

06  
**Изменение свойств алмаза из <sup>13</sup>C при изотермическом сжатии**

© М.Н. Магомедов

Институт проблем геотермии Дагестанского научного центра РАН,  
 367030 Махачкала, Россия  
 E-mail: mahmag4@mail.ru

Поступило в Редакцию 9 апреля 2018 г.  
 В окончательной редакции 28 октября 2018 г.  
 Принято к публикации 20 декабря 2018 г.

Исходя из экспериментальных данных по отношению рамановских частот в изотопно-различных алмазах, определены параметры парного потенциала межатомного взаимодействия для алмаза из <sup>13</sup>C. На основе полученных параметров рассчитаны как уравнение состояния, так и барические зависимости решеточных свойств алмаза из <sup>13</sup>C при температуре 300 К. Были рассчитаны: температура Дебая, первый, второй и третий параметры Грюнайзена, модуль упругости, коэффициент теплового расширения, теплоемкость, поверхностная энергия, а также производные этих функций по давлению вдоль изотермы 300 К. Полученные зависимости сопоставлены с данными для алмаза с природным изотопным составом <sup>12,01</sup>C.

DOI: 10.21883/JTF.2019.06.47635.2293

**Введение**

Известно, что алмаз с природным содержанием стабильных изотопов углерода (<sup>nat</sup>C) состоит из <sup>12</sup>C (его в природном алмазе 98.93%) и из <sup>13</sup>C (его содержится 1.07%) [1]. В последнее время были разработаны методы получения моноизотопных алмазов [1,2]. Как указано в [1], это открывает перспективы создания на основе алмазов с разной концентрацией изотопов <sup>12</sup>C и <sup>13</sup>C терагерцевых источников с разными частотами генерации. Кроме этого, рамановское рассеяние в алмазе является одним из наиболее надежных датчиков давления в мегабарном диапазоне. Оказалось, что для алмаза из изотопа <sup>13</sup>C рамановская линия имеет более низкую частоту, чем частота алмазной наковальни природного изотопного состава. Это дает возможность использовать моноизотопные алмазы в качестве точных датчиков давления [2].

Однако изменение свойств алмаза из <sup>13</sup>C при изотермическом всестороннем (гидростатическом) сжатии исследовано крайне мало. Более того, неизвестно, как изменяются барические зависимости решеточных свойств алмаза при переходе от алмаза из <sup>nat</sup>C к алмазу из <sup>13</sup>C. Поэтому в настоящей работе нами получены уравнение состояния и барические зависимости решеточных свойств для алмаза с массой атома  $m = 13$  a.m.u. при температуре  $T = 300$  К и давлениях от нуля до  $P = 10$  Mbar (1 TPa). Полученные зависимости были сопоставлены со свойствами алмаза из <sup>nat</sup>C = <sup>12,01</sup>C. При расчетах использовался метод, предложенный в работе [3], где межатомное взаимодействие в алмазе из <sup>nat</sup>C описывается парным потенциалом Ми-Леннарда-Джонса следующего вида:

$$\varphi(r) = \frac{D}{(b-a)} \left[ a \left( \frac{r_0}{r} \right)^b - b \left( \frac{r_0}{r} \right)^a \right]. \quad (1)$$

Здесь  $D$  и  $r_0$  — глубина и координата минимума потенциала,  $b > a > 1$  — численные параметры. Для алмаза с природным изотопным составом (т.е. при  $m = 12.01$  a.m.u.) в работе [3] было получено (здесь  $k_B$  — постоянная Больцмана):

$$r_0 = 0.1545 \text{ nm}, \quad D/k_B = 97821.72 \text{ K},$$

$$a = 2.05, \quad b = 3.79. \quad (2)$$

Используя потенциал (1) с параметрами из (2), нами в [3] были рассчитаны уравнение состояния и барические зависимости решеточных свойств для алмаза из <sup>nat</sup>C = <sup>12,01</sup>C, и было получено хорошее согласие с экспериментальными данными. Поэтому мы используем метод из [3] для расчета свойств алмаза из <sup>13</sup>C. Но для этого необходимо определить, каковы параметры потенциала (1) для алмаза из <sup>13</sup>C.

