

01,19

Тепловые свойства интерметаллидов Ti_3Al и Zr_3Al со сверхструктурой $L1_2$. Метод молекулярной динамики

© Е.Б. Долгушева

Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН,
Ижевск, Россия

E-mail: elena@udman.ru

Поступила в Редакцию 12 июля 2023 г.

В окончательной редакции 4 августа 2023 г.

Принята к публикации 4 августа 2023 г.

В рамках метода молекулярной динамики с многочастичными потенциалами межатомного взаимодействия проведены исследования термодинамических свойств упорядоченных интерметаллидов Ti_3Al , Zr_3Al со структурой типа $L1_2$. Результаты расчетов колебательных спектров и тепловых свойств интерметаллидов сравниваются с данными, полученными из первых принципов на основе теории функционала плотности. Результаты расчетов обоими методами показывают, что спектры соединений похожи по морфологии и имеют интервалы запрещенных значений частот. Методом неравновесной молекулярной динамики получены температурные зависимости коэффициентов решеточной теплопроводности Ti_3Al и Zr_3Al . На графике теплопроводности в системе с цирконием наблюдаются „плато“ в интервале температур $200\text{ K} < T < 300\text{ K}$, где значения теплопроводности практически не изменяются.

Ключевые слова: метод молекулярной динамики, плотность колебательных состояний, решеточная теплоемкость, решеточная теплопроводность.

DOI: 10.61011/FTT.2023.10.56312.146

1. Введение

В последнее время изучению тепловых свойств металлов и полупроводников уделялось большое внимание из-за востребованности этих знаний при создании различных технических устройств, основные функции в которых выполняются с помощью терморегулирования [1–3]. Однако, до сих пор нет корректного теоретического описания температурной зависимости решеточной теплопроводности в металлах. Строгие *ab initio* расчеты, как правило, ограничены нулевой температурой [4], а для учета температуры вводятся параметры. Молекулярная динамика облегчает исследование свойств, зависящих от температуры. В определении таких тепловых свойств решетки, как теплопроводность, теплоемкость, тепловое расширение и др., важную роль играют колебания атомов. Особый интерес вызывают свойства материалов, в колебательных спектрах которых имеется интервал частот с нулевым вкладом — „щель“. К таким соединениям относятся интерметаллиды Ti_3Al , Zr_3Al со структурой типа $L1_2$.

Структурированные интерметаллиды Ti_3Al , Zr_3Al представляют собой кристаллы „цепочного типа“, в которых в гране-центрированной кубической (ГЦК) решетке чередуются атомы $Zr(Ti)$ и Al , причем масса атома Zr в ~ 3.4 , а Ti в 1.8 раза больше, чем Al . Наличие „цепочной“ структуры, с существенной разницей масс атомов, приводит к появлению „щели“ в колебательном спектре этих соединений. Соединение Zr_3Al обладает свойствами (высокотемпературная прочность, коррозионная устойчивость и низкое поглощением тепловых

нейтронов), которые делают перспективным его применение в различных высокотехнологичных областях промышленности и атомной энергетики. Интерметаллид Ti_3Al со сверхструктурой $L1_2$ на фазовой диаграмме не существует. Эта фаза считается метастабильной, тем не менее, она обнаружена экспериментально при проведении быстрого охлаждения и последующего отжига фазы γ - $TiAl$ [5]. Заметим, что фаза ГЦК для чистых циркония и титана также является метастабильной и наблюдается экспериментально только в пленочных образцах [6,7,8]. Метастабильные материалы могут обладать физическими свойствами, которые отличаются от свойств равновесного состояния, поскольку в них реализуется иной набор колебательных мод. Что добавляет интерес к исследованию свойств таких систем.

В наших ранних работах [9–11], методом молекулярной динамики (МД) изучались различные динамические и тепловые свойства как чистых ГЦК Zr , Ti и Al , так и их различных систем в объемном и пленочном состоянии. В частности, полученные в работе [11] плотности колебательных состояний решетки интерметаллидов Ti_3Al и Zr_3Al , показали, что в обоих случаях колебательные спектры имеют „щель“. В работах [12,13] были вычислены температурные зависимости коэффициентов решеточной теплопроводности чистых ГЦК- Al , $-Zr$ и $-Ti$. Причем, полученная температурная зависимость решеточной теплопроводности ГЦК- Al согласуется с результатами *ab initio* расчетов, учитывающих фононное рассеяние.

