

Механическая и динамическая стабильность комплектного и нестехиометрического $3C-Si_xC_y$ из *ab initio* расчетов

© И.Р. Шейн

Институт химии твердого тела УрО РАН,
Екатеринбург, Россия

E-mail: shein@ihim.uran.ru

(Поступила в Редакцию 12 апреля 2018 г.)

Ab initio методами зонной теории для комплектной и нестехиометрических кубических фаз $3C-Si_xC_y$ ($x, y = 1.0-0.75$) определены энергии образования вакансий по подрешеткам углерода и кремния, независимые константы упругости, модули всестороннего сжатия, сдвига и Юнга, коэффициенты анизотропии. В формализме теории возмущения электронной плотности (DFPT) для этих фаз получены фоновые дисперсионные зависимости (для комплектной фазы приведено сравнение с экспериментом). Показано, что при переходе от $3C-SiC_{0.875}$ к $3C-SiC_{0.75}$ механические характеристики фаз становятся сильно анизотропными. Из анализа фоновых дисперсионных кривых установлено, что фазы $3C-SiC_{0.875}$ и $3C-SiC_{0.75}$, в отличие от комплектной $3C-SiC$, при $T = 0$ К являются динамически нестабильными.

Результаты, представленные в этой статье, были получены благодаря финансовой поддержке Проекта УрО РАН № 18-10-3-32.

DOI: 10.21883/FTT.2018.10.46525.090

1. Введение

Одной из актуальных проблем безопасности ядерных реакторов, в которых в качестве теплоносителя используется вода, связана с эксплуатацией оболочек твэлов, изготавливаемых из цирконий сплавов с добавкой до 12% ниобия. Данные сплавы обладают достаточной теплопроводностью и механической прочностью при нормальных условиях эксплуатации. Но аварийное повышение температуры оболочки твэлов, при контакте с водяным паром, приводит к образованию парциркулониевой реакции при 900°C и окислению при 1200°C с выделением водорода. Для того чтобы исключить реакцию образования водорода, необходимо использовать материалы, которые бы сделали невозможность образования взрывоопасной газовой смеси (обладали низкой кинетикой окисления). Эти материалы должны иметь высокую температуру плавления, достаточную механическую прочность и малое сечение захвата тепловых нейтронов. В последнее время большое внимание стали уделять композиционным материалам на основе карбида кремния [1–4]. Оболочки из SiC обладают на 25% меньшим значением сечения захвата тепловых нейтронов, чем сплавы из Zr–Nb. Кроме того, во-первых, SiC коррозионно устойчив в воде при повышенных температурах [5,6], а во-вторых, конструкционные материалы в ядерных реакторах на основе SiC значительно меньше подвержены радиационному набуханию по сравнению с традиционными Zr–Nb сплавами [7], что позволяет значительно повысить глубину выгорания ядерного топлива и существенно снизить эксплуатационные издержки на атомных станциях.

Но основной эксплуатационной проблемой керамического материала, в том числе на основе карбида кремния, являются его недостаточные механические характеристики, и прежде всего — хрупкость. Поэтому одним из главных вопросов является устранение хрупкости SiC-матрицы путем увеличения вязкости, прочности при растяжении, изгибе, кручении, циклической механической и температурной нагрузки, что обычно достигается путем создания керамических композитов.

Необходимо так же отметить, что различные полиморфы SiC интенсивно исследуются и используются как в качестве детекторов всевозможных типов ионизирующего излучения, так и матриц для создания тонкопленочных оптических материалов [8,9].

В последние годы в научной периодике появилось большое количество статей, как экспериментальных, так и теоретических, посвященных изучению:

- физико-химических свойств различных фаз: $2H-$, $4H-$, $3C-$, $6H-$, $8H-$, $15R-SiC$, находящихся под действием различных типов облучения (см., например, [10–14]);

- влиянием вакансий, атомов и кластеров гелия на свойства SiC, атомов различных металлов (Mg, Ag, Ca, Pd и др.) [15–18];

- влиянию облучения на свойства кристаллического SiC как рабочего вещества для детекторов ионизирующего излучения (см., например, обзоры [8,9] и др.).

Обзор научных статей, посвященных изучению свойств различных полиморфов кристаллических SiC, показывает, что наибольшее число работ относится к кубической фазе $3C-SiC$. Но исследований по изучению влияния собственных дефектов в фазе $3C-SiC$ на механические характеристики и динамическую устойчивость в мировой периодической печати практически

нет. И результаты, представленные в настоящей статье, восполняют данный пробел.