Известно, что при переходе от алмаза из <sup>12,01</sup>C к алмазу из <sup>13</sup>C расстояние между центрами ближайших атомов ( $c = [6k_p V / (\pi N_A)]^{1/3}$ ) уменьшается [1,4–6], а модуль упругости ( $B = -[\partial P / \partial \ln(V)]_T$ ) возрастает [2,4,6,7]:

$$c^* = \frac{c(^{13}\text{C})}{c(^{12,01}\text{C})} = 1 - \Delta_c, \quad B^* = \frac{B(^{13}\text{C})}{B(^{12,01}\text{C})} = 1 + \Delta_B. \quad (3)$$

Здесь  $V$  — молярный объем кристалла,  $N_A$  — число Авогадро,  $k_p$  — коэффициент упаковки структуры кристалла,  $\Delta_c$  и  $\Delta_B$  — относительные изотопные смещения для параметра решетки и для модуля упругости в алмазе.

Параметры потенциала (1) при переходе от <sup>12,01</sup>C к <sup>13</sup>C также изменяются в соответствии с (3). Так как у алмаза энергия химической связи много больше энергии „нулевых колебаний“ атомов, степени потенциала (1) с хорошей точностью определяются из соотношений [4]:

$$b = 6\gamma_0 - 2, \quad a = 3[B'(P)_0 - 2] - b, \quad (4)$$

где  $\gamma = -[\partial \ln(\Theta) / \partial \ln(V)]_T$  — первый параметр Грюнайзена,  $B'(P) = (\partial B / \partial P)_T$  — производная изотер-

мического модуля упругости по давлению. Индекс „0“ в (4) означает, что данная величина определена при нулевых значениях температуры и давления:  $T = 0\text{ К}$  и  $P = 0$ . Как показали экспериментальные исследования в [2] и наши расчеты, значения  $\gamma_0$  и  $B'(P)_0$  практически не меняются при переходе от алмаза из  $^{12.01}\text{C}$  к алмазу из  $^{13}\text{C}$ . Поэтому степени потенциала (1)  $a$  и  $b$  можно считать независимыми от массы изотопа.

Глубина парного потенциала (1) для упругих (обратимых) деформаций алмаза определяется из модуля упругости и молярного объема при  $T = 0\text{ К}$  и  $P = 0$  [4,8–10]:

$$D_b = \frac{18B_0V_0}{k_n ab N_A} = D_s + \Delta D, \quad (5)$$

где  $k_n$  — первое координационное число (для алмаза  $k_n = 4$  и  $k_p = 0.3401$ ),  $D_s$  — глубина парного межатомного потенциала для пластической (необратимой) деформации алмаза, которая определяется из энергии сублимации:  $D_b/D_s = 8.43\text{ eV}/3.68\text{ eV} = 2.29$ .

По результатам экспериментов, проведенных при температурах ниже температуры Дебая ( $\Theta$ ), были получены следующие оценки:  $\Delta_C = 1.5 \cdot 10^{-4}$  [1,5] и  $\Delta_B = 1.5 \cdot 10^{-3}$  [6]. Поэтому, исходя из (3) и (5), в работах [4,8–10] для относительного изменения параметров потенциала (1) было принято

$$r_0^* = \frac{r_0(^{13}\text{C})}{r_0(^{12.01}\text{C})} = 1 - \Delta_C = 0.99985, \quad (6)$$

$$D^* = \frac{D(^{13}\text{C})}{D(^{12.01}\text{C})} = (1 + \Delta_B)(1 - \Delta_C)^3 = 1.00105. \quad (7)$$

Однако, как было указано в [2], точность измерения модуля упругости алмаза не превышает 3%, что не позволяет надежно определить не только величину  $\Delta_B$ , но даже ее знак. В связи с этим в настоящей работе для оценки  $\Delta_B$  были использованы результаты измерений отношения рамановских частот в изотопно-чистых алмазах, которые были проведены в [2].

## Оценка глубины межатомного потенциала в алмазе из $^{13}\text{C}$

Как было показано в [4], температура Дебая ( $\Theta$ ) при  $T = 0\text{ К}$  и  $P = 0$  (т.е. при  $c \approx r_0$ ) имеет следующую изотопную зависимость (здесь учтено, что у алмаза энергия парной межатомной связи много больше энергии „нулевых колебаний“ атомов):

$$\Theta_0^* = \frac{\Theta_0(^{13}\text{C})}{\Theta_0(^{12}\text{C})} \cong \left[ \frac{D^*}{(r_0^*)^2 m^*} \right]^{1/2} = \left[ \frac{(1 + \Delta_B)(1 + \Delta_C)}{(1 + \Delta_m)} \right]^{1/2}, \quad (8)$$

где  $m^* = 1 + \Delta_m$ , т.е. для алмаза  $\Delta_m = (13/12) - 1 = 0.0833$ .