В настоящей работе в рамках метода МД с многочастичными потенциалами межатомного взаимодействия,

Упругие свойства интерметаллидов Ti_3Al и Zr_3Al . Равновесный параметр решетки a_0 (Å), объемный модуль B , модуль сдвига C' и упругие модули C (GPa)

	Метод	a_0	B	C'	C_{11}	C_{12}	C_{44}	Источник
Ti_3Al	DFT(GGA)	4.046	112.157	26.08	146.936	94.767	88.432	[20]
	MD	4.09	118.2	34.16	165.8	97.4	51.2	[11]
Zr_3Al	DFT(GGA)	4.375	98.706	25.87	132.155	81.981	70.586	[21]
	DFT(LDA)	3.951	80.8	—	—	—	—	[22]
	MD	4.34	93.5	19.6	119.7	78.43	46.5	[11]

проведены расчеты тепловых характеристик соединений Ti_3Al и Zr_3Al со сверхструктурой типа $L1_2$. Полученные полные и парциальные фононные спектры, а также теплоемкости обоих соединений сравниваются с расчетами из первых принципов. Вычислены температурные зависимости коэффициентов решеточной теплопроводности соединений Ti_3Al и Zr_3Al .

2. Детали расчета фононных спектров и теплоемкостей Ti_3Al и Zr_3Al

Для описания межатомного взаимодействия использовались многочастичные потенциалы, построенные в рамках модели „погруженного атома“ (EAM) [14]. Для системы Zr_3Al потенциалы взяты из [15], а для Ti_3Al — [16]. В этих работах было показано, что потенциалы позволяют получить, с высокой степенью точности, параметры решеток, когезионные энергии, упругие постоянные, температуры плавления и другие физические характеристики как чистых Zr , Ti и Al , так и их различных соединений. Ранее с этими потенциалами в работе [11] нами были вычислены параметры решетки, упругие модули, фононные спектры, и теплоемкости для чистых ГЦК- Zr , $-Ti$, $-Al$, а также их различных систем $Zr/Ti-Al$. Поскольку все методы расчетов перечисленных физических величин подробно описаны в [11]. Здесь отметим лишь, что полученные значения параметров решеток и упругих модулей для ГЦК- Zr и $-Ti$ согласуются с рассчитанными из первых принципов и наблюдаемыми в экспериментах при получении пленок этих металлов. Параметр решетки структуры Zr_3Al в экспериментах [17–19] находится в пределах — от 4.29 до 4.392 Å в наших расчетах $a_0 = 4.34$ Å, что вполне удовлетворительно. Параметр решетки Ti_3Al , полученный в эксперименте [5] $a_0 = 3.994$ Å, в МД-расчетах — 4.09 Å.

На рис. 1, *a, b* представлены полные и парциальные плотности колебательных состояний для Ti_3Al (*a*) и Zr_3Al (*b*) со сверхструктурой типа $L1_2$. Спектры получены на основе МД-расчетов, путем быстрого преобразования Фурье автокорреляционных функций скоростей, усредненных на временном интервале ~ 30 ps.

Вычисления сделаны при температуре $T = 100$ К. Из приведенных данных на рис. 1, *a, b* видно, что по морфологии спектры похожи, поскольку оба соединения имеют одинаковый тип структуры. В обоих случаях низкочастотная область содержит хорошо различимые четыре основных пика, и почти вся она обусловлена колебаниями более тяжелых атомов титана или циркония. В высокочастотной области состояния определяются в основном колебаниями легких атомов алюминия. В титановом соединении парциальные вклады атомов титана в высокочастотную область, а атомов алюминия в низкочастотную несколько больше, чем соответствующие вклады в соединении с цирконием. В Zr_3Al граничная частота находится гораздо ниже, чем в Ti_3Al . Это следствие соотношения масс, поскольку цирконий более чем в 2 раза тяжелее титана. Соответственно запрещенная зона в системе с цирконием находится ниже по частоте, кроме того, она намного шире, чем в Ti_3Al . В Zr_3Al запрещенная зона имеет ширину несколько десятков градусов (~ 280 – 360 К), а в Ti_3Al — всего несколько градусов (434–441 К).