2. Методики расчетов

Для определения методами *ab initio* зонной теории параметров кристаллической структуры (постоянные кристаллической решетки и позиции атомов), энергии образования собственных дефектов по подрешеткам углерода и кремния, механических характеристик (независимые константы упругости, модули сжатия, сдвига и Юнга, коэффициенты анизотропии и проч.) нами был использован пакет VASP [19] с применением формализма проекционных присоединенных волн (PAW), обменно корреляционным функционалом в виде градиентной аппроксимации (PBE [20]) и энергии *cutoff*, равной 500 eV. Для определения динамической стабильности и фононных мод комплектного и нестехиометрического 3C-SiC использовалась программа Quantum Espresso [21] с использованием нормосохраняющих (NC) псевдопотенциалов в формализме теории возмущения электронной плотности (DFPT).

3. Механические свойства и межатомные взаимодействия

На начальном этапе методом *ab initio* зонной теории (пакет VASP) были получены оптимальные постоянные кристаллических решеток, позиции атомов, энергии образования комплектных и нестехиометрических $C-Si_xC_y$ фаз ($x, y = 0.75-0.984$) и энергии образования точечных дефектов (вакансий) по обеим подрешеткам.

Кристаллическая структура кубического 3C-SiC имеет пространственную группу $F\bar{4}3m$, Расчеты энергии образования дефектов по подрешеткам углерода и кремния были проведены по формуле

$$E_{\text{form}} = E_{\text{tot}}(\text{Si}_x\text{C}_y) - E_{\text{tot}}(\text{SiC}) - x \cdot E_{\text{tot}}(\text{C}^g) - y \cdot E_{\text{tot}}(\text{Si}), \quad (1)$$

где E_{form} — энергия образования вакансии по соответствующей, $E_{\text{tot}}(\text{Si}_x\text{C}_y)$ — энергия кристалла с дефектами, x и y — концентрации атомов, $E_{\text{tot}}(\text{SiC})$ — энергия кристалла, $E_{\text{tot}}(\text{C}^g)$ — энергия, приходящаяся на один атом углерода (в данном случае — графита как наиболее стабильной фазы), $E_{\text{tot}}(\text{Si})$ — энергия приходящаяся на один атом кремния (кристаллическая структура α -Si). В нашем случае, при $T = 0$ и $P = 0$, значения энергий $E_{\text{tot}}(\text{C}^g)$ и $E_{\text{tot}}(\text{Si})$ по сути являются химическими потенциалами графита и α -Si соответственно. Энергии образования вакансий по обеим подрешеткам для фаз 3C-SiC (в сравнении с литературными данными) приведены в табл. 1. Для расчета энергий образования вакансий

Таблица 1. Энергии образования вакансий (в eV) по подрешетке углерода (V_C) и подрешетке кремния (V_{Si}) в eV. (В скобках приведены результаты других авторов.)

Фаза	$E_{\text{form}}(V_C)$	$E_{\text{form}}(V_{Si})$
3C-SiC	3.96 (4.02 ^a , 3.63 ^b , 3.74 ^c , 4.2 ^d , 4.3 ^e)	8.52 (8.88 ^a , 7.48 ^b , 8.38 ^c , 8.1 ^d , 8.45 ^e)

Примечание. a — [22], b — [23], c — [24], d — [25], e — [26].

и коэффициентов упругости выбирались формальные ячейки Si_3C_4 , Si_4C_3 (составы $\text{Si}_{0.75}\text{C}$ и $\text{SiC}_{0.75}$ соответственно), Si_7C_8 и Si_8C_7 (составы $\text{Si}_{0.875}\text{C}$ и $\text{SiC}_{0.875}$ соответственно), $\text{Si}_{31}\text{C}_{32}$, $\text{Si}_{32}\text{C}_{31}$ (составы $\text{Si}_{0.969}\text{C}$ и $\text{SiC}_{0.969}$ соответственно), $\text{Si}_{63}\text{C}_{64}$ и $\text{Si}_{64}\text{C}_{63}$ (составы $\text{Si}_{0.984}\text{C}$ и $\text{SiC}_{0.984}$) в кубической группе симметрии.

Из табл. 1 видно, что полученные нами результаты хорошо соответствуют данным других авторов. Эти энергии образования вакансий имеют положительное значение, то есть комплектная 3C-SiC фаза энергетически более устойчивой, чем фазы с вакансиями. Так же необходимо отметить, что энергия образования вакансии по подрешетке углерода более чем в 2 раза меньше, чем энергия образования вакансии по подрешетке кремния. Это указывает на тот факт, что вероятность образования вакансий по подрешетке атомов C будет значительно выше, чем по подрешетке атомов Si. И особый интерес представляет нестехиометрия именно по углеродной подрешетке.

