

01,10,19

Метод определения параметров парного межатомного потенциала

© М.Н. Магомедов

Институт проблем геотермии и возобновляемой энергетики — филиал Объединенного института высоких температур РАН, Махачкала, Россия

E-mail: mahmag4@mail.ru

Поступила в Редакцию 11 февраля 2020 г.

В окончательной редакции 11 февраля 2020 г.

Принята к публикации 11 февраля 2020 г.

Указаны недостатки известных из литературы методов определения 4-х параметров парного межатомного потенциала Ми–Леннард–Джонса применительно к кристаллам. Предложен новый метод для определения параметров этого потенциала по термоупругим свойствам кристалла. В данном методе параметры определяются по наилучшему совпадению рассчитанных значений с экспериментальными данными: 1) энергии сублимации кристалла при нулевых значениях температуры ($T = 0$ К) и давления ($P = 0$); 2) коэффициента теплового расширения и изотермического модуля упругости, измеренными при $P = 0$ и $T = 300$ К; 3) зависимостью изотермы $T = 300$ К уравнения состояния от объема $P(300 \text{ К}, V)$. Метод был апробирован на железе и золоте и показал хорошие результаты. Данным методом были также определены параметров межатомного потенциала для тугоплавких металлов: Nb, Ta, Mo и W. Полученные результаты позволили также более точно определить такие свойства данных металлов как энергия сублимации, температура Дебая и поверхностная энергия.

Ключевые слова: межатомный потенциал, уравнение состояния, тепловое расширение, поверхностная энергия

DOI: 10.21883/FTT.2020.07.49462.026

1. Введение

Для численного или аналитического расчета термодинамических свойств кристалла простого (однокомпонентного) вещества необходимо определить потенциал взаимодействия пары его атомов. Для аналитического расчета часто парное межатомное взаимодействие в кристалле простого вещества представляется в виде 4-х параметрического потенциала Ми–Леннард–Джонса, который имеет следующий вид [1–7]:

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

где D и r_o — глубина и координата минимума потенциала, $b > a > 1$ — численные параметры.

В литературе встречаются высказывания, что парный 4-х параметрический потенциал Ми–Леннард–Джонса (1) дает при расчетах свойств кристаллов худшие результаты, чем трех параметрический потенциал Морзе для металлов, либо многочастичные потенциалы для Si или Ge (потенциалы типа Stillinger-Weber или Tersoff, которые включают не менее 10–12 параметров, и которые можно использовать только в численных расчетах). Это мнение возникло из-за трудностей определения самосогласованным образом всех четырех параметров потенциала Ми–Леннард–Джонса, особенно значений степеней a и b . Поэтому ранее (лет 50 тому назад) в большинстве расчетов брали ничем не обоснованные значения степенных параметров $a = 6$ и $b = 12$. Это

было обусловлено тем, что с параметрами 6 и 12 получается квадратное уравнение, с которым было легче работать. Потенциал 6-12 использовался Леннард–Джонсом с соавт. в „докомпьютерную эру“ (т.е. 30–40-х годах XX века) для описания свойств инертных газов [8]. По этой же причине потенциал 6–12 (названный потенциалом Леннард–Джонса) был применен для расчета свойств твердой фазы металлов и диэлектриков. Это и привело к плохим результатам, на основе которых и сложилось неправильное мнение о неприменимости потенциала Ми–Леннард–Джонса общего вида (1), т.е. со степенями $a-b$, для описания свойств металлов. Отметим, что потенциал Морзе дает для металлов более лучшие результаты чем потенциал Леннард–Джонса 6–12. Но 3-х параметрический потенциал Морзе является частным случаем 4-х параметрического потенциала Ми–Леннард–Джонса (1) при $b = 2a$ [8, Т. 1, стр. 282].

