

На правах рукописи

МЕДВЕДЕВ НИКОЛАЙ НИКОЛАЕВИЧ

ЭФФЕКТЫ, СВЯЗАННЫЕ С ЛОКАЛИЗАЦИЕЙ ЭНЕРГИИ И
СОЛИТОНАМИ В МОДЕЛЬНЫХ ГЦК КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ
РЕШЕТКАХ

Специальность 01.04.07 - физика конденсированного состояния

Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

Барнаул – 2014

Работа выполнена в Алтайском государственном техническом университете им. И.И. Ползунова на кафедре общей физики.

Научный консультант: Заслуженный деятель науки РФ, доктор физико-математических наук, профессор, Старостенков Михаил Дмитриевич.

Официальные оппоненты: Поплавной Анатолий Степанович, заслуженный деятель науки РФ, доктор физико - математических наук, профессор, зав. кафедрой теоретической физики ФГБОУ ВПО «Кемеровский государственный университет»

Колупаева Светлана Николаевна, доктор физико-математических наук, профессор, зав кафедрой прикладной математики ФГБОУ ВПО «Томский государственный архитектурно – строительный университет»

Зольников Константин Петрович, доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник ФГБУН «Институт физики прочности и материаловедения СО РАН»

Ведущая организация: ФГБУН «Институт проблем сверхпластичности металлов РАН», г. Уфа.

Защита состоится «9» апреля 2014 г. в 12.00. час. на заседании диссертационного совета Д 212.004.04 при Алтайском государственном техническом университете по адресу: 656099, г. Барнаул, пр. Ленина, 46.
e-mail: veronika_65@mail.ru.

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке Алтайского государственного технического университета.

Автореферат разослан " _____ " _____ 2014 г.

Ученый секретарь диссертационного совета,
кандидат физико-математических наук,
доцент

Романенко В.В

Отзывы на автореферат с печатью в 2-х экземплярах просим присылать на e-mail veronika_65@mail.ru и адрес диссертационного совета АлтГТУ

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность исследования.

На сегодняшний день нелинейная физика, и в частности физика солитонов испытывает интенсивное развитие, причем значительная часть работ имеет теоретический характер, и в какой-то мере она развивается как отрасль математической физики и компьютерного моделирования [1, 2]. Математические модели хорошо описывают и позволяют идентифицировать солитоны различных типов и различной природы. Например, известны оптические солитоны в волоконных световодах [3], они обнаружены в живых организмах, которые переносят энергию и информацию [4], на поверхности жидкости и в твердых телах [5].

Дискретные бризеры (ДБ) или нелинейные локализованные колебательные моды (НЛКМ) в идеальных кристаллах, относят к динамическим солитонам. Они представляют собой нелинейные незатухающие колебания большой амплитуды строго определенной частоты одной или группы частиц в бездефектной периодической структуре. Впервые концепция локализации колебательной энергии в нелинейных моделях идеальных кристаллических решеток различных размерностей была предложена Sievers A.J. и Takeno S. в работе [6]. За период в четверть века с момента появления первой публикации интерес к ДБ неуклонно возрастает. Нелинейные локализованные колебательные моды экспериментально обнаружены в нелинейной оптике [3], джозевсоновских сверхпроводящих контактах [7]. Относительно недавно появились экспериментальные работы по поиску ДБ и явлений, связанных с ними, в кристаллах NaI [8, 9].

Задачи, связанные с массопереносом, дрейфом точечных топологических солитонов и их агрегатов в кристаллических решетках, имеющие прямое отношение к проблемам пластичности и прочности твердых тел, являются классическими. В связи с появлением новых материалов и открытием таких явлений, как например, эффект дальнего действия, интерес к ним не ослабевает [10, 11].

Таким образом, направления исследований, связанные с локализацией энергии колебаний атомов, с динамическими и топологическими солитонами в твердых телах являются актуальными.

Настоящая работа посвящена изучению эффектов локализации колебательной энергии и некоторых процессов, связанных с топологическими солитонами в двух- и трехмерных моделях ГЦК кристаллических решеток, построенных с помощью метода молекулярной динамики. Рассматривалась локализация энергии колебаний не только на

динамических солитонах [12 - 14], на нелинейных колебательных модах или т.н. дискретных бризерах [15, 16], но и локализация энергии фононных колебаний на подрешетке атомов сорта “B” в упорядоченных кристаллах стехиометрии A_3B , которая к солитонам не относится.

Целью работы является поиск и изучение эффектов локализации колебательной энергии и явлений, связанных с дрейфом и агрегатизацией точечных топологических солитонов в биатомных сплавах с ГЦК кристаллической решеткой.

Математические модели периодических структур, позволяющие получать бризерные решения, строятся, как правило, с помощью короткодействующих потенциалов, обеспечивающие взаимодействие лишь со своими ближайшими соседями [1, 12, 15, 16]. Очевидно, что это достаточно грубое приближение, чтобы судить о том, насколько близко они описывают свойства реальных кристаллов. В настоящей работе используется дальнедействующие потенциалы, учитывающие воздействие соседних атомов до седьмой, а иногда и до десятой координационной сферы включительно.

Учет такого большого количества соседей по кристаллу весьма громоздкая задача, по этой причине использовалась не аналитическое, а компьютерное моделирование. Для рассматриваемых задач наиболее подходящим оказался метод молекулярной динамики (ММД).

Итак, в диссертации, методом молекулярной динамики с помощью достаточно универсального потенциала Морзе, который позволяет строить модели, отражающие весьма широкий спектр свойств реальных кристаллов [10], исследовались:

- возможности получения бризерных решений в моделях реальных сплавов стехиометрии A_3B ;
- влияния различных факторов на существование НЛКМ;
- обнаруженные эффекты локализации энергии фононных колебаний в подрешетке атомов сорта “B” в упорядоченных кристаллах стехиометрии A_3B , со целью в фононном спектре;
- слабоустойчивые колебания атома Al в упорядоченном сплаве Ni_3Al .

Кроме этого, рассмотрены особенности агрегатизации точечных дефектов в упорядоченном сплаве Ni_3Al ; влияние на дрейф агрегатов точечных упругих волн, продольных и поперечных, возникающих при комбинации пар Френкеля; изучены динамические эффекты, возникающие на межфазной границе биметаллов; осуществлена модификация потенциала Морзе, для моделирования столкновений атомов обладающих высокой энергией; смоделированы краудсионные и

фокусирующиеся столкновения атомов Cu в 3D модели упорядоченного сплава $CuAu$.

Научная новизна работы заключается в следующем.

1. Впервые, в 2D и 3D моделях упорядоченного сплава Pt_3Al , построенных методом молекулярной динамики, показана возможность возбуждения ДБ.

2. Изучено влияние различных факторов на возможность возбуждения ДБ в моделях упорядоченных сплавов стехиометрии A_3B .

3. Показано на примере модельного сплава Ni_3Al , что появление колебательных мод с частотами, входящими в щель фононного спектра не является достаточным признаком возбуждения щелевых ДБ.

4. Обнаружена новая разновидность локализации энергии колебаний, локализация энергии фононных колебаний на подрешетке атомов сорта "B" в упорядоченном кристалле стехиометрии A_3B со сверхструктурой $L1_2$ и со щелью в фононном спектре.

Практическая и научная ценность работы заключается в следующем.

1. Найдено сочетание параметров, характеризующих кристалл, необходимое для существования щелевых ДБ в упорядоченных сплавах стехиометрии A_3B со сверхструктурой $L1_2$. Как оказалось, наибольшее влияние на принципиальную возможность возбуждения НЛКМ оказывает соотношение масс и эффективных диаметров атомов компонентов сплава. Причем, если масса атомов сорта "A" должна существенно превосходить массу атомов сорта "B", в настоящей работе в семь раз и более, то эффективный диаметр первых должен быть, хотя бы незначительно, меньше диаметра вторых. Ни объемный модуль упругости, ни энергия сублимации заметной роли в жизни ДБ не играют.

2. Исследование процесса слабоустойчивых колебаний атома алюминия в 3D модели упорядоченного сплава Ni_3Al , в котором невозможно существование ДБ, показало, что частоты этих колебаний оказываются в щели фононного спектра упорядоченного сплава. Таким образом, поставлена под сомнение интерпретация результатов эксперимента по обнаружению спонтанного возбуждения дискретных бризеров в NaI , находящегося в состоянии термодинамического равновесия при температуре 555 K [8], в котором в качестве признака возбуждения ДБ принято появление колебательных мод с частотами, лежащими в щели фононного спектра.

3. Открыта возможность локализации энергии фононных оптических колебаний подрешетки атомов сорта "B" кристаллов со стехиометрией A_3B , со сверхструктурой $L1_2$, и со щелью в фононном спектре. Сущность

явления заключается в том, что энергия оптических колебаний более легких атомов “*B*” возбужденных при 0 К благодаря наличию щели в фоннном спектре не передается атомам сорта “*A*”. Иными словами, реализуется ситуация, при которой энергия колебаний легких атомов может сколь угодно долго, значительно, до двух порядков, превосходить энергию колебаний более массивных атомов.

На защиту выносятся следующие положения:

1. Выявлена возможность возбуждения дискретных бризеров в 2*D* и 3*D* моделях упорядоченного сплава Pt_3Al .

2. Установлено, что для возбуждения ДБ в моделях упорядоченных сплавов стехиометрии A_3B необходимо выполнение двух условий. Во-первых, должно быть большое соотношение масс атомов (в предлагаемой работе оно было от 7:1 и более). Во-вторых, эффективный диаметр атомов сорта “*B*” должен быть больше эффективного диаметра сорта “*A*”.

3. Показана возможность возбуждения слабоустойчивых колебательных мод с частотами, входящими в щель фоннного спектра, в тех кристаллах, где в принципе не возникают ДБ. Этот факт доказывает то обстоятельство, что появление колебательных мод с частотами, входящими в щель фоннного спектра не является достаточным признаком возбуждения щелевых ДБ.

4. Обнаружена локализация энергии фоннных колебаний на подрешетке атомов сорта “*B*” в упорядоченном кристалле стехиометрии A_3B со сверхструктурой $L1_2$, со щелью в фоннном спектре.

5. В модельных кристаллах состава A_3B , (со щелью в фоннных спектрах) находящихся в состоянии термодинамического равновесия, обнаружено локальное спонтанное перераспределение энергии колебаний между подрешетками.

6. Кроме того, модифицирован потенциал Морзе для моделирования столкновения атомов с энергией 10 – 400 эВ; на границе биметаллов при некоторых условиях возможно появление ударной волны и возбуждение долгоживущей нелинейной локализованной моды; в результате рекомбинации пар Френкеля возможно возбуждение не только продольной, но и при некоторых условиях, поперечной волны, эти волны при взаимодействии с агрегатами вакансий и межузельных атомов, вызывает их разнонаправленный дрейф; тетраэдр дефектов упаковок не является конечным кластером агрегатизации вакансий в Ni_3Al ; агрегаты, образованные из вакансий в интерметаллиде Ni_3Al менее стабильны по сравнению с аналогичными образованиями в монокристаллах Ni и Al .

