Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2023. Т. 20. № 4. С. 508–514
Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedenia (Basic Problems of Material Science (BPMS)). 2023; 4(20): 508–514

Научная статья
1.3.8. Физика конденсированного состояния (физико-математические науки)
УДК 544.22
doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2023.04.010

ПЕРВОПРИНЦИПНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СТАБИЛЬНОСТИ ВЫСОКОЭНТРОПИЙНЫХ СПЛАВОВ $CoCrFe_{40-x}Mn_xNi$ (x = 5, 10, 15, 20)

Кирилл Александрович Осинцев[1], Виктория Сергеевна Панова[2], Валентина Анатольевна Кузнецова[3], Сергей Валерьевич Коновалов[4†], Ирина Алексеевна Панченко[5]

[1, 2, 3, 4, 5] Сибирский государственный индустриальный университет, ул. Кирова, 42, 654007, Новокузнецк, Россия
[1, 4] Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева, Московское шоссе, 34, 443086, Самара, Россия
[1] osincev.ka@ssau.ru, https://orcid.org/0000-0003-1150-6747,
[2] viktorya.panova@icloud.com, https://orcid.org/0009-0000-1460-6677
[3] valyakuz28@mail.ru, https://orcid.org/0009-0007-5845-4928
[4] konovalov@sibsiu.ru[†], https://orcid.org/0000-0003-4809-8660
[5] i.r.i.ss@yandex.com, https://orcid.org/0000-0002-1631-9644

Аннотация. В работе проведено первопринципное исследование стабильности четырех сплавов с различным содержанием Fe и Mn $CoCrFe_{40-x}Mn_xNi$ (x = 5, 10, 15, 20 ат. %). Для каждой композиции были созданы специальные квазислучайные сверхструктуры, имеющие тип строения гранецентрированной кубической решетки и состоящие из 32 атомов. В программном комплексе QUANTUM ESPRESSO проводилась полная релаксация полученных сверхструкур и определение полной энергии основного состояния при температуре 0 К. На основании полученных результатов рассчитаны энтальпии смешения и показано, что ГЦК твердые растворы являются термодинамически стабильными структурами для исследуемых сплавов при заданной температуре. Наименьшим значением энтальпии смешения обладает сверхструктура Co–Cr–Fe–Mn–Ni, что подтверждает концепцию того, что высокоэнтропийные сплавы с эквиатомной композицией демонстрируют наибольшую устойчивость, по сравнению с не эквиатомными сплавами. Были получены значения параметров решетки, которые продемонстрировали сохранение кубической структуры после полной релаксации исследованных структур. Также рассчитаны значения плотности и объема полностью релаксированных сверхструктур, указывающие на то, что при увеличении содержания Fe и одновременном уменьшении содержания Mn объем сверхструктур уменьшается, а их плотность, соответственно, увеличивается.

Ключевые слова: высокоэнтропийный сплав, первопринципное исследование, Co–Cr–Fe–Mn–Ni, энтальпия смешения, параметр решетки, сверхструктура, стабильность, релаксация, плотность, объем.

Благодарности: Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-49-00015, https://rscf.ru/project/23-49-00015/.

Для цитирования: Осинцев К.А., Панова В.С., Кузнецова В.А., Коновалов С.В., Панченко И.А. Первопринципное исследование стабильности высокоэнтропийных сплавов $CoCrFe_{40-x}Mn_xNi$ (x = 5, 10, 15, 20) // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2023. Т. 20, № 4. С. 508–514. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2023.04.010.

Original article

FIRST-PRINCIPLES STUDY OF THE STABILITY OF $CoCrFe_{40-x}Mn_xNi$ (x = 5, 10, 15, 20) HIGH-ENTROPY ALLOYS

Kirill A. Osintsev[1], Viktoria S. Panova[2], Valentina A. Kuznetsova[3], Sergey V. Konovalov[4†], Irina A. Panchenko[5]

[1, 2, 3, 4, 5] Siberian State Industrial University, Kirova Str., 42, Novokuznetsk, 654007, Russia
[1, 4] Samara National Research University, Moskovskoe shosse Str., 34, Samara, 443086, Russia
[1] osincev.ka@ssau.ru, https://orcid.org/0000-0003-1150-6747,
[2] viktorya.panova@icloud.com, https://orcid.org/0009-0000-1460-6677
[3] valyakuz28@mail.ru, https://orcid.org/0009-0007-5845-4928
[4] konovalov@sibsiu.ru[†], https://orcid.org/0000-0003-4809-8660
[5] i.r.i.ss@yandex.com, https://orcid.org/0000-0002-1631-9644