На следующем этапе были получены данные по механическим свойствам нестехиометрических (имеющих вакансии по обеим подрешеткам) фаз 3C-SiC. Наши расчеты показали, что для составов $\text{Si}_{0.969}\text{C}$, $\text{SiC}_{0.969}$, $\text{Si}_{0.984}\text{C}$ и $\text{SiC}_{0.984}$ независимые константы упругости (C_{11} , C_{12} и C_{44}) очень незначительно отличаются от констант упругости для стехиометрической фазы 3C-SiC и поэтому результаты по механическим свойствам для фаз $\text{Si}_{0.969}\text{C}$, $\text{SiC}_{0.969}$, $\text{Si}_{0.984}\text{C}$ и $\text{SiC}_{0.984}$ здесь не приводятся.

Данные расчетов модулей C_{11} , C_{12} и C_{44} для фаз 3C-Si_xC_y ($x, y = 1; 0.875; 0.75$) и равновесные (оптимизированные) параметры кристаллических решеток в зависимости от концентрации вакансий представлены на рис. 1. Анализ полученных результатов позволяет говорить (критерий Коши) о механической стабильности этих нестехиометрических фаз.

Из рис. 1 видно, что увеличение концентрации вакансий приводит к неравномерному уменьшению значений независимых модулей упругости C_{11} , C_{12} и C_{44} . Так, если вакансии по обеим подрешеткам оказывают слабое влияние на коэффициент C_{12} , то для коэффициентов C_{11} и C_{44} влияние нестехиометрии более существенно. При этом при большой степени нестехиометрии по подрешетке кремния (25% вакансий) кубический 3C-Si_{0.75}C находится на границе механической устойчивости (C_{44} близко к 0).

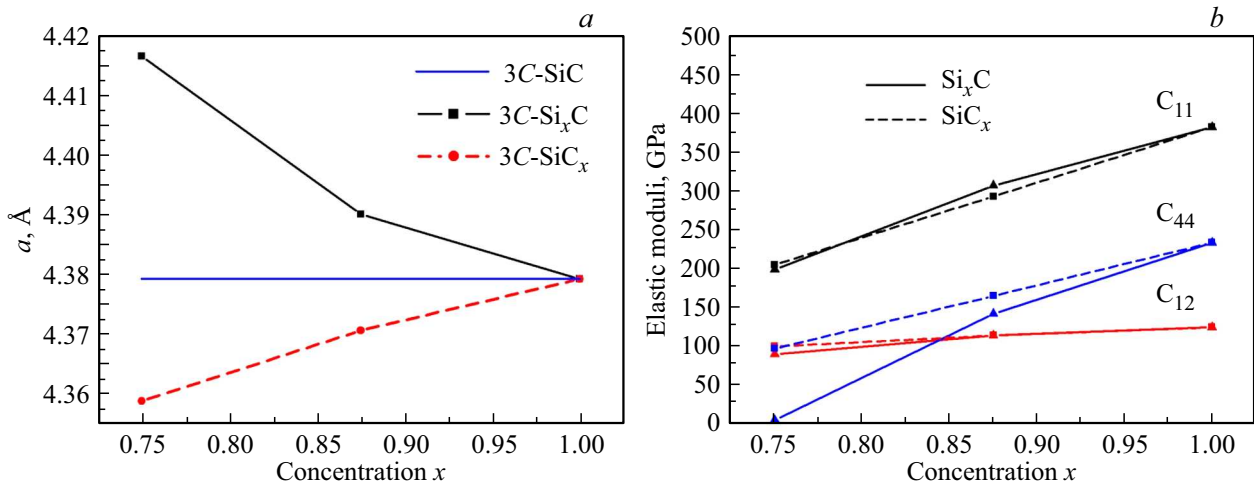


Рис. 1. Зависимость постоянных кристаллической решетки (а) и модулей упругости (b) для 3C-Si_xC_y в зависимости от концентрации вакансий.

Оценка механических анизотропных свойств может быть произведена через эффективные модули упругости в приближениях Фойгта и Реусса [27,28]. Модули упругости в приближении Хилла есть среднее арифметическое от модулей Фойгта и Реусса [29]. Для количественной оценки упругой анизотропии общепринятым является использование т.н. „универсального“ индекса анизотропии [30]: $A^U = 5G_V/G_R + B_V/B_R - 6$. Здесь B_V и B_R — модули сжатия по Фойгту и Реуссу соответственно, G_V и G_R — модули сдвига по Фойгту и Реуссу соответственно. Для изотропных кристаллов $A^U = 0$ и отклонения от нуля A^U определяет степень анизотропных свойств.

