

Молекулярно-динамическое исследование размерного эффекта при $\beta \rightarrow \alpha$ -превращении в нанокристаллах Zr

© Е.Б. Долгушева, В.Ю. Трубицын

Физико-технический институт Уральского отделения Российской академии наук, Ижевск, Россия

E-mail: tvynew@otf.pti.udm.ru

(Поступила в Редакцию 15 января 2009 г.

В окончательной редакции 6 мая 2009 г.)

Используя метод молекулярной динамики с многочастичным потенциалом межатомного взаимодействия, полученным в модели погруженного атома, проведены расчеты стабильности β -фазы в наночастицах циркония кубической формы в зависимости от размера r (r изменяется от 2.5 до 11.5 nm). Показано, что температура T_k , при которой кубический кластер ОЦК-циркония становится структурно-неустойчивым, нелинейно зависит от размера частицы. Кривая $T_k(r)$ имеет ярко выраженный максимум в области $r \approx 4.3\text{--}4.7$ nm. Установлено, что механизм структурного ОЦК-ГПУ-перехода существенно зависит от размера частицы. Для частиц размером от 2.5 до 5 nm существует область температур, при которых в течение длительного времени переход из ОЦК- в ГПУ-фазу остается незавершенным. В этом случае наблюдаются одновременное существование двух фаз и сильная деформация исходной частицы вдоль габитусной плоскости.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (гранты № 07-02-96-18 и 07-02-00973).

PACS: 31.15.xv, 61.46.Df, 63.22.-m, 63.20.D-

1. Введение

В последние годы представляет огромный интерес изучение атомной структуры и свойств малых металлических частиц в связи с проявлением разных по физической природе размерных эффектов. Многочисленные экспериментальные исследования показывают существенное изменение механических, магнитных свойств материалов, их химической активности и фазовой стабильности при переходе от объемных образцов к частицам малого размера [1–3]. Эти изменения связаны с влиянием поверхностных атомов, которые находятся в особых условиях по сравнению с объемными и оказывают большое влияние на свойства нанокристаллов.

Важная роль поверхности при фазовых превращениях подтверждается экспериментальными наблюдениями за мартенситными превращениями в различных материалах. Установлено, что мартенситный переход начинается на поверхности и лишь затем распространяется в глубь образца [4,5]. Влияние поверхностной энергии сказывается и на термодинамических условиях протекания фазовых превращений и их энергетических параметрах. Это приводит к возникновению фаз и структурных состояний, не наблюдаемых в массивных образцах. Исследование структурной стабильности и причин изменения механизмов преобразования структур в наноразмерных объектах имеет огромное фундаментальное значение в современной науке.

Одним из наиболее эффективных методов исследования структурной организации наносистем является метод молекулярной динамики (МД). Этот метод дает уникальную возможность непосредственного анализа

кристаллических структур, изучения закономерностей пространственно-временной эволюции как отдельных атомов, так и всей системы в целом, а также механизмов структурных превращений в нанокластерах при конечных температурах. Результаты МД-моделирования показывают, что мартенситное превращение в идеальной ОЦК-фазе циркония происходит при температуре значительно ниже экспериментальной. Получить разумное согласие с экспериментом удастся, если на начальной стадии сформировать какие-либо дефекты, например дислокации [6]. При моделировании структурных превращений в свободных частицах нет необходимости вводить такие дефекты, так как сама поверхность выступает в роли области, способствующей зарождению новой фазы.

Значительная часть работ по компьютерному моделированию нанокристаллов касается исследования процессов образования наночастиц, влияния термодинамических условий на закономерности их зарождения, формирования и роста определенных кристаллических структур, влияния особенностей потенциалов межатомного взаимодействия на структурные состояния, реализующиеся в процессе образования нанокластеров конкретных материалов [7–10]. Вопрос о существовании размерного эффекта при фазовых превращениях в частицах со свободными поверхностными атомами до сих пор детально не изучен ни экспериментально, ни теоретически. До настоящего времени нет полного понимания процессов, происходящих в нанокристаллах.