Abstract. In this work, a first-principles study of the stability of four alloys with different Fe and Mn contents $CoCrFe_{40-x}Mn_xNi$ (x = 5, 10, 15, 20 at. %) has been carried out. For each composition, special quasi-random structures were created, having the structure type of face-centered cubic lattice and consisting of 32 atoms. Full relaxation of the obtained superstructures and determination of the total ground state energy at 0 K temperature were carried out in the QUANTUM ESPRESSO program complex. Based on the obtained results, the enthalpies of mixing are calculated and it is shown that FCC solid solutions are thermodynamically stable structures for the studied alloys at a given temperature. The lowest value of enthalpy of mixing has the superstructure Co–Cr–Fe–Mn–Ni, which confirms the concept that high-entropy alloys with equiatomic composition demonstrate the greatest stability compared to non-equiatomic alloys. The values of lattice parameters were obtained, which provide the preservation of cubic structure after complete relaxation of the studied structures. The values of density and volume of the fully relaxed superstructures were also calculated, indicating that with increasing Fe content and simultaneous decrease in Mn content, the volume of the superstructures decreases and their density, respectively, increases.

Keywords: high-entropy alloy, first-principles study, Co–Cr–Fe–Mn–Ni, enthalpy of mixing, lattice parameter, superstructure, stability, relaxation, density, volume.

Acknowledgements: This study is funded by a grant of the Russian Science Foundation, project No. 23-49-00015. https://rscf.ru/en/project/23-49-00015/.

For citation: Osintsev, K. A., Panova, V. S., Kuznetsova, V. A., Konovalov, S. V. & Panchenko, I. A. (2023). First-principles study of the stability of $CoCrFe_{40-x}Mn_xNi$ (x = 5, 10, 15, 20) high-entropy alloys. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedenia (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 20(4), 508–514. (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2023.04.010.

Введение

Одним из перспективных направлений современного материаловедения является исследование структуры и свойств высокоэнтропийных сплавов (ВЭС) [1]. При сплавлении пяти и более основных компонентов, имеющих концентрацию от 5 до 35 ат. % вклад конфигурационной энтропии смешения в полную свободную энергию системы начинает превалировать над энтальпией формирования различных соединений и разделения фаз, что делает ВЭС уникальными с точки зрения способности к стабилизации твердых растворов [2].

В предыдущих исследованиях одного из наиболее изученного сплава CoCrFeMnNi было установлено влияние каждого компонента в отдельности на свойства сплава при сохранении остальных компонентов в равной пропорции. При варьировании содержания Cr от 0 до 27,2 ат. % скорость коррозии в растворе серной кислоты уменьшается в 6 раз в связи с увеличением толщины пассивирующей пленки [3]. Увеличение содержания Fe ослабляет вклад твердорастворного упрочнения в связи с уменьшением искажения кристаллической решетки. Помимо этого, уменьшается вклад зернограничного упрочнения [4] По мере увеличения содержания Mn от 0 до 44 ат. % кристаллическая структура сплавов $CoCrFeMn_xNi$ становится более устойчивой к тепловому расширению, а энергия разрушения кристаллической ячейки возрастает в направлениях [100] [010] и [001], что указывает на повышение прочности атомных связей [5]. При содержании Ni от 0 до 2,5 ат. % сплав $CoCrFeMnNi_x$ имеет двухфазную структуру (гранецентрированная кубическая решетка (ГЦК) + тетрагональная σ-фаза) и наибольшую твердость по Виккерсу (>300 HV). При концентрации 5 ат. % Ni сплав состоит из ГЦК + объемно-центрированной кубической (ОЦК) фаз, а при дальнейшем увеличении содержания Ni до 20 ат. % сплав характеризуется однофазной ГЦК фазой [6].