Из результатов, представленных в табл. 2, видно, что образование вакансий по обеим подрешеткам кремния и углерода приводит к незначительной анизотропии механических свойств, кроме фазы 3C-SiC_{0.75}. Для этой фазы анизотропия механических свойств проявляется достаточно сильно. Данный эффект можно так же проиллюстрировать на пространственных распределениях модулей Юнга (рис. 2).

Из рис. 2 видно, что пространственное распределение модулей Юнга слабо меняется от комплектного 3C-SiC до нестехиометрического 3C-SiC_{0.875}. Но в случае 3C-SiC_{0.75} модуль Юнга становится сильно анизотропным.

Особый интерес представляет факт, что в нестехиометрической (по подрешетке кремния) фазе 3C-SiC появление вакансий приводит к снижению констант упругости C_{11} , C_{12} и C_{44} , но эти системы остаются механически стабильными. При этом происходит изменение параметров кристаллической решетки (рис. 1). Из рис. 1 видно, что увеличение концентрации вакансий по атомам С приводит к уменьшению параметра кристаллической решетки (константа a) и, наоборот, при увеличении вакансий по атомам Si данный параметр растет. Для объяснения данного факта были проведены дополнительные расчеты и построены карты валентной электронной плотности для составов 3C-SiC, 3C-SiC_{0.875} и 3C-SiC_{0.75} (рис. 3).

Как видно из рис. 3, образование вакансий по подрешетке углерода не приводит к значительным перестрой-

Таблица 2. Модули сжатия, сдвига (по Фойгту, Реуссу и Хиллу) и Юнга, сжимаемость, соотношения Пуассона и „универсальный“ индекс анизотропии для фаз 3C-Si_xC_y

Величина	3C-SiC	3C-SiC _{0.875}	3C-SiC _{0.75}	3C-Si _{0.875} C	3C-Si _{0.75} C
Модуль сжатия (по Фойгту), GPa	211.2	179.3	127.3	174.7	136.0
Модуль сжатия (по Реуссу), GPa	211.2	179.3	127.3	174.7	136.0
Модуль сжатия (по Хиллу), GPa	211.2	179.3	127.3	174.7	136.0
Сжимаемость, GPa ⁻¹	0.00473	0.00558	0.00785	0.005735	0.00735
Модуль сдвига (по Фойгту), GPa	192.5	124.4	25.6	135.4	79.8
Модуль сдвига (по Реуссу), GPa	176.8	119.9	9.8	123.7	72.8
Модуль сдвига (по Хиллу), GPa	184.7	122.2	17.7	129.5	76.3
Модуль Юнга, GPa	429.0	298.6	50.7	311.6	192.8
Соотношение Пуассона	0.162	0.223	0.434	0.203	0.264
„Универсальный“ индекс анизотропии	0.09	0.04	1.62	0.09	0.10