В настоящей работе мы приводим результаты молекулярно-динамического исследования размерной и температурной зависимостей стабильности β -фазы, энерге-

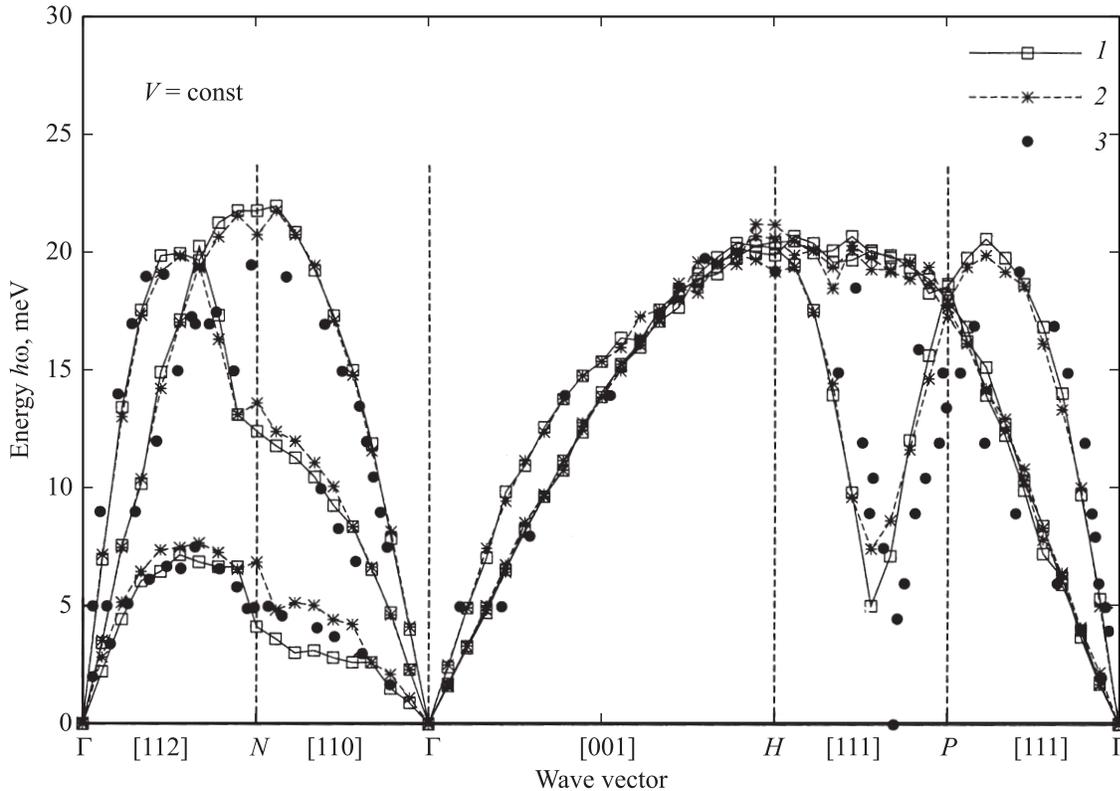


Рис. 1. Фононные дисперсионные кривые вдоль основных направлений зоны Бриллюэна ОЦК-Zr, полученные при температуре $T = 300$ (1) и 900 К (2). 3 — экспериментальные значения частот [17].

тических и структурных характеристик, а также механизма фазового превращения в нанокристаллах циркония кубической формы. Расчеты выполнены в интервале температур 600–900 К для изолированных частиц циркония с числом атомов от $n = 686$ до $n = 65\,536$ (2.5–11.5 nm).

2. Потенциал и фононные спектры

Для описания свойств частиц нанометрового диапазона со свободной поверхностью приближение парного потенциала оказывается недостаточным. Это обстоятельство связано с тем, что электронная плотность вблизи поверхности существенно отличается от электронной плотности в объеме образца. Следовательно, при расчете сил взаимодействия необходимо учитывать зависимость не только от межатомного расстояния, как это делается в парном потенциале, но и от электронной плотности. Наиболее подходящим в этом случае является описание межатомного взаимодействия с помощью многочастичного потенциала, построенного в рамках „модели погруженного атома“ (Embedded-atom-method — EAM) [11]. EAM-метод естественным образом учитывает изменение электронной плотности вблизи свободной поверхности кристалла.

В нашей работе МД-расчеты проводились с использованием многочастичного EAM-потенциала, предложен-

ного в работе [12]. Этот потенциал с хорошей степенью точности описывает значения параметра решеток ОЦК- и ГПУ-фаз циркония, когезионную энергию, упругие постоянные, температуру плавления [13] и другие параметры [12].

Моделирование проводилось с помощью хорошо апробированного пакета XMD [14]. Данный пакет программ позволяет проводить расчеты как в приближении парного потенциала, так и с использованием многочастичного EAM-потенциала с различными типами граничных условий, моделировать дефекты кристаллической структуры, границы раздела сред, двойники.

Известно, что ОЦК–ГПУ-переход в Zr связан со смягчением фононных спектров вдоль направления [110] зоны Бриллюэна. С целью определения пригодности потенциала для моделирования структурных превращений в дополнение к физическим величинам, полученным в работе [12], были проведены расчеты фононных спектров.