Таким образом, предыдущие исследования показывают, что высокоэнтропийные сплавы системы Co–Cr–Fe–Mn–Ni могут состоять, как из однофазного ГЦК твердого раствора, так и представлять собой многофазные сплавы, содержащие интерметаллидные соединения. Рассмотренные работы фокусировались на исследовании влияния одного компонента при пропорциональном изменении содержания остальных компонентов. Однако для дальнейшего поиска сплавов с новыми свойствами необходимо расширять область исследования до одновременного влияния двух и более компонентов.

В данной работе с помощью первопринципных методов исследования было установлено влияние увеличения Mn при одновременном уменьшении Fe на термодинамическую стабильность сплавов $CoCrFe_{40-x}Mn_xNi$ (x = 5, 10, 15, 20 ат. %) при температуре 0 K. Получены значения энтальпии смешения оптимизированных сверхструктур, определены параметры решеток, а также плотность и объем структур после полной релаксации.

Методика исследования

В данной работе для создания специальных квазислучайных сверхструктур, представляющих собой ГЦК решетки, каждая из которых состоит из 32 атомов, применялся программный комплекс The Alloy-Theoretic Automated Toolkit (ATAT) [7, 8]. Полученные структуры использовались в качестве исходных данных для выполнения первопринципных расчетов при температуре $T = 0$ K, давлении 0 Па в рамках теории функционала плотности с помощью программного пакета Quantum ESPRESSO [9, 10] Обменно-корреляционное взаимодействие задавалось обобщенным градиентным приближением (generalized gradient approximation GGA) с использованием функции Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) [11]. Для релаксации структуры сплавов суммирование производилось по зоне Бриллюэна с использованием решетки волновых векторов k-mesh 3×3×3. В качестве метода для расчетов был выбран метод псевдопотенциалов, который заключается в замене реального потенциала на специально построенный псевдопотенциал, заменяющий осцилирующую часть волновой функции [12] Использовались ультрамягкие псевдопотенциалы для каждого из компонентов, взятые из библиотеки SSSP Efficiency v.1.3.0. Для получения достоверных результатов предварительно проведено тестирование базисных наборов для каждой сверхструктуры. Варьировались значения обрезания максимальной кинетической энергии плоской волны Ea (ecutwfc в Quantum ESPRESSO) от 60 Р до 130 Р (Ридберг) с шагом 10 Р, а также значения кинетической энергии обрезания плотности заряда Eb (ecutrho в Quantum ESPRESSO) от 720 Р до 1080 Р и отслеживалось значение давления, в качестве одного из наиболее чувствительных параметров для определения сходимости (рис.1). Достижение постоянных значений давлений при увеличении Ea и Eb, свидетельствовало о сходимости результатов. Для всех расчетов был выбран базисный набор ecutwfc 90 Р и ecutrho 1080 Р, который обеспечивает сходимость. Полные расходимости энергетических и атомных сил задавались менее 10^{-4} Р и 0,001 Р/Å.

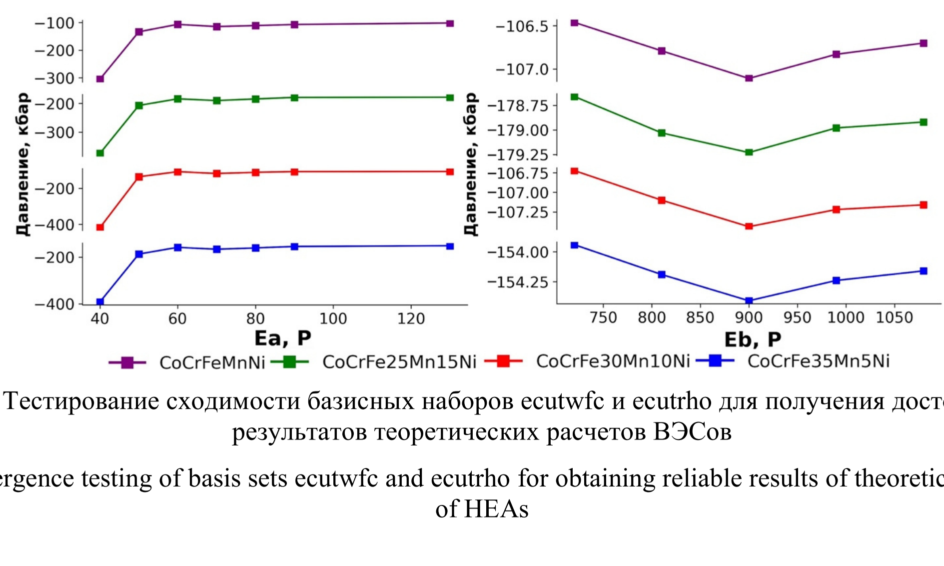

Рис.1. Тестирование сходимости базисных наборов ecutwfc и ecutrho для получения достоверных результатов теоретических расчетов ВЭСов