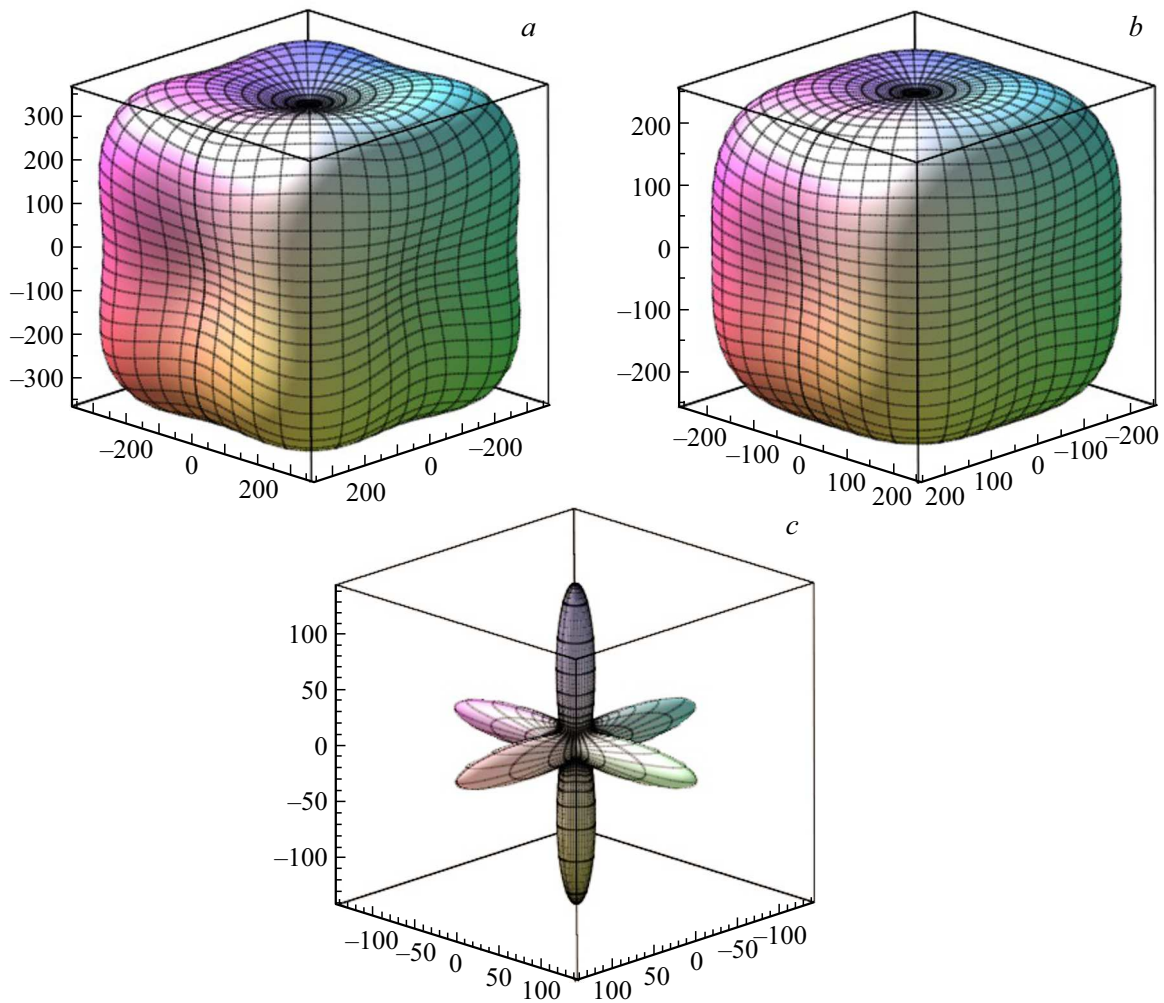


Рис. 2. Пространственное распределение модулей Юнга (в GPa) для $3C-SiC_x$. (a) — $3C-SiC$, (b) — $3C-SiC_{0.875}$ и (c) — $3C-SiC_{0.75}$.

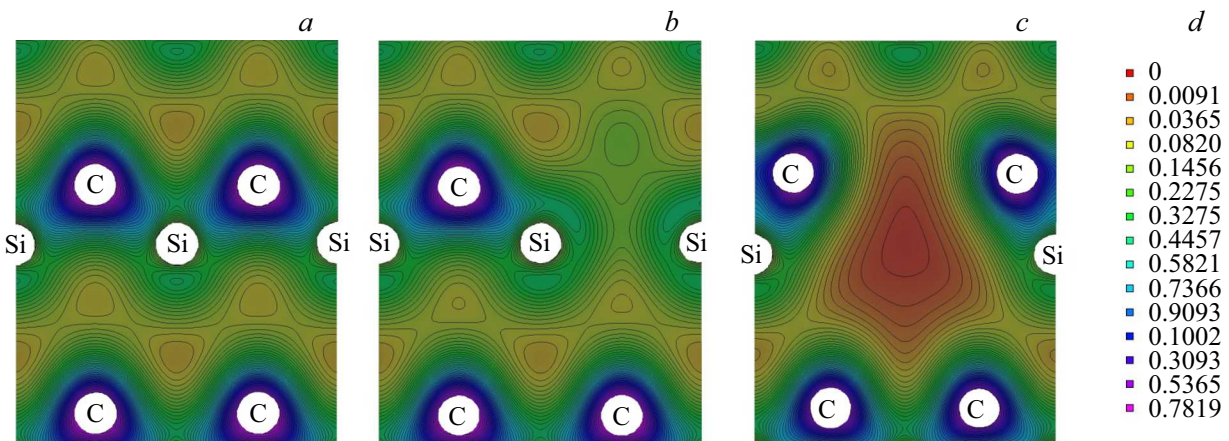


Рис. 3. Карты валентной электронной плотности для составов $3C-SiC$ (a), $3C-SiC_{0.75}$ (b) и $3C-Si_{0.75}C$ (c). (d) — цвета масштаба концентрации валентных электронов в $e/\text{Å}^3$.