Как было указано в [4], величина  $\Delta_B$  должна лежать в интервале

$$3\Delta_C \leq \Delta_B < \Delta_m + \Delta_C.$$

Тогда для алмаза при использовании  $\Delta_C = 1.5 \cdot 10^{-4}$  получим условие

$$4.5 \cdot 10^{-4} \leq \Delta_B < 0.08345. \quad (9)$$

Из (9) видно, что величина  $\Delta_B$  не может быть отрицательной, поскольку энергия активационного процесса (образования вакансии или самодиффузии) не может уменьшаться при увеличении массы изотопа в области  $T \gg \Theta_0$  при  $P = 0$  [4].

В работе [2] для отношения рамановских частот в изотопно-чистых алмазах из  $^{12}\text{C}$  и из  $^{13}\text{C}$  при  $P = 0$  было получено:  $\nu_0(^{12}\text{C})/\nu_0(^{13}\text{C}) = 1.039$ , что заметно отличается от классического значения:  $\nu_0(^{12}\text{C})/\nu_0(^{13}\text{C}) = (m^*)^{1/2} = (13/12)^{1/2} = 1.040833$ . Полагая, что соблюдается равенство:  $\Theta_0(^{12}\text{C})/\Theta_0(^{13}\text{C}) = \nu_0(^{12}\text{C})/\nu_0(^{13}\text{C})$ , из формулы (8) при  $\Delta_C = 1.5 \cdot 10^{-4}$  получим  $\Delta_B = 3.68 \cdot 10^{-3}$ . Это укладывается в интервал (9), но в 2.453 раза больше величины из [6], которая была использована при получении (7). Тогда, используя  $\Delta_C = 1.5 \cdot 10^{-4}$  и  $\Delta_B = 3.68 \cdot 10^{-3}$ , вместо (7) получим

$$D^* = \frac{D(^{13}\text{C})}{D(^{12.01}\text{C})} = (1 + \Delta_B)(1 - \Delta_C)^3 = 1.00323. \quad (10)$$

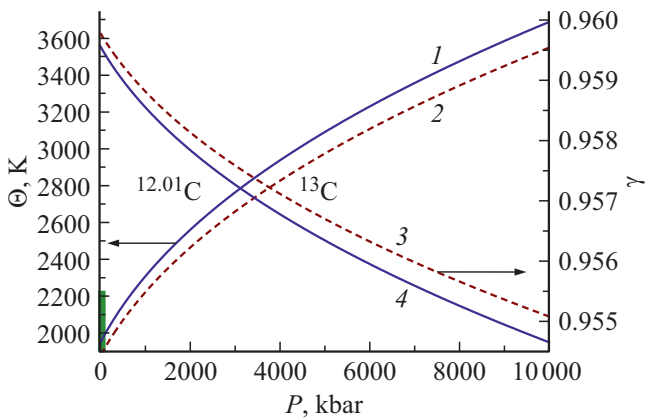
Не вдаваясь в обсуждение величины  $\Delta_B$ , мы используем (6) и (10) для изучения как направления смещения, так и относительной величины этого смещения для различных барических свойств алмаза при вариации изотопного состава.

## Результаты расчетов при $T = 300\text{ К}$

В соответствии с (6) и (10) параметры парного межатомного потенциала (1) для алмаза из  $^{13}\text{C}$  примут вид

$$r_0 = 0.15448\text{ nm}, \quad D/k_B = 98137.68\text{ K}, \quad a = 2.05, \quad b = 3.79. \quad (11)$$