Fig.1. Convergence testing of basis sets ecutwfc and ecutrho for obtaining reliable results of theoretical calculations of HEAs

Результаты и их обсуждение

Стабильность сплава *AB* может быть рассмотрена как реакция взаимодействия входящих в состав компонентов при их сплавлении и выражена следующим выражением:

$$A + B \leftrightarrow AB. \quad (1)$$

В данном случае под *AB* подразумеваются сплавы $CoCrFe_{40-x}Mn_xNi$ (x = 5, 10, 15, 20 ат. %), а *A* и *B* обозначают исходные компоненты.

Свободная энергия Гиббса ΔG_{mix} позволяет количественно определить, в каком направлении будет протекать данная реакция, то есть, являются ли сплавы $CoCrFe_{40-x}Mn_xNi$ (x = 5, 10, 15, 20 ат. %) термодинамически стабильны или нет, по отношению к их исходным компонентам, и определяется как:

$$\Delta G_{mix} = \Delta H_{mix} - T\Delta S, \quad (2),$$

где ΔH_{mix} – энтальпия смешения, T – температура, а ΔS – изменение энтропии системы. Энтальпия смешения может быть выражена через разницу значений полных энергий основного состояния, рассчитанных с помощью первопринципных методов, сплава $E(AB)$ и его компонентов $E(A)$ и $E(B)$, умноженных на соответствующие мольные доли xA и xB:

$$\Delta H_{mix} = E(AB) - (xA \cdot E + zA \cdot B). \quad (3)$$

В данном исследовании не учитывались вибрационная и конфигурационная составляющие энтропии, поскольку расчеты проводились при температуре T = 0 К. Таким образом, значение свободной энергии Гиббса соответствует значению энтальпии смешения, которое определяет в данном случае стабильность сплава:

$$\Delta G_{mix} = \Delta H_{mix}. \quad (4)$$

Результаты расчета энтальпий смешения сплавов представлены в Таблице 1. Все полученные значения являются отрицательными и свидетельствуют о том, что сплавы $CoCrFe_{40-x}Mn_xNi$ (x = 5, 10, 15, 20 ат. %), представляющие собой ГЦК твердый раствор, являются стабильными при температуре 0 К. Наибольшей термодинамической стабильностью обладает эквиатомная композиция, значение энтальпии смешения которой равно -761 эВ. При увеличении содержания Fe и одновременном уменьшении содержания Mn лишь на 5 ат. % происходит резкое увеличение энтальпии смешения, которая отличается более чем на 170 эВ по сравнению с эквиатомным составом для сплавов $CoCrFe_{40-x}Mn_xNi$ (x = 5, 10, 15 ат. %). Это подтверждает концепцию ВЭС, в соответствии с которой большую термодинамическую стабильность имеют сплавы эквиатомных композиций с пятью и более основными компонентами.

Таблица 1. Результаты расчета термодинамических параметров и оптимизированных сверхструктур сплавов $CoCrFe_{40-x}Mn_xNi$ (x = 5, 10, 15, 20 ат. %)

Table 1. The results of calculation of thermodynamic parameters and optimized superstructures of $CoCrFe_{40-x}Mn_xNi$ (x = 5, 10, 15, 20 ат. %) alloys

	CoCrFeMnNi	$CoCrFe_{25}Mn_{15}Ni$	$CoCrFe_{30}Mn10Ni$	$CoCrFe_{35}Mn_5Ni$
Энтальпия смешения, эВ	-769,5741147	-596,1036577	-588,4448532	-584,8236989
Точность сходимости, эВ	0,0000076	0,0000117	0,0000133	0,0000113
Сила, действующая на атомы, эВ/А	0,07	0,09	0,04	0,11
Давление, кбар	-0,42	-1,28	-0,4	3,69
Плотность, г/см^3	8,57	8,60	8,61	8,64
V_0, Å^3	347,94	347,24	346,94	345,93
a, Å	7,03	7,02	7,02	6,99
b, Å	7,02	7,03	7,06	7,04
c, Å	7,06	7,03	7,01	7,03
α, °	89,93	90,01	90,00	90,06
β, °	90,14	90,01	90,01	89,98
γ, °	89,86	89,96	90,12	90,07