Задача корректного определения параметров потенциала (1) решалась во многих работах (см. обзор в [1,2]), но так до сих пор и не получила полного решения. Координата минимума потенциала r_o легко вычисляется либо из мольного объема (V_{00}), либо из параметра решетки (l_{00}) кристалла при нулевых значениях температуры $T = 0$ К и давления $P = 0$ по формулам [1,2]:

$$r_o = \left(q_v \frac{V_{00}}{N_A} \right)^{1/3}, \quad r_o = \left(6 \frac{k_p V_{00}}{\pi N_A} \right)^{1/3}, \quad r_o = q_l l_{00} = c_{00}. \quad (2)$$

Здесь N_A — число Авогадро, k_p — коэффициент упаковки структуры, c_{00} — расстояние между центрами

ближайших атомов при $T = 0\text{ К}$ и $P = 0$, структурные константы q_v и q_l были определены в [1,2].

Величину D — глубину потенциальной ямы можно определить из молярной энергии сублимации кристалла, экстраполированной к $T = 0\text{ К}$ при $P = 0$: L_{00} . В работе [1] величину D определяли из L_{00} без учета энергии „нулевых колебаний“ решетки кристалла. Но это приближение плохо выполняется даже для металлов. Параметры b и a в [1] определялись из зависимости величины $L_{00}/(B_{00}r_o^3)$ от произведения ba . Здесь $B = -V(\partial P/\partial V)_T$ — изотермический модуль упругости. Такой подход позволил в [1] приближенно рассчитать параметры r_o , D , b и a для металлов с различной структурой.

Нами в [2] был предложен метод самосогласованного определения всех 4-х параметров потенциала (1): r_o , D , b и a , который состоит в следующем. Значение r_o вычисляется по формулам (2). Величина D в приближении „взаимодействия только ближайших соседей“ вычислялась из уравнения, в котором учитывается энергия „нулевых колебаний“

$$L_{00}/N_A = (k_n/2)D - (9/8)k_B\Theta_{00}, \quad (3)$$

где k_n — первое координационное число, k_B — постоянная Больцмана, Θ_{00} — температура Дебая при $T = 0\text{ К}$ и $P = 0$.

Для определения степеней b и a в [2] используется выражение для Θ и вытекающая из этого выражения формула для первого параметра Грюнайзена (γ), которые были получены в [9] также на основе приближения „взаимодействия только ближайших соседей“

$$\Theta(k_n, c) = A_w(k_n, c)\xi \left[-1 + \left(1 + \frac{8D}{k_B A_w(k_n, c)\xi^2} \right)^{1/2} \right], \quad (4)$$

$$\gamma = - \left(\frac{\partial \ln \Theta}{\partial \ln V} \right)_T = \frac{b+2}{6(1+X_w)}. \quad (5)$$

Здесь $c = [6k_p V/(\pi N)]^{1/3}$ — расстояние между центрами ближайших атомов, функция A_w возникает из-за учета энергии „нулевых колебаний“ атомов в кристалле,

$$A_w(k_n, c) = K_R \frac{5k_n ab(b+1)}{144(b-a)} \left(\frac{r_o}{c} \right)^{b+2},$$

$$K_R = \frac{\hbar^2}{k_B r_o^2 m}, \quad \xi = \frac{9}{k_n}, \quad (6)$$

где m — масса атома, \hbar — постоянная Планка, функция $X_w = A_w \xi / \Theta$ определяет роль квантовых эффектов в кристалле.

Таким образом, для одноатомного вещества параметры r_o , D , b и a в [2] однозначно определялись из формул (2) и из 3-х уравнений, в которые входят три экспериментально определенные при $T = 0\text{ К}$ и $P = 0$ величины: L_{00} , Θ_{00} , γ_{00} :

$$D/k_B = (2/k_n) \{ [L_{00}/(N_A k_B)] + (9\Theta_{00}/8) \},$$

$$b = 6\gamma_{00} [1 + (2F_b)^{-1}] - 2, \quad (7)$$

$$a = b / \{ 1 + [5K_R k_n b(b+1)/(144A_w(1))] \}.$$

Здесь, согласно (4) и (6), имеем: $A_w(1) = \Theta_{00}/(2\xi F_b)$, $F_b = [4D/(k_B \xi \Theta_{00})] - 1$.