Фононные дисперсионные кривые, построенные для четырех направлений зоны Бриллюэна ОЦК-структуры: $[\xi\xi2\xi]$, $[\xi\xi0]$, $[00\xi]$, $[\xi\xi\xi]$, приведены на рис. 1. Дисперсионные кривые определялись из анализа смещений атомов, полученных в результате МД-моделирования с циклическими граничными условиями. Процедура восстановления фононных спектров из МД-расчетов подробно описана в работах [15,16].

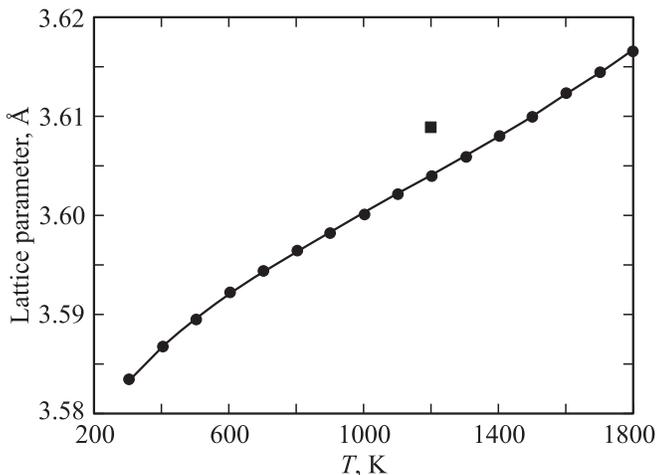


Рис. 2. Температурная зависимость равновесного параметра решетки ОЦК-циркония при циклических граничных условиях. Темным квадратом отмечено экспериментальное значение [18].

На рис. 1 приведены фоновые спектры для кристаллита, содержащего $n = 11664$ атома ($18 \times 18 \times 18$ элементарных ячеек) при двух различных температурах: $T = 300$ и 900 К. Там же представлены экспериментальные результаты [17], полученные из данных по нейтронному рассеянию при атмосферном давлении и температуре 1400 К. Из рисунка видно, что рассчитанные дисперсионные кривые близки к экспериментально наблюдаемым, а поперечные колебания вдоль направления $[110]$ демонстрируют сильную температурную зависимость. Смягчение колебательных мод вдоль этого направления приводит к структурной неустойчивости ОЦК-решетки в нашем расчете при температурах ниже 250 К.

Отметим, что при расчете фоновых спектров учитывалась зависимость параметра решетки от температуры (рис. 2). Равновесные значения параметров решетки при фиксированной температуре определялись в результате усреднения мгновенных значений объемов при постоянном давлении по интервалу времени $t = 50$ ps, взятому после релаксации системы в течение $t = 100$ ps. Полученная нами величина параметра решетки $a = 3.604$ Å при $T = 1200$ К хорошо согласуется с экспериментальным значением $a_{\text{exp}} = 3.609$ Å [18] при этой же температуре.

Совпадение экспериментальных и теоретических фоновых спектров и „правильное“ поведение ангармонических колебательных мод при изменении температуры свидетельствуют о том, что выбранный нами потенциал хорошо воспроизводит не только статические характеристики, но и динамические свойства ОЦК-Zr.

3. Результаты и обсуждение

Для проведения МД-расчетов формировался кубический кристаллит с идеальной ОЦК-структурой и параметром решетки, который соответствовал заданной

температуре (рис. 2). Единичная ОЦК-ячейка была ориентирована вдоль стандартных осей x -(100), y -(010), z -(001). МД-расчеты проводились при свободных граничных условиях. Минимальный по размеру кластер содержал $7 \times 7 \times 7$ элементарных ячеек ($N = 7$) или $n = 686$ атомов. Параметр N обозначает число элементарных ячеек вдоль каждой из осей x , y , z . Размер максимального кластера соответствовал $N = 32$ с числом атомов $n = 65536$. Состояние кластера рассматривалось только при нулевом давлении и постоянной температуре. Чтобы исключить влияние дополнительного разогрева на изменение структуры кластера, заданная температура поддерживалась в очень жестких рамках, колебания по шкале температур составляли не более $1-1.5\%$. Значение температуры вычислялось из мгновенной средней кинетической энергии кластера с помощью стандартного соотношения $\bar{E}_k = 3/2k_B T$. Как обсуждалось в работе [19], такой способ введения температуры возможен для системы, имеющей больше 55 атомов. Интервал времени моделирования составлял не менее 500 ps. Шаг по времени был постоянным и равным $\delta t = 1 \cdot 10^{-15}$ s. После анализа структурного состояния температура изменялась на величину $\Delta T = 33$ К, и вся процедура расчета повторялась. Состояние системы отслеживалось по функции радиального распределения атомов (ФРРА), изменению полной энергии, с помощью визуализации кластера как всего целиком, так и любых выделений плоскостей. Принадлежность каждого атома системы к одной из структур (ОЦК, ГПУ или ГЦК) определялась по его ближайшему окружению. Анализ расчетов моделирования проводился через каждые 10 ps, по результатам которого делался вывод либо о стабильности кластера N -го размера при заданной температуре, либо о наличии в нем структурных превращений.