кам электронной плотности между атомами Si и C около вакансии (рис. 3, b), но в случае появления нестехиометрии по подрешетке кремния изменения электронных плотностей весьма существенны (рис. 3, c). При этом

расстояние между атомами углерода около вакансии по подрешетке кремния (рис. 3, c) увеличивается по сравнению с полным составом (рис. 3, a). Это можно так же проиллюстрировать данным из табл. 3.

Таблица 3. Расстояние между атомами (в Å) в комплектной фазе 3C-SiC и около соответствующей вакансии в 3C-SiC_{0.75} и 3C-Si_{0.75}C. (В скобках приведены экспериментальные значения [31])

Фаза	C–C	Si–C	Si–Si
3C-SiC	3.097 (3.082)	1.896 (1.888)	3.097 (3.082)
3C-SiC _{0.75}	3.082	1.901	3.125
3C-Si _{0.75} C	3.137	1.861	3.123

Данный эффект и приводит к возрастанию постоянной кристаллической решетки в случае нестехиометрии в 3C-SiC по кремнию.

4. Динамические свойства

Для определения устойчивости кристаллической решетки необходимо проводить оценки не только фазовой и механической стабильности, но и дать оценку динамической стабильности, то есть провести расчеты фононного спектра. Критерием устойчивости кристаллической решетки под действием внешних нагрузок являются условия действительности всех частот нормальных колебаний фононов для всех волновых векторов **k** внутри зоны Бриллюэна: $\omega(\mathbf{k}) > 0$, что является критерием динамической стабильности кристаллической решетки. Поэтому информация, получаемая из анализа фононных частот, крайне важна для практической применимости тех или иных кристаллических соединений. Нами, при помощи программы Quantum Espresso в формализме NC псевдопотенциалов [21], были рассчитаны фононные спектры комплектного 3C-SiC и нестехиометрических соединений — 3C-SiC_{0.875} и 3C-SiC_{0.75}.

Если для комплектного 3C-SiC отсутствуют отрицательные фононные моды (рис. 4, *a*), то для нестехиометрических по углеродной подрешетке 3C-SiC_{0.875} и 3C-SiC_{0.75} наблюдаются отрицательные моды (рис. 4, *b* и 4, *c* соответственно). Данные факты свидетельствуют о том, что системы 3C-SiC_{0.875} и 3C-SiC_{0.75} являются динамически неустойчивыми и их существование в кубической симметрии является метастабильным. Фононные зонные структуры для комплектного 3C-SiC содержат 6 ветвей (3 акустических и 3 оптических) — рис. 4, *a*. Три высокочастотные оптические моды отделены от акустических энергетическим промежутком, при этом максимальная фононная частота соответствует точке Г (мода LO) и равна 965 см⁻¹ (экспериментальное значение — 971 см⁻¹ [32]). Наибольший вклад в оптические моды вносят колебания атомов углерода (как следствие их меньшей массы по сравнению с атомами кремния). И, наоборот, наибольший вклад в акустические моды вносят колебания атомов кремния. Сравнивая фононные моды для нестехиометрических 3C-SiC_{0.875}

и 3C-SiC_{0.75} (рис. 4) видно, что для первой фазы на участке X–W–X–K фононные моды имеют значительно меньшую дисперсию по сравнению со второй фазой.

Необходимо отметить, что полученные данные относятся к температуре 0 К. Кроме того, *ab initio* расчеты показывают, что для температуры, равной 0 К, некоторые чистые 3*d*-, 4*d*-металлы также имеют отрицательные фононные моды, в то время как эксперименты и теоретические расчеты утверждают, что эти же чистые металлы не имеют отрицательных фононных мод (то есть динами-