Используя метод, представленный в работе [3], мы рассчитали следующие свойства алмаза из  $^{12.01}\text{C}$  и из  $^{13}\text{C}$ :  $P(V, T)$  — уравнение состояния,  $\Theta$  — температура Дебая и  $\Theta'(P) = (\partial\Theta/\partial P)_T$  — производная  $\Theta$  по давлению вдоль изотермы, первый ( $\gamma = -[\partial \ln(\Theta)/\partial \ln(V)]_T$ ), второй ( $q = [\partial \ln(\gamma)/\partial \ln(V)]_T$ ) и третий ( $z = -[\partial \ln(q)/\partial \ln(V)]_T$ ) параметры Грюнайзена,  $B = -[\partial P/\partial \ln(V)]_T$  — изотермический модуль упругости и  $B'(P) = (\partial B/\partial P)_T$ ,  $\alpha_p = [\partial \ln(V)/\partial T]_P$  — коэффициент теплового объемного расширения и  $\alpha'_p(P) = (\partial \alpha_p/\partial P)_T$ ,  $C_v = \alpha_p \cdot B \cdot V/\gamma$  и  $C_p = C_v(1 + \gamma \cdot \alpha_p \cdot T)$  — изохорная и изобарная теплоемкости, их производные по давлению:  $C'_v(P) = (\partial C_v/\partial P)_T$  и  $C'_p(P) = (\partial C_p/\partial P)_T$ , произведения:  $\alpha_p B = (\partial P/\partial T)_V$ ,  $\sigma$  — удельная (на единицу площади) поверхностная энергия грани (100), ее производные как по температуре  $\sigma'(T) = (\partial \sigma/\partial T)_V$ , так и по давлению  $\sigma'(P) = (\partial \sigma/\partial P)_T$ .



**Рис. 1.** Барическая зависимость температуры Дебая (возрастающие кривые 1 и 2, левая шкала) и первого параметра Грюнайзена (убывающие кривые 3 и 4, правая шкала) для алмаза из  $^{12.01}\text{C}$  (сплошные линии 1 и 4) и из  $^{13}\text{C}$  (штриховые линии 2 и 3).

Расчеты, выполненные при температуре  $T = 300\text{ K}$  для давлений от нуля до  $P = 10\text{ Mbar}$  (1 ТПа), показали следующее:

1. Зависимость  $P(V)$  для алмаза из  $^{13}\text{C}$  лежит чуть ниже, чем для алмаза из  $^{12.01}\text{C}$ . Сравнение данной зависимости с экспериментальными оценками для алмаза из  $^{12.01}\text{C}$  было проведено нами в работе [4], поэтому здесь мы этого не делали. Расчеты показали, что при малых сжатиях (при  $V = 3.4\text{ cm}^3/\text{mol}$ ) смещение изотермы равно  $\Delta P = P(^{12.01}\text{C}) - P(^{13}\text{C}) = 3.6\text{ kbar}$ . Это хорошо согласуется со значением, экспериментально полученным в [11] при малых сжатиях и  $T = 300\text{ K}$ :  $\Delta P = 2.7 \pm 0.8 = 1.9\text{--}3.5\text{ kbar}$ . Однако при уменьшении объема величина  $\Delta P$  уменьшается. При  $V = 2.5\text{ cm}^3/\text{mol}$  было получено  $\Delta P = 0.3\text{ kbar}$ . Таким образом, в линейном приближении для зависимости  $\Delta P(P)$  можно принять

$$\begin{aligned} \Delta P / [\text{kbar}] &= P(^{12.01}\text{C}) - P(^{13}\text{C}) \\ &= 3.6 - 13.285 \cdot 10^{-4} P / [\text{kbar}]. \end{aligned}$$

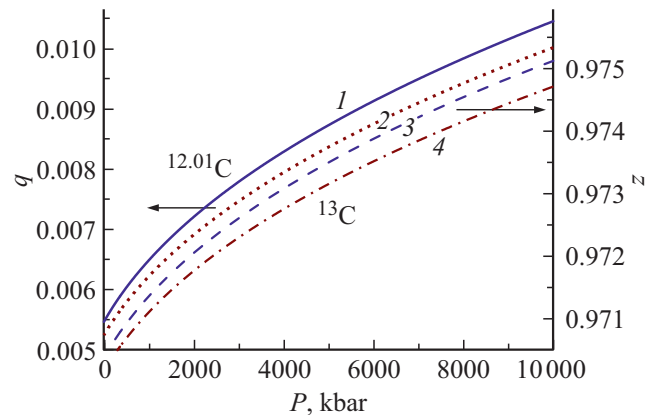
2. Зависимости:  $\Theta(P)$ ,  $q(P)$ ,  $z(P)$  возрастают с давлением, причем для алмаза из  $^{13}\text{C}$  данные зависимости лежат ниже, чем для алмаза из  $^{12.01}\text{C}$ . Это показано на рис. 1 и 2. Вертикальной линией у левой шкалы рис. 1 показана область разброса экспериментальных оценок температуры Дебая для алмаза из  $^{12}\text{C}$  при  $P = 0$ : 1860–2239 K [3]. В работе К.С. Насс с соавт. для алмаза из  $^{13}\text{C}$  при  $P = 0$  также было получено возрастание температуры Дебая до 2114 K (при  $\Theta(^{12.01}\text{C}) = 1860\text{ K}$ ) [6,12]. Экспериментальных оценок  $q$  и  $z$  в литературе нет даже для алмаза из  $^{12.01}\text{C}$  при  $P = 0$ . Поэтому в расчетах часто полагают  $q = 0$  [2,13].