Полученная зависимость температуры $\beta \rightarrow \alpha$ -фазового перехода от размера нанокластера Zr приведена на рис. 3. Как видно из рисунка, температура стабильности

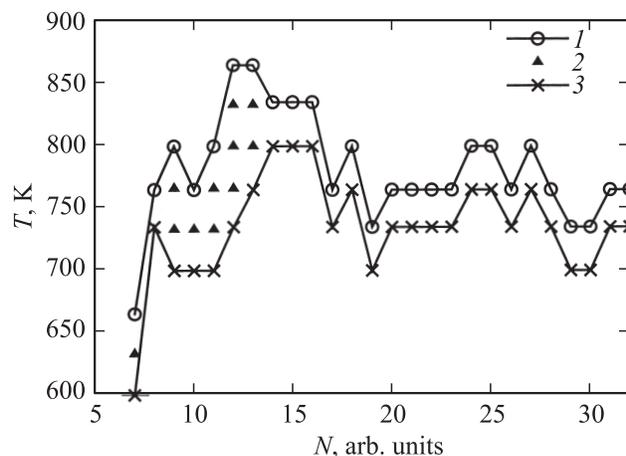


Рис. 3. Зависимость температуры фазового перехода $\beta \rightarrow \alpha$ от размера N нанокластера Zr. 1 — ОЦК, 2 — ОЦК-ГПУ, 3 — ГПУ.

ОЦК-фазы Zr в кластерах кубической формы со свободными границами нелинейно зависят от их размера. На рис. 3 кривой 1 обозначена граница стабильности ОЦК-решетки. При этих и более высоких значениях температуры в наночастицах Zr структурная перестройка не наблюдается, средняя полная энергия также остается неизменной. На рис. 3 кривая 3 отмечает границу, ниже которой за время моделирования 1000 ps наблюдается переход всего кластера из ОЦК- в ГПУ-структуру. Переход сопровождается изменением полной энергии и функции радиального распределения атомов. В области между этими двумя линиями наблюдается стабильная промежуточная конфигурация кластера, соответствующая незавершенному фазовому ОЦК- и ГПУ-переходу (треугольники 2). Конфигурация атомов, соответствующая такому положению, представлена на рис. 4, где показаны проекции трех центральных плоскостей типа $\{001\}$ при $T = 800$ K и $N = 12$. Из рисунка видно, что половина кристалла (нижний правый угол) перешла в ГПУ-фазу, а другая часть (верхний левый угол) находится в ОЦК-фазе. Линией $a-b$ показана граница раздела ОЦК- и ГПУ-фаз. Видно, что решетка деформирована вдоль этой линии. Это промежуточное состояние характеризуется значительной устойчивостью. Даже за время наблюдения $t = 1000$ ps завершение перехода в другой половине кластера так и не произошло. Отметим, что начиная с размера $N = 14$ такое „половинчатое“ состояние кристалла не наблюдается, ОЦК-фаза Zr либо остается стабильной при заданной температуре, либо во всем кристалле завершается структурный переход в ГПУ-фазу. Подобный эффект — существование устойчивой в широком интервале температур промежуточной конфигурации незавершенного фазового $\alpha \rightarrow \gamma$ -превращения, был обнаружен

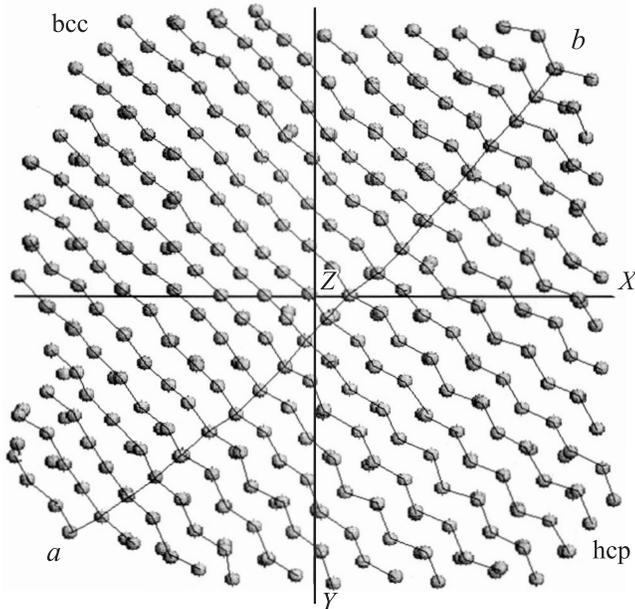


Рис. 4. Проекция трех центральных плоскостей типа $\{001\}$ кластера со свободными границами размером $N = 12$ при $T = 800$ K.