Апробация работы. Результаты работы были доложены и обсуждены на следующих всероссийских и международных научных конференциях. VI Всероссийская научно-техническая конференция “Измерения, автоматизация и моделирование в промышленности и научных исследованиях”, (ИАМП - 2005), Бийский технологический институт, 6 – 7 октября, Алтайский край, Бийск, 2005; VIII Всероссийская научная конференция “Краевые задачи и математическое моделирование”, 1 – 3 декабря, Новокузнецк, 2006; International Conference on Computational Methods, (ICCM - 2007), Japan, International Conference Center, 4-6 April, Hiroshima, 2007; 13th International Conference on Liquid and Amorphous Metals, Russia, 8 - 14 July, Ekaterinburg, 2007; The Second International conference “Deformation & Fracture of Materials and Nanomaterials”, (DFMN-2007), Russia, 8-11 October, Moscow, 2007; Vth International Conference on “Materials Structure and Micromechanics of Fracture”, (MSMF5), Czech Republic, June 27 - 29, Brno, 2007. 9th International Conference on Modification of Materials With Particle Beams and Plasma Flows, Russia, September 21 – 26, Tomsk, 2008; Открытая школа-конференция стран СНГ “Ультрамелкозернистые и наноструктурные материалы” Россия, Республика Башкортостан, 4 – 9 августа, Уфа, 2008; Международный симпозиум “Перспективные материалы и технологии”, Беларусь, 25 - 29 мая, Витебск, 2009; XVII Международная конференция «Физика прочности и пластичности материалов», Россия, 23 - 25 июня, Самара, 2009; Региональная научно-практическая конференция «Наноиндустрия Алтая 2009» Бийск, 2009. 10th International Conference on Modification of Materials with Particle Beams and Plasma Flows, Russia, September 19-24, Tomsk, 2010; Открытая школа-конференция стран СНГ “Ультрамелкозернистые и наноструктурные материалы” Россия, Республика Башкортостан, 11-15 октября, Уфа, 2010; 50th Международный симпозиум “Актуальные проблемы прочности”, Беларусь, 27 сентября – 1 октября, Витебск, 2010; Fifth International Conference “Multiscale Materials Modeling” (MMM-2010), Germany, October 04-08, Freiburg, 2010; Международная научно-практическая конференция “Фундаментальные науки и образование”, Россия, Алтайский край 29 января - 1 февраля, Бийск, 2011; Всероссийская конференция “VI сессия научного совета РАН по механике”, 26-31 июля, Барнаул, Белокуриха, 2012; Всероссийская научно-практическая конференция “Информационные технологии в науке, экономике и образовании”, Алтайский край, 8 – 9 октября, Бийск, 2012; 3rd International Congress on Radiation Physics and Chemistry of Condensed Matter, High Current Electronics and Modification of Materials with Particle Beams and Plasma Flows, Russia, on September 17-21, Tomsk, 2012; VII Международная

конференция “Микромеханизмы пластичности, разрушения и сопутствующих явлений”, Россия, 18 – 21 июня, Тамбов, 2013; European Materials Research Society (E-MRS 2013) Fall Meeting, Poland, September 16 – 20, Warsaw, 2013;

Публикации. Результаты работы изложены в 75 публикациях, 29 из которых в Российских и зарубежных журналах, включенных в список ВАК Минобрнауки РФ для публикации материалов докторских диссертаций, в том числе, авторское свидетельство государственного образца на программу ЭВМ, полученное в соавторстве.

Структура и объем диссертации

Диссертация состоит из введения, восьми глав, заключения и списка литературы из 400 наименований. Работа изложена на 299 страницах машинописного текста, содержит 12 таблиц, 122 рисунка.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обосновывается актуальность исследуемой проблемы, сформулирована цель диссертационной работы, описана научная новизна, практическая ценность, перечисляются основные защищаемые положения. Дается краткое содержание работы по главам.

В первой главе дается обзор литературы по главам диссертации. Формулируются задачи исследования.

Во второй главе обосновывается выбор метода моделирования кристаллических решеток и потенциала взаимодействия. Освещаются основные проблемы моделирования методом молекулярной динамики. Перечислены визуализаторы, используемые в исследованиях. Приведены результаты изучения процесса накопления погрешностей счета в методе молекулярной динамики.

Третья глава посвящена изучению вопроса об энергетическом диапазоне применимости потенциала Морзе:

$$U(r) = D\beta \exp(-\alpha r) [\beta \exp(-\alpha r) - 2] \quad (1)$$

содержащего три параметра D , α , β , которые определяются из условий:

$$\frac{1}{2} \sum_{i=1}^z \eta_i U_{V=V_0} = E_s, \quad \frac{1}{2} \sum_{i=1}^z \eta_i \left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_{V=V_0} = 0, \quad K_0 = -V_0 \cdot \left(\frac{\partial P_s}{\partial V} \right), \quad (2)$$

где η_i - число атомов в i - координационной сфере, z - число учитываемых сфер, E_s - энергия сублимации атомов кристалла при нуле Кельвин, K_0 - объемный модуль упругости, P_s - давление изоэнтропического

сжатия, V_0 и V - удельные объемы в начальном и деформированном состояниях.

Для описания фокусирующихся и краудсионных столкновений атомов потребовалась модификация потенциала. Модифицированный потенциал Морзе имеет вид:

$$U(r) = D\beta \exp(-ar) [\beta \exp(-ar) - 2] + \frac{Da_0}{\delta} \exp\left(-\delta \frac{(r-a_0)}{a_0}\right) \quad (3)$$

Для определения величины δ системе уравнений (2) требуется еще одно уравнение, включающее в себя третью производную от потенциала:

$$\gamma_0 = \frac{l-1}{3} - \frac{V}{2} \cdot \left(\frac{\partial^2 (P_s \cdot V^{\frac{2}{3}})}{\partial V^2} \right) / \left(\frac{\partial (P_s \cdot V^{\frac{2}{3}})}{\partial V} \right), \quad (4)$$

Формула (4) является обобщенной формулой [17], которая при $l = -1$ превращается в формулу Ландау-Слейгера [18], а при $l = 0$ в формулу Дугдала – Мак-Дональда [19]. При этом последняя получена с учетом равенств между первыми и вторыми производными от изэнтропической зависимости давления при $V = V_0$ и изотермической, при нуле Кельвин, (γ_0 - постоянная Грюнайзена).

Зависимость, которая дается выражением Ландау-Слейгера приводит к неустойчивым моделям. В настоящей работе использовалась формула Дугдала-Мак-Дональда:

$$\gamma_0 = -\frac{l}{3} - \frac{V}{2} \cdot \left(\frac{\partial^2 (P_s \cdot V^{\frac{2}{3}})}{\partial V^2} \right) / \left(\frac{\partial (P_s \cdot V^{\frac{2}{3}})}{\partial V} \right). \quad (5)$$

Уравнения (2) и (4) после несложных преобразований приводят к системе уравнений:

$$\begin{cases} (U(x))_{x=0} = E_s \\ \left(\frac{\partial U}{\partial x} \right)_{x=0} = 0 \\ \left(\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \right)_{x=0} = 9a_0 k_l K_0 \\ \left(k_l a_0 \left(\frac{\partial^3 U}{\partial x^3} \right) / \left(6 \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \right) \right)_{x=0} = -\gamma_0 \end{cases} \quad (6)$$

Если энергия одной связи выражается формулой (3), то энергия атома с учетом Z координационных сфер задается выражением:

$$U(x) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{\bar{z}} \eta_i D \left(\beta \left(\beta e^{-2\alpha\sqrt{2}k_i(a_0+x)} - 2e^{-\alpha\sqrt{2}k_i(a_0+x)} \right) + \frac{a_0}{\delta} \exp \left(-\frac{\delta(\sqrt{2}k_i(a_0+x) - a_0)}{a_0} \right) \right) \quad (7)$$

Решая систему (6) с учетом (7) получим расчетные формулы для параметров потенциала (3):

$$\beta = \frac{\sum_{i=1}^{\bar{z}} k_i \eta_i e^{-\alpha k_i \sqrt{2} a_0} \pm \left(\left(\sum_{i=1}^{\bar{z}} k_i \eta_i e^{-\alpha k_i \sqrt{2} a_0} \right)^2 - 2 \frac{k_1 \eta_1}{\alpha} \sum_{i=1}^{\bar{z}} k_i \eta_i e^{-2\alpha k_i \sqrt{2} a_0} \right)^{\frac{1}{2}}}{2 \sum_{i=1}^{\bar{z}} k_i \eta_i e^{-2\alpha k_i \sqrt{2} a_0}} \quad (8)$$

$$D = - \frac{2E_S}{\beta \sum_{i=1}^{\bar{z}} \eta_i \left(\beta e^{-2\alpha k_i \sqrt{2} a_0} - 2e^{-\alpha k_i \sqrt{2} a_0} \right) + \frac{\eta_1 a_0}{\delta}} \quad (9)$$

$$\delta^2 = \frac{54\gamma_0 K_0 a_0^2}{k_1^3 D \eta_1 \sqrt{2}} + \frac{2\beta\alpha^3 a_0^2}{k_1^3 \eta_1} \sum_{i=1}^{\bar{z}} \eta_i k_i^3 \left(e^{-\alpha k_i \sqrt{2} a_0} - 4\beta e^{-2\alpha k_i \sqrt{2} a_0} \right) \quad (10)$$

$$\frac{\delta \eta_1 D k_1^2}{a_0} - 9k_1 a_0 K_0 + 2D\beta\alpha^2 \sum_{i=1}^{\bar{z}} \eta_i k_i^2 \left(2\beta e^{-2\alpha k_i \sqrt{2} a_0} - e^{-\alpha k_i \sqrt{2} a_0} \right) = 0 \quad (11)$$

Процедура нахождения параметров потенциалов Морзе с поправочным членом (3) заключается в следующем. Варьируется параметр α . По его значению определяются параметры β и D с помощью выражений (8) и (9) соответственно. В самом начале расчетов параметру δ , входящему в (9) присваивается любое значение близкое к 10. После вычисления δ по формуле (10) его значение подставляют в (9) и снова вычисляют значение D а затем и δ . Вычисления методом последовательных приближений продолжают до тех пор, пока не будет выполняться равенство (11).

На рис. 1. показаны графики четырех потенциалов. Цифрой 2 отмечена кривая потенциала Морзе с включенным в него потенциалом Борна-Майера, чьи параметры подогнаны так, чтобы было полное совпадение эффективного диаметра атома модельной решетки с

эффективным диаметром атома Cu приведенным в [20, 21] при кинетической энергии атома равной 100 эВ.

Эффективный диаметр атомов Cu, который дает потенциал Морзе, при кинетической энергии 10 эВ, приблизительно равен тому, что получил Silsbee, R.H. [20] при использовании потенциала Борна Майера с коэффициентами, полученными Huntington H.V. [22] см. рис.1 в). Это значит, что потенциал Морзе с коэффициентами, найденными с помощью уравнений (2), можно использовать для моделирования процессов, когда энергии частиц находятся в диапазоне от 0 до величины немногим более 10 эВ. При больших энергиях требуется модификация потенциала Морзе, например по методу описанному выше.

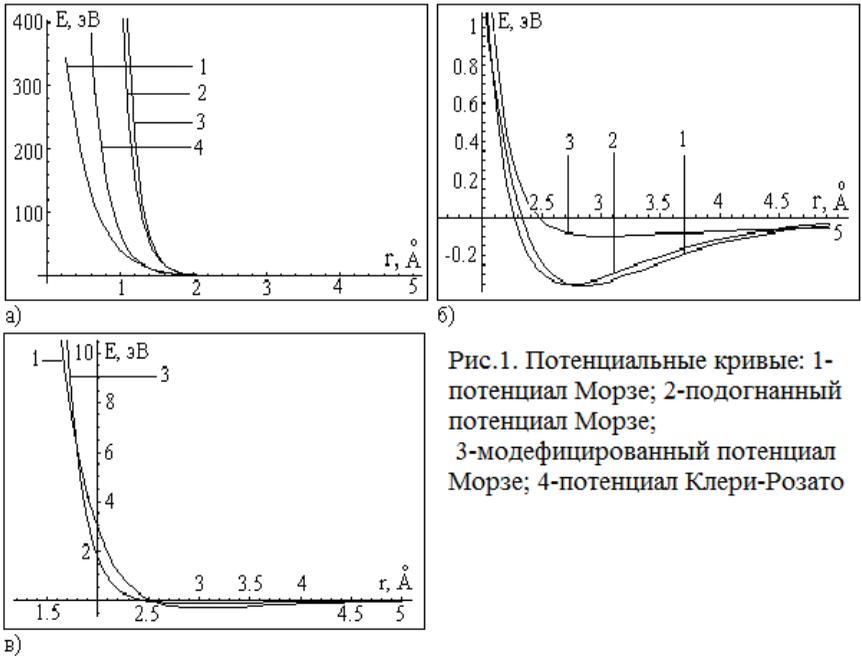


Рис.1. Потенциальные кривые: 1- потенциал Морзе; 2-подогнанный потенциал Морзе; 3-модифицированный потенциал Морзе; 4-потенциал Клери-Розато

Четвертая глава о дискретных бризерах в 2D моделях кристаллических решеток упорядоченных сплавов стехиометрии A_3B . Приведена методика расчета фононного спектра двумерных моделей. Исследована зависимость ширины щели фононного спектра от соотношения масс атомов компонент упорядоченного сплава.