Таким методом в [2] были определены параметры потенциала (1) для многих элементарных кристаллов. При этом было учтено, что потенциальные параметры простых веществ ограничены определенными интервалами допустимых значений

$$0.67\text{ К} \leq D/k_B \leq 97473.6\text{ К} \text{ и } 6 \leq ab \leq 108. \quad (8)$$

Но метод из [2] предполагает, что значения L_{00} , Θ_{00} и γ_{00} определены в эксперименте при $T = 0\text{ К}$ и $P = 0$ с высокой точностью. К сожалению, этого не получается, причем наименее точно определяется величина γ_{00} . Именно поэтому в [2] значения D , b и a были рассчитаны из фиксированных значений L_{00} и Θ_{00} и различных значений γ_{00} , которые известны из литературы. При этом возникала неопределенность в выборе значения γ_{00} и вытекающих из этого расчета набора параметров b и a .

Это привело к тому, что в работе [3] нами был предложен метод, в котором при данных значениях r_o , D и b величина a корректировалась так, чтобы получить хорошее совпадение с экспериментальным значением коэффициента теплового расширения: $\alpha_p(P, T) = (\partial \ln V / \partial T)_P$, измеренным при $P = 0$ и $T = 300\text{ К}$. Таким методом для ОЦК-Fe величина a была скорректирована от $a = 3.58$ [2] до $a = 2.95$ [3].

Но для тугоплавких металлов (Mo, W, Nb) такая корректировка величины a для получения хорошего согласия с величиной $\alpha_p(P = 0, T = 300\text{ К})$ оказалась недостаточной. Это было связано с тем, что для таких металлов приближенно измеряется не только значение γ_{00} , но и величина Θ_{00} . Например, для Mo и W в литературе приводятся следующие значения:

$$\Theta_{00}(\text{Mo})/\text{К} = 450 [10], \quad 460-474.5 [11],$$

$$472.4-474.9 [12], \quad 259 \pm 11 [13], \quad 423 [14],$$

$$273.7 [15], \quad 375-527 [16], \quad 455-470 [17];$$

$$\Theta_{00}(\text{W})/\text{К} = 400 [10], \quad 382.58-390 [11],$$

$$382.6-384.6 [12], \quad 384-388 [13], \quad 383 [14],$$

$$232 [15], \quad 378 \pm 7 [18].$$

Для Nb и Ta разброс чуть меньше:

$$\Theta_{00}(\text{Nb})/\text{К} = 275 [10], \quad 275.7-277.05 [11],$$

$$276.6-278.7 [12], \quad 241 \pm 13 [13], \quad 276 [14], \quad 300 [15].$$

$$\Theta_{00}(\text{Ta})/\text{К} = 240 [10], \quad 258-263.7 [11], \quad 263.4-264.6 [12],$$

$$247 [13], \quad 245 [14], \quad 160.9 [15].$$

По этим причинам в [5,7] при расчетах свойств W и Au корректировались уже два параметра b и a ,

при фиксированных значениях r_o и D . Корректировка производилась до получения наилучшего совпадения как с экспериментальным значением коэффициента теплового расширения: $\alpha_p(P = 0, T = 300 \text{ К})$, так и с экспериментальной зависимостью уравнения состояния $P(300 \text{ К}, v/v_o)$. Здесь $v = V/N$ — удельный объем, $v_o = \pi r_o^3 / (6k_p)$. Однако, полученные таким путем параметры потенциала (1) привели к низким значениям модуля упругости $B(P = 0, T = 300 \text{ К})$.

Поэтому в работах [4,6] оптимизация потенциала (1) проводилась уже по трем параметрам: D , b и a , при фиксированном значении r_o . В этом методе стремились получить наилучшее согласие с экспериментальными данными для $\alpha_p(P = 0, T = 300 \text{ К})$, $B(P = 0, T = 300 \text{ К})$ и с экспериментальной зависимостью $P(300 \text{ К}, v/v_o)$. Таким путем были получены параметры потенциала (1) для Мо [4] и Nb [6]. Эти параметры позволили получить хорошие зависимости для функций: $P(T, v/v_o)$, $\alpha_p(P, T)$, $B(P, T)$, изохорной (C_v) и изобарной теплоемкости: $C_p = C_v(1 + \gamma\alpha_p T)$, температуры плавления (T_m), а также производных этих функций по давлению. Однако, ввиду высокой величины D , рассчитанные значения энергии сублимации L_{00} и поверхностной энергии (σ) оказались много больше экспериментальных данных.