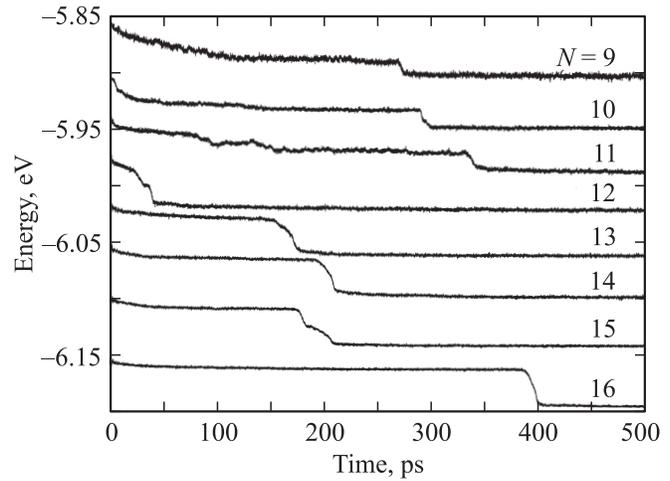


Рис. 5. Полная энергия, приходящаяся на один атом, в зависимости от времени моделирования для кластеров разных размеров N .

и в работе [20] для нанокластеров сплава Fe–Ni с размерами от 1.5 до 3.0 nm.

В настоящее время существует несколько различных точек зрения на механизм $\beta \rightarrow \alpha$ -превращения в цирконии. Так, например, Бюргерсом [21] был предложен сдвиговый механизм, заключающийся в том, что решетка ГПУ образуется из решетки ОЦК с помощью сдвига плоскостей типа $\{112\}$ в направлении $\langle 111 \rangle$. Далее в образующей таким образом искаженной структуре с помощью окончательной подстройки атомов формируется ГПУ-фаза. Другие авторы [22] придерживаются кристаллогеометрического механизма. В нем предполагается, что перестройка β -фазы в решетку α -фазы происходит путем распространения от зародышевой плоскости $\{112\}$ β -фазы локализованных волн смещений рядов атомов $\langle 111 \rangle$ в плоскостях $\{110\}$. Причем, как следует из общей закономерности движения, волны смещений в четных и нечетных плоскостях $\{110\}$ находятся в противофазе.

В наших расчетах по результатам МД-моделирования все рассмотренные кристаллы можно разделить на две группы: „малые“ кластеры с размером $N = 7-11$ и „большие“ — с $N = 12-32$, которые различаются характером протекания структурного превращения. В кристаллах обеих групп фазовый переход сопровождается понижением полной (потенциальной) энергии и проходит в несколько этапов. Особенности структурного превращения в разных группах кластеров можно определить по графикам полной энергии (рис. 5) и изменению функций радиального распределения атомов (рис. 6).

На рис. 5 представлены временные зависимости полной энергии, приходящейся на один атом, при структурном $\beta \rightarrow \alpha$ -превращении (значения температур соответствуют значениям, которые на рис. 3 отмечены крестиками на кривой 3 для частиц соответствующего размера N). Для более удобного рассмотрения графики энергий по оси ординат разнесены друг от друга.