На рис. 2 показано несколько спектров рассчитанных при различных массах атомов Al: а) $m_{Al} = 26.97$, г/моль, ($m_A/m_B \approx 2.2$); б) $m_B = 15$ г/моль, ($m_A/m_B \approx 3.9$); в) $m_B = 10$ г/моль, ($m_A/m_B \approx 5.9$); г) $m_B = 6$ г/моль, ($m_A/m_B \approx 9.8$).

При расчете дисперсионных кривых просканирована первая зона Бриллюэна - $\pi \leq q_x, q_y \leq \pi$. Шаг изменения величин проекций волновых векторов q_x, q_y равен $\pi/50$. Показана проекция полученных поверхностей на плоскость (q_x, ω) . Точками показаны частоты фоновых колебаний ω , измеряемых в ТГц.

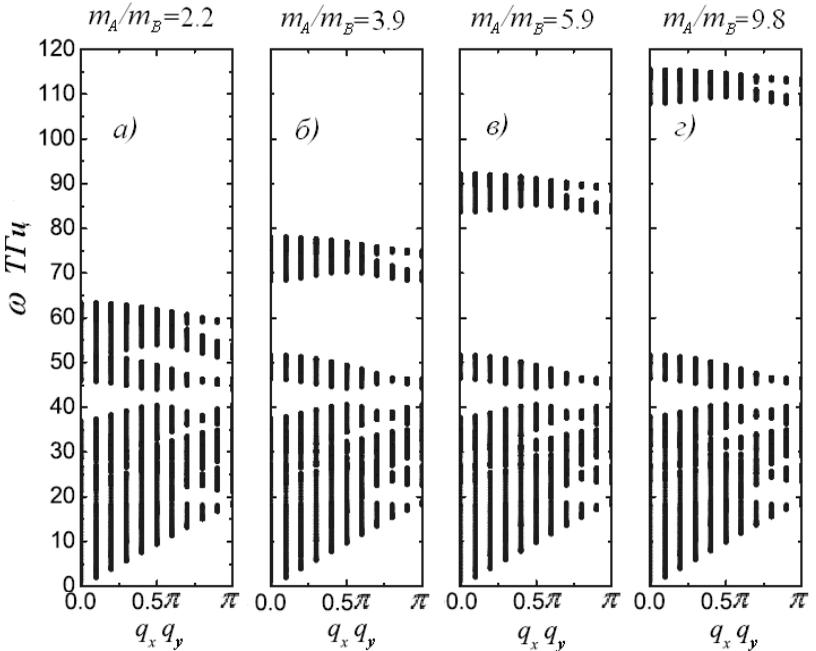


Рис. 2. Фоновый спектр двумерной модели кристаллической решетки сплава стехиометрии A_3B (Ni_3Al), при различных соотношениях масс атомов компонентов сплава.

Частота нелинейной локализованной колебательной моды, возбуждаемой в двумерной модельной решетке упорядоченного сплава

стехиометрии A_3B , находится в щели фоннного спектра этого кристалла. Однако она не может принимать произвольное значение в этой зоне. Она лежит в узком диапазоне верхней части щели фоннного спектра кристаллической решетки. Указанный диапазон меняет свою ширину аналогично тому, как это происходит с шириной щели дисперсионных кривых при варьировании массы атомов компонента B упорядоченного сплава A_3B . Достаточно широкий диапазон значений частот, ДБ при большом соотношении масс атомов сплава см. рис. 3.

Амплитуда колебаний атома несущего нелинейную локализованную моду связана с частотой колебаний см. рис. 4.

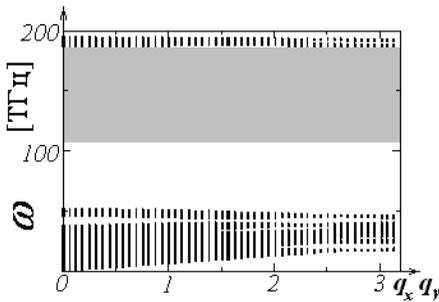


Рис. 3.

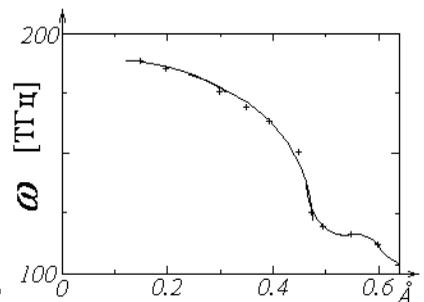


Рис.4

Рис. 3. Дисперсионные зависимости для A_3B при отношении масс 30:1. Серым цветом показана область, в которой может лежать частота ДБ.

Просканирована первая зона Бриллюэна $-\pi \leq q_x, q_y \leq \pi$ с шагом $\pi/50$ по каждой переменной, и результаты представлены в проекции на плоскость (q_x, ω) .

Рис. 4. Кривая зависимости частоты от амплитуды ДБ. График построен при соотношении масс упорядоченного сплава 30:1.

В последнем параграфе главы рассмотрена возможность возбуждения нелинейных локализованных колебательных мод в результате периодического внешнего воздействия.

В пятой главе рассмотрены эффекты локализации колебательной энергии в 3D моделях упорядоченных сплавов состава A_3B со сверхструктурой $L1_2$. Изложена методика расчета фоннного спектра трехмерных кристаллов. В 3D модели упорядоченного сплава Pt_3Al был получен щелевой ДБ (см. рис. 5.), частота которого также как и в двумерном случае зависела от амплитуды колебаний, рис. 6.

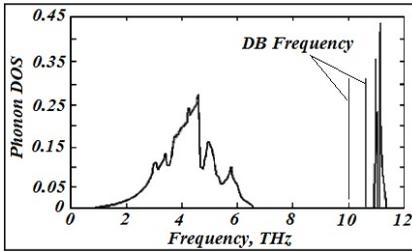


Рис. 5.

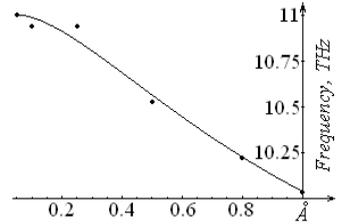


Рис. 6.

Рис. 5. Плотность фоновных состояний трехмерной модели кристалла Pt_3Al . 10 и 10.6 THz – частоты колебаний дискретных бризеров.

Рис. 6. Зависимость частоты ДБ от амплитуды колебаний.

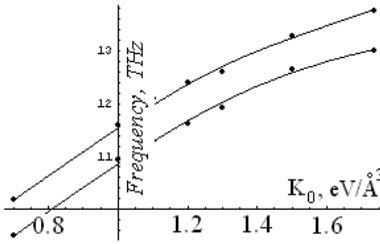


Рис. 7.

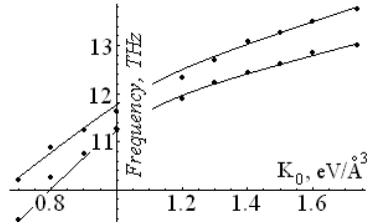


Рис. 8

Рис. 7. Зависимость ширины диапазона частот ДБ от объемного модуля упругости K_{Pt-Al} .

Рис. 8. Зависимость ширины диапазона частот ДБ от объемного модуля упругости K_{Pt-Pt} .

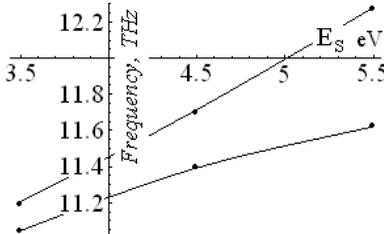


Рис. 9.

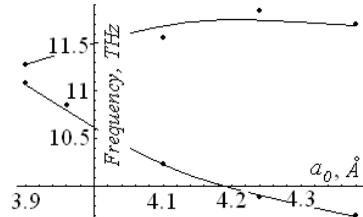


Рис. 10.

Рис. 9. Зависимость ширины диапазона частот ДБ от параметра $E_{S(Pt-Al)}$ - энергии связи атомов в сплаве Pt_3Al .

Рис. 10. Зависимость ширины диапазона частот ДБ от эффективного диаметра атомов Al в сплаве Pt_3Al .

Там же было показано, что объемные модули упругости K_{Pt-Pt} и K_{Pt-Al} не влияют на ширину частотного диапазона возбуждения ДБ в упорядоченном сплаве Pt_3Al (рис. 7-8). Она заметно зависит от энергии связи $E_{S(Pt-Al)}$ атомов в сплаве $Pt-Al$ (рис. 9). Наибольшее влияние на ширину частотного диапазона ДБ в щели фоннного спектра имеет эффективный диаметр атомов в упорядоченном сплаве Pt_3Al , см. рис. 10.

Возбуждение ДБ наблюдалось при отклонении атома алюминия в модельном кристалле с нулевой температурой вдоль направления $[100]$, или под углом не больше чем 5-10 градусов к указанному направлению. При начальном отклонении атома на 0.69 Å максимальная кинетическая энергия атома несущего нелинейную локализованную моду имеет значение приблизительно 5 эВ, частота 10.6 ТГц, см. рис 11. Отклонение атома Al на 1 Å от положения равновесия позволяет получить ДБ с энергией 10 эВ, его частота колебаний при этом 10 ТГц (рис. 12).

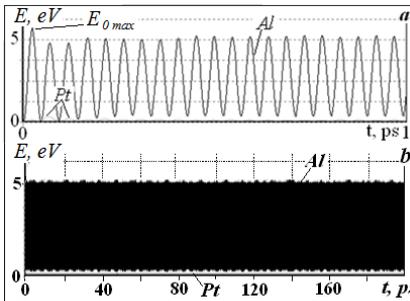


Рис. 11.

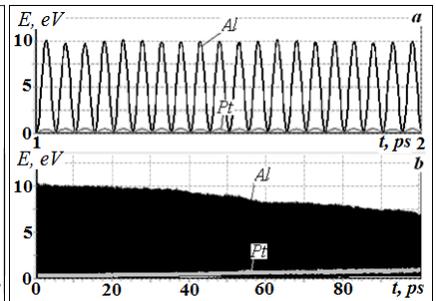


Рис. 12.

Рис. 11. Колебания ДБ. Первоначальное отклонение атома 0.69 Å. *a*). Зависимость кинетической энергии от времени (в первую пикосекунду) атома Al несущего нелинейную локализованную моду (совершающего колебания вдоль направления $[001]$), черный цвет. Серым цветом отмечена кривая зависимости кинетической энергии атомов Pt, окружающих атом алюминия несущего нелинейную локализованную моду. *b*). То же что и на рис. *a*) в течение 200 пикосекунд.

Рис. 12. Колебания ДБ. Первоначальное отклонение атома Al - 1 Å. Наблюдается рассеяние энергии ДБ и рост средней кинетической энергии атомов подрешетки Pt.

