

УДК 539.219.3

ИССЛЕДОВАНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ МИГРАЦИИ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ В УПОРЯДОЧЕННОМ СПЛАВЕ CuPt В УСЛОВИЯХ ДЕФОРМАЦИИ*

Сосков А.А.¹, аспирант кафедры физики им. В.М. Финкеля

*Полетаев Г.М.², д.ф.-м.н., профессор, заведующий кафедрой высшей математики
и математического моделирования (gmpoletaev@mail.ru)*

Старостенков М.Д.², д.ф.-м.н., профессор, заведующий кафедрой физики

¹ Сибирский государственный индустриальный университет

(654007, Россия, г. Новокузнецк, Кемеровская обл., ул. Кирова, 42)

² Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова

(656038, Россия, г. Барнаул, пр. Ленина, 46)

Аннотация. С помощью метода молекулярной динамики получены значения энергии миграции вакансии и межузельного атома в упорядоченном сплаве CuPt. При миграции вакансии и межузельного атома в сплаве CuPt преимущественно мигрируют атомы меди. Межузельный атом формирует в упорядоченном сплаве CuPt конфигурации, нехарактерные для чистых металлов: избыточный атом меди стремится сформировать краудин вдоль направления $\langle 110 \rangle$ в плоскости (111), содержащей атомы меди; при введении атома платины формируется гантельная конфигурация из двух атомов платины в направлении $\langle 111 \rangle$, перпендикулярном плоскости (111), содержащей атомы платины. Обнаружена высокая анизотропия миграции межузельного атома: межузельный атом в упорядоченном сплаве CuPt мигрирует, как правило, вдоль плоскостей (111), содержащих атомы меди. При упругом растяжении вдоль этой плоскости отчасти подобная анизотропия появляется при миграции вакансии, а межузельный атом в этом случае мигрирует преимущественно вдоль оси растяжения.

Ключевые слова: молекулярная динамика, упорядоченный сплав, сверхструктура, точечный дефект, вакансия, межузельный атом, диффузия, энергия миграции, деформация.

DOI: 10.17073/0368-0797-2015-12-919-924

Упорядочивающиеся сплавы и интерметаллиды имеют большое практическое значение в связи с наличием у них большого спектра уникальных физических и физико-механических свойств, таких как прочность, жаропрочность, магнитные свойства и др. [1 – 5]. Платина и сплавы платины используются в приборостроении, электронике, электротехнике, ювелирном производстве. Стабильность электрических, термоэлектрических и механических свойств, а также высокие коррозионная и термическая стойкости сделали этот металл незаменимым для современной электротехники, автоматики и телемеханики, радиотехники, точного приборостроения [3, 6 – 9]. Знание структурно-энергетических характеристик дефектов материала позволяет прогнозировать его свойства и поведение в тех или иных условиях, конструировать новые материалы с заданным набором свойств. В настоящее время из-за высокого разнообразия дефектов в упорядоченных структурах вопрос нахождения структурно-энергетических характеристик дефектов остается открытым. Для их определения (помимо экспериментальных методов) в

настоящее время эффективно используются методы компьютерного моделирования.

Точечные дефекты, вакансии и межузельные атомы играют важную роль в процессах, связанных с диффузией, деформацией, радиационным повреждением [10 – 13]. Они оказывают влияние на интенсивность диффузии, скопления точечных дефектов существенно влияют на подвижность дислокаций [5, 10, 13]. Знание энергетических и структурных характеристик необходимо для развития теоретических представлений и моделей этих процессов.

Целью настоящей работы являлось определение энергии миграции вакансии и межузельного атома в упорядоченном сплаве CuPt, имеющем сверхструктуру $L1_1$, а также исследование особенностей миграции точечных дефектов в этом сплаве в условиях одноосной упругой деформации.

Система Cu–Pt является единственной двойной системой, в которой при соответствующем стехиометрическом составе реализуется упорядоченная фаза CuPt со сверхструктурой $L1_1$ (рис. 1) [1], остающейся стабильной до относительно высоких температур (около 1080 К при точном стехиометрическом составе) [1, 3].

Упорядоченный сплав CuPt изначально создавался в молекулярно-динамической модели со структурой, со-

* Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научных проектов № 13-02-00301_а, № 14-02-98000-р_сибирь_а, № 14-08-90416-Укр_а.