На этом же рис. 1, *c, d, e* представлены полные и парциальные спектры Ti_3Al [20], Zr_3Al [21], Zr_3Al [22], полученные из первых принципов. Во обоих случаях *ab initio* расчетов применен метод основанный на теории функционала плотности (DFT). В работах [20,21] функция обменно-корреляционного взаимодействия вычислена в приближении обобщенного градиента (GGA), а в [22] — в приближении локальной плотности (LDA). Заметим, что на приведенных в работе [22] графиках с результатами расчетов дисперсии фононов и плотности колебательных состояний (см. рис. 2 в [22]) неверно указаны единицы измерения: вместо cm^{-1} — THz. Понятно, что это досадная опечатка, поскольку авторы сравнивают свои результаты с результатами, полученными в работе [21], где результаты расчетов спектров фононов приведены в cm^{-1} . Для удобства сравнения оригинальные частотные шкалы THz (рис. 1, *c*) и cm^{-1} (рис. 1, *d, e*) переведены в температурные единицы на всех графиках. Из сравнения результатов, полученных разными методами, видно, что граничные частоты спектров обоих соединений в МД расчетах находятся выше,

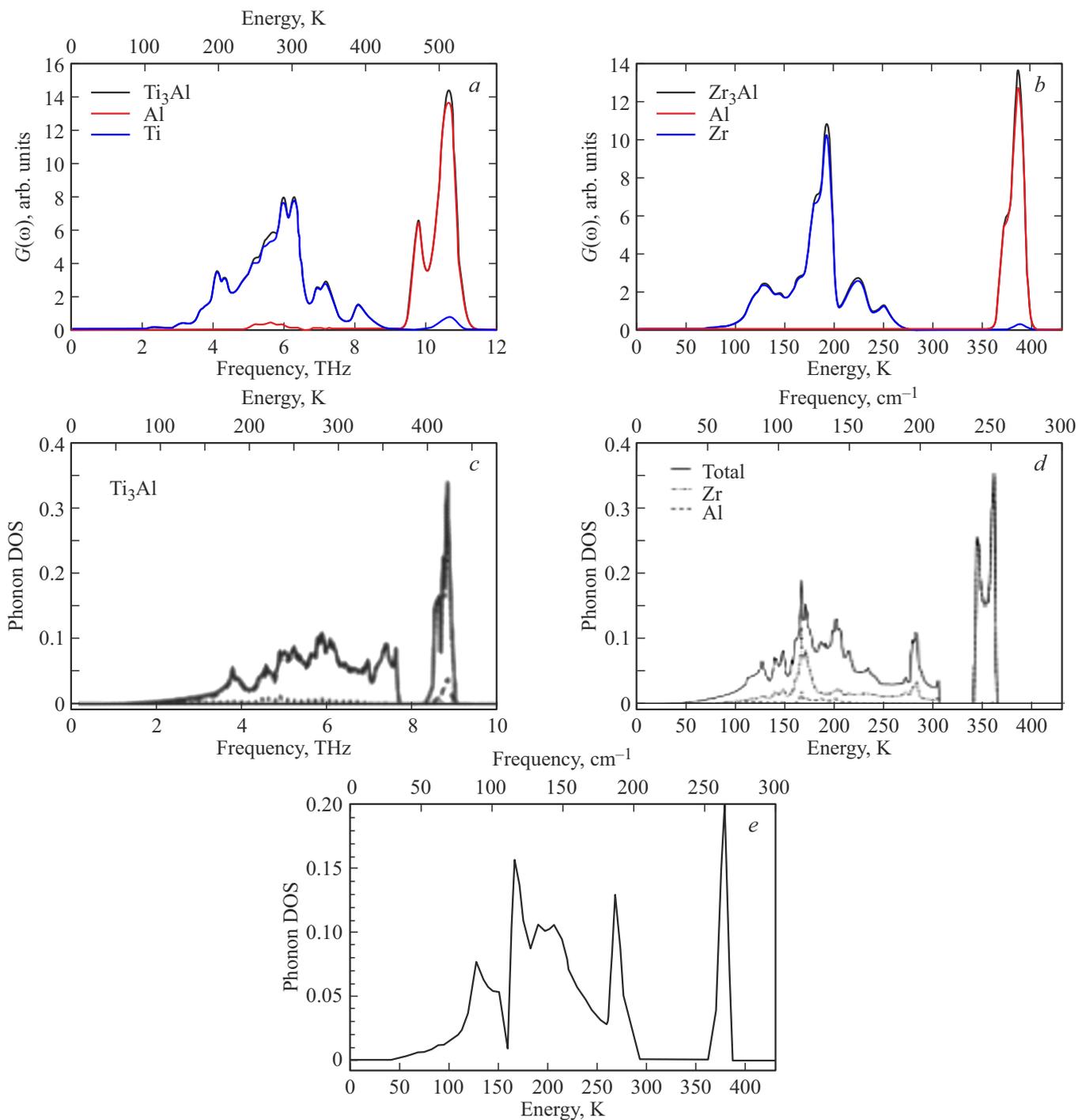


