B-A	24	
	(7/2, 3/2, 1/2) (latest addition)	59/4	B-A	48	

Последовательности упаковок координационных сфер и структуры наночастиц сверхструктуры $D0_3$ представлены на рисунке 2.

Здесь P_1, P_2, P_3 и т.д. – упаковка соответствующей сферы.





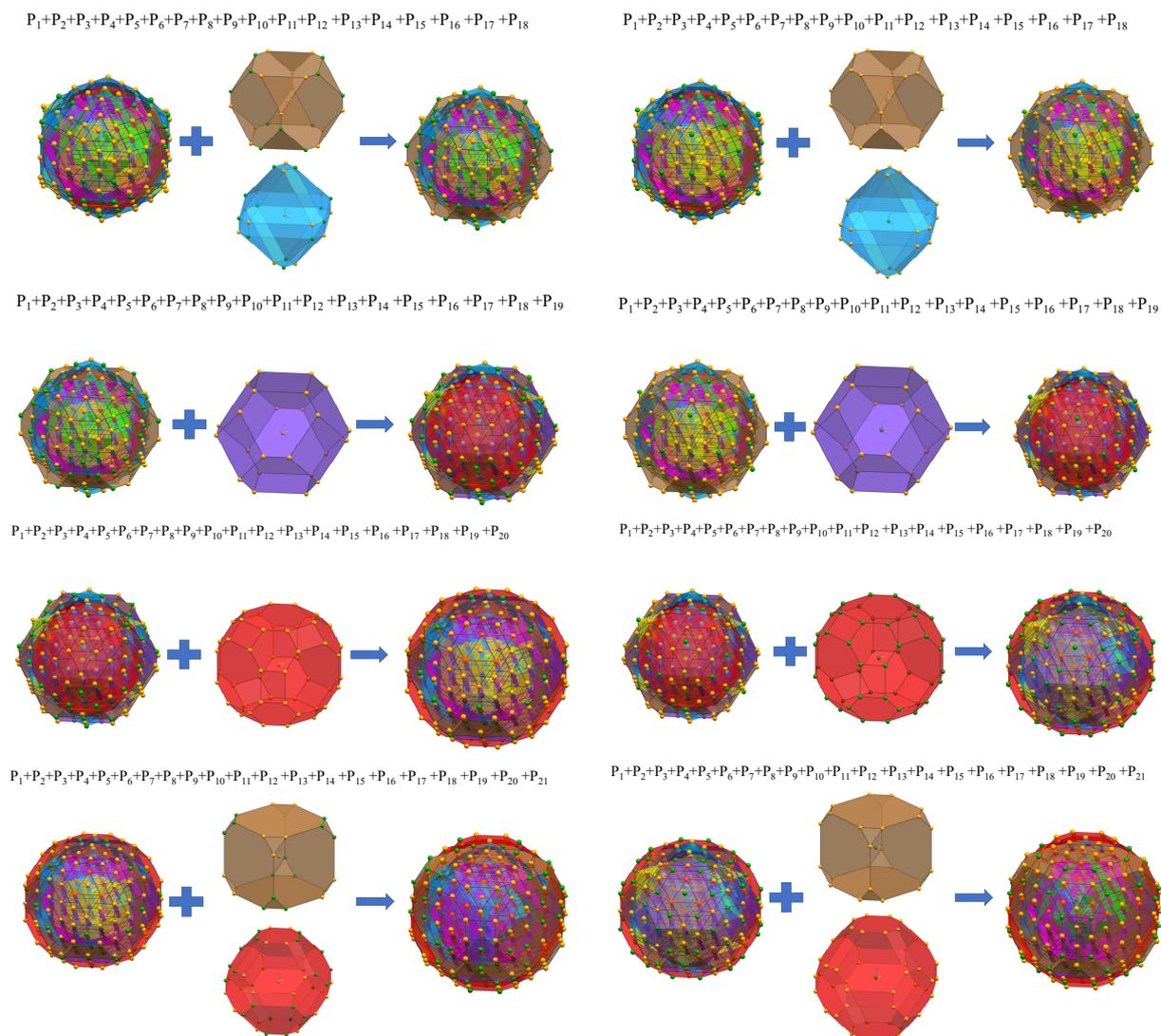


Рис.2. Последовательности упаковки координационных сфер и структур наночастиц сверхструктуры $D0_3$
Fig.2. Sequences of packing of coordination spheres and structures of nanoparticles of the $D0_3$ superstructure

Итоговые конфигурации показаны на рисунке 3 а,б.