В связи с этим в данной работе предложен самосогласованный метод определения параметров межатомного потенциала (1) по термоупругим свойствам кристалла, который будет более корректнее, чем методы из [1–7].

2. Метод определения параметров

В новом методе оптимизация потенциала (1) идет по двум параметрам: b и a , при фиксированных значениях r_o и молярной энергии сублимации L_{00} . При этом значения Θ_{00} , γ_{00} изменяются в широких диапазонах. Для металлов эти величины равны:

$$100 < \Theta_{00} < 600 \text{ и } 1.1 < \gamma_{00} < 4.1.$$

Из рассчитанных по формулам (7) наборам значений D , b и a отбираются только такие, которые при расчете уравнения состояния: $P(300 \text{ К}, v/v_o = 0.8)$, модуля упругости: $B(P = 0, T = 300 \text{ К})$ и коэффициента теплового расширения: $\alpha_p(P = 0, T = 300 \text{ К})$, дают величины, входящие в интервал допустимых значений. Данные функции вычисляются по формулам полученным в [3] на основании модели кристалла Эйнштейна и приближения „взаимодействия только ближайших соседей“

$$P = - \left(\frac{\partial f_H}{\partial v} \right)_T = \left[\frac{k_n}{6} D \cdot U'(R) + 3k_B \Theta_E \cdot \gamma \cdot E_w \left(\frac{\Theta_E}{T} \right) \right] \frac{1}{v}, \quad (9)$$

$$B = -v \left(\frac{\partial P}{\partial v} \right)_T = P + \left[\frac{k_n}{18} D \cdot U''(R) + 3k_B \Theta_E \cdot \gamma \cdot (\gamma - q) \cdot E_w \left(\frac{\Theta_E}{T} \right) - 3N \cdot k_B \cdot \gamma^2 \cdot T \cdot F_E \left(\frac{\Theta_E}{T} \right) \right] \frac{1}{v}. \quad (10)$$

$$\alpha_p = \gamma \frac{C_v}{V \cdot B} = \frac{\gamma \cdot C_v}{N \cdot B [\pi r_o^3 / (6k_p)]} \left(\frac{v_o}{v} \right). \quad (11)$$

Здесь f_H — удельная (на атом) свободная энергия Гельмгольца для кристалла Эйнштейна, Θ_E — это температура Эйнштейна, которая связана с температурой Дебая соотношением [19]: $\Theta = (4/3)\Theta_E$, $R = r_o/c$ — относительная линейная плотность кристалла, $U(R)$ — функция потенциальной энергии, которая, в соответствии с (1), равна

$$U(R) = \frac{aR^b - bR^a}{b - a},$$

$$U'(R) = R \left[\frac{\partial U(R)}{\partial R} \right] = \frac{ab(R^b - R^a)}{b - a},$$

$$U''(R) = R \left[\frac{\partial U'(R)}{\partial R} \right] = \frac{ab(bR^b - aR^a)}{b - a}, \quad (12)$$

$$E_w(y) = 0.5 + \frac{1}{[\exp(y) - 1]},$$

$$F_E(y) = \frac{y^2 \exp(y)}{[\exp(y) - 1]^2}, \quad C_v = 3N \cdot k_B \cdot F_E \left(\frac{\Theta_E}{T} \right),$$

$$q = \left(\frac{\partial \ln \gamma}{\partial \ln v} \right)_T = \gamma \frac{X_w(1 + 2X_w)}{1 + X_w}.$$