Рис. 1. Полные и парциальные плотности колебательных состояний (VDOS) соединений со структурой типа $L1_2$, полученные в методе МД: *a* — Ti_3Al , *b* — Zr_3Al ; вычисленные из первых принципов: *c* — Ti_3Al [20], *d, e* — Zr_3Al , [21,22] соответственно.

чем в *ab initio* расчетах. Особенно сильно это наблюдается для системы Ti_3Al , хотя по морфологии все спектры похожи. Как видно из рис. 1, *c, d, e*, спектры колебаний атомов Ti_3Al и Zr_3Al , полученные *ab initio* методами также имеют полосы запрещенных значений. Однако, если в Ti_3Al ширина „щели“ сопоставима в расчетах обоими методами, то в системе с цирконием расчеты МД и DFT в приближении LDA дают ширину „щели“

примерно в 2–2.5 раза больше, чем расчет, проведенный в приближении GGA.

Для сравнения в таблице приведены упругие модули интерметаллидов Ti_3Al и Zr_3Al с кубической структурой типа $L1_2$, полученные с помощью молекулярной динамики и из первых принципов.

Из таблицы видно, что в системе с титаном параметр решетки и все упругие модули в методе МД несколько

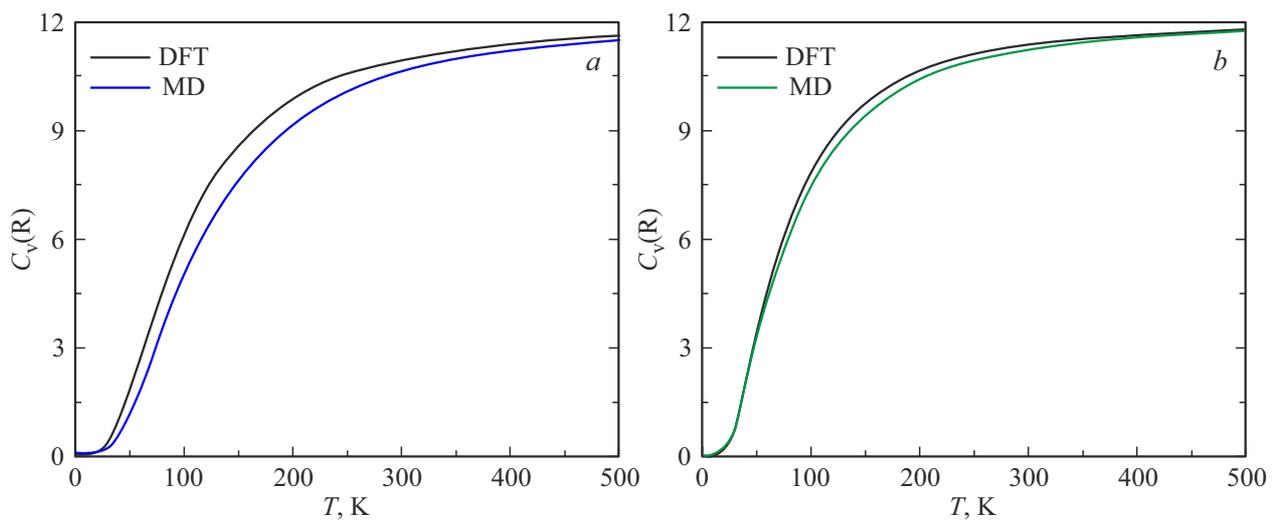


Рис. 2. Температурные зависимости теплоемкости $C_V(R)$ соединений с типом решетки $L1_2$: *a* — Ti_3Al , *b* — Zr_3Al . Темные линии — *ab initio* расчеты из [20] и [21], соответственно; цветные линии — МД-расчеты.