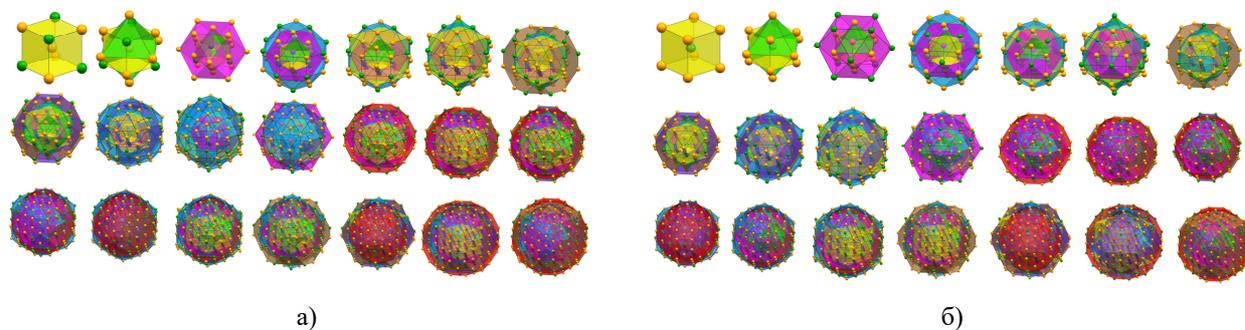


Рис.3. Конфигурации заполнения атомными узлами координационных сфер относительно центрального узла А (а) и В (б)

Fig.3. Configurations of filling coordination spheres with atomic sites relative to the central site A (a) and B (b)

Заключение

На примере упаковок атомными узлами сплава сверхструктуры $D0_3$ состава A_3B на основе ОЦК решетки продемонстрированы правила заполнения координационных сфер для последовательности упаковки первых 21 сферы. Показано, что для центральных узлов А и В упаковки компонентами существенно различаются. Построенные кристаллогеометрические структуры являются идеальными и при последующем включении процессов релаксации по методу молекулярной динамики их симметрия должна нарушаться с появлением некристаллических осей симметрии пятого порядка [14]. Кроме того следует разрушение сверхструктурного порядка с ростом температуры. Данные эффекты должны наблюдаться для малых наночастиц, по крайней мере, в 10-15 сферных упаковок наночастиц. С увеличением размеров наночастиц подобные эффекты должны ослабевать. Однако, представленная в статье упаковка наночастиц сплава сверхструктур $D0_3$ может быть полезной в задачах конструирования наноматериалов с использованием методик компьютерного моделирования.

Список литературы

1. Pearson W.B. Handbook of Spacing Lattice and Structures of Metals and Allous. V.1. London, N.Y.: Pergamon Press, 1958. 939 p.
2. Pearson W.B. Handbook of Spacing Lattice and Structures of Metals and Allous. V.2. London, N.Y.: Pergamon Press, 1967. 1446 p.
3. Козлов Э.В., Дементьев В.М., Кормин Н.М., Штерн Д.М. Структуры и стабильность упорядоченных фаз. Томск: Изд-во Том. ун-та, 1994. 248 с.
4. Иванов Ю.Ф., Громов В.Е., Коновалов С.В., Ефимов М.О., Шлярова Ю.А. и др. Структурно-фазовые состояния покрытия ВЭС Al-Fe-Co-Cr-Ni, сформированного на сплаве 5083 // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2023. Т. 20, № 1. С. 41–51.
5. Bi J., Wu L., Liu Z., Wang H., Yia X. et al. Formability, surface quality and compressive Fracture behavior of Al, Mg, Sc, Zr alloy lattice structure fabricated by selective laser melting // *Journal of Materials Research and Technology*. 2022. V. 19. P. 391–403.
6. Старостенков М.Д. Пространственное распределение атомов по координационным сферам в кристаллах кубической симметрии // *Кристаллография*. 1992. Т. 37, Вып. 3. С. 717–723.

7. Старостенков М.Д. Метод расчета заполнения координационных сфер в кристаллах с ГЦК решеткой. Томск, 1986, 27с/Деп. в ВИНИТИ, 31.03.86, №2968-2-B86.

8. Starostenkov M.D., Zhdanov A.N., Starostenkova O.H. Spatial distribution of atoms and interstitial sites over coordination spheres in cubic crystals // *Crystallography Reports*. 1999. V. 44, N 3. P. 366–72.

9. Starostenkov M.D., Dmitriev S.V. Spatial distribution of polyhedral over the coordination spheres in the BCC lattice // *J. Structural Chemistry*. 1993. V. 34, N 4. P. 107–111.

10. Starostenkov M., Tabakov P., Romanenko V., Chernykh E. Regularities of coordination spheres in the crystal lattice of the cubic symmetry // *Procedia IUTAM*. 2017. V. 23. P. 167–176.

11. Starostenkov M.D., Zhdanov A.N., Starostenkova O.H. Order in atomic distribution of coordination spheres in perovskite-related oxides // *Solid State Ionics*. 1998. V. 108. P. 137–40.

12. Старостенков М.Д., Лощина И.В. Простое правило заполнения координационных сфер кристаллической решетки типа алмаза // В сб. материалов конференции «XVII Петербургские чтения по проблемам прочности». Санкт-Петербург, 10-12 апреля 2007 г. СПб., 2007. С. 92–95.

13. Лощина И.В., Старостенков М.Д. Правило заполнения координационных сфер в кристаллической решетке алмаза // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2006. Т. 3, № 3. С. 94–100.