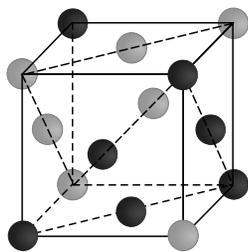


Рис. 1. Элементарная ячейка сверхструктуры $L1_1$ [2]

Fig. 1. Unit cell of superstructure $L1_1$ [2]

ответствующей ГЦК решетке. Однако, как известно [3], по сравнению с идеальной ГЦК решеткой этот сплав имеет небольшие ромбоэдрические искажения, в связи с чем после создания расчетных блоков в модели проводили их обязательную структурную релаксацию, при которой происходила небольшая деформация решетки. В завершение релаксации проводили охлаждение до 0 К.

Расчетные блоки содержали 8400 атомов, для исследования свойств точечных дефектов этого количества атомов достаточно [11, 12]. На границы блоков были наложены периодические граничные условия (имитирующие бесконечное повторение в пространстве рассматриваемого расчетного блока). Для описания межатомных взаимодействий использовали потенциалы Морза, параметры которых были взяты из работы [3]. В работе [3] эти потенциалы были апробированы при моделировании методом Монте-Карло фазового перехода порядок – беспорядок в системе Cu–Pt: температура фазового перехода для сплава CuPt с удовлетворительной точностью совпала с экспериментальными значениями.

Во всех случаях в расчетный блок вводили единственный точечный дефект: вакансию или межузельный атом. Вакансию вводили путем удаления атома меди или платины. Межузельный атом вводили путем добавления одного атома меди или платины в различные позиции решетки: с образованием гантельной конфигурации в различных направлениях, в октаэдрическую или тетраэдрическую поры. Однако несмотря на то, что межузельные атомы изначально вводили в различные позиции, они, как правило, стремились образовать единственную для каждого случая энергетически выгодную конфигурацию. При введении лишнего атома меди в любую позицию в сплаве CuPt он переходил в краудионную конфигурацию (т.е. располагался вдоль плотноупакованного ряда $\langle 110 \rangle$ в плоскости (111), содержащей атомы меди (рис. 2, а). Краудионный механизм миграции межузельного атома имеет, как было показано в работе [12], наименьшую энергию активации, т.е. следует ожидать высокой подвижности межузельного атома в сплаве CuPt. При введении лишнего атома платины в упорядоченный сплав CuPt формировалась гантель из двух атомов платины в направлении

$\langle 111 \rangle$ перпендикулярно плоскости (111), содержащей атомы платины, между двумя плоскостями меди (111) (рис. 2, б).

Следует заметить, что в чистых ГЦК металлах межузельный атом, как правило, образует гантель из двух атомов в узле, ориентированную вдоль направления $\langle 100 \rangle$ [12, 14]. Механизм и скорость миграции межузельного атома в сплаве CuPt также отличны от таковых в чистых металлах.

Для определения энергии миграции точечных дефектов проводили моделирование диффузии при различных температурах. Шаг интегрирования по времени движения атомов (при использовании метода молекулярной динамики) составлял 5 фс ($5 \cdot 10^{-15}$ с). Температуру расчетного блока задавали начальными скоростями атомов в соответствии с распределением Максвелла, при этом суммарный импульс и момент импульса атомов в расчетном блоке были равны нулю.