выше, чем в расчете DFT. А в соединении с цирконием, наоборот, параметр решетки и значения всех модулей ниже, чем соответствующие значения, полученные из первых принципов.

На рис. 2 приведены температурные зависимости теплоемкостей: (*a*) — Ti_3Al , (*b*) — Zr_3Al . Темные сплошные линии показывают результаты, полученные *ab initio* методами, взятые из [20] и [21] соответственно. Цветными линиями обозначены теплоемкости, вычисленные с использованием спектров колебаний из МД-расчета. Как видно из сравнения графиков, в области температур 100–300 К МД-расчеты дают несколько заниженное значение теплоемкости по сравнению с результатами, полученными *ab initio* методами. Причем в системе с титаном эта разница намного заметнее, что объясняется различным распределением вкладов энергии колебаний при разных методах вычисления спектров фононов.

3. Схема расчета решеточной теплопроводности

МД-расчеты теплопроводности выполнены с помощью пакета LAMMPS [23], который широко используется для молекулярных и атомных симуляций. Для расчета коэффициента решеточной теплопроводности применялся, встроенный в пакет LAMMPS, алгоритм „eNEX“ [24], основанный на методе неравновесной молекулярной динамики (NEMD) [25]. Метод NEMD имеет прямой и обратный варианты. При обратном — тепловой поток накладывается на систему, а температурный градиент получается в результате моделирования. Именно этот вариант применен в расчетах на базовых кристаллитах сечением 12×12 (x, y) и длинами 48 и 96 элементарных ячеек (у.с.) по оси z , что соответствует размерам, примерно $5 \times 5 \times 20$ и

$5 \times 5 \times 40$ nm. Вдоль всех осей задавались циклические граничные условия. Релаксация кристаллитов при заданном значении температуры проводилась в течение 2 ns. После чего задавались зоны с „горячим“ и „холодным“ термостатами, путем добавления и отвода одинаковой порции энергии на каждом временном шаге. Тепловой поток формировался между термостатами вдоль оси z . Выход на стационарный режим теплового потока при заданной температуре моделировался в течение 3 ns. Для получения температурного профиля, весь кристаллит разбивался на слои, перпендикулярно тепловому потоку, толщиной в одну элементарную ячейку. Усреднение кинетической энергии атомов в каждом слое проводилось на временном интервале 2 ns, после установления стационарного потока. Значения коэффициента решеточной теплопроводности (k_p) вычислялись по схеме предложенной в [26]:

$$dQ/dt = -k_p \cdot S \cdot \Delta T / \Delta Z.$$

Здесь dQ/dt — поток энергии в единицу времени ($dt = 1$ fs), S — усредненное по времени сечение кристаллита, $\Delta T / \Delta Z$ — градиент температуры, взятый на *линейном* участке температурного профиля и усредненный по времени. Из всех величин вводимым параметром является только количество энергии dQ , а все остальные получаются в результате моделирования.

В работе [12], используя этот алгоритм, и учитывая только линейную область температурного профиля, мы получили температурную зависимость решеточной теплопроводности ГЦК-Al, которая согласуется с результатами *ab initio* расчетов, выполненных на основе теории функционала плотности, и учитывающих только фонон-фононное взаимодействие. Там же подробно описаны все особенности применения этой схемы для вычисления фононной теплопроводности металлов.