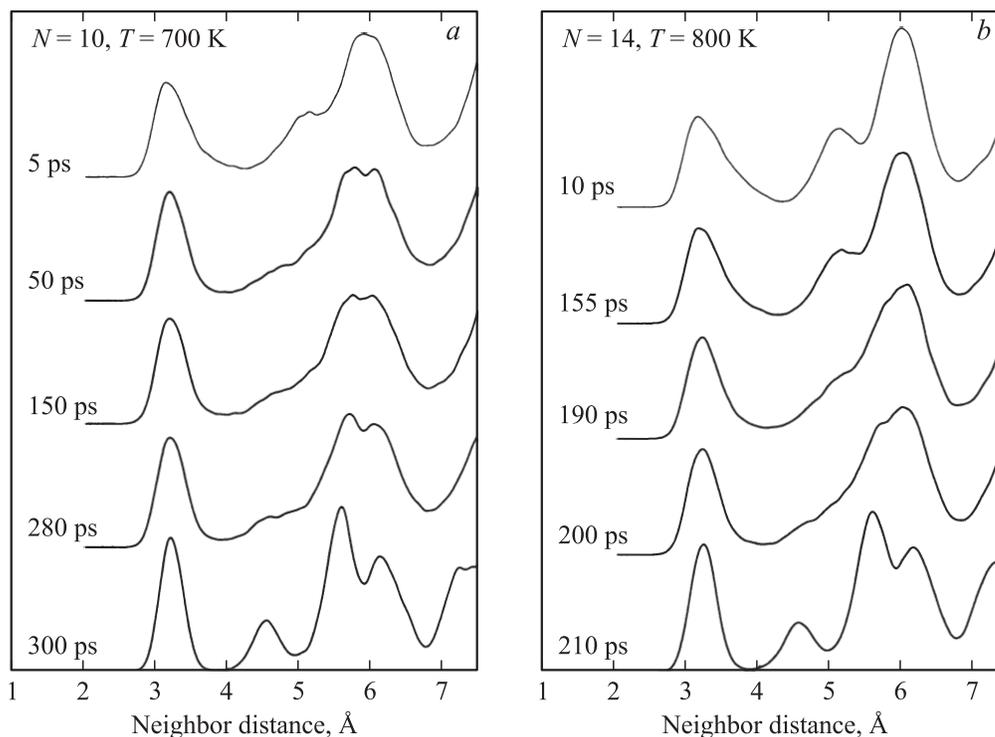


Рис. 6. Изменение функции радиального распределения атомов при фазовом превращении. *a* — в „малых“ кластерах, *b* — в кластерах „большого“ размера.

Общие закономерности процесса $\beta \rightarrow \alpha$ -структурного превращения частиц следующие: для кластеров „малого“ размера характерно резкое понижение энергии на начальном этапе (рис. 5), вызванное процессом релаксации как во всем объеме (изменение межатомных расстояний), так и смещением поверхностных атомов, поскольку система пытается сформировать структуру с наименьшей поверхностной энергией (шар). В „малых“ частицах содержится относительно большее число поверхностных атомов, которые перемещаются из своих первоначальных положений, особенно это касается реберных и вершинных атомов. Поэтому, чем меньше размер кластера, тем существенней изменение его формы и тем на большую величину изменяется значение полной энергии на начальном этапе. Такое сильное изменение полной энергии на начальном этапе моделирования характерно для кластеров с параметром $N < 12$. ФРРА на этом интервале времени соответствует ОЦК-решетке, т.е. атомы, уходя из своих первоначальных положений, располагаются на гранях куба в положениях, соответствующих ОЦК-решетке.

Следующий этап характеризуется появлением зародышей новой фазы на поверхности кластера, во всех случаях новая фаза возникала первоначально в вершинах куба, поскольку именно вершинные атомы имеют наибольшую амплитуду смещений. Характер движения атомов в процессе формирования ГПУ-фазы близок к предложенной в работе [22] схеме перестройки. Смещения атомов в рядах $\langle 111 \rangle$ направлены в противофазе в четных и нечетных рядах ОЦК-фазы в плоскостях

типа $\{110\}$. Эти смещения соответствуют поперечному T_{1N} -фонону в ОЦК-решетке, ответственному за β - α -переход. Однако авторы работы [22] утверждают, что физически правильные ориентационные соотношения между α - и β -фазами должны записываться в виде

$$\{112\}_{\beta} \parallel \{10\bar{1}0\}_{\alpha}; \quad \langle 111 \rangle_{\beta} \parallel \langle 11\bar{2}0 \rangle_{\alpha},$$

а не как принято в литературе

$$\{110\}_{\beta} \parallel \{0001\}_{\alpha}; \quad \langle 111 \rangle_{\beta} \parallel \langle 11\bar{2}0 \rangle_{\alpha}.$$

Мы же в своих МД-расчетах наблюдаем окончательно сформированную ГПУ-решетку после структурного перехода с ориентационными соотношениями, которые соответствуют именно общепринятым, т.е. нормаль к плоскости типа $\{110\}$ -фазы соответствует оси c в α -фазе циркония. Влияние размера кластеров на взаимную ориентацию между β - и α -фазами в настоящей работе не выявлено, т.е. для всех размеров кластеров межфазные ориентационные соотношения сохранялись неизменными.