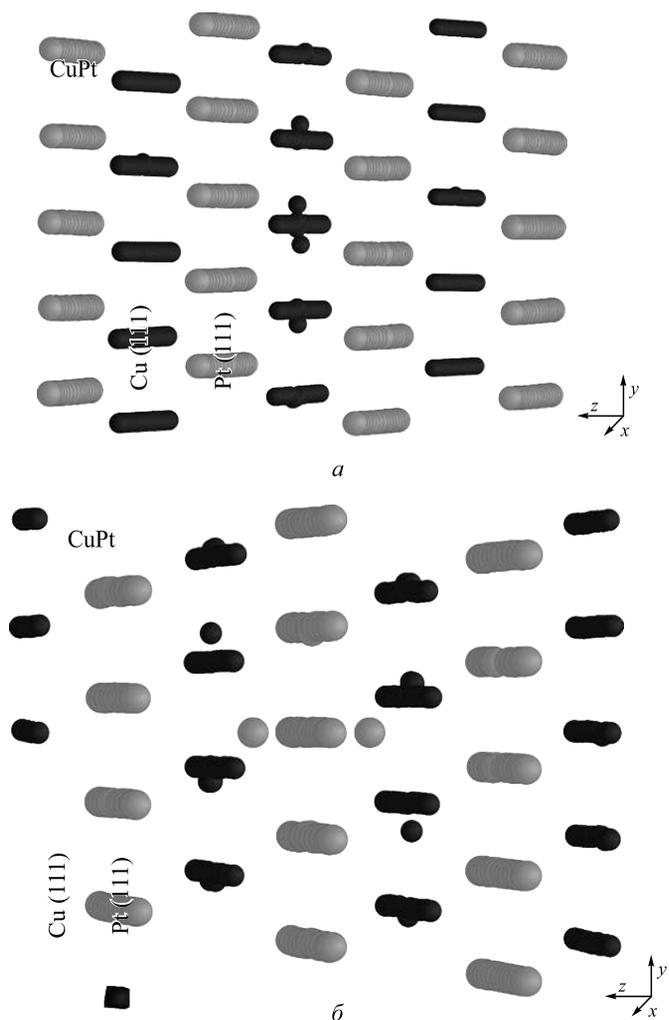


Рис. 2. Межузельные атомы меди (а) и платины (б) в упорядоченном сплаве CuPt:

● – атомы меди; ● – атомы платины

Fig. 2. Interstitial atoms of copper (а) and platinum (б) in an CuPt ordered alloy:

● – copper atoms; ● – platinum atoms

Для вычисления энергии миграции точечного дефекта в настоящей работе определяли зависимость коэффициента диффузии (D) от температуры (T) при введении в расчетный блок одного дефекта рассматриваемого типа. Энергию миграции дефекта E_m можно найти с помощью зависимости $\ln D(T^{-1})$, предварительно определив по графику тангенс угла наклона прямой к оси абсцисс ($\text{tg}\alpha$) [12]:

$$E_m = -k\text{tg}\alpha = -k \frac{\partial \ln D}{\partial (T^{-1})},$$

где k – постоянная Больцмана.

С помощью полученных зависимостей $\ln D(T^{-1})$ можно также определить предэкспоненциальный множитель D_0 в соответствующем уравнении Аррениуса. В работе [12] было показано, что в случае диффузии точечного дефекта $D_0 = ND'_0$ (где N – число атомов в расчетном блоке; D'_0 – предэкспоненциальный множитель, получаемый из зависимости $\ln D(T^{-1})$ в модели при введении одного дефекта в расчетный блок).

Для нахождения коэффициентов диффузии проводили компьютерные эксперименты продолжительностью 400 – 600 пс. Коэффициент диффузии рассчитывали по формуле

$$D = \frac{1}{3} (D_X + D_Y + D_Z) = \frac{1}{6tN} \sum_{i=1}^N \left((x_{0i} - x_i)^2 + (y_{0i} - y_i)^2 + (z_{0i} - z_i)^2 \right), \quad (1)$$

где x_{0i}, y_{0i}, z_{0i} – координаты начального положения i -го атома; x_i, y_i, z_i – координаты i -го атома в момент времени t .

Для исключения при расчете по формуле (1) коэффициента диффузии атомных смещений, обусловленных тепловыми колебаниями атомов, расчетный блок в конце компьютерного эксперимента охлаждали до температуры, близкой к 0 К. Полученные значения энергии миграции E_m и соответствующие предэкспоненциальные множители D_0 при миграции вакансии и межузельного атома в упорядоченном сплаве CuPt приведены ниже:

Элемент	Значение параметра для			
	вакансии		межузельного атома	
	$E_m, \text{эВ}$	$D_0, \text{м}^2/\text{с}$	$E_m, \text{эВ}$	$D_0, \text{м}^2/\text{с}$
Cu	0,89	$5,8 \cdot 10^{-7}$	0,06	$7,0 \cdot 10^{-8}$
Pt	1,05	$5,0 \cdot 10^{-7}$	0,21	$5,7 \cdot 10^{-10}$
среднее значение	0,96	$5,7 \cdot 10^{-7}$	0,06	$3,4 \cdot 10^{-8}$

При рассмотрении интенсивности миграции атомов разного сорта было выяснено, что и при миграции вакансии, и при миграции межузельного атома интенсивнее мигрируют атомы меди, что, видимо, объясняется

их относительно меньшим размером и массой по сравнению с атомами платины.