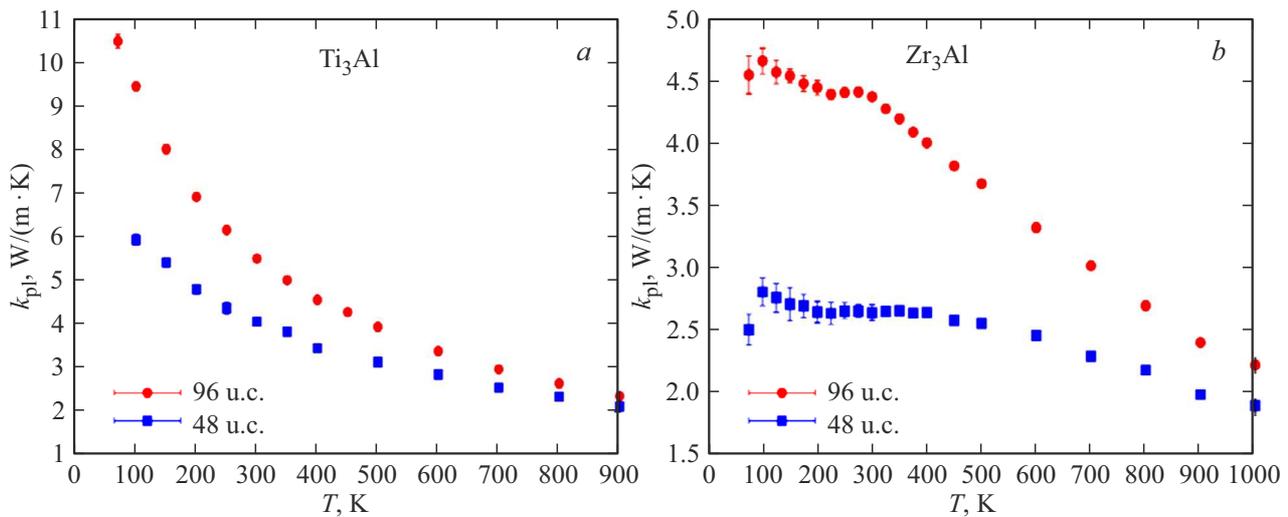


Рис. 3. Температурная зависимость решеточной теплопроводности $k_p(T)$: (a) — Ti_3Al ; (b) — Zr_3Al . Кружками обозначены значения k_p , полученные для кристаллитов длиной 96 у.с., квадратами — длиной 48 у.с.

Таким образом, исходя из результатов расчетов теплопроводности алюминия, появилась возможность использования такого подхода к расчету решеточной теплопроводности металлических соединений. Ранее, таким способом были получены температурные зависимости коэффициентов решеточной теплопроводности для ГЦК-Zr и -Ti [13].

4. Решеточная теплопроводность интерметаллидов Ti_3Al и Zr_3Al

По описанной схеме были вычислены температурные зависимости решеточной теплопроводности для Ti_3Al и Zr_3Al со структурой типа $L1_2$. При каждом заданном значении температуры проводилось несколько реализаций расчета k_p (ниже 300 K — 5, выше — 3) для определения относительной ошибки. Результаты вычислений представлены на рис. 3. Как видно из рис. 3, а в поведении решеточной теплопроводности Ti_3Al нет ничего необычного, с ростом температуры она убывает. Кристаллиты с большей длиной (96 у.с.) имеют большее значение теплопроводности, по сравнению с кристаллитами длиной 48 у.с. Поскольку при низких температурах основной вклад в коэффициент теплопроводности дают длинноволновые фононы, а их в кристаллите длиной 48 ячеек меньше, чем в образце длиной 96 ячеек. С ростом температуры разность значений k_p для кристаллитов разных размеров уменьшается. Как видно из графика на рис. 3, б, температурная зависимость теплопроводности Zr_3Al имеет аномальное поведение: для образца длиной 96 у.с. в области температур 200–300 K, а для кристаллита длиной 48 у.с. наблюдается еще более длинное „плато“ — от 200 до 400 K.

Можно предположить разные варианты объяснения такого поведения температурной зависимости $k_p(T)$ в

Zr_3Al : один — это проявление аномального характера кривой решеточной теплопроводности в чистом ГЦК-Zr, как показано в [13] пик на графике $k_p(T)$ находится в области достаточно высокой температуры — 300 K (возможно из-за сильной ангармоничности потенциала); другой вариант — это может быть связано с наличием достаточно широкой „запрещенной зоны“ в спектральной плотности колебаний, которая существует до 450 K. В этом соединении оптические и акустические моды, которые главным образом отвечают за теплопроводность, четко разделены по подрешеткам алюминия и циркония. Кроме того, положение их основных пиков на кривой плотности колебаний отличаются ровно в два раза (192 и 384 K). Хотя считается, что оптические фононы не очень эффективны при передаче энергии, однако, они могут взаимодействовать с акустическими и тем самым оказывать влияние на тепловой поток.