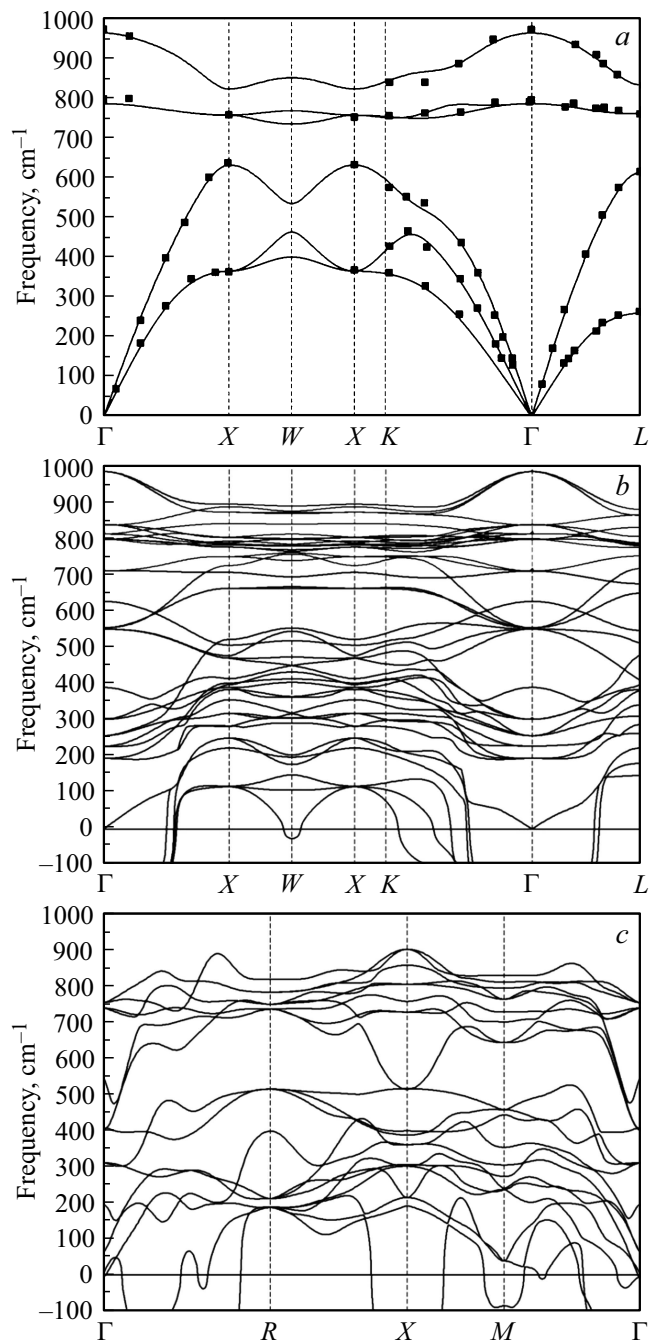


Рис. 4. Фононная зонная структура комплектного 3C-SiC (*a*, точки — экспериментальные данные [32]) и нестехиометрических 3C-SiC_x (*x* = 0.875 (*b*) и *x* = 0.75 (*c*)).

чески устойчивы) при более высоких температурах (см. обзор [33]). Поэтому существование стабильных нестехиометрических по углеродной подрешетке кристаллических структур 3C-SiC при температурах, отличных от 0 К, требует дальнейшего изучения.

5. Заключение

Методами DFT в приближении градиентной аппроксимации обменно-корреляционного функционала (GGA–PBE) для комплектной и нестехиометрических кубических фаз 3C-Si_xC_y определены энергии образования вакансий по подрешеткам углерода и кремния, независимые константы упругости, модули всестороннего сжатия, сдвига и Юнга, коэффициенты анизотропии. Показано, что при переходе от 3C-SiC_{0.875} к 3C-SiC_{0.75} механические характеристики фаз становятся сильно анизотропными. В формализме теории возмущения электронной плотности (DFPT) для этих фаз получены фоновые дисперсионные зависимости. Из анализа фоновых дисперсионных кривых установлено, что фазы 3C-SiC_{0.875} и 3C-SiC_{0.75}, в отличие от комплектной 3C-SiC, являются динамически нестабильными при $T = 0$ К.