Если наличие щели в фоннном спектре биатомных кристаллов еще не гарантирует возможность возбуждения ДБ, то для возбуждения произвольных оптических колебаний локализованных на подрешетке

легких атомов сорта “*B*” в кристалле состава A_3B , наличие запрещенной зоны в фононном спектре является достаточным условием. Это утверждение можно проиллюстрировать, с помощью модельного кристалла Ni_3Al . В его фононном спектре имеется довольно узкая запрещенная зона (рис. 18), и возбудить дискретные брэггеры в нём не удастся. Однако существует принципиальная возможность локализации энергии на оптических колебаниях атомов алюминия. На рис. 13 показан разброс средних по ансамблю кинетических энергий атомов подрешеток алюминия и никеля в 3D модели упорядоченного сплава Ni_3Al .

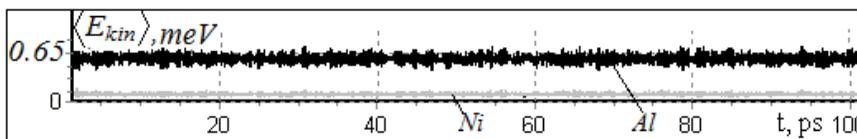


Рис. 13. Локализация энергии фононных колебаний в подрешетке *Al* в 3D модели упорядоченного сплава Ni_3Al .

Масса атома алюминия приблизительно в 2 раза меньше массы атома никеля. Поэтому даже незначительные начальные отклонения атомов *Al* от положения равновесия вызывает возмущение соседних атомов никеля. Разброс колебательных энергий атомов *Al* и *Ni* на рис. 13 получен путем отклонений в произвольных направлениях каждого атома *Al* из положения равновесия на расстояние порядка 0.05 \AA .

С существенно большей легкостью можно получить локализацию энергии колебаний на подрешетке атомов сорта “*B*” в модельных упорядоченных кристаллах состава A_3B с широкой запрещенной зоной фононного спектра при температуре модельного кристалла равной 0 K . Например, в модели упорядоченного сплава Pt_3Al .

Если атом алюминия в начальный момент времени отклонить на расстояния меньшее, чем 0.69 \AA от положения равновесия в направлении $[100]$, или в любых других направлениях, например, $[110]$, $[111]$, а также на любое расстояние, не превышающее 1 \AA (при большем отклонении энергия слишком велика, чтобы описывать взаимодействие потенциалом Морзе), он будет совершать затухающие колебания.

В случае, когда высокоамплитудные колебания атома *Al* имели поляризацию $[111]$, наблюдалось очень быстрое их затухание, в течение нескольких пикосекунд (см. рис. 14 а). Частота колебаний была на 2-3 процента выше частоты колебаний атома *Al* с поляризацией вдоль направления $[100]$, в течение первой пикосекунды она составляла 11 THz и

по мере уменьшения амплитуды колебаний незначительно уменьшалась, не выходя за пределы оптической части фононного спектра. При этом энергия рассеивалась исключительно внутрь подрешетки *Al*, (см. рис. 14 б).

На рис. 15 показан процесс и результат рассеяния энергии высокоамплитудной моды имеющей поляризацию [100] и амплитуду недостаточно большую, чтобы частота колебаний оказалась в запрещенной зоне плотности фононных состояний. Отличаются колебания на рис. 15 от колебаний на рис. 14 значительно большей амплитудой биений. Объяснение дано в диссертации.

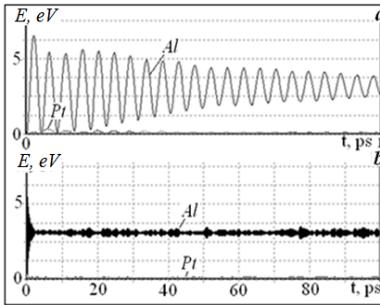


Рис. 14.

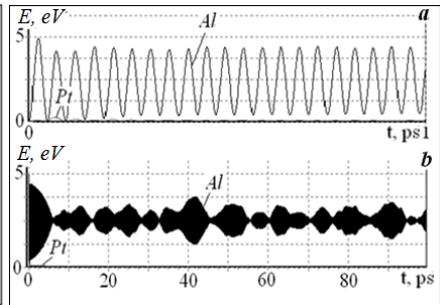


Рис. 15.

Рис. 14. Рассеяние энергии нелинейной локализованной моды с поляризацией [111], начальное отклонение атома *Al* 0.69 Å. Черная кривая на рисунке - а) – рассеяние энергии нелинейной высокоамплитудной моды в подрешетку *Al*. Здесь же серая кривая – энергия атомов *Pt*. В части б), верхняя кривая – средняя энергия колебаний подрешетки *Al*, нижняя кривая – энергия колебаний атомов *Pt*.

Рис. 15. То же что и на рис. 14 для случая с начальным отклонением атома *Al* на 0.64 Å и поляризацией [100].

Увеличение числа частиц выведенных из состояния равновесия в начальный момент времени приводит, естественно, к повышению разброса температур подрешеток. Так, отклонение на 0.1 Å в шахматном порядке на одной из плоскостей (111) ячейки 64-х атомов *Al* приводило к разбросу средних кинетических энергий атомов до 17.5 мэВ (0.6 мэВ у подрешетки *Pt*), см. рис. 16.

На рис. 17 показан характер колебаний атома *Al* отклоненного на 1.1 Å в начальный момент времени в направлении [100]. Уже в течение первого периода колебаний значительная часть энергии, приблизительно, 3

эВ (из 11 эВ) рассеивается в никелевую подрешетку кристалла. При этом на кинетическую и потенциальную энергии приходится по 1.5 эВ. Остальная часть энергии в течение нескольких периодов колебаний остается у атома алюминия.

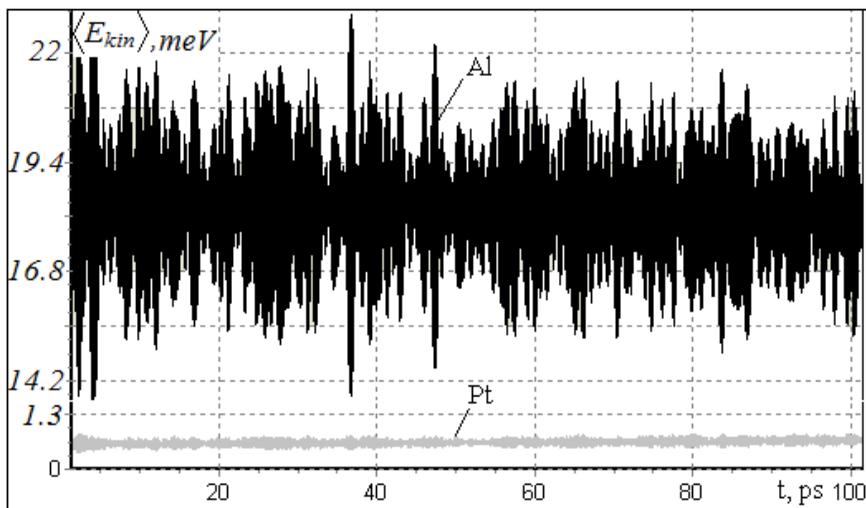


Рис. 16. Распределение средних кинетических энергий по подрешеткам *Al* и *Pt* в модельном сплаве Pt_3Al (результат отклонения из положения равновесия 64 атомов).

Считается, что ДБ могут спонтанно возбуждаться в некоторых кристаллах, находящихся в условиях термодинамического равновесия см. публикацию [8]. В указанной работе экспериментально было установлено, что при определенных температурах в щели фононного спектра *NaI* появляются колебательные моды, что было интерпретировано как спонтанное возбуждение ДБ см. рис. 5.27. В диссертации показано, что появление колебательных мод в щели фононного спектра не является достаточным признаком спонтанного возбуждения ДБ. Оно может быть также признаком спонтанного возбуждения неустойчивых колебаний большой амплитуды в кристаллах где в принципе не возбуждаются ДБ. Были рассмотрены слабоустойчивые нелинейные колебания атома *Al* в сплаве Ni_3Al .

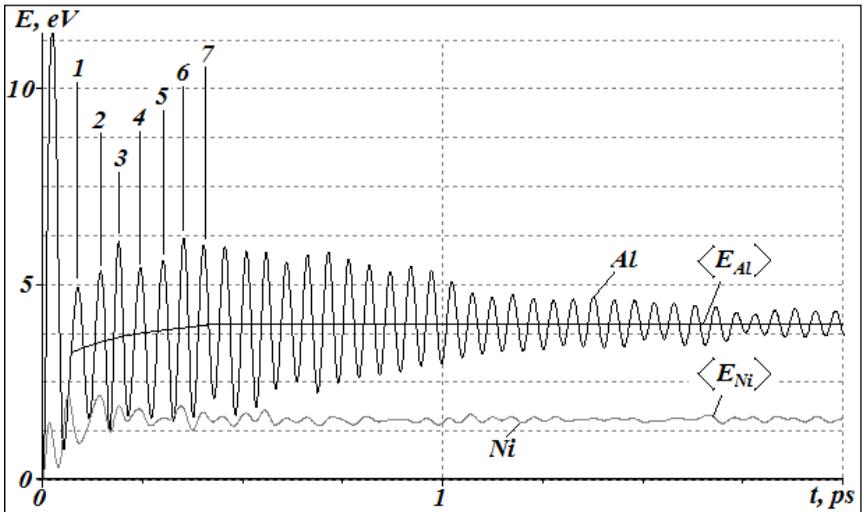


Рис. 17. Процесс неустойчивых нелинейных колебаний большой амплитуды атома Al, рассеяние его энергии в подрешетку Al в модели упорядоченного сплава Ni_3Al . Цифрами отмечены начала полупериодов колебаний атома Al, для которых показаны зависимости модуля силы действующей на этот атом в процессе колебаний на рис. 19.

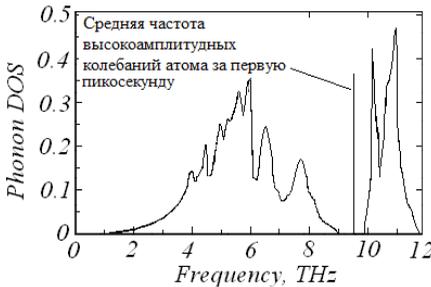


Рис. 18.

Зависимость фоновых состояний модели Ni_3Al .

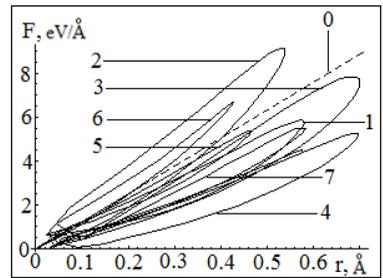


Рис. 19.

Зависимости модуля силы действующей на атом алюминия, совершающий колебания с поляризацией $[100]$, от расстояния от положения равновесия. Цифрами отмечены номера полупериодов колебания атома (см. рис. 17). Цифрой 0 отмечен наклон линейной зависимости для фоновых колебаний с той же поляризацией.

Около десятка колебаний рассматриваемого атома происходят со значительной амплитудой, при этом частота его колебаний, приблизительно, 9.5 ТГц., попадает в щель фононного спектра, см. рис. 18.

В конце первой пикосекунды амплитуда колебаний начинает уменьшаться, частота колебаний увеличивается до величины, приблизительно, 10 ТГц. и оказывается в разрешенной, оптической части фононного спектра.