3. Зависимости  $\gamma(P)$ ,  $B'(P)$ ,  $\alpha_p(P)$ ,  $C_v(P)$ ,  $C_p(P)$  и  $\alpha_p(P) \cdot B(P)$  убывают с давлением, причем для алмаза из  $^{13}\text{C}$  данные зависимости лежат выше, чем для алмаза

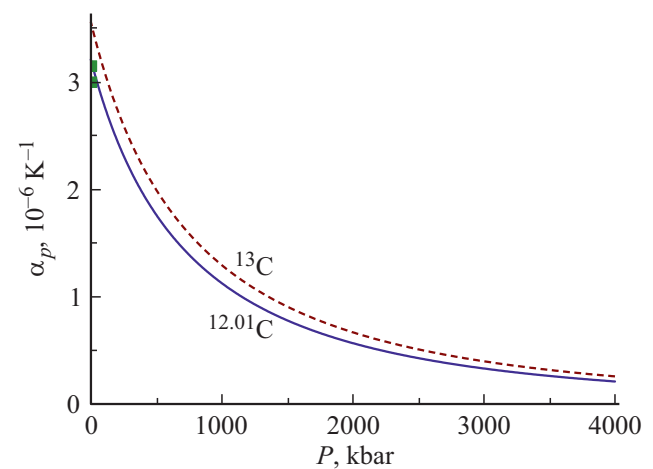
из  $^{12.01}\text{C}$ . Это показано на рис. 1, 3–5. Экспериментальные оценки первого параметра Грюнайзена при  $P = 0$  лежат в интервале  $\gamma = 0.965 \pm 0.005 = 0.97 - 0.96$  [13]. Отметим, что изотопные зависимости для  $\gamma(P)$  и  $B'(P)$  очень слабые, что обосновывает сделанное здесь допущение о независимости параметров потенциала (1)  $a$  и  $b$  от массы изотопа. Например, при  $P = 0$  получено  $B'(P) = 3.94783$  (для  $^{13}\text{C}$ ) и 3.94754 (для  $^{12.01}\text{C}$ ), т. е.  $\Delta B' = 3 \cdot 10^{-4}$ ; при  $P = 10\,000\text{ kbar}$  получено  $B'(P) = 2.8557$  (для  $^{13}\text{C}$ ) и 2.8548 (для  $^{12.01}\text{C}$ ), т. е.  $\Delta B' = 9 \cdot 10^{-4}$ .

На рис. 3 около вертикальной оси сплошными квадратами показаны области разброса экспериментальных данных, полученных для природного алмаза при  $T = 300\text{ K}$  и  $P = 0$ :  $\alpha_p(0, 300\text{ K}) / [10^{-6}\text{ K}^{-1}] = 3\text{--}3.15$  [3].

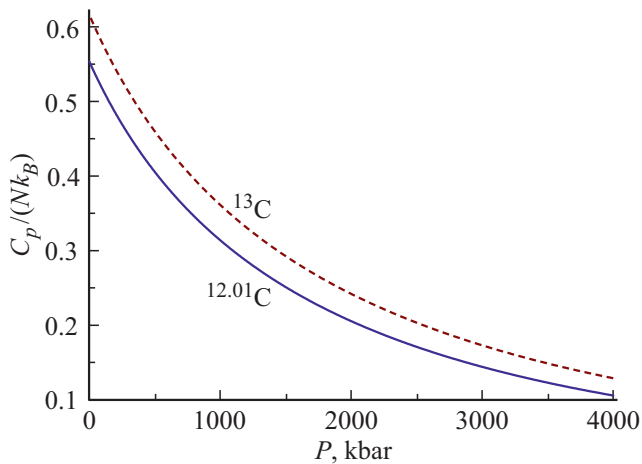
Из рис. 4 видно, что при 300 K барическая зависимость теплоемкости (изохорной и изобарной) для алмаза