Расчеты плотности колебаний Ti_3Al и Zr_3Al показали, что с ростом температуры спектры в обоих соединениях „смягчаются“, ширина „щели“ уменьшается. На рис. 4 представлены полные плотности колебаний обоих соединений в области „щели“ при различных значениях температуры: (a) — Ti_3Al , (b) — Zr_3Al . Как видно из этих графиков, в системе Ti_3Al при $T = 200$ K запрещенная зона практически исчезает — „схлопывается“, т.е. в области этих энергий возникают колебания, которые будут вносить вклад в фонон-фононное рассеяние. В то время как, в системе Zr_3Al запрещенная зона сохраняется до $T = 400$ K, включительно, уменьшается только ее ширина. При $T = 75$ K она составляет примерно 70 K, а при $T = 400$ K — около 30 K.

Экспериментальные исследования теплопроводности стеклообразных кристаллов, керамик и нанокomпозитов, имеющих „щель“ в низкоэнергетической области фононного спектра, показывают, что в этом случае,

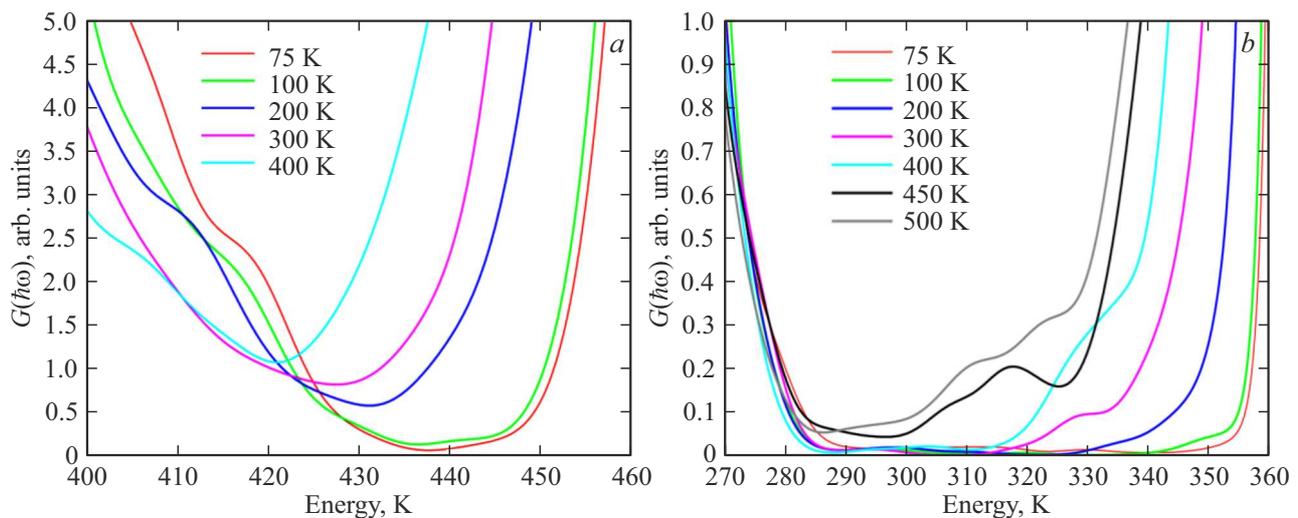


Рис. 4. Плотности колебательных состояний в области „щели“: (a) — Ti_3Al ; (b) — Zr_3Al . Представлены результаты для кристаллитов длиной 48 н.с.

на кривой температурной зависимости коэффициента теплопроводности наблюдаются аномалии в виде локального минимума или „плато“ [27–29]. Теоретическое описание этого эффекта было предложено в работе [30], где показано, что расположение „плато“ на графике температурной зависимости теплопроводности коррелирует с положением и шириной *низкоэнергетической* (до 10 К) „щели“ в фоновом спектре.

В нашем же случае, „щель“ находится в средней области колебательного спектра. Как видно из графика спектральной плотности на рис. 1, *b*, при температурах до 200 К число фононов циркония, участвующих в переносе энергии увеличивается. Вместе с этим растет взаимодействие фононов друг с другом, соответственно, кривая k_p убывает. При $T = 200$ К наблюдается резкий спад плотности колебательных мод. Возможно, с этого момента число фононов, участвующих в переносе и рассеянии энергии остается примерно на прежнем уровне. Соответственно, на кривой теплопроводности наблюдается „плато“. Дальнейшее увеличение температуры, вероятно, приводит к включению в процесс теплопереноса оптических фононов, обусловленных колебаниями атомов алюминия, и росту взаимодействия фононов друг с другом. Теплопроводность при этом уменьшается обратно пропорционально температуре. Примечательно, что температура Дебая (Θ_D), характеризующая энергию возбуждения всех возможных фононов в рассматриваемой системе, по данным [21,22] для Zr_3Al соответствует $\Theta_D \sim 325$ К, что совпадает с центром „запрещенной“ зоны. А в колебательном спектре атомов Ti_3Al „щель“ очень узкая и находится в более высокоэнергетической области, которая соответствует температуре ~ 440 К.