На рисунке 2 представлены изображения сверхструктур высокоэнтропийных сплавов (а-г) в исходном состоянии, полученном с помощью программы ATAT, а также после структурной оптимизации (д-з). Стрелками на исходных изображениях сверхструктур обозначаются силы, действующие на атомы и вызывающие внутренние напряжения. В результате релаксации сверхструктур, силы, действующие на атомы, уравновешиваются и составляют суммарно не более 0,1 эВ/Å на атом, а максимальное давление внутри решеток не превышает 3,69 кбар, что свидетельствует о полной релаксации структур (Табл.1).

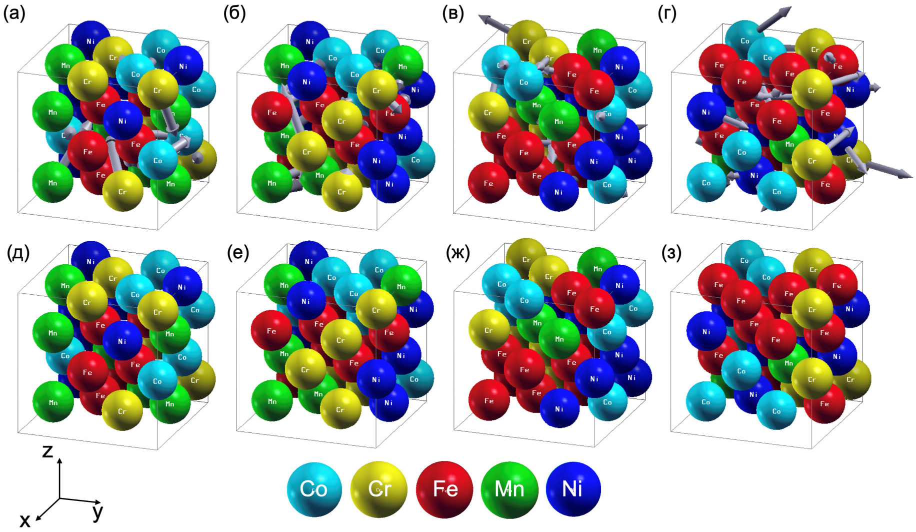

Рис.2. ГЦК сверхструктуры сплавов $CoCrFe_{40-x}Mn_xNi$ (x = 5, 10, 15, 20 ат. %), состоящие из 32 атомов. (а-г) исходное состояние, (д-з) – после полной релаксации

Fig.2. FCC superstructures of $CoCrFe_{40-x}Mn_xNi$ (x = 5, 10, 15, 20 at. %) alloys consisted of 32 atoms. (a-d) initial state, (e-h) – after full relaxation

Рассчитанные значения параметров решетки (a, b, c), углов между ними, а также равновесного объема V_0 и плотности сверхструктур представлены в Таблице 1. Исходя из полученных результатов оптимизации параметров сверхструктур, наибольший объем и наименьшую плотность имеет эквиатомный сплав CoCrFeMnNi. При увеличении содержания Fe и одновременном уменьшении содержания Mn объем сверхструктур уменьшается, а их плотность, соответственно, увеличивается. Это может быть обусловлено замещением атомов Mn, имеющих атомный радиус 135 пм, атомами Fe с радиусом 124,12 пм, что приводит к уменьшению искажения решетки. Рассчитанные значения параметров решетки, а также углов между ними указывают на сохранение кубической структуры после полной релаксации структуры.

Выводы

В результате проведенного исследования с помощью первопринципных методов установлено, что ГЦК твердый раствор является стабильным состоянием для сплавов $CoCrFe_{40-x}Mn_xNi$ (x = 5, 10, 15, 20 ат. %) при температуре 0 К и давлении 0 бар. Наименьшее значение энтальпии смешения было получено у сверхструктуры эквиатомного состава, что свидетельствует о ее наибольшей стабильности среди исследованных в данной работе не эквиатомных сплавов.