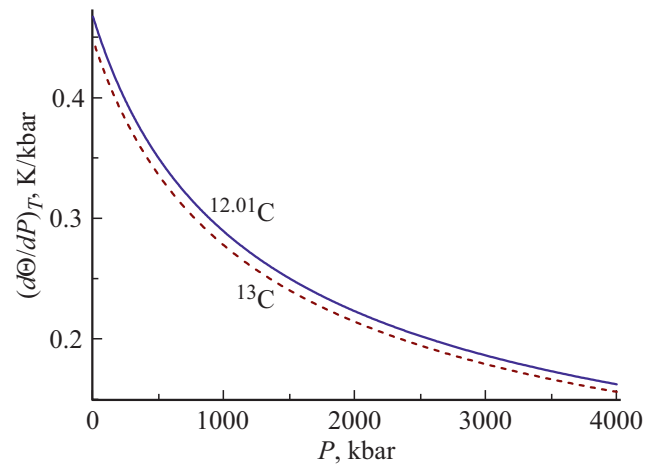
**Рис. 2.** Барическая зависимость второго (сплошная 1 и пунктирная 2 верхние кривые, левая шкала) и третьего (штриховая 3 и штрихпунктирная 4 линии, правая шкала) параметров Грюнайзена для алмаза из  $^{12.01}\text{C}$  (сплошная 1 и штриховая 3 линии) и из  $^{13}\text{C}$  (пунктирная 2 и штрихпунктирная 4 линии).



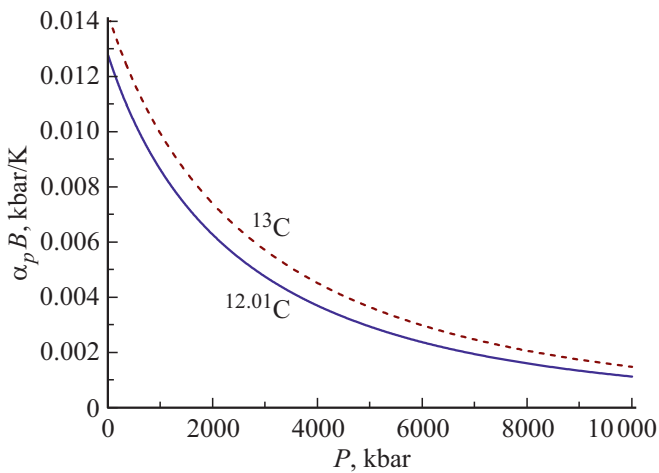
**Рис. 3.** Барическая зависимость коэффициента теплового расширения для алмаза из  $^{12.01}\text{C}$  (сплошная линия) и из  $^{13}\text{C}$  (штриховая) при  $T = 300\text{ K}$ .



**Рис. 4.** Барическая зависимость изохорной и изобарной теплоемкости (эти зависимости при  $T = 300\text{ К}$  сливаются) для алмаза из  $^{12.01}\text{C}$  (сплошная линия) и из  $^{13}\text{C}$  (штриховая линия).



**Рис. 6.** Барическая зависимость производной температуры Дебая по давлению для алмаза из  $^{12.01}\text{C}$  (сплошная линия) и из  $^{13}\text{C}$  (штриховая линия) при  $T = 300\text{ К}$ .



**Рис. 5.** Барическая зависимость произведения  $\alpha_p \cdot B$  для алмаза из  $^{12.01}\text{C}$  (нижняя сплошная линия) и из  $^{13}\text{C}$  (верхняя штриховая линия) при  $T = 300\text{ К}$ .

из  $^{13}\text{C}$  заметно больше, чем для алмаза из  $^{12.01}\text{C}$ . Это обусловлено тем, что  $\Theta \gg 300\text{ К}$ , а также уменьшением как температуры Дебая, так и давления при переходе от алмаза  $^{12.01}\text{C}$  к алмазу  $^{13}\text{C}$ .