Как и ожидалось, межузельный атом в сплаве CuPt имел высокую подвижность, энергия миграции составила всего 0,06 эВ. При этом наблюдали ярко выраженную анизотропию диффузии: межузельный атом мигрировал преимущественно в одной плоскости меди (111) (рис. 3). Такой характер диффузии не менялся при введении изначально лишнего атома платины: атом платины в процессе миграции, как правило, вытеснял один из атомов меди в медной плоскости и в дальнейшем уже мигрировали в основном атомы меди.

В работе рассматривали влияние одноосной деформации вдоль осей X и Z (рис. 2) на интенсивность и характер миграции точечных дефектов (деформацию вдоль оси Y в настоящей работе не рассматривали, поскольку она имеет характер влияния, аналогичный влиянию деформации вдоль оси X). Деформацию задавали в начале компьютерного эксперимента путем изменения соответствующих межатомных расстояний вдоль одной из осей. После деформирования проводили структурную релаксацию. В зависимости от деформации для выявления анизотропии миграции дефектов определяли коэффициенты диффузии вдоль трех осей: D_X, D_Y, D_Z . На рис. 4 и 5 приведены зависимости коэффициентов диффузии вдоль различных осей от величины одноосной деформации вдоль осей X и Z в случае миграции вакансии и межузельного атома.

Резкий рост коэффициентов диффузии при деформации сжатия свыше 3 – 4 % (рис. 4, а, б, рис. 5, а)

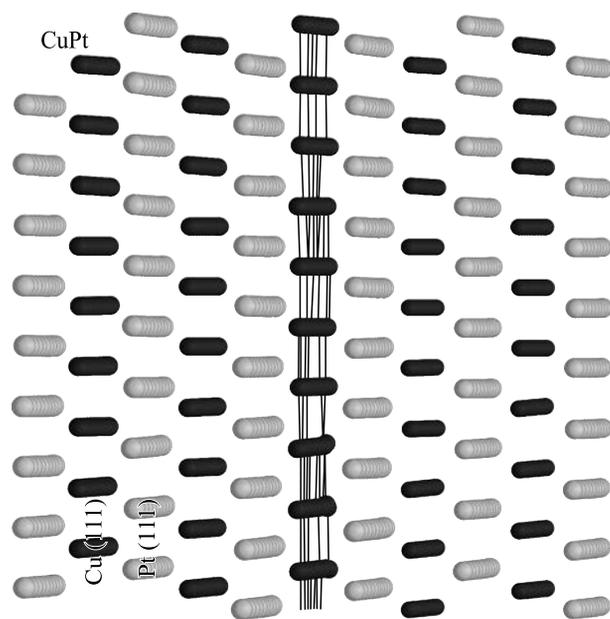


Рис. 3. Смещения атомов в результате миграции межузельного атома в сплаве CuPt при температуре 700 К в течение 150 пс:

● – атомы меди; ● – атомы платины

Fig. 3. Atoms displacement as a result of migration of an interstitial atom in an CuPt alloy at temperature of 700 K for 150 ps:

● – copper atoms; ● – platinum atoms

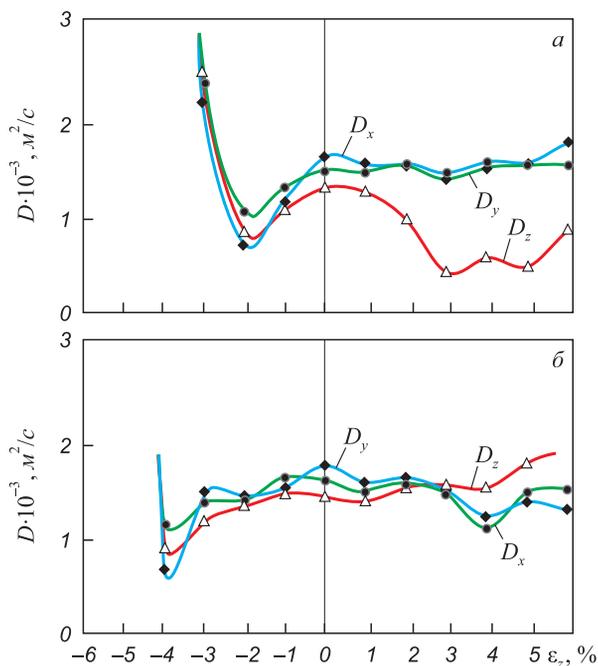


Рис. 4. Зависимости коэффициентов диффузии D_x, D_y, D_z от величины деформации вдоль осей X (а) и Z (б) в случае миграции вакансий в сплаве CuPt при температуре 1500 К (отрицательная область деформации – сжатие, положительная – растяжение)

Fig. 4. Dependences of diffusion coefficient D_x, D_y, D_z on deformation value along the axes X (a) and Z (б) in the case of vacancy migration in the CuPt alloy at temperature 1500 K (negative area of deformation – pressing, positive one – tension)

связан с интенсификацией смещений атомов в результате пластической деформации. В этом случае уже на начальной стадии компьютерного эксперимента в расчетном блоке образовывались дислокации, инициирующиеся в области точечного дефекта. Во всех других случаях (значения коэффициентов диффузии для которых входят в область построения графиков) компьютерные эксперименты проводили в условиях упругой деформации.

Ранее в работе [15] при исследовании влияния упругой деформации на интенсивность диффузии по границам фаз отмечалось, что при сжатии интенсивность зернограницной диффузии понижается, при растяжении – повышается. В настоящей работе при рассмотрении миграции точечных дефектов в сплаве CuPt подобная зависимость также прослеживается, но менее явно: для вакансий, например, при растяжении рост интенсивности диффузии практически не наблюдался (рис. 4).

Во всех случаях, независимо от величины деформации, атомы меди мигрировали интенсивнее атомов платины. При моделировании миграции межузельного атома практически все атомные смещения происходили в одной плоскости XY (111), содержащей атомы меди, аналогично примеру, изображенному на рис. 3. В этой связи коэффициент диффузии вдоль оси Z был почти равен нулю (рис. 5).

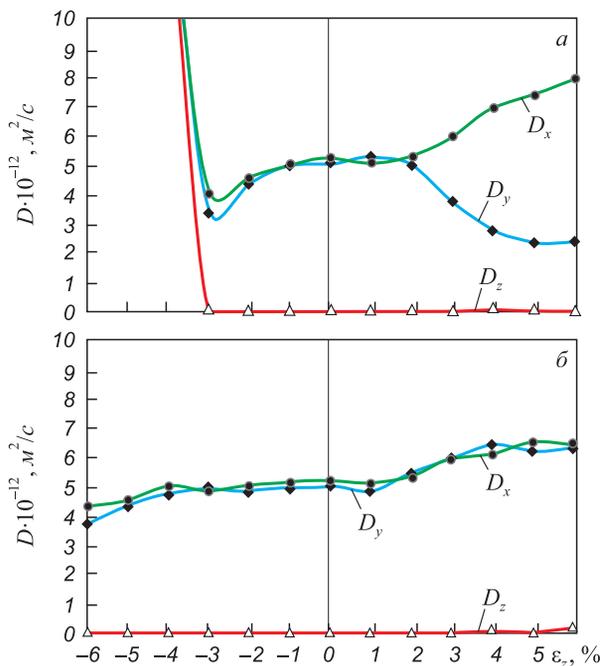


Рис. 5. Зависимости коэффициентов диффузии D_x, D_y, D_z от величины деформации вдоль осей X (а) и Z (б) в случае миграции межузельного атома в сплаве CuPt при температуре 1000 К (отрицательная область деформации – сжатие, положительная – растяжение)

Fig. 5. Dependence of diffusion coefficient D_x, D_y, D_z on deformation value along the axes X (a) and Z (б) in the case of an interstitial atom migration in the CuPt alloy at temperature 1000 K (negative area of deformation – pressing, positive one – tension)

Анизотропия миграции вакансий наблюдалась только при упругом растяжении кристалла вдоль оси X : в этом случае вакансия преимущественно мигрировала в плоскости (111), содержащей атомы меди. При растяжении вдоль оси Z наблюдалось незначительное превышение коэффициента D_z по сравнению с D_x и D_y . Однако, учитывая погрешности, нельзя утверждать о явной анизотропии в этом случае, хотя ее появление при растяжении вдоль оси Z и кажется закономерным.