14. Starostenkov M.D., Zakharov P.V., Markidonov A.V., Tabakov P.Ya. Nonlinear Effects in Model Lattices of Metals. *Materials Research Forum LLC*. USA, V. 156. 2024. 129 p.

Информация об авторах

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

Ц. Би – доктор наук Яньшанского университета.

Ч. Ян – преподаватель Яньшанского университета.

Г. Донг – профессор Яньшанского университета.

Сухаиб Латиф Садаа – аспирант Алтайского государственного технического университета им. И.И. Ползунова.

Н. М. Гурова – кандидат физико-математических наук, доцент Алтайского госу-

дарственного технического университета им. И.И. Ползунова.

С. Л. Кустов – кандидат физико-математических наук, декан, заведующий кафедрой, доцент Алтайского государственного технического университета им. И.И. Ползунова.

References

- Pearson, W. B. (1958). Handbook of Spacing Lattice and Structures of Metals and Allous. V.1. London, N.Y.: Pergamon Press. P. 939.
- Pearson, W. B. (1967). Handbook of Spacing Lattice and Structures of Metals and Allous. V.2. London, N.Y.: Pergamon Press. P. 1446.
- Kozlov, E. V., Dement'yev, V. M., Kormin, N. M. & Shtern, D. M. (1994). Структуры и стабильности устойчивых легируемых фаз. Томск: Изд-во Том. ун-та. P. 248. (In Russ.).
- Ivanov, Yu. F., Gromov, V. E., Konovalov, S. V., Yefimov, M. O. & Shlyarova, Yu. A. i dr. (2023). Структурно-фазовые состояния покрытия VES Al–Fe–Co–Cr–Ni, сформированного на сплаве 5083. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedenia (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 20(1), 41–51. (In Russ.).
- Bi, J., Wu, L., Liu, Z., Wang, H. & Yia, X. et al. (2022). Formability, surface quality and compressive Fracture behavior of Al, Mg, Sc, Zr alloy lattice structure fabricated by selective laser melting. *Journal of Materials Research and Technology*, 19, 391–403.
- Starostenkov, M. D. (1992). Prostranstvennoye raspredeleniye atomov po koordinatsionnym sferam v kristallakh kubicheskoy simmetrii. *Kristallografiya*, 37(3), 717–723. (In Russ.).
- Starostenkov, M. D. (1986). Metod rascheta zapolneniya koordinatsionnykh sfer v kristallakh s GTSK reshetkoy. Томск, 27s/Dep. v VINITI, 31.03.86, N 2968-2-V86. (In Russ.).
- Starostenkov, M. D., Zhdanov, A. N. & Starostenkova, O. H. (1999). Spatial distribution of atoms and interstitial sites over coordination spheres in cubic crystals. *Crystallography Reports*, 44(3), 366–72.
- Starostenkov, M. D. & Dmitriev, S. V. (1993). Spatial distribution of polyhedral over the coordination spheres in the BCC lattice. *J. Structural Chemistry*, 34(4), 107–111.
- Starostenkov, M., Tabakov, P., Romanenko, V. & Chernykh, E. (2017). Regularities of coordination spheres in the crystal lattice of the cubic symmetry. *Procedia IUTAM*, 23, 167–176.
- Starostenkov, M. D., Zhdanov, A. N. & Starostenkova, O. H. (1998). Order in atomic distribution of coordination spheres in perovskite-related oxides. *Solid State Ionics*, 108, 137–40.
- Starostenkov, M. D. & Loshchina, I. V. (2007). Prostoye pravilo zapolneniya koordinatsionnykh sfer kristallicheskoy reshetki tipa almaza. V sb. materialov konferentsii «XVII Peterburgskiyecheniya po problemam prochnosti». Sankt-Peterburg, 10-12 aprelya 2007. SPb., 92–95. (In Russ.).
- Loshchina, I. V. & Starostenkov, M. D. (2006). Pravilo zapolneniya koordinatsionnykh sfer v kristallicheskoy reshetke almaza. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedenia (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 3(3), 94–100. (In Russ.).
- Starostenkov, M. D., Zakharov, P. V., Markidonov, A. V. & Tabakov, P. Ya. (2024). Nonlinear Effects in Model Lattices of Metals. *Materials Research Forum LLC. USA. V. 156. P. 129.*

Information about the authors

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

J. Bi – Ph.D., Yanshan University.

Z. Yang – Lecturer, Yanshan University.

G. Dong – Professor, Yanshan University.

Suhayb Lateef Sadaa – Graduate Student, I.I. Polzunov Altai State Technical University.

N. M. Gurova – Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Assistant Professor, I.I. Polzunov Altai State Technical University.

S. L. Kustov – Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Dean, Head of Department, Assistant 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 08.06.2024; одобрена после рецензирования 17.07.2024; принята к публикации 01.08.2024.

The article was received by the editorial board on 08 June 24; approved after reviewing 17 July 24; accepted for publication 01 Aug. 24.