Проверка данного метода была проведена на Fe с объемно-центрированной кубической (ОЦК) структурой и на Au с гранецентрированной кубической (ГЦК) структурой. Были определены как параметры межатомного потенциала (1), так и вытекающие из этих параметров значения энергии сублимации: L_{00} , уравнения состояния: $P(300 \text{ К}, v/v_o = 0.8)$, и значения решеточных свойств кристалла: α_p , B , Θ , γ . Здесь σ — удельная (на единицу площади) поверхностная энергия грани (100), выражение для которой имеет вид [20]:

$$\sigma(R, T) = - \frac{k_n D R^2}{12\alpha^{2/3} r_o^2} L_E(R, T), \quad (13)$$

Здесь введены обозначения:

$$L_E(R, T) = U(R) + 3H_w(R, T),$$

$$H_w(R, T) = \frac{6\gamma}{(b+2)} \left[\frac{k_B \Theta_E}{Dk_n} \right] E_w \left(\frac{\Theta_E}{T} \right).$$

Таким образом, в данном методе производится оптимизация параметров потенциала (1) как по энергетическим, так и по упругим параметрам кристалла.

Энергия сублимации, параметры межатомного потенциала (1) и статья, в которой они были определены, и свойства, которые получаются при расчете с использованием указанных параметров

Кристалл	L_{00} , kJ/mol	D/k_B , К	b	a	Статья	$P(0.8)$, GPa	α_p , 10^{-6} K^{-1}	$B = -v(\partial P/\partial v)_T$, GPa	$B'(P) = (\partial B/\partial P)_T$	Θ , К	γ	σ , 10^{-3} J/m^2
Fe	413.80 [1]	12561.53	8.37	3.097		75.9	34.1	161.3	5.85	415.17	1.720	2202.98
	-//-	12576.70	8.26	3.58	[2]	87.7	28.6	185.7	5.98	470.01	1.701	2207.35
	414.454	12576.70	8.26	2.95	[3]	71.1	36.1	151.9	5.77	399.5	1.702	2204.95
	414.634 ± 1.255 [21]					50–60 [23]	33–38 [25,26]	156–171 [26,32]	4–6 [26,32]	420–478 [33]	1.4–1.8 [33]	1910–2525 [34] 2420–2480 [35]
Au	368.19 [1]	7419.16	16.05	2.80		109.9	43.0	166.4	8.35	198.04	3.001	1531.38
	-//-	7411.50	15.56	1.96	[2]	71.9	64.0	109.0	7.91	156.23	2.921	1523.82
	-//-	-//-	16.34	1.89	[2]	75.2	66.6	109.4	8.15	155.38	3.051	1523.08
	367.903	-//-	12.82	2.93	[7]	80.5	41.7	141.1	7.30	190.09	2.464	1530.31
	368.610 ± 1.255 [21]					65–75 [15]	42–42.8 [25,27]	166.4–173.2 [10,14]	5.31 [15]– 9.57 [27]	156–178 [33]	2.3–3.05 [33]	1175–1850 [34] 1500–1510 [35]
Nb	719.65 [1]	21732.20	9.24	2.55		77.7	24.0	167.2	5.95	327.28	1.869	2870.66
	-//-	21706.44	5.81	1.88	[2]	31.1	37.0	77.2	4.58	237.02	1.300	2860.54
	-//-	-//-	7.50	1.72	[2]	39.0	38.4	90.5	5.09	236.38	1.581	2859.80
	1001.25	30200.0	6.2	2.3	[6]	57.4	20.6	145.1	4.84	331.56	1.367	3998.34
	719.472 ± 4.184 [21]					50–60 [15]	21.3–22.8 [25,28,29]	144.2–170.2 [10,14]	3.3 [15]– 14.5 [14]	241 [13]– 300 [10]	1.3–1.69 [33]	2050–2550 [34] 2660–2700 [35]
Ta	706.26 [1]	21318.49	7.86	3.49		86.3	18.5	192.8	5.80	289.93	1.640	2819.56
	-//-	21305.51	7.01	2.90	[2]	60.8	23.2	142.4	5.32	244.43	1.499	2815.53
	-//-	-//-	11.16	2.52	[2]	97.9	24.8	194.7	6.58	242.84	2.190	2814.5
	785.608 [21]	23701.02	7.92	3.13		85.8	18.6	193.8	5.70	278.54	1.650	3136.47
	785.608 ± 4.184 [21]					55–75 [15,24]	18–19.8 [25,29,30]	192 [15]– 195 [24]– 201.9 [14]	3.4–3.55 [24] – 3.842 [14]	160.9 [15] – 264.6 [12]	1.5–2.19 [33]	1950–2680 [34] 2900–3150 [35]
Mo	655.31 [22]	19832.34	8.29	3.93		115.0	16.4	248.7	6.09	451.13	1.710	2907.50
	-//-	19776.91	7.68	1.93	[2]	48.4	37.2	110.6	5.22	253.91	1.610	2889.24
	1624.34	48950.0	6.82	1.87	[4]	97.5	14.9	242.6	4.90	383.66	1.468	7207.60
	654.867 ± 2.928 [21]					80–95 [15,17]	14–16.5 [25,29,31]	244–260 [17]	4.21–4.67 [17]	455–470 [17]	1.95 – 2.03 [17]	1865–2630 [34] 2910–3000 [35]
W	848.10 [1]	25594.79	8.82	3.45		136.2	15.0	295.7	6.10612	330.35	1.800	3715.79
	-//-	25608.93	8.58	4.06	[2]	157.6	12.6	339.6	6.22903	381.042	1.760	3719.21
	847.987	-//-	6.28	3.97	[5]	103.1	13.6	243.5	5.42890	393.482	1.377	3718.11
	855.644 ± 4.184 [21]					103–120 [15]	11–15 [18,25,29]	296 [15]– 323.3 [10]	4.4 [15]– 19.1 [14]	232 [15]– 400 [10] 310–610 [33]	1.1–1.76 [33]	2668–2712 [34] 3270–3680 [35]