Миграция межузельного атома в упорядоченном сплаве CuPt, как уже говорилось выше, почти всегда протекала в одной плоскости (111). Вместе с тем, при растяжении вдоль оси X наблюдалось еще большее «усиление» анизотропии (рис. 5, а): межузельный атом уже мигрировал не только в одной плоскости XY (111), но и преимущественно вдоль оси X . То есть в сплаве CuPt с помощью упругой деформации растяжения можно «направлять» миграцию межузельных атомов.

Выводы. С помощью метода молекулярной динамики получены значения энергии миграции точечных дефектов в упорядоченном сплаве CuPt. Выяснено, что межузельный атом формирует конфигурации, нехарактерные для чистых металлов: избыточный атом меди стремится сформировать краудион вдоль направления $\langle 110 \rangle$ в плоскости (111), содержащей атомы меди;

при введении атома платины формируется гантельная конфигурация из двух атомов платины в направлении $\langle 111 \rangle$ перпендикулярно плоскости (111), содержащей атомы платины. При миграции вакансии и межузельного атома в сплаве CuPt преимущественно мигрируют атомы меди. Миграция межузельного атома сопровождается ярко выраженной анизотропией: как правило, диффузия в данном случае протекает в одной плоскости (111), содержащей атомы меди. Причем в условиях упругого растяжения вдоль оси X межузельный атом преимущественно перемещается в направлении растяжения (вдоль оси X). Анизотропия миграции вакансии при отсутствии деформации не наблюдалась, она появляется в условиях упругого растяжения вдоль оси X : в этом случае диффузия протекает интенсивнее в плоскости XY (111), содержащей атомы меди. Влияние одноосной деформации на анизотропию миграции точечных дефектов, очевидно, объясняется уникальными особенностями сверхструктуры $L1_1$. Это позволяет, в частности, с помощью упругого деформирования «направлять» миграцию вакансий и межузельных атомов в упорядоченном сплаве CuPt, что может использоваться для создания, например, фильтров, радиационно-стойких материалов и т.д.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Козлов Э.В., Дементьев В.М., Кормин Н.М., Штерн Д.М. Структуры и стабильность упорядоченных фаз. – Томск: изд. Томского ун-та, 1994. – 248 с.
2. Матвеева Н.М., Козлов Э.В. Упорядоченные фазы в двойных металлических системах. – М.: Наука, 1989. – 280 с.
3. Чаплыгина А.А. Исследование структурных и сверхструктурных превращений в сплавах системы Cu – Pt. Автореф. дисс. канд. физ.-мат. наук. – Томск, 2013. – 23 с.
4. Лякишев Н.П., Алымов М.И. Наноматериалы конструкционного назначения // Российские нанотехнологии. 2006. № 1 – 2. С. 71 – 80.
5. Старенченко В.А., Соловьева Ю.В., Старенченко С.В., Ковалевская Т.А. Термическое и деформационное упрочнение монокристаллов сплавов со сверхструктурой $L1_2$. – Томск: Изд-во НТЛ, 2006. – 292 с.
6. Carr D.A., Corbitt J., Hart G.R., Gilmartin E., Hart G.L. Finding new phases for precipitate-hardening in platinum and palladium alloys // Computational Materials Science. 2012. Vol. 51. P. 331 – 339.
7. Огородникова О.М., Литвинов В.С. Кинетика упорядочения сплавов платина-никель-медь по типу $L1_0$ // Физика металлов и материаловедение. 1993. Т. 75. № 6. С. 113 – 117.
8. Власова Н.И., Щеголева Н.Н., Кандаурова Г.С., Шилова Н.Ф. Магнитная доменная структура терморазмагнитных кристаллов CoPt на ранних стадиях упорядочения при растягивающей нагрузке // Физика металлов и материаловедение. 2001. Т. 91. № 6. С. 27 – 45.
9. Артемьев Е.М., Живаева Л.В. Атомное упорядочение и магнитные свойства пленок сплавов FePd, FePt, $Fe_{50}Pd_{50-x}Pt_x$ // Известия РАН. Серия физическая. 2006. Т. 70. № 4. С. 556 – 558.
10. Старенченко В.А., Старенченко С.В., Колупаева С.Н., Пантюхова О.Д. Генерация точечных дефектов в сплавах со сверхструктурой $L1_2$ // Изв. вуз. Физика. 2000. № 1. С. 66 – 70.
11. Poletaev G.M., Dmitrienko D.V., Diabdenkov V.V., Mikrukov V.R., Starostenkov M.D. Molecular dynamics investigation of the diffusion permeability of triple junctions of tilt and mixed-type boundaries in nickel // Physics of the Solid State. 2013. Vol. 55. № 9. P. 1920 – 1924.
12. Poletaev G.M., Starostenkov M.D. Contributions of different mechanisms of self-diffusion in face-centered cubic metals under equilibrium conditions // Physics of the Solid State. 2010. Vol. 52. № 6. P. 1146 – 1154.
13. Matsukawa Y., Zinkle S.J. Dynamic observation of the collapse process of a stacking fault tetrahedron by moving dislocations // Journal of Nuclear Materials. 2004. Vol. 329-333. P. 919 – 923.
14. Zhao P., Shimomura Y. Molecular dynamics calculations of properties of the self-interstitials in copper and nickel // Computational Materials Science. 1999. № 14. P. 84 – 90.
15. Poletaev G.M., Sannikov A.V., Berdychenko A.A., Starostenkov M.D. Molecular dynamics study of plastic deformation mechanisms near the interphase boundary in two-dimensional bimetallic systems // Materials Physics and Mechanics. 2015. Vol. 22. № 1. P. 15 – 19.