Чтобы выяснить, почему средняя частота колебаний оказывается меньше оптических колебаний и оказывается в щели фононного спектра, рассмотрим, как с расстоянием от положения равновесия меняется модуль результирующей силы, действующий со стороны кристаллической решетки на атом, совершающий высокоамплитудные колебаний (см. рис. 19). А затем сравним его с характером зависимости от расстояния возвращающей силы действующей на атом, совершающий оптические фононные колебания с поляризацией [111] и имеющая наименьшую частоту (рис. 19, пунктирная прямая отмеченная цифрой 0). Угловые коэффициенты касательных к любым из точек этих кривых, пропорциональны квадратам частот которыми обладает в этот момент атом, совершающий высокоамплитудные колебания. Легко видеть, что большая часть частот высокоамплитудных колебаний (угловых коэффициентов касательных к кривым на рис. 19) оказываются меньше частоты фононных колебаний, т.е. средняя по времени частота попадают в щель плотности фононных состояний рассматриваемой 3D модели Ni_3Al (рис. 18).

Последний параграф главы посвящен эффекту спонтанного перераспределения энергии колебаний между подрешетками упорядоченных кристаллов состава A_3B , находящегося в состоянии термодинамического равновесия. Эффект интерпретируется как проявление ангармонизма потенциального поля, в котором движутся атомы упорядоченного сплава.

Как известно, для ангармонического осциллятора, потенциальная энергия не является квадратичной функцией смещения q (обобщенная координата, которая показывает отклонение от положения равновесия). Такие осцилляторы позволяют более широко взглянуть на закон равнораспределения энергий [23]. Рассмотрим функцию потенциальной энергии вида

$$U = Cq^S, \quad (12)$$

где C и S произвольные действительные постоянные. В этом случае закон равнораспределения приводит к выражению

$$k_B T = \left\langle q \frac{\partial U}{\partial q} \right\rangle = \langle q \cdot SCq^{S-1} \rangle = \langle SCq^S \rangle = S \langle U \rangle. \quad (13)$$

Таким образом, средняя потенциальная энергия равна $k_B T/S$, а не $k_B T/2$ как для потенциала гармонического осциллятора (для которого $S=2$). Очевидно, что в этом случае средняя кинетическая энергия атомов будет отличаться от $k_B T/2$. В диссертации показано, что значение S зависит от поляризации колебаний. В маленьких объемах возможно спонтанное преобладание одного из направлений колебаний.

Шестая глава об упругих волнах, возникающих в результате рекомбинации пар Френкеля и их влиянии на дрейф агрегатов точечных дефектов – вакансий и межузельных атомов. Рассмотрены 2D и 3D модели моноатомных кристаллических решеток Ni . В 2D моделях изучались условия возбуждения поперечной солитоноподобной волны (рис. 20).

Упругие волны практически не взаимодействуют с отдельными вакансиями. В тоже время они вызывают перемещение одиночного межузельного атома, если он находится в составе краудина. Эффективность взаимодействия волны с агрегатом вакансий зависит от размеров последнего. Волны вызывают его дрейф, если диаметр агрегата сравним с длиной волны.

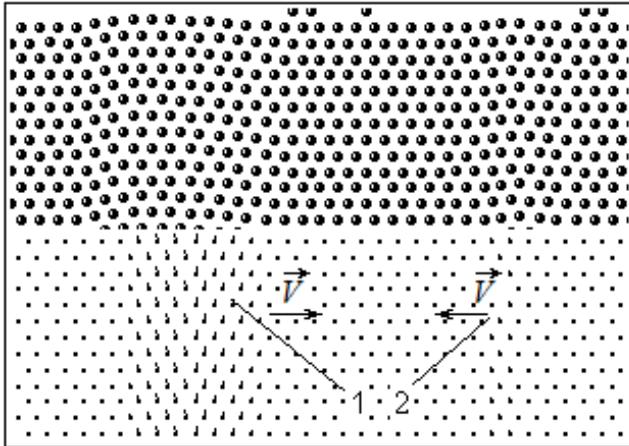


Рис. 20. Уединенная поперечная волна – 1. Волна отдачи – 2.

Эта волна вызывает разнонаправленный дрейф агрегатов вакансий и краудионов (краудионных комплексов), при этом не взаимодействует с отдельными вакансиями (рис. 21).

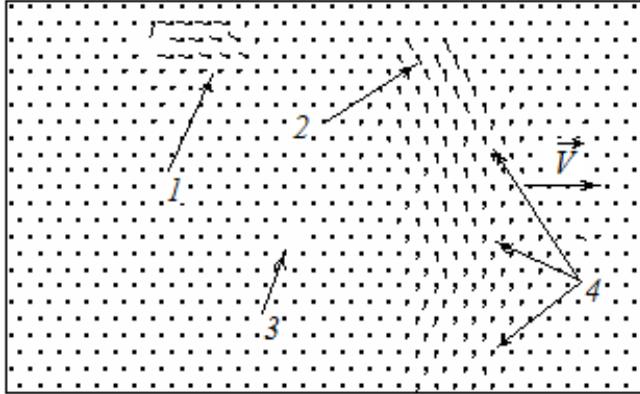


Рис. 21. Реакция дефектов на прохождение поперечной волны. 1-увлечение поперечной волной агрегата вакансий. 2. Перемещение вниз волной МА. 3. Неподвижная вакансия. 4. Поперечная волна, распространяющаяся со скоростью \vec{V} .

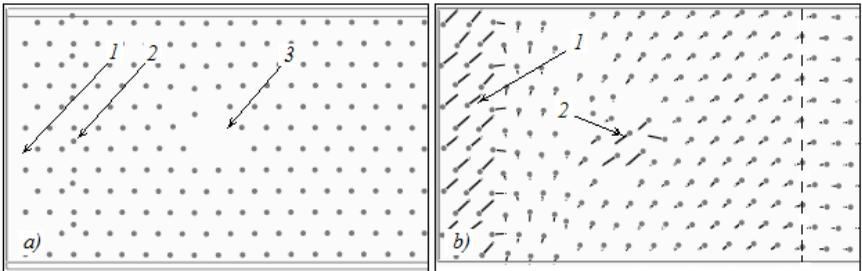


Рис. 22. Одна из плоскостей (111) трехмерной модельной решетки; *a*). начальная конфигурация пар Френкеля, 1 – вакансия, 2 – межузельный атом, 3 - сечение агрегата вакансий. На части *b*) траектории атомов после рекомбинации пар Френкеля – 1, 2 - дрейф атомов в результате прохождения волн. Перед фронтом поперечной волны (который отмечен пунктирной линией) – продольная волна.

В 3D моделях рождение поперечной волны сопровождается появлением продольной, которая распространяется впереди поперечной

(см. рис. 22). Продольная волна имеет большую скорость, чем поперечная и с течением времени отрывается от нее.

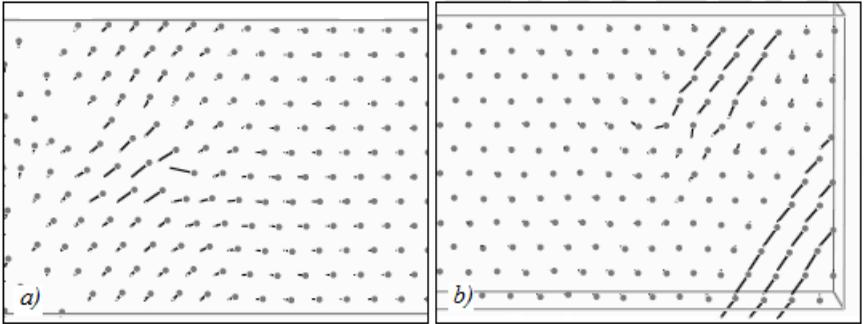


Рис. 23. Одна из плоскостей (111) трехмерной модельной ячейки после прохождения поперечной волны слева на право; *a*) дрейф агрегата вакансий, *b*) перемещение объемного краудионного комплекса.

В трехмерном случае упругое возмущение смещает лишь объемный дефект, тетраэдр дефекта упаковки или объемный краудионный комплекс.

Продольные и поперечные волны после однократного воздействия могут вызвать дрейф ОКК на расстояния до нескольких десятков межатомных расстояний. Перемещения при этом осуществляются исключительно вдоль направления плотной упаковки. Направления движения волны и ОКК могут иметь некоторый довольно большой острый угол, до 60 градусов.

Общим для продольных и поперечных волн является также то, что и те и другие вызывают разнонаправленный дрейф агрегатов точечных дефектов. При этом ОКК движутся по направлению, или как уже отмечалось, под острым углом к направлению распространению волн. Агрегаты вакансий после прохождения волны перемещаются на одно межатомное расстояние, и всегда строго по направлению колебаний атомов в волне (см. рис. 23).

В седьмой главе рассматриваются динамические эффекты на межфазной границе биметаллов. В частности, в двумерной модели, влияние границы на движение краудиона. Изучались условия преодоления краудионом межфазной границы и возбуждения на границе волн различного типа (рис. 24 - 25).

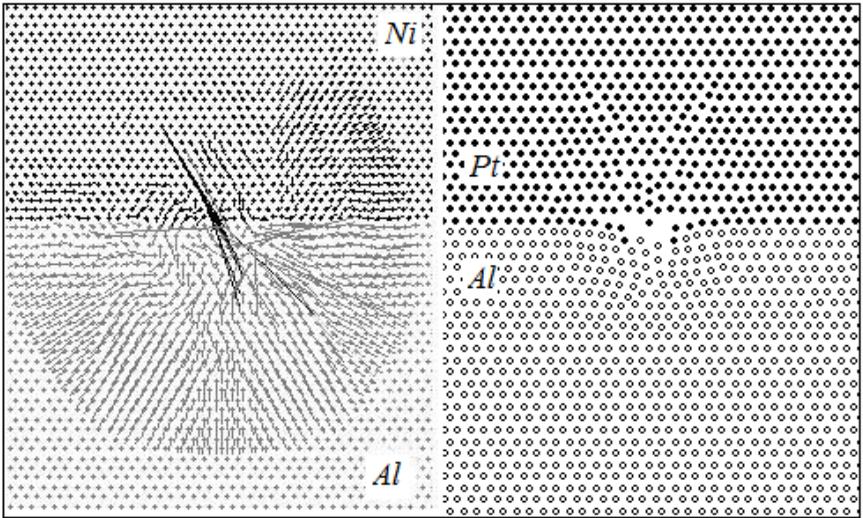


Рис. 24.

Рис. 25.

Рис. 24. Продольная волна, сформировавшаяся в результате столкновения краудина и вершинной дислокации несоответствия, на границе биметалла Ni-Al, смещения атомов увеличены в 10 раз, 0,4 пс. после начала эксперимента.

Рис. 25. Ударная волна, возбужденная краудионом при пересечении межфазной границы биметалла PtAl

Другой динамический эффект на межфазной границе биметалла – колебания долгоживущей нелинейной локализованной моды. Наиболее благоприятные условия для существования локализованных мод на границе биметалла *Pt-Al*. Для возбуждения нелинейного локализованного колебания, атому алюминия, находящемуся в вершине дислокации несоответствия, сообщалось отклонение от положения равновесия в нужном направлении (см. рис. 26).

Для более детального выявления факторов, влияющих на возможность существования высокоамплитудных нелинейных колебаний, кроме *Pt-Al*, рассматривались модели границ целого ряда биметаллов, таких как *Ni-Al*, *Ni-Fe*, *Pt-Cu*, *Au-Cu*. Компьютерные эксперименты показали, что это те же факторы что и для ДБ (см. параграф 4.3 и 5.2).