Как показали наши расчеты, в „малых“ частицах зарождение новой фазы происходит не в одной области, а, как правило, в двух, иногда даже трех вершинах куба. Через некоторое время объем этих областей увеличивается, атомы перестраиваются в ГПУ-решетку, волны смещений распространяются в направлении $\langle 111 \rangle$ из вершин куба. Но ни одна из волн смещений не распространяется сразу через весь кристалл. Когда одна из волн смещений доходит до середины кластера,

она останавливается, частица при этом деформируется и остается в таком напряженном состоянии (рис. 4) длительное время (200–400 ps). По-видимому, деформация кристалла приводит к торможению структурного перехода в „малых“ кластерах. ФРРА на этом этапе имеет характерный вид, приведенный на рис. 6, *a* при $t = 50$ –280 ps. Полная энергия при переходе от этапа релаксации по второму этапу изменяется плавно, без резких скачков и принимает промежуточное значение между энергиями ОЦК- и ГПУ-решеток. Второй этап заканчивается в тот момент, когда волна смещений переходит габитусную плоскость (плоскость, разделяющую две фазы: ОЦК и ГПУ) и распространяется через другую половину кристалла. Этот момент отражается на графике полной энергии резким скачком. Переход оставшейся части кристалла в ГПУ-структуру происходит очень быстро, что как раз и характерно для мартенситного перехода. Далее завершается некоторая подстройка атомов к равновесным положениям ГПУ-решетки, особенно это касается атомов, расположенных ближе к поверхности. Таким же образом происходит β – α -превращение и в кристаллах размером $N = 7, 8$, они не приведены на рисунке лишь потому, что завершение перехода в них происходит намного дальше по времени (через 700–800 ps от начала наблюдения).

Отметим, что при увеличении кластера с $N = 11$ к $N = 12$ (рис. 5) происходит изменение характера протекания структурного превращения, которое выражается в значительном сокращении времени существования промежуточной фазы (до ~ 5 –20 ps) и изменении морфологии ГПУ-фазы, полученной после завершения перехода. Такие изменения могут быть связаны с появлением новых длинноволновых колебаний, необходимых для завершения перестройки решетки. Появление дополнительных колебаний делает ОЦК-решетку менее устойчивой и приводит к повышению температуры перехода при $12 \leq N \leq 14$ (рис. 3).

В „больших“ кластерах этап релаксации происходит без значительных перемещений атомов; следовательно, полная энергия при этом изменяется незначительно. На втором этапе в этих кластерах зародыши α -фазы возникают и исчезают то в одной, то в другой вершине куба, но распространения волны смещений вглубь (т.е. до центра кластера) не происходит. ОЦК-фаза сохраняется довольно длительное время (100–400 ps). Например, для кластера с $N = 14$ ФРРА соответствует ОЦК-решетке примерно до 190 ps от начала наблюдения (рис. 6, *b*). Второй этап заканчивается самопроизвольным структурным превращением в ГПУ-фазу. В кластерах этого размера волна смещений проходит через весь кристалл за малый промежуток времени (10–20 ps), практически не задерживаясь в середине кластера. Как показал анализ, в таких частицах один из образующихся зародышей α -фазы быстро распространяется вглубь. Соответствующая волна смещений, подавляя все остальные, проходит через весь кристалл. На третьем этапе в кластерах „большого“ размера наблюдаются небольшие колебания

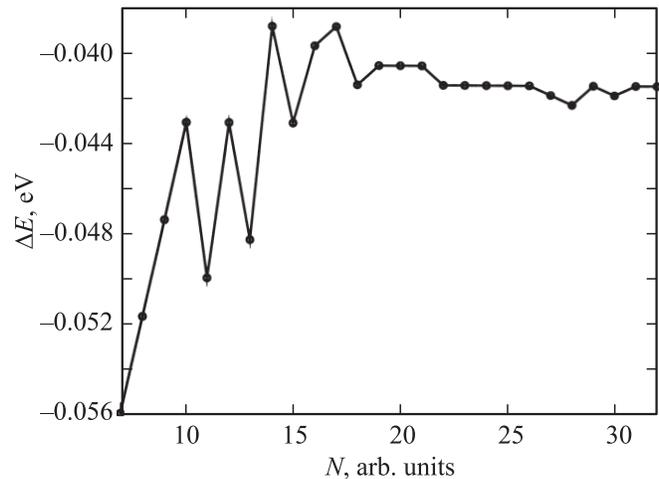


Рис. 7. Изменение полной энергии при фазовом превращении в зависимости от размера кластера N .

реберных атомов куба вдоль направления прошедшей волны смещений. ФРРА соответствует ГПУ-решетке.

На рис. 6 показано, как происходит типичное изменение функции радиального распределения атомов при структурной перестройке кластера обеих групп. На каждом из рисунков (*a* — для „малых“ кластеров, *b* — для „больших“ кластеров) параметр N указывает на размер кластера, приведены температуры фазового превращения, слева от каждой ФРРА обозначено время наблюдения. Из рисунков видно, что в первом случае (*a*) переход идет через промежуточную фазу, которая остается стабильной в течение примерно 200 ps (от 50 до 250 ps), а во втором случае (*b*) ОЦК-решетка остается стабильной в течение 190 ps, а структурное преобразование протекает за небольшой отрезок времени всего 10 ps.