Поступила 12 сентября 2014 г.

IZVESTIYA VUZOV. CHERNAYA METALLURGIYA = IZVESTIYA. FERROUS METALLURGY. 2015. VOL. 58. NO. 12, pp. 919–924.

THE STUDY OF FEATURES OF POINT DEFECTS MIGRATION IN CuPt ORDERED ALLOY IN THE CONDITIONS OF DEFORMATION

*A.A. Soskov*¹, *Postgraduate of the Chair of Physics named after V.M. Finkel*

*G.M. Poletaev*², *Dr. Sci. (Phys.-math.), Professor, Head of the Chair of Advanced Mathematics and Mathematical Modeling (gmpoletaev@mail.ru)*

*M.D. Starostenkov*², *Dr. Sci. (Phys.-math.), Professor, Head of the Chair of General Physics*

¹*Siberian State Industrial University (42, Kirova Str., Novokuznetsk, Kemerovo Region, 654007, Russia)*

²*Altai State Technical University (46, Lenina ave., Barnaul, Altai Territory, 656038, Russia)*

Abstract. The values of migration energy of vacancy and interstitial atom in CuPt ordered alloy were calculated using the method of molecular

dynamics. During migration of the vacancy and the interstitial atom mainly the Cu atoms migrate. The interstitial atom forms configurations in CuPt ordered alloy not typical for pure metals: excess Cu atom seek to form crowdion along the $\langle 110 \rangle$ direction in (111) plane containing copper atoms; in the case of introduction of Pt atom dumbbell shaped configuration of the two Pt atoms forms in the $\langle 111 \rangle$ direction perpendicular to the (111) plane containing Pt atoms. The high anisotropy of interstitial atom migration has been found: interstitial atom in CuPt ordered alloy migrates, as a rule, along (111) planes containing Cu atoms. At the tension along this plane, similar anisotropy is partly observed at vacancy migration, but interstitial atom in this case migrates mainly along the axis of tension.

Keywords: molecular dynamics, ordered alloy, superstructure, point defect, vacancy, interstitial atom, diffusion, migration energy, deformation.