Список литературы

- [1] В.С. Войнецкая, А.Г. Шепелев, Т.А. Понаморенко. Вопросы атомной науки и техники. Харьков, 2, 160 (2007).
- [2] С.С. Солнцев, Д.В. Гращенко, С.А. Евдокимов. Стекло и керамика *1*, 25 (2014).
- [3] S. Novak, G. Drazic, K. Konig, A. Ivekovic. *J. Nucl. Mater.* **399**, 2/3, 167 (2010).
- [4] K. Yoshida, Y. Aoyagi, H. Akimoto, T. Yano, M. Kotani, T. Ogasawara. *Comp. Sci. Tech.* **17**, 1665 (2012).
- [5] A. Ivekovic, S. Novak, G. Drazic, D. Blagoeva, V. de Gonzalez. *J. Eur. Ceram. Soc.* **33**, 1577 (2013).
- [6] Карбид кремния/ Под ред. Г. Хениша и Р. Роя. Пер. с англ. Мир, М. (1972), 386 с.
- [7] А.И. Кондрик, Г.П. Ковтун, О.А. Даценко, А.П. Щербань. Современные материалы для термоядерной энергетики ННЦ ХФТИ, Харьков. (2008). 88 с.
- [8] А.А. Лебедев, А.И. Иванов, Н.Б. Строкан. *ФТП* **38**, 129 (2004).
- [9] Е.В. Калинина. *ФТП* **41**, 769 (2007).
- [10] T. Yano, Y. You, K. Kanazawa, T. Kobayashi, M. Imai, K. Yoshida, S. Yamazaki. *J. Nucl. Mater.* **455**, 445 (2014).
- [11] T. Liao, G. Roma. *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B* **327**, 52 (2014).
- [12] Y. Katoh, K. Ozawa, C. Shih, T. Nozawa, R. Shinavski, A. Hasegawa, L. Snead. *J. Nucl. Mater.* **448**, 448 (2014).
- [13] Y. Watanabe, K. Morishita, A. Kohyama, H. Heinisch, F. Gao. *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B* **267**, 3223 (2009).
- [14] H. Zang, T. Yang, D. Guo, J. Xi, C. He, Z. Wang, T. Shen, L. Pang, C. Yao, P. Zhang. *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B* **307**, 558 (2013).
- [15] S. Hu, W. Setyawan, R. van Ginhoven, W. Jiang, C. Henager Jr., R. Kurtz. *J. Nucl. Mater.* **448**, 121 (2014).
- [16] F. Gao, W. Weber, H. Xiao, X. Zu. *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B* **267**, 2995 (2009).
- [17] C. Zhang, Y. Song, Y. Yang, C. Zhou, L. Wei, H. Ma. *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B* **326**, 345 (2014).
- [18] J. Rabone, E. Lypez-Honorato. *J. Nucl. Mater.* **458**, 56 (2015).
- [19] G. Kresse, J. Hafner. *Phys. Rev. B* **17**, 558 (1993); G. Kresse, J. Furthmuller. *Phys. Rev. B* **54**, 11169 (1996); G. Kresse, D. Joubert, *Phys. Rev. B* **59**, 1758 (1999).
- [20] J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof. *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3865 (1996).
- [21] P. Giannozzi, S. Baroni, N. Bonini, M. Calandra, R. Car, C. Cavazzoni, D. Ceresoli, G.L. Chiarotti, M. Cococcioni, I. Dabo, A.D. Corso, S. de Gironcoli, S. Fabris, G. Fratesi, R. Gebauer, U. Gerstmann, C. Gougoussis, A. Kokalj, M. Lazzeri, L. Martin-Samos, N. Marzari, F. Mauri, R. Mazzarello, S. Paolini, A. Pasquarello, L. Paulatto, C. Sbraccia, S. Scandolo, G. Sclauzer, A.P. Seitsonen, A. Smogunov, P. Umari, R.M. Wentzcovitch. *J. Phys. Condens. Matter* **21**, 395502 (2009).
- [22] F. Gao, W.J. Weber, H.Y. Xiao, X.T. Zu. *Nucl. Instr. Meth. B* **267**, 2995 (2009).
- [23] G. Lucas, L. Pizzagalli. *Nucl. Instr. Meth. B* **255**, 124 (2007).
- [24] M. Salvador, J.M. Perlado, A. Mattoni, F. Bernardini, L. Colombo. *J. Nucl. Matter.* **329**, 1219 (2004).
- [25] A. Gali, P. Dek, E. Rauls, N.T. Son, I.G. Ivanov, F.H.C. Carlsson, E. Janzn, W.J. Choyke. *Phys. Rev. B* **67**, 155203-7 (2003).
- [26] R.H. Telling, M.I. Heggie. *Phil. Mag.* **87**, 4797 (2007).
- [27] W. Voigt. *Lehrbuch der Kristallphysik.* Teubner, Leipzig (1928). P. 716–761.
- [28] A. Reuss. *Z. Angew. Math. Mech.* **9**, 49 (1929).
- [29] R. Hill. *Proc. Phys. Soc. London. A* **65**, 349 (1952).
- [30] S.I. Ranganathan, M. Ostojca-Starzewski. *Phys. Rev. Lett.* **101**, 055504 (2008).
- [31] J.M. Bind. *Mater. Res. Bull.* **13**, 91 (1978).
- [32] J. Serrano, J. Stremper, M. Cardona, M. Schwoerer-Böhning, H. Requardt, M. Lorenzen, B. Stojetz, P. Pavone, W.J. Choyke. *Appl. Phys. Lett.* **80**, 4360 (2002).
- [33] G. Grimvall, B. Magyari-Köpe, V. Ozolins, K.A. Persson. *Rev. Mod. Phys.* **84**, 945 (2012).

Редактор Ю.Э. Кутаев