На рис. 5 показана барическая зависимость произведения коэффициента теплового расширения на модуль упругости, которое определяет другие параметры системы:  $\alpha_p \cdot B = (\partial P / \partial T)_V = (\partial S / \partial V)_T$ , где  $S$  — энтропия системы.

Из рис. 5 видно, что при больших сжатиях прирост давления при изохорическом нагреве существенно уменьшается.

4. Зависимость  $B(P)$  возрастает с давлением, как это было показано в [3]. Для алмаза из  $^{13}\text{C}$  данная зависимость лежит выше (при данном  $P$ ), чем для алмаза из  $^{12.01}\text{C}$ , причем эта разница возрастает с ростом давления. При  $P = 0$  получено  $\Delta B = B(^{13}\text{C}) - B(^{12.01}\text{C}) =$

$= 4017 - 4000 = 17\text{ kbar}$ , а при  $P = 10\,000\text{ kbar}$  получено  $\Delta B = 34950 - 34920 = 30\text{ kbar}$ . Поэтому в линейном приближении для зависимости  $\Delta B(P)$  можно принять

$$\Delta B / [\text{kbar}] = 17 + 1.3 \cdot 10^{-3} P / [\text{kbar}].$$

Таким образом, получается  $\Delta B = [B(^{13}\text{C}) - B(^{12.01}\text{C})] / B(^{12.01}\text{C}) = 4.25 \cdot 10^{-3}$  (при  $P = 0$ ) —  $0.86 \cdot 10^{-3}$  (при  $P = 10\text{ Mbar}$ ). Значение  $\Delta B(P = 0)$  согласуется с известными из литературы оценками, приведенными в обзоре [2]  $\Delta B(P = 0) = (5 - 170) \cdot 10^{-3}$ .

5. Зависимость  $\Theta'(P)$  убывает с давлением, причем для алмаза из  $^{13}\text{C}$  данная зависимость лежит ниже, чем для алмаза из  $^{12.01}\text{C}$ , как это показано на рис. 6.

6. Функции  $\alpha'_p(P)$ ,  $C'_v(P)$  и  $C'_p(P)$  лежат в отрицательной области, и их абсолютные значения убывают с давлением, как это и было показано в [3]. Изотопной зависимости для данных функций не обнаружено.

7. Как было показано в [4,10,14], барическая зависимость удельной поверхностной энергии  $\sigma(P)$  с ростом давления возрастает до максимума при  $P_{\text{max}}$ , после чего уменьшается, переходя в отрицательную область. Удельная поверхностная энергия для алмаза из  $^{13}\text{C}$  всегда больше, чем для алмаза из  $^{12.01}\text{C}$ , так как при  $P = 0$  выполняется  $[\sigma_0(^{13}\text{C}) / \sigma_0(^{12.01}\text{C})] \approx D^* / (r_0^*)^2$ . Поэтому поверхность алмаза (как свободная при  $P = 0$ , так и межкристаллитная при  $P > 0$ ) должна быть обогащена изотопом  $^{12.01}\text{C}$  [10].

8. Зависимость  $\sigma'(T)$  лежит в отрицательной области, ее абсолютное значение убывает с давлением, и при  $P \rightarrow \infty$  имеем  $\sigma'(T) \rightarrow -0$ . Величина  $|\sigma'(T)|$  для алмаза из  $^{13}\text{C}$  больше, чем для алмаза из  $^{12}\text{C}$ . Функция  $\sigma'(T)$  определяет удельную (на атом) энтропию, обусловленную наличием поверхности площадью  $\Sigma$  в системе из  $N$  атомов [15]:

$$s_{sf} = - \left( \frac{\Sigma}{N} \right) \left( \frac{\partial \sigma}{\partial T} \right)_{c,N}.$$

Поэтому при наличии поверхности (как свободной, так и межкристаллитной) получим  $s_{sf}^{(13\text{C})} > s_{sf}^{(12,01\text{C})}$ , а при  $P \rightarrow \infty$  имеем  $s_{sf}^{(13\text{C})}$  и  $s_{sf}^{(12,01\text{C})} \rightarrow 0$  при любом значении  $\Sigma/N$ .

9. Функция  $\sigma'(P)$  убывает с давлением, переходя при  $P_{\max}$  в отрицательную область. Изотопной зависимости для данной функции на интервале  $P = 0-10$  Мбар не обнаружено.