3. Результаты расчетов

В таблице представлены полученные в различных работах параметры межатомного потенциала (1) и вытекающие из этих параметров значения указанных свойств как для ОЦК-Fe и ГЦК-Au, так и для тугоплавких металлов Nb, Ta, Mo и W, которые имеют ОЦК структуру. Для координаты минимума потенциала (1) брали следующие значения: $r_o/[10^{-10} \text{ m}] = 2.4775$ (ОЦК-Fe), 2.8751 (ГЦК-Au), 2.8648 (ОЦК-Nb), 2.8648 (ОЦК-Ta), 2.7365 (ОЦК-W) — из [1]; 2.72 (ОЦК-Mo) — из [2]. Для каждого кристалла в верхних строках представлены результаты полученные новым методом, а в нижней строке представлены экспериментальные оценки указанных свойств. Для ОЦК-Ta расчет параметров потенциала (1) и свойств сделан для двух значений энергий сублимации: из [1] и из [21], ввиду их заметного различия. Результаты представлены в первой и четвертой строках.

Как видно из таблицы, полученные новым методом параметры потенциала (1) для Fe и Au дают при $T = 300 \text{ K}$ и $P = 0$ значения решеточных свойств лучше, чем потенциалы из других работ. Но величина $P(300 \text{ K}, v/v_o = 0.8)$ по данным параметрам получилась несколько выше экспериментальных данных. Это указывает на то, что полученные здесь параметры потенциала работоспособны в области упругих деформаций, т.е. при $v/v_o \geq 0.9$. Аналогичный вывод можно сделать и по результатам расчета свойств тугоплавких ОЦК-металлов. Но потенциальные параметры, полученные предлагаемым методом, дают в комплексе более лучшее согласие с набором экспериментальных данных: как по L_{00} и $P(300 \text{ K}, v/v_o = 0.8)$, так и для определенных при $T = 300 \text{ K}$ и $P = 0$ решеточных свойств: α_p , B , Θ , γ и σ . Для ОЦК-Ta лучшее согласие рассчитанных свойств с экспериментальными данными получено из значения энергии сублимации из [21], которые представлены в четвертой строке.