Рассчитанные параметры оптимизированных структур характеризуются уменьшением объема и увеличением плотности сверхструктур при увеличении содержания Fe и одновременном уменьшении содержания Mn.

Таким образом, данное исследование предоставляет ценную информацию о термодинамической стабильности сплавов $CoCrFe_{40-x}Mn_xNi$ (x = 5, 10, 15, 20 ат. %), а также параметрах их оптимизированных структур, что может быть полезным для дальнейшей разработки высокоэнтропийных сплавов с оптимальными свойствами.

Список литературы

1. Cantor B. Multicomponent and High Entropy Alloys // Entropy. Multidisciplinary Digital Publishing Institute. 2014. V. 16, N 9. P. 4749–4768.

2. Guo S., Liu C.T. Phase stability in high entropy alloys: Formation of solid-solution phase or

amorphous phase // Progress in Natural Science: Materials International. Chinese Materials Research Society. 2011. V. 21, N 6. P. 433–446.

3. Wan T., Huang Z., Cheng Z., Zhu M., Zhu W. et al. The effect of chromium content on the corrosion behavior of ultrafine-grained $Cr_xMnFeCoNi$ high-entropy alloys in sulfuric acid solution // Microstructures. 2023. V. 3. P. 2023014.

4. Ondicho I., Alunda B., Park N. Effect of Fe on the Hall-Petch relationship of $(CoCrMnNi)_{100-x}Fe_x$ medium-and high-entropy alloys // Intermetallics (Barking). 2021. V. 136. P. 107239.

5. Liu Y., Liu W., Zhou Q.-Y., Liu C., Fan T.-W. et al. An initio study of thermodynamic and fracture properties of $CrFeCoNiMn_x$ ($0 \le x \le 3$) high-entropy alloys // Journal of Materials Research and Technology. 2022. V. 17. P. 498–506.

6. Koppoju S., Konduri S.P., Chalavadi P., Bonta S.R., Mantripragada R. Effect of Ni on Microstructure and Mechanical Properties of CrMnFeCoNi High Entropy Alloy // Transactions of the Indian Institute of Metals. 2020. V. 73, N 4. P. 853–862.

7. Van De Walle A., Tiwary P., De Jong M., Olmsted D.L., Asta M. et al. Efficient stochastic generation of special quasirandom structures // Calphad. 2013. V. 42. P. 13–18.

8. Van de Walle A., Asta M., Ceder G. The Alloy-Theoretic Automated Toolkit (ATAT): A User Guide // Calphad. 2013. V. 26. P. 539–553.

9. Giannozzi P., Andreussi O., Brumme T., Bunau O., Nardelli M.B. et al. Advanced capabilities for materials modelling with Quantum ESPRESSO // Journal of Physics Condensed Matter. 2017. V. 29, N 46. P. 465901.

10. Giannozzi P., Baroni S., Bonini N., Calandra M., Car R. et al. QUANTUM ESPRESSO: A modular and open-source software project for quantum simulations of materials // Journal of Physics Condensed Matter. 2009. V. 21, N 39. P. 395502.

11. Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized Gradient Approximation Made Simple // Physical Review Letters. 1996. V. 77, N 18. P. 3865–3868.

12. Payne M.C., Teter M.P., Allan D.C., Arias T.A., Joannopoulos J.D. Iterative minimization techniques for *ab initio* total-energy calculations: molecular dynamics and conjugate gradients // Reviews of Modern Physics. 1992. V. 64, N 4. P. 1045–1097.

Информация об авторах

К. А. Осинцев – аспирант кафедры технологии металлов и авиационного материаловедения Самарского национального исследовательского университета им. академика С.П. Королева; младший научный сотрудник научно исследовательской лаборатории электронной микроскопии и обработки изображений Сибирского государственного индустриального университета.

В. С. Панова – младший научный сотрудник научно-исследовательской лаборатории электронной микроскопии и обработки изображений Сибирского государственного индустриального университета.

В. А. Кузнецова – лаборант Управления научных исследований Сибирского государственного индустриального университета.

С. В. Коновалов – доктор технических наук, профессор, проректор по научной и инновационной деятельности Сибирского государственного индустриального университета; профессор кафедры технологии металлов и авиационного материаловедения Самарского национального исследовательского университета им. академика С.П. Королева.