## Заключение

1. Зависимость  $P(V)$  для алмаза из  $^{13}\text{C}$  лежит чуть ниже, чем для алмаза из  $^{12,01}\text{C}$ , и при сжатии величина  $\Delta P$  уменьшается.

2. Зависимости  $\Theta(P)$ ,  $q(P)$ ,  $z(P)$  возрастают с давлением, причем для алмаза из  $^{13}\text{C}$  данные зависимости лежат ниже, чем для алмаза из  $^{12,01}\text{C}$ .

3. Функции  $\gamma(P)$ ,  $B'(P)$ ,  $\alpha_p(P)$ ,  $C_v(P)$ ,  $C_p(P)$ ,  $\alpha_p(P) \cdot B(P)$  и  $|\sigma'(T)|$  убывают с давлением, причем для алмаза из  $^{13}\text{C}$  значения данных функций больше, чем для алмаза из  $^{12,01}\text{C}$ .

4. Зависимость  $B(P)$  для алмаза из  $^{13}\text{C}$  лежит выше, чем для алмаза из  $^{12,01}\text{C}$ , причем эта разница возрастает с ростом давления.

5. Зависимость  $\Theta'(P)$  убывает с давлением, причем для алмаза из  $^{13}\text{C}$  данная зависимость лежит ниже, чем для алмаза из  $^{12,01}\text{C}$ .

6. Удельная поверхностная энергия для алмаза из  $^{13}\text{C}$  всегда больше, чем для алмаза из  $^{12,01}\text{C}$ .

7. Функции  $\alpha'_p(P)$ ,  $C'_v(P)$ ,  $C'_p(P)$  и  $\sigma'(P)$  изотопной зависимости не имеют.

## Благодарности

Автор благодарен Э.Н. Ахмедову, Н.Ш. Газановой, С.П. Крамынину и З.М. Сурхаевой за помощь в работе и плодотворные дискуссии.

## Финансирование работы

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 18-29-11013\_мк) и Программы Президиума РАН (программа № I.13).

## Список литературы

- [1] Каминский А.А., Ральченко В.Г., Енеда Х., Большаков А.П., Инюшкин А.В. // Письма в ЖЭТФ. 2016. Т. 104. Вып. 5. С. 356–361.
- [2] Энкович П.В., Бражкин В.В., Ляпин С.Г., Новиков А.П., Канда Х., Стишов С.М. // ЖЭТФ. 2016. Т. 150. Вып. 3(9). С. 516–525.
- [3] Магомедов М.Н. // ЖТФ. 2017. Т. 87. Вып. 5. С. 643–650.
- [4] Магомедов М.Н. // Письма в ЖТФ. 2005. Т. 31. Вып. 9. С. 50–57.
- [5] Yamanaka T., Morimoto S., Kanda H. // Phys. Rev. B. 1994. Vol. 49. N 4. P. 9341–9343.
- [6] Плеханов В.Г. // УФН. 2003. Т. 173. Вып. 7. С. 711–738.
- [7] Vogelgesang R., Ramdas A.K., Rodriguez S., Grimsdich M., Anthony T.R. // Phys. Rev. B. 1996. Vol. 54. N 6. P. 3989–3999.
- [8] Магомедов М.Н. // Письма в ЖТФ. 2006. Т. 32. Вып. 10. С. 40–49.
- [9] Магомедов М.Н. // ТВТ. 2009. Т. 47. Вып. 3. С. 379–387.
- [10] Магомедов М.Н. // Поверхность. Рентген., синхротр., и нейтрон. исследования. 2014. Вып. 2. С. 108–112.
- [11] Gillet Ph., Fiquet G., Daniel I., Reynard B., Hanfland M. // Phys. Rev. B. 1999. Vol. 60. N 21. P. 14660–14664.
- [12] Hass K.C., Tamor M.A., Anthony T.R., Banholzer W.F. // Phys. Rev. B. 1992. Vol. 45. N 13. 7171–7182.
- [13] Александров И.В., Гончаров А.Ф., Зисман А.Н., Стишов С.М. // ЖЭТФ. 1987. Т. 93. Вып. 8. С. 680–691.
- [14] Магомедов М.Н. // ЖТФ. 2013. Т. 83. Вып. 12. С. 87–96.
- [15] Магомедов М.Н. // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исследования. 2012. Вып. 1. С. 99–104.