Помимо определения параметров потенциала (1) данный метод расчета позволяет определить более достоверные значения для таких свойств как Θ , γ и σ , которые для тугоплавких металлов имеют большой разброс экспериментальных данных. Как было указано в [9,34,36] современные экспериментальные методы не позволяют измерить данные параметры с необходимой точностью (см. разброс экспериментальных данных в таблице). Кроме этого, на примере ОЦК-Ta показано, что данный метод может быть использован для выбора более достоверного значения энергии сублимации кристалла. Поэтому данный комплексный метод расчета параметров потенциала (1), также позволяет более точно определять и термодинамические свойства кристалла.

4. Заключение

Предложен новый метод для определения 4-х параметров потенциала Ми–Леннард–Джонса по термоупругим

свойствам кристалла. Показано, что данный метод более корректен, чем известные из литературы другие методы определения параметров потенциала. Определены параметры межатомного потенциала для ГЦК-Au, и для кристаллов Fe, Nb, Ta, Mo, W, имеющих ОЦК-структуру. На основании полученных результатов указаны более достоверные значения для Θ , γ и σ указанных кристаллов. На примере ОЦК-Ta показано, что данным методом можно также указать более достоверное значение энергии сублимации кристалла.

Благодарности

Автор выражает благодарность С.П. Крамынину, Н.Ш. Газановой и З.М. Сурхаевой за плодотворные дискуссии и помощь в работе.

Финансирование работы

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 18-29-11013_мк) и Программы Президиума РАН (программа № 6, грант 2-13).

Конфликт интересов

Автор заявляет, что у него нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] S. Zhen, G.J. Davies. Phys. Status Solidi A **78**, 2, 595 (1983). DOI: 10.1002/pssa.2210780226
- [2] М.Н. Магомедов. Теплофизика высоких температур **44**, 4, 518 (2006). DOI: 10.1007/s10740-006-0064-
- [3] М.Н. Магомедов. ЖТФ **85**, 11, 48 (2015). DOI: 10.1134/S1063784215110195
- [4] E.N. Akhmedov. J. Phys. Chem. Solids **121**, 62 (2018). DOI: 10.1016/j.jpcs.2018.05.011
- [5] N.Sh. Gazanova. Appl. Solid State Chem. **3**, 4, 36 (2018). DOI: 10.18572/2619-0141-2018-3-4-36-40
- [6] S.P. Kraminin, E.N. Ahmedov. J. Phys. Chem. Solids **135**, 109108 (2019). DOI: 10.1016/j.jpcs.2019.109108
- [7] E.N. Ahmedov. J. Phys.: Conf. Ser. **1348**, 012002, 1 (2019). DOI: 10.1088/1742-6596/1348/1/012002
- [8] Э.А. Мелвин-Хьюз. Физическая химия. ИЛ, М. (1962). 1148 с. [E.A. Moelwyn-Hughes. Physical Chemistry. Pergamon Press, London (1961).]
- [9] М.Н. Магомедов. ФТТ **45**, 1, 33 (2003). DOI: 10.1134/1.1537405
- [10] Ч. Киттель. Введение в физику твердого тела. Наука, М. (1978). 792 с. [Ch. Kittel. Introduction to Solid State Physics, J. Wiley and Sons Ltd., N.-Y. (1976).]
- [11] M.M. Shukla, N.T. Padial. Rev. Brasil. Fis. **3**, 1, 39 (1973). <http://sbfisica.org.br/bjp/download/v03/v03a03.pdf>
- [12] J.K.D. Verma, M.D. Aggarwal. J. Appl. Phys. **46**, 7, 2841 (1975). DOI: 10.1063/1.322028
- [13] В.Е. Зиновьев. Теплофизические свойства металлов при высоких температурах. Справочник. Металлургия, М. (1989). 384 с.