И. А. Панченко – кандидат технических наук, заведующий лабораторией электронной микроскопии и обработки изображений Сибирского государственного индустриального университета.

References

1. Cantor, B. (2014). Multicomponent and High Entropy Alloys. Entropy. *Multidisciplinary Digital Publishing Institute*, *16*(9), 4749–4768.

2. Guo, S. & Liu, C. T. (2011). Phase stability in high entropy alloys: Formation of solid-solution phase or amorphous phase. Progress in Natural Science: Materials International. *Chinese Materials Research Society*, *21*(6), 433–446.

3. Wan, T., Huang, Z., Cheng, Z., Zhu, M. & Zhu, W. et al. (2023). The effect of chromium content on the corrosion behavior of ultrafine-grained $Cr_xMnFeCoNi$ high-entropy alloys in sulfuric acid solution. *Microstructures*, *3*, 2023014.

4. Ondicho, I., Alunda, B. & Park, N. (2021). Effect of Fe on the Hall-Petch relationship of $(CoCrMnNi)_{100-x}Fe_x$ medium-and high-entropy alloys. *Intermetallics (Barking)*, *136*, 107239.

5. Liu, Y., Liu, W., Zhou, Q.-Y., Liu, C. & Fan, T.-W. et al. (2022). An initio study of thermodynamic and fracture properties of $CrFeCoNiMn_x$ ($0 \leq x \leq 3$) high-entropy alloys. *Journal of Materials Research and Technology*, *17*, 498–506.

6. Koppoju, S., Konduri, S. P., Chalavadi, P., Bonta, S. R. & Mantripragada, R. (2020). Effect of Ni on Microstructure and Mechanical Properties of CrMnFeCoNi High Entropy Alloy. *Transactions of the Indian Institute of Metals, 73*(4), 853–862.

7. Van De Walle, A., Tiwary, P., De Jong, M., Olmsted, D. L. & Asta, M. et al. (2013). Efficient stochastic generation of special quasirandom structures. *Calphad*, *42*, 13–18.

8. Van de Walle, A., Asta, M. & Ceder, G. (2013). The Alloy-Theoretic Automated Toolkit (ATAT): A User Guide. *Calphad*, *26*, 539–553.

9. Giannozzi, P., Andreussi, O., Brumme, T., Bunau, O. & Nardelli, M. B. et al. (2017). Advanced capabilities for materials modelling with Quantum ESPRESSO. *Journal of Physics Condensed Matter*, *29*(46), 465901.

10. Giannozzi, P., Baroni, S., Bonini, N., Calandra, M. & Car, R. et al. (2009). QUANTUM ESPRESSO: A modular and open-source software project for quantum simulations of materials. *Journal of Physics Condensed Matter*, *21*(39), 395502.

11. Perdew, J. P., Burke, K. & Ernzerhof, M. (1996). Generalized Gradient Approximation Made Simple. *Physical Review Letters*, *77*(18), 3865–3868.

12. Payne, M. C., Teter, M. P., Allan, D. C., Arias, T. A. & Joannopoulos, J. D. (1992). Iterative minimization techniques for *ab initio* total-energy calculations: molecular dynamics and conjugate gradients. *Reviews of Modern Physics*, *64*(4), 1045–1097.

Information about the authors

K. A. Osintsev – Postgraduate Student at the Department of Metal Technology and Aviation Materials Science, Samara National Research University; Research Assistant at the Laboratory of Electron Microscopy of Image Processing, Siberian State Industrial University.

V. S. Panova – Research Assistant at the Laboratory of Electron Microscopy of Image Processing, Siberian State Industrial University.

V. A. Kuznetsova – Research Management Laboratory Assistant, Siberian State Industrial University.

S. V. Konovalov – Doctor of Technical Sciences, Professor, Vice-Rector for Research and Innovation, Siberian State Industrial University; Professor at the Department of Metal Technology and Aviation Materials Science, Samara National Research University.

I. A. Panchenko – Candidate of Technical Sciences, Head of the Laboratory of Electron Microscopy of Image Processing, Siberian State Industrial University.

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

Статья поступила в редакцию 19.08.2023; одобрена после рецензирования 28.07.2023; принята к публикации 07.09.2023.

The article was received by the editorial board on 19 Aug. 23; approved after reviewing 28 Aug. 23; accepted for publication 07 Sept. 23.