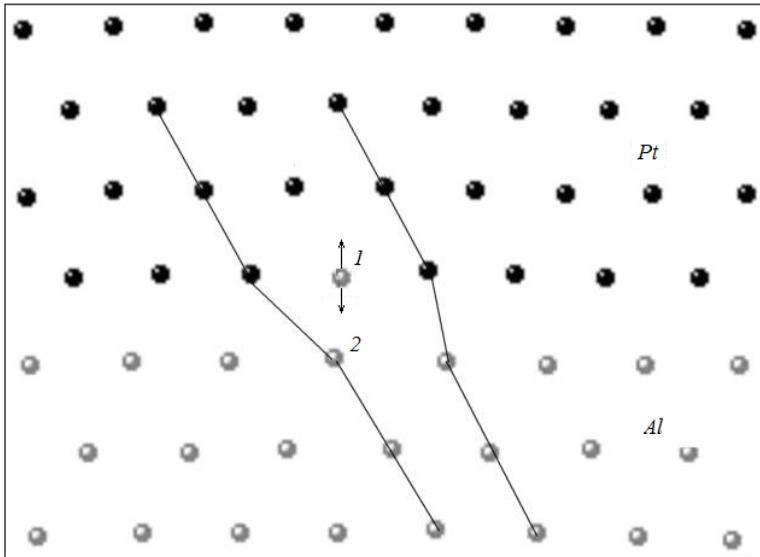


Рис. 26. Граница биметалла Pt–Al с атомами Al (отмеченными цифрами 1 и 2) несущими нелинейную локализованную моду, стрелками показана поляризация колебаний.

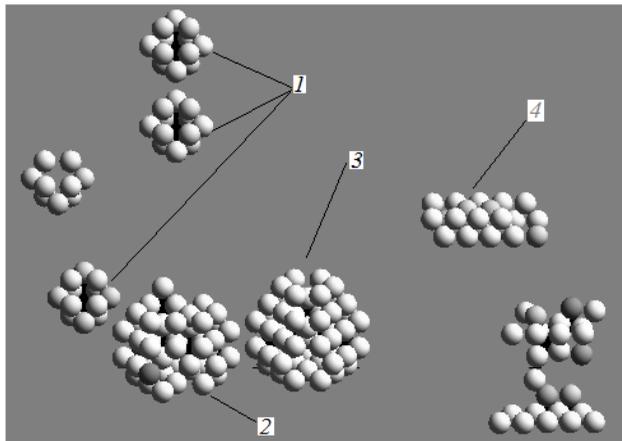


Рис. 27. Поле напряжений результата агрегатизации пар Френкеля в моноатомном Ni; 1) одиночных вакансий, 2) три-вакансий, 3) элементарный ТДУ, 4) объемный краудинный комплекс.

Восьмая глава посвящена агрегатизации точечных дефектов, вакансий и межузельных атомов в модели упорядоченного сплава Ni_3Al . Для сравнения приведены результаты компьютерных экспериментов в модели монокристалла никеля (рис. 27).

Изучалась агрегатизация хаотично разбросанных по модельной ячейке вакансий без присутствия межузельных атомов и агрегатизация межузельных атомов без присутствия вакансий. После чего показаны результаты агрегатизации пар Френкеля. Кроме того, рассмотрены вопросы о роли пар Френкеля в процессе фазового перехода кристалл-расплав.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

Перечислим основные результаты исследований, к наиболее важным, очевидно, следует отнести первые три.

1. Выявлена возможность возбуждения ДБ в 2D и 3D моделях упорядоченного сплава Pt_3Al .
2. Обнаружена новая разновидность локализации энергии фононных колебаний в подрешетке атомов сорта "B" идеального кристалла стехиометрии A_3B со сверхструктурой $L1_2$.
3. Показано, что наличие мод с частотами, лежащими в щели плотности фононных состояний биатомных кристаллов, не является достаточным признаком спонтанного возбуждения ДБ, это могут быть и неустойчивые колебания большой амплитуды в кристаллах, где в принципе не может быть ДБ.
4. При изучении энергетических границ применимости используемого в работе потенциала Морзе, было установлено, что для моделирования явлений с энергией взаимодействия атомов до 10 эВ включительно, модификация потенциала Морзе не требуется. Для моделирования взаимодействия атомов с энергией от 10-15 эВ до 400 эВ построен модифицированный потенциал Морзе, включающий в себя потенциал Борна-Майера. Четыре параметра потенциала
5. В процессе исследования влияния различных факторов на возможность возбуждения ДБ в идеальном кристалле стехиометрии A_3B выявлено, что основное влияние оказывают соотношение масс и эффективных диаметров атомов компонентов сплава.
6. В кристаллах состава A_3B обнаружен эффект локального спонтанного перераспределения энергии колебаний между подрешетками.
7. Показано, что в результате рекомбинации пар Френкеля возможно возбуждение не только продольной, но и при некоторых начальных

условиях, поперечной волны, которая при взаимодействии с агрегатами вакансий и межузельных атомов, вызывает их разнонаправленный дрейф.

8. Найдено, что на границе биметаллов при некоторых условиях возможно появление ударной волны и возбуждение долгоживущей нелинейной локализованной моды.

9. Модельные эксперименты, проведенные в рамках изучения процессов агрегатизации пар Френкеля показали, что тетраэдр дефектов упаковки не является конечным кластером агрегатизации вакансий в Ni_3Al ; агрегаты, образованные из вакансий в интерметаллиде Ni_3A менее стабильны по сравнению с аналогичными образованиями в монокристаллах Ni и Al .

ЛИТЕРАТУРА

1. Дмитриев С.В. Волны солитонного типа в дискретных системах в физике конденсированного состояния / Дисс. на соискание уч. степ. д. ф.-м.н. Барнаул. 2007. 236 с.
2. Захаров В.Е., Манаков С.В., Новиков С.П., Питаевский Л.П. Теория солитонов. Метод обратной задачи / под ред. Новикова С.П. – М.: Наука, 1980, 320 с.
3. Кившарь Ю.С., Агравал Г.П. Оптические солитоны. От волоконных световодов до фотонных кристаллов.- М.: Физматлит, 2005. – 648 с.
4. Давыдов А.С. Солитоны в молекулярных системах.- Киев.: Наукова думка, 1988. - 304 с.
5. Филипов А.Т. Многоликий солитон.- М.: Наука, 1990. – 288 с.
6. Sievers A.J., Takeno S. Intrinsic Localized Modes in Anharmonic Crystals // Phys. Rev. Lett. – 1988. – V.61(8). – P. 970-973.
7. Miroshnichenko A.E., Flach S., Fistul M.V., Zolotaryuk, Y., Page J.B. Breather in Josephson junction ladders: resonances and electromagnetic waves spectroscopy // Phys. Rev. E. – 2001. - V.64. 066601.
8. Manley M.E., Sievers A.J., Lynn J.W., Kiselev S.A., Agladze N.I., Chen Y., Llobet A., Alatas A. Intrinsic Localized Modes Observed in the High Temperature Vibrational Spectrum of NaI // Phys. Rev. B. – 2009. – V.79. 134304.
9. Manley M.E., Abernathy D.L., Agladze N.I., and Sievers A.J. Symmetry-breaking dynamical pattern and localization observed in the equilibrium vibrational spectrum of NaI // Scientific Rep. – 2011. – V.1. Article number 4.
10. Поletaев Г.М. Атомные механизмы структурно-энергетических превращений в объеме кристаллов и вблизи границ зерен наклона в

- ГЦК металлах / Дисс. на соискание уч. степ. д. ф.-м.н. Барнаул. 2008. 412 с.
11. Тетельбаум Д.И., Курильчик Е.В., Менделева Ю.А. Эффект дальнего действия при малоинтенсивном облучении твердых тел // Поверхность. Рентгеновские синхротронные и нейтронные исследования. – 2009. - №3. – С. 94 - 103.
 12. Braun O.M., Kivshar Yu. S. The Frenkel-Kontorova Model: Concepts, Methods, and Applications. – Berlin: Springer, 2004. – 472 p.
 13. Раджараман Р. Солитоны и инстантоны в квантовой теории поля: монография / перевод с англ. под ред. О.А. Хрусталева. – М.: Мир, 1985, 416 с.
 14. Физическая энциклопедия / Гл. ред. А.М. Прохоров. – М. Большая Российская энциклопедия. Т. 5, 1998, 691 с.
 15. Flach S., Gorbach A. Discrete breathers: advances in theory and applications // Phys. Rep. – 2008.-V.467. – P.1-116.
 16. Дмитриев С.В. Щелевые дискретные бризеры в 2D и 3D Кристаллах // Письма о материалах – 2011.-Т.1.(2). С.78-83.
 17. Wasserman E. and Stixrude L. Thermal properties of iron at high pressures and temperatures // Phys. Rev. B. – 1996 – V.53.(13). – P. 8296 – 8309.
 18. Зельдович Я.Б., Райзер Ю.П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. – М. Физматгиз. 1963. – 632 С.
 19. Dugdale J.S., McDonald D.K. The Thermal Expansion of Solids // Phys. Rev. – 1953. – V.89.(4). – P. 832 – 851.
 20. Silsbee, R.H. Focusing in Collision Problems in Solids // J. of Appl. Phys. - 1957 – V.28. – P. 1246-1250.
 21. Гарбер Р.И. Федоренко А.И. Фокусировка атомных столкновений в кристаллах // УФН. – 1964. - Т.83.(3). - С. 385-432.
 22. Huntington H.B., Mobility of Interstitial Atoms in a Face-Centered Metal // Phys. Rev. – 1953 – V.91.(5). – P. 1092-1098.
 23. Terletskii Y.P. Statistical Physics – translated: N. Fröman. – Amsterdam: North-Holland. - 1971. - P. 83 - 84.

Основные результаты диссертации изложены в следующих работах:

Публикации в журналах рекомендованных ВАК Минобрнауки РФ:

1. Starostenkov M.D., Medvedev N.N., Poletaev G.M., Pozhidaeva O.V. Aggregatization of Frenkel Pairs in Metallic Materials at External High-

- Energetic Impulsive Influences // Изв. вузов. Физика. – 2006. – Т.49.(10). Приложение. – С. 364 – 366.
2. Медведев Н.Н., Старостенков М.Д., Полетаев Г.М., Пожидаева О.В., Терещенко О.А., Ракитин Р.Ю., Краснов В.Ю., Попов В.А. Образование и агрегатизация пар Френкеля при имплантации внедренных атомов в сплаве Ni_3Al // Изв. вузов. Физика. - 2007. – Т.50.(9). Приложение. - С. 421 – 423.
 3. Дмитриев С.В., Медведев Н.Н., Мулюков Р.Р., Пожидаева О.А., Потеекаев А.И., Старостенков М.Д. Локализованные колебательные моды в бездефектном двумерном кристалле состава A_3B // Изв. вузов. Физика. – 2008. – Т.51.(8). – С. 73 - 79.
 4. Dmitriev S.V., Medvedev N.N., Mulyukov R.R., Pozhidaeva O.V., Starostenkov M.D., Potekaev A.I. Localized vibrational modes in two-dimensional perfect cristal // Russian Physics Journal. – 2008. - V.51.(8). - P. 858 - 865.
 5. Медведев Н.Н., Дмитриев С.В., Старостенков М.Д., Захаров П.В. Устойчивость колебаний локализованной моды в двумерном упорядоченном сплаве стехиометрии A_3B // Перспективные материалы. – 2009. - Специальный выпуск (7). - С. 213 - 217.
 6. Iskandarov A.M., Medvedev N.N., Zakharov P.V., Dmitriev S.V. Crowdion mobility and self-focusing 3D and 2D nickel // Computational Materials Science. – 2009. – V.47. - P. 429 - 431.
 7. Старостенков М.Д., Маркидонов А.В., Тихонова Т.А., Медведев Н.Н. Высокоскоростной массоперенос в двумерном кристалле никеля при наличии дислокационных петель различной локальной плотности // Изв. вузов. Черная металлургия. - 2009. - № 6. С. 57 - 60.
 8. Дмитриев С.В., Хадеева Л.З., Пшеничнюк А.И. Медведев Н.Н. Щелевые дискретные бризеры в двухкомпонентном трехмерном и двумерном кристаллах с межатомными потенциалами Морзе // ФТТ. - 2010. - Т.52.(7). - С. 1398 - 1403.
 9. Dmitriev S.V., Khadeeva L.Z., Pshenichnyk A.I., Medvedev N.N. Gab discrete breathers in two-dimensional crystals with Morse interatomic potentials // Physics of the Solid State. - 2010. - V.52.(7). - P. 1499 – 1505.
 10. Старостенков М.Д., Пожидаева О.В., Полетаев Г.М., Тихонова Т.А., Медведев Н.Н. Механизмы взаимодействия и аннигиляции агрегатов вакансий и межузельных атомов в двумерной решетке упорядоченного сплава сверхструктуры L1_2 // Известия АлтГУ. Серия: Математика и механика. Управление, вычислительная техника и информатика. Физика. – 2010. - №1.(65). – С. 173 – 176.