- [14] Физические величины. Справочник / Под ред. И.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова. Энергоатомиздат, М. (1991). 1232 с. [Handbook of Physical Quantities Ed. I.S. Grigoriev, E.Z. Meilikhov. Energoatomizdat, M. (1991); CRC Press, Boca Raton, Florida (1996).]
- [15] A. Karbasi, S.K. Saxena, R. Hrubiak. CALPHAD: Comp. Coupling Phase Diagrams Thermochem. **35**, 1, 72 (2011). DOI:10.1016/j.calphad.2010.11.007
- [16] P.D. Desai. J. Phys. Chem. Ref. Data **16**, 1, 91 (1987). DOI: 10.1063/1.555794
- [17] X. Huang, F. Li, Q. Zhou, Y. Meng, K.D. Litasov, X. Wang, B. Liu, T. Cui. Sci. rep. **6**, 19923 (2016). DOI: 10.1038/srep19923
- [18] В.Ю. Бодряков. Теплофизика высоких температур **53**, 5, 676 (2015). DOI: 10.7868/S0040364415040067
- [19] Л. Жирифалько. Статистическая физика твердого тела. Мир, М. (1975). 383 с. [L.A. Girifalco. Statistical Physics of Materials. J. Wiley and Sons Ltd, N.-Y. (1973).]
- [20] М.Н. Магомедов. Кристаллография **62**, 3, 487 (2017). DOI: 10.1134/S1063774517030142
- [21] <http://www.chem.msu.su/cgi-bin/tkv.pl>.
- [22] Термические константы веществ. Справочник в 10-ти вып. / Под ред. В.П. Глушко, ВИНТИ, М. (1965–1982).
- [23] Д.К. Белашенко, О.И. Островский. ЖФХ **85**, 6, 1063 (2011). DOI: 10.1134/S0036024411060094
- [24] J.-B. Gu, C.-J. Wang, W.-X. Zhang, B. Sun, G.-Q. Liu, D.-D. Liu, X.-D. Yang. Chin. Phys. B **25**, 12, 126103 (2016). DOI: 10.1088/1674-1056/25/12/126103
- [25] С.И. Новикова. Тепловое расширение твердых тел. Наука, М. (1974). 294 с.
- [26] D.R. Wilburn, W.A. Bassett. Am. Mineral. **63**, 5-6, 591 (1978). <https://pubs.geoscienceworld.org/msa/ammin/article-abstract/63/5-6/591/40926>
- [27] M.G. Pamato, I.G. Wood, D.P. Dobson, S.A. Hunt, L. Voňadlo. J. Appl. Crystallography **51**, 2, 470 (2018). DOI: 10.1107/S1600576718002248
- [28] M.E. Straumanis, S. Zyszczyński. J. Appl. Crystallography **3**, 1, 1 (1970). DOI: 10.1107/s002188987000554x
- [29] K. Wang, R.R. Reeber. Mater. Sci. Engineering: Rep. **23**, 3, 101 (1998). DOI: 10.1016/s0927-796x(98)00011-4
- [30] В.Ю. Бодряков. Теплофизика высоких температур **54**, 3, 336 (2016). DOI: 10.7868/S0040364416030029
- [31] В.Ю. Бодряков. Теплофизика высоких температур **52**, 6, 863 (2014). DOI: 10.7868/S004036441404005X
- [32] Y. Shibasaki, K. Nishida, Y. Higo, M. Igarashi, M. Tahara, T. Sakamaki, H. Terasaki, Y. Shimoyama, S. Kuwabara, Y. Takubo, E. Ohtani. Am. Mineral. **101**, 5, 1150 (2016). DOI: 10.2138/am-2016-5545
- [33] М.Н. Магомедов. Изучение межатомного взаимодействия, образования вакансий и самодиффузии в кристаллах. Физматлит, М. (2010). 544 с.
- [34] V.K. Kumikov, Kh.B. Khokonov. J. Appl. Phys. **54**, 3, 1346 (1983). DOI: 10.1063/1.332209
- [35] Q. Jiang, H.M. Lu, M. Zhao. J. Phys.: Condens. Matter **16**, 4, 521 (2004). DOI: 10.1088/0953-8984/16/4/001
- [36] М.Н. Магомедов. ЖТФ **80**, 9, 150 (2010). DOI: 10.1134/S1063784210090240

Редактор Т.Н. Василевская