DOI: 10.17073/0368-0797-2015-12-919-924

REFERENCES

1. Kozlov E.V., Dement'ev V.M., Kormin N.M., Shtern D.M. *Struktury i stabil'nost' uporyadochennykh faz* [Structures and stability of ordered phases]. Tomsk: izd. Tomskogo un-ta, 1994, 248 p. (In Russ.).
2. Matveeva N.M., Kozlov E.V. *Uporyadochennye fazy v dvoynykh metallicheskikh sistemakh* [Ordered phases in double metallic systems]. Moscow: Nauka, 1989, 280 p. (In Russ.).
3. Chaplygina A.A. *Issledovanie strukturnykh i sverkhstrukturnykh prevrashchenii v splavakh sistemy Cu – Pt. Avtoref. diss. kand. fiz.-mat. nauk* [Reserach of structural and superstructural transformations in the alloys of Cu – Pt system. Extended Abstract of Cand. Phys.-math. Sci. Diss.]. Tomsk, 2013, 23 p. (In Russ.).
4. Lyakishev N.P., Alymov M.I. Nanomaterilas of structural purpose. *Rossiiskie nanotekhnologii*. 2006, no. 1-2, pp. 71–80. (In Russ.).
5. Starenchenko V.A., Solov'eva Yu.V., Starenchenko S.V., Koval'skaya T.A. *Termicheskoe i deformatsionnoe uprochnenie monokristallov splavov so sverkhstrukturnoi L1₂* [Thermal and strain hardening of alloy single crystals with L1₂ superstructure]. Tomsk: izd-vo NTL, 2006. 292 p. (In Russ.).
6. Carr D.A., Corbitt J., Hart G.R., Gilmartin E., Hart G.L. Finding new phases for precipitate-hardening in platinum and palladium alloys. *Computational Materials Science*. 2012, vol. 51, pp. 331–339.
7. Ogorodnikova O.M., Litvinov V.S. Odering kinetics of platinum-nickel-copper alloys by L1₀ type. *Fizika metallov i metallovedenie*. 1993, vol. 75, no. 6, pp. 113–117. (In Russ.).
8. Vlasova N.I., Shchegoleva N.N., Kandaurova G.S., Shilova N.F. Magnetic domain structure of thermally demagnetized CoPt crystals at early stages of ordering under the effect of a tensile load. *Physics of Metals and Metallography*. 2001, vol. 91, no. 6, pp. 559–577.
9. Artem'ev E.M., Zhivaeva L.V. Atom ordering and magnetic film properties of FePd, FePt, Fe₅₀Pd_{50-x}Pt_x alloys. *Izvestiya RAN. Seriya fizicheskaya*. 2006, vol. 70, no. 4, pp. 556–558. (In Russ.).
10. Starenchenko V.A., Starenchenko S.V., Kolupaeva S.N., Pantyukhova O.D. Generation of point defects in alloys with the L1₂ superlattice. *Russian Physics Journal*. 2000, vol. 43, no. 1, pp. 61–65.
11. Poletaev G.M., Dmitrienko D.V., Diabdenkov V.V., Mikrukov V.R., Starostenkov M.D. Molecular dynamics investigation of the diffusion permeability of triple junctions of tilt and mixed-type boundaries in nickel. *Physics of the Solid State*. 2013, vol. 55, no. 9, pp. 1920–1924.
12. Poletaev G.M., Starostenkov M.D. Contributions of different mechanisms of self-diffusion in face-centered cubic metals under equilibrium conditions. *Physics of the Solid State*. 2010, vol. 52, no. 6, pp. 1146–1154.
13. Matsukawa Y., Zinkle S.J. Dynamic observation of the collapse process of a stacking fault tetrahedron by moving dislocations. *Journal of Nuclear Materials*. 2004, vol. 329–333, pp. 919–923.
14. Zhao P., Shimomura Y. Molecular dynamics calculations of properties of the self-interstitials in copper and nickel. *Computational Materials Science*. 1999, no. 14, pp. 84–90.
15. Poletaev G.M., Sannikov A.V., Berdychenko A.A., Starostenkov M.D. Molecular dynamics study of plastic deformation mechanisms near the interphase boundary in two-dimensional bimetallic systems. *Materials Physics and Mechanics*. 2015, vol. 22, no. 1, pp. 15–19.

Acknowledgements. The research was financially supported by RFBR within the frameworks of scientific projects no. 13-02-00301_a, no. 14-02-98000-р_сибирь_a, no. 14-08-90416-Укр_a.

Received September 12, 2014