По графикам рис. 5 можно определить величину изменения полной энергии структурного превращения $\Delta E_{\text{bcc} \rightarrow \text{hcp}}$, равную разности энергий равновесных состояний β - и α -фаз. Полученные таким образом результаты вычислений приведены на рис. 7, из которого видно, что при „малых“ N изменение энергии больше, а при увеличении N значение разности энергий стремится к величине $\Delta E_{\text{bcc} \rightarrow \text{hcp}} = 0.0413$ eV. Это хорошо согласуется с экспериментальным значением изменения энтальпии $\Delta H_{\text{exp}} = 0.040$ eV при α – β -переходе в цирконии [15].

4. Заключение

Таким образом, на основе проведенных компьютерных исследований можно сделать вывод о существенном влиянии размера кластера на энергетические характеристики фазового $\beta \rightarrow \alpha$ -перехода, а также на механизм этого перехода. Расчеты структурной стабильности наночастиц ОЦК-Zr показывают, что наименее устойчивыми являются частицы с размером 4.3–4.7 nm ($N = 12, 13$).

Изменение механизма протекания фазового структурного перехода также связано с граничным размером

4.3 nm ($N = 12$). В случае размера кластера от 2.5 до 4.3 nm фазовый переход идет через промежуточную конфигурацию, которая стабильна в течение длительного времени, и процесс превращения происходит в два этапа. В кластерах размером более 4.3 nm фазовый переход идет быстро во всем объеме образца, что характерно для мартенситных переходов в обычных массивных системах.

В нанокластерах размером от 2.5 до 5 nm обнаружена промежуточная конфигурация незавершенного фазового перехода, которая остается стабильной в широком интервале температур и представляет собой сосуществование двух фаз: ОЦК и ГПУ. При этом сама частица находится в сильно деформированном состоянии по линии габитусной плоскости.

Список литературы

- [1] F. Baletto, R. Ferrando. *Rev. Mod. Phys.* **77**, 371 (2005).
- [2] Г.А. Малыгин. *ФТТ* **50**, 1480 (2008).
- [3] А.И. Гусев. *Нанокристаллические материалы: методы получения и свойства*. УРО РАН, Екатеринбург (1998). 198 с.
- [4] В.А. Лободюк. *ФММ* **99**, 29 (2005).
- [5] Э.Л. Нагаев. *УФН* **162**, 50 (1992).
- [6] Ю.Н. Горностырев, М.И. Кацнельсон, А.Р. Кузнецов, А.В. Трефелов. *Письма в ЖЭТФ* **70**, 376 (1999).
- [7] Ю.Н. Горностырев, И.Н. Карькин, М.И. Кацнельсон, А.В. Трефелов. *ФММ* **96**, 19 (2003).
- [8] P. Jensen. *Rev. Mod. Phys.* **71**, 1695 (1999).
- [9] А.Т. Косилов, А.А. Маливанчук, Е.А. Михайлов. *ФТТ* **50**, 1338 (2008).
- [10] Ю.Я. Гафнер, С.Л. Гафнер, П. Энтель. *ФТТ* **46**, 1287 (2004).
- [11] M.S. Daw, M.I. Baskes. *Phys. Rev. B* **29**, 6443 (1984).
- [12] M.I. Mendeleev, G.J. Ackland. *Phil. Mag. Lett.* **87**, 349 (2007).
- [13] J.R. Morris, C.Z. Wang, K.M. Ho, C.T. Chan. *Phys. Rev. B* **49**, 3109 (1994).
- [14] J. Rifkin. *XMD Molecular Dynamics Program*. University of Connecticut, Center for Materials Simulation, Storrs, CT (2002).
- [15] J.M. Dickey, A. Paskin. *Phys. Rev.* **188**, 1407 (1969).
- [16] V.Yu. Trubitsin, E.B. Dolgusheva. *Phys. Rev. B* **76**, 024308 (2007).
- [17] A. Heiming, W. Petry, J. Trampenau, M. Alba, C. Herzig, H.R. Schober, G. Vogl. *Phys. Rev. B* **43**, 10948 (1991).
- [18] Е.Ю. Тонков. *Фазовые диаграммы элементов при высоком давлении*. Наука, М. (1979). С. 103.
- [19] A. Rytkonev, S. Valkealahti, M. Manninen. *J. Chem. Phys.* **108**, 5826 (1998).
- [20] Л.Е. Карькина, И.Н. Карькин, Ю.Н. Горностырев. *ФММ* **101**, 146 (2006).
- [21] W.G. Burgers. *Physica* **1**, 561 (1934).
- [22] А.В. Добромислов, Н.И. Талуц. *ФММ* **67**, 1138 (1989).