11. Старостенков М. Д., Маркидонов А. В., Медведев Н. Н., Тихонова Т. А. Моделирование переноса массы в виде рядов вакансий и межузельных атомов на примере двумерного кристалла // Вестн. Сам. гос. техн. ун-та. Сер. Физ.-мат. науки. – 2010. – Т.1.(20). - С. 249 – 252.
12. Медведев Н.Н., Старостенков М.Д., Захаров П.В., Пожидаева О.В. Локализованные колебательные моды в двумерной модели упорядоченного сплава Pt₃Al // ПЖТФ. – 2011. - Т.37.(3). – С. 7 - 15.
13. Medvedev N.N., Starostenkov M.D., Zakharov P.V., Pozidaeva O.V., Localized oscillating modes in two-dimensional model of regulated Pt₃Al Alloy // Technical Physics Letters. - 2011. - V.37.(2) - P. 98 – 101.
14. Медведев Н.Н., Старостенков М.Д., Дискретные бризеры в биатомных упорядоченных кристаллических решетках // ФПСМ. – 2011. – Т.8.(2). - С. 67 - 74.
15. Медведев Н.Н., Старостенков М.Д., Маркидонов А.В., Захаров П.В., Фокусирующиеся и краудионные столкновения атомов Cu в трехмерной модели упорядоченного сплава CuAu со сверхструктурой L1₁ // Перспективные материалы. - 2011. - Спец. Вып. №12. - С. 321 - 326.
16. Маркидонов А.В., Старостенков М.Д., Потекаев А.И., Медведев Н.Н., Неверова Т.И., Барчук А.А., Кулагина В.В. Поведение краудионов и их комплексов в слабоустойчивом состоянии материалов // Изв. Вузов. Физика. - 2011. – Т.54.(11). - С. 61 - 67.
17. Маркидонов А.В., Старостенков М.Д., Барчук А.А., Медведев Н.Н. Особенности динамики краудионов и их комплексов в деформированном ГЦК кристалле // ФПСМ. – 2011 – Т.8.(3). - С. 83 - 87.
18. Захаров П.В., Медведев Н.Н., Старостенков М.Д. Эффекты самоорганизации вещества на атомном уровне при прохождении уединенной поперечной волны через границу биметалла Ni-Al // ФПСМ. – 2012. – Т.9.(1). - С. 46 - 49.
19. Захаров П.В., Старостенков М.Д., Медведев Н.Н., Маркидонов А.В., Обидина О.В. Кооперативное поведение межузельных атомов в поле дислокаций несоответствия на границе биметалла Ni-Al // ФПСМ. – 2012. – Т.9.(4). - С. 431 - 436.
20. Markidonov, A.V., Starostenkov M.D., Potekaev A.I., Medvedev N.N., Neverova T.I. Barchuk A.A., Kulagina V.V. The behavior of crowdions and their complexes in weakly stable states of materials // Russian Physics Journal. – 2012. – V.54.(11). –P. 1241 - 1248.

21. Medvedev N.N., Starostenkov M.D. Discrete breathers on the 3D model of Pt₃Al with L₁₂ order // Изв. Вузов. Физика. – 2012. – Т.55.(11-3). - С. 113 - 116.
22. Медведев Н.Н., Старостенков М.Д., Захаров П.В., Маркидонов А.В. О локализации энергии нелинейных и линейных колебаний атомов в модельной кристаллической решетке состава А₃В // Письма о материалах. – 2013 – Т.3.(1). - С. 34 - 37.
23. Старостенков М.Д., Захаров П.В., Медведев Н.Н., Маркидонов А.В., Еремин А.М., Сосков А.А., Мулюков В.Р. Особенности процесса массопереноса в различных биметаллах при наличии комплексных вакансий в поле дислокаций несоответствия // ФПСМ. – 2013. - Т.10.(2). - С. 245 - 250.
24. Медведев Н.Н., Старостенков М.Д., Захаров П.В. Миграция агрегатов точечных дефектов в модельных кристаллах // Вестник Тамбовского университета. – 2013. - Т.18.(4). - С. 1850 - 1851.
25. Маркидонов А.В., Старостенков М.Д., Павловская Е.П., Яшин А.В., Медведев Н.Н., Захаров П.В., Ситников А.А. Расщепление вакансионной поры в зернограничной области ударной послекаскадной волной // ФПСМ – 2013. - Т.10.(3). - С. 443. – 450.
26. Маркидонов А.В., Старостенков М.Д., Павловская Е.П., Яшин А.В., Медведев Н.Н., Захаров П.В. Структурная трансформация вакансионных пор в деформированном кристалле под воздействием ударных волн // ФПСМ. - 2013. - Т.10.(4). - С. 563 – 571.
27. Medvedev N.N., Starostenkov M.D. and Manley M.E. Energy Localization on the sublattice of Pt₃Al with L₁₂ order // Journal of Applied Physics. - 2013. - V.114. - P. 213506(4).
28. Медведев Н.Н., Старостенков М.Д., Потекаев А.И., Захаров П.В., Маркидонов А.В., Еремин А.М. Слабоустойчивые колебания и эффекты локализации энергии в 3D моделях упорядоченных сплавов стехиометрии А₃В // Изв. Вузов. Физика. – 2013. – Т.56. в печати.

Программа для ЭВМ:

29. Медведев Н.Н., Захаров П.В. Моделирование методом молекулярной динамики двумерной кристаллической решетки стехиометрии А₃В с возможностью фиксирования дискретных брызгов (DKR_A3B_DB) / РОСПАТЕНТ. Свидетельство № 2010614584 от 28 сентября 2010.

Прочие публикации:

30. Медведев Н.Н., Старостенков М.Д., Полетаев Г.М. К вопросу о накоплении систематических погрешностей в ММД. Измерения,

- автоматизация и моделирование в промышленности и научных исследованиях: Межвузовский сборник / Бийск: изд-во Алтайского гос. тех. ун-та, 2005. – С. 5 – 8.
31. Старостенков М.Д., Медведев Н.Н., Полетаев Г.М., Пожидаева О.В. Компьютерное моделирование пар Френкеля в металлах при низких температурах / Фундаментальные науки и образование. Материалы Всероссийской научно-практической конференции. Бийск: БПГУ, 2006. - С. 105 – 108.
 32. Старостенков М.Д., Медведев Н.Н., Полетаев Г.М., Терещенко О.А. Гамильтониан замкнутой системы, моделируемой с помощью ММД // ФПСМ. – 2006 – Т.3.(2). – С. 46 – 48.
 33. Медведев Н.Н., Старостенков М.Д., Пожидаева О.В., Терещенко. О резонансных явлениях молекулярной динамики // ФПСМ. – 2006. – Т.3.(3). – С. 101 – 106.
 34. Пожидаева О.В., Старостенков М.Д., Медведев Н.Н. Влияние пар Френкеля на структурно-энергетические превращения в двумерном кристалле чистого Ni // Вестник Барнаульского гос. пед. Университета. Серия: естественные и точные науки. выпуск 6; - 2006 - № 3. - С. 98 - 99.
 35. Медведев Н.Н., Старостенков М.Д., Полетаев Г.М. Систематические погрешности в ММД и их влияние на сохранение энергии в модельных экспериментах / Краевые задачи и математическое моделирование: сборник трудов VIII Всероссийской научной конференции. Т.1. – Новокузнецк: РИО НФИ КемГУ, - 2006. – С. 141 – 147.
 36. Медведев Н.Н., Дмитриев С.В., Старостенков М.Д. О локализации энергии в двумерных кристаллических решетках металлов // ФПСМ. - 2007. - Т.4.(3). – С. 100 - 102.
 37. Пожидаева О.В., Медведев Н.Н., Старостенков М.Д., Терещенко О.А. О резонансных явлениях в методе молекулярной динамики / Сборник тезисов, материалы 13-ой Всероссийской научной конференции студентов физики и молодых ученых. Материалы конференции, тезисы докладов: Т.1 – Екатеринбург – Ростов-на-Дону, Таганрог: издательство АСФ России, 2007. - С. 132 – 133.
 38. Пожидаева О.В., Медведев Н.Н., Старостенков М.Д., Терещенко О.А. О резонансных явлениях в методе молекулярной динамики // Сборник тезисов, материалы 13-ой Всероссийской научной конференции студентов физиков и молодых ученых (ВНКСФ-13, Ростов-на-Дону, Таганрог): Материалы конференции, тезисы докладов: В 1 т. Т.1 -

- Екатеринбург – Ростов-на-Дону – Таганрог: издательство АСФ России. - 2007. - С. 132 - 133.
39. Пожидаева О.В., Старостенков М.Д., Медведев Н.Н. Агрегатизация пар Френкеля в Ni и интерметаллиде Ni₃Al // IV Международная школа-конференция «Микромеханизмы пластичности, разрушения и сопутствующих явлений»: Сб. науч. тр. Молодых ученых. 24-30 июня 2007 г. Тамбов, Россия / Науч. ред. В.А. Федоров; Федеральное агентство по образованию, Тамб. гос. ун-т им. Г.Р. Державина. Тамбов. – 2007. С. 83 - 88 (статья).
 40. Старостенков М.Д., Медведев Н.Н., Пожидаева О.В., Ракитин Р.Ю. Агрегатизация межузельных атомов и их роль в структурно-энергетической трансформации в интерметаллиде Ni₃Al // IV Международная школа-конференция «Микромеханизмы пластичности, разрушения и сопутствующих явлений»: Материалы shk.-конф. 24-30 июня 2007 г. Тамбов, Россия / Науч. ред. В.А. Федоров; Федеральное агентство по образованию, Тамб. гос. ун-т им. Г.Р. Державина. Тамбов: Изд-во ТГУ им. Г.Р. Державина. – 2007. С. 232 - 235 (тезисы).
 41. Starostenkov M., Medvedev N. and Pozhidaeva O. Aggregatization of Frenckel Defects in Ni and Intermetallide Ni₃Al // 5 th International Conference on “Materials Structure and Micromechanics of Fracture”. Abstract Booklet. MSMF5, June 27-29, 2007, Brno, Czech Republic, p.143
 42. Medvedev N., Pozhidaeva O., Tereschenko O., Starostenkov M. Resonance phenomena in the method of molecular dynamics // International Conference on Computational Methods, International Conference Center Hiroshima, Japan, 4-6 April 2007, Abstact. 7H-2. Режим доступа: <http://www2.infonets.hiroshima-u.ac.jp/iccm/program/7H.html#>.
 43. Старостенков М.Д., Медведев Н.Н., Пожидаева О.В., Ракитин Р.Ю. Агрегатизация межузельных атомов и их роль в структурно-энергетической трансформации в интерметаллиде Ni₃Al // Ж. функциональных материалов. - 2007. - Т.1.(12). - Ст. 080.07. - С. 468 - 471.
 44. Пожидаева О.В., Дмитриев С.В., Медведев Н.Н., Бебихов Ю.В., Самсонов А.В., Старостенков М.Д. Локализованная колебательная мода в двумерном упорядоченном сплаве // ФПСМ. – 2007. – Т.4.(4). – С. 102 – 107.
 45. Пожидаева О.В., Старостенков М.Д., Дмитриев С.В., Медведев Н.Н., Полетаев Г.М. Моделирование волновых процессов в двумерных кристаллах Ni и Al, порожденных мгновенно введенными в них межузельными атомами и/или вакансиями // The Second

- International conference “Deformation & Fracture of Materials and Nanomaterials”. DFMN-2007. Moscow Intercontac: Nauka. Book of article, p. 691-692 (Сб. трудов Второй международной конференции «Деформация и разрушение материалов и наноматериалов» DFMN2007. Москва, - 2007. - С. 691 - 692)
46. Medvedev N.N., Dmitriev S.V., Starostenkov M.D., Sinelnikova A.S., Pozhydaeva O.V. On the experimental search of nonlinear localized modes in binary ordered alloy with stoichiometry A_3B // 9th International Conference on Modification of Materials With Particle Beams and Plasma Flows: Proceedings. Tomsk. – 2008. – P. 173 – 175.
 47. Starostenkov M.D., Pozhidaeva O.V. and Medvedev N.N. Frenkel pairs and their role in phase transformations crystal-melt // J. Phys.: Conf. Ser. – 2008. – V.98. Part 4 - 042009 - (4 p.) [<http://iopscience.iop.org/1742-6596/98/4/042009/>]
 48. Poletaev G.M., Krasnov V.Yu., Starostenkov M.D. and Medvedev N.N. The research of the structure of amorphous metals by molecular dynamics method // J. Phys.: Conf. Ser. – 2008. – V.98. - Part 4 – 0420011 - (4 p.) [<http://iopscience.iop.org/1742-6596/98/4/042011>]
 49. Starostenkov M.D., Medvedev N.N., Pozhidaeva O.V., Aggregatization of Frenckel Defects in Ni and Intemetallide Ni_3Al // Materials Science Forum. – 2008. – V. 567-568. - P. 165 - 168. online at <http://www.scitntific.net>
 50. Medvedev N.N., Dmitriev S.V., Tereschenko O.V., Starostenkov M.D., Rakitin R.Y. The Nonlinear Localized Modes of Atoms Included into Frenkel Pairs Aggregates in Binary Alloy // 9th International Conference on Modification of Materials With Particle Beams and Plasma Flows: Proceedings. Tomsk. - 2008. - P. 176 - 177.
 51. Старостенков М.Д., Холодова Н.Б., Кондратенко М.Б., Медведев Н.Н., Пожидаева О.В. Возникновение релаксационных волн смещений вблизи точечных дефектов в металлах с ГЦК решеткой. I. Волны смещений вблизи одиночных вакансий // ФПСМ. – 2008. – Т.5.(4). - С. 117 – 120.
 52. Медведев Н.Н. Дмитриев С.В., Старостенков М.Д., Синельникова А.В. Исследование устойчивости колебаний локализованной моды в двумерном упорядоченном сплаве // Ультрамелкозернистые и наноструктурные материалы 2008: тезисы докладов Открытой школы-конференции стран СНГ (Уфа, 4-9 августа 2008). Уфа. БГУ. – 2008. - С. 176 - 177.
 53. Пожидаева О.В., Дмитриев С.В., Медведев Н.Н., Старостенков М.Д., Локализованные колебательные моды в интерметаллиде Ni_3Al //

- УМЗНМ-2008: тезисы докладов Открытой школы-конференции стран СНГ (Уфа, 4-9 августа 2008). Уфа. БГУ. – 2008. - С. 129 - 130.
54. Старостенков М.Д., Яшин А.В., Дудник Е.А., Медведев Н.Н., Образование агрегатов из атомов Ni при импульсных высокоинтенсивных воздействиях на интерметаллид Ni₃Al // УМЗНМ-2008: тезисы докладов Открытой школы-конференции стран СНГ (Уфа, 4-9 августа 2008). Уфа. БГУ. – 2008. - С. 170 - 171.
 55. Медведев Н.Н., Дмитриев С.В., Захаров П.В., Старостенков М.Д., Ракитин Р.Ю. Оценка максимальной концентрации атомов, несущих локализованную моду, в бездефектном трехмерном упорядоченном сплаве // УМЗНМ-2008: тезисы докладов Открытой школы-конференции стран СНГ – Уфа, БГУ. – 2008. – С. 178 – 179.
 56. Старостенков М.Д., Маркидонов А.В., Тихонова Т.А., Медведев Н.Н. Высокоскоростной перенос массы посредством краудинных столкновений // сборник тезисов международного симпозиума «Перспективные материалы и технологии». Беларусь, Витебск. – 2009. С. 55.
 57. Старостенков М.Д., Холодова Н.Б., Кондратенко М.Б., Медведев Н.Н., Пожидаева О.В. Возникновение релаксационных волн смещений вблизи точечных дефектов в металлах с ГЦК решеткой. II. Волны смещений вблизи одиночных внедренных атомов // ФПСМ. – 2009. – Т.6.(1). С. 105 – 108.
 58. Медведев Н.Н., Старостенков М.Д., Маркидонов А.В., Захаров П.В. Волны, возникающие при рекомбинации пар Френкеля в двумерных модельных решетках металлов и их влияние на дрейф агрегатов точечных дефектов // ФПСМ. – 2009. – Т.6.(2). – С. 8 – 14.
 59. Старостенков М.Д., Маркидонов А.В., Медведев Н.Н., Тихонова Т.А. Моделирование переноса массы в виде рядов вакансий и межузельных атомов // Тезисы докладов XVII международной конференции «Физика прочности и пластичности материалов». Самара. – 2009. - С. 37.
 60. Старостенков М.Д., Маркидонов А.В., Тихонова Т.А., Медведев Н.Н. Примеры высокоскоростного переноса массы в идеальных монокристаллах без разрушения его структуры // Тезисы докладов I региональной научно-практической конференции «Наноиндустрия Алтая 2009». Бийск. - 2009. - С. 33 - 34.
 61. Medvedev N.N., Starostenkov M.D., Markidonov A.V. The Waves Appearing during Recombination of Frenckel Pairs in Tree-Dimensional Model Lattices of Metals and their influence on the Drift of Point Defects Aggregates // 10th International Conference on Modification of Materials

- with Particle Beams and Plasma Flows Proceeding. Tomsk: Издательство института оптики атмосферы СО РАН. – 2010. – Р. 194 – 196.
62. Медведев Н.Н., Старостенков М.Д., Пожидаева О.В. Фокусирующиеся и краудсионные столкновения Cu в упорядоченном сплаве CuAu со сверхструктурой $L1_1$ // Тезисы докладов открытой школы-конференции стран СНГ «Ультрамелкозернистые и наноструктурные материалы», Уфа: Редакционно-издательский центр БГУ. – 2010. – С. 101.
 63. Пожидаева О.В., Медведев Н.Н., Старостенков М.Д., Влияние деформации сжатия/растяжения на процессы разупорядочения в сплавах сверхструктуры $L1_2$, содержащих ряды точечных дефектов // Тезисы докладов открытой школы-конференции стран СНГ «Ультрамелкозернистые и наноструктурные материалы», Уфа: Редакционно-издательский центр БГУ. – 2010. - С. 262.
 64. Медведев Н.Н., Старостенков М.Д., Пожидаева О.В. Фокусирующиеся и краудсионные столкновения Cu в упорядоченном сплаве CuAu // Сборник материалов 50-го международного симпозиума «Актуальные проблемы прочности» 218 с. Витебск, Беларусь: УО «ВГТУ» - 2010. – Ч.2. – С. 75.
 65. Starostenkov M.D., Pozhidaeva O.V., and Medvedev N.N. The Excitation of Oscillation Modes Localized on an Interstitial Atom in 2D Cristal // Fifth International Conference, Multiscale Materials Modeling (MMM 2010). Conference Proceedings Microstructure Modeling. Freiburg, Germany. October 04 - 08 (2010). – P. 499 – 502. <http://www.mmm2010.de/program/symposia/>
 66. Медведев Н.Н., Старостенков М.Д., Шайхутдинова Т.А. Модификация потенциала Морзе для моделирования взаимодействия атомов, обладающих высокой энергией // ФПСМ. – 2011. – Т.8.(1). – С. 99 – 104.
 67. Старостенков М.Д., Захаров П.В., Медведев Н.Н., Взаимодействие краудиона с границей биметалла Ni-Al в 2D модели. // Письма о материалах. - 2011. - Т.1.(4). - С. 238 - 240.
 68. Старостенков М.Д., Захаров П.В., Медведев Н.Н., Взаимодействие уединенной поперечной волны с границей раздела биметалла Ni-Al // Влияние внешних энергетических воздействий на структуру, фазовый состав и свойства материалов / под ред. Громова В.Е. – Новокузнецк: Изд-во «СибГИУ». – 2012. – С. 315 - 318.
 69. Старостенков М.Д., Захаров П.В., Медведев Н.Н., Дёмина И.А., Попова Г.В. Исследование зависимости скорости массопереноса от расстояния между межузельным атомом и дислокацией

- несоответствия на модельной границе биметалла Ni-Al // Вестник карагандинского университета, серия ФИЗИКА. – 2012. - №1. (65). – С. 36 - 40.
70. Медведев Н.Н., Старостенков М.Д. О локализации энергии в модельном идеальном кристалле Pt₃Al со сверхструктурой L1₂ // Фундаментальные науки и образование: материалы I международной научно-практической конференции Бийск: ФГБОУ ВПО «АГАО» - 2011. – С. 130 - 135.
 71. Захаров П.В., Старостеков М.Д., Медведев Н.Н., Маркидонов А.В., Кооперативное поведение межузельных атомов в поле дислокаций несоответствия на границе биметалла Ni-Al // VI сессия научного совета РАН по механике: материалы Всеросс. Конф. 26-31 июля 2012 Барнаул, Белокураха, Россия / под науч. ред. Н.Ф. Морозова, М.Д. Старостенкова, издательство АлтГТУ – 2012. С. 65 – 67.
 72. Захаров П.В., Старостенков М.Д., Медведев Н.Н., Маркидонов А.В. Кооперативное поведение межузельных атомов в поле дислокации несоответствия на границе биметалла Ni-Al в компьютерной модели // Информационные технологии в науке, экономике и образовании: материалы Всероссийской научно-практической конференции 8–9 октября 2012 года / под ред. О.Б. Кудряшовой; Алт. гос. техн. ун-т, БТИ. – Бийск: Изд-во Алт. гос. техн. ун-та. - 2012. – С. 12 - 14.
 73. Medvedev N.N., Starostenkov M.D. Discrete Breathers on the 3D Model of Pt₃Al with L1₂ Order // 3rd International Congress on Radiation Physics and Chemistry of Condensed Matter, High Current Electronics and Modification of Materials with Particle Beams and Plasma Flows, Tomsk, Russia, on September 17-21, 2012, Abstracts Book, National Research Tomsk Polytechnic University, Institute of High Current Electronics SB RAS. P. 76.
 74. Захаров П.В., Старостенков М.Д., Медведев Н.Н., Еремин А.М., Моделирование процессов в различных биметаллических сплавах при наличии комплексов вакансий в поле дислокаций несоответствия // Вестник Омского университета. – 2013. - № 1. - С. 416 - 422.
 75. Захаров П.В., Старостенков М.Д., Медведев Н.Н., Еремин А.М. Моделирование массопереноса в биметаллических сплавах при наличии комплексов вакансий в поле дислокаций несоответствия на микроуровне // Казахский национальный педагогический университет им. Абая. ВЕСТНИК серия ”Физико-математические науки”.- 2013. - №2(42). С. 74 – 80.