Таким образом, возможно, что аномалия на кривой температурной зависимости решеточной теплопроводности может возникать для соединений, имеющих такую

структуру и межатомное взаимодействие, которые бы приводили к возникновению широкой „запрещенной зоны“ в плотности колебательных состояний. Кроме того, эта „щель“ должна существовать при температуре выше Θ_D . Наличие таких условий, видимо, может привести к возникновению „ступеньки“ или „плато“ на кривой температурной зависимости решеточного коэффициента теплопроводности. Понятно, что это предположение требует более тщательной проверки, как теоретической, так и экспериментальной. Предварительно, можно сказать, что тестовое моделирование соединения Pt_3Al , в конфигурации L_{12} , с потенциалами из работы [30] показывает, что в плотности колебательных состояний имеется „запрещенная зона“, которая „схлопывается“ при повышении температуры до 250 К. Соответственно, кривая $k_p(T)$, полученная для этого соединения на кристаллите $12 \times 12 \times 48$ н.с., ведет себя аналогично как в соединении Ti_3Al , „плато“ не наблюдается. Для полного подтверждения или опровержения этого предположения, необходимо найти материал, в колебательном спектре которого имеется достаточно широкая „запрещенная зона“, не исчезающая до высоких значений температуры (выше Θ_D) и посмотреть, как будут изменяться значения коэффициента решеточной теплопроводности с температурой.

5. Заключение

В работе исследованы тепловые свойства интерметаллидов Ti_3Al и Zr_3Al со структурой L_{12} с помощью метода молекулярной динамики с потенциалами межатомного взаимодействия, построенными в модели погруженного атома. Проведено сравнение полных и парциальных спектров колебательных состояний и температурных зависимостей теплоемкостей Ti_3Al и Zr_3Al ,

полученных при моделировании с результатами *ab initio* расчетов. Оба метода показывают, что в обоих соединениях колебательные спектры атомов характеризуются наличием „запрещенной зоны“. В Zr_3Al ширина „щели“ на порядок больше, чем в Ti_3Al .

Проведены расчеты решеточной теплопроводности, основанные на методе неравновесной молекулярной динамики. Моделирование теплового потока проведено на кристаллитах сечением 12×12 и длинами 48 и 96 элементарных ячеек вдоль направления распространения энергии. Построены графики температурной зависимости коэффициента решеточной теплопроводности структурированных интерметаллидов Ti_3Al и Zr_3Al . На графиках $k_p(T)$ в системе Zr_3Al в интервале температур $200\text{ K} < T < 300\text{ K}$ коэффициент решеточной теплопроводности практически не изменяется. Предполагается, что такое поведение $k_p(T)$ связано с существованием „запрещенной зоны“ в колебательном спектре атомов до высокой температуры ($450\text{ K} > \Theta_D$). В соединении Ti_3Al , где в фоновом спектре также имеется „запрещенная зона“, но при температуре 200 K она „схлопывается“, и коэффициент решеточной теплопроводности убывает обратно пропорционально температуре.

Представленные модельные расчеты тепловых свойств Ti_3Al и Zr_3Al , могут быть полезны для интерпретации будущих экспериментов и теоретических исследований процессов в сложных соединениях, где фононы играют существенную роль.

Финансирование работы

Работа выполнена с использованием кластера „Уран“ СКЦ ИММ УрО РАН в рамках темы НИР УдмФИЦ УрО РАН „Теоретические исследования фазовых состояний, спектральных и кинетических свойств электронов и фононов в системах с пониженной размерностью“ № 121030100005-1.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] M. Maldovan. Phys. Rev. Lett. **110**, 025902 (2013).
- [2] G. Wehmeyer, T. Yabuki, C. Monachon, J. Wu, C. Dames. Appl. Phys. Rev. **4**, 041304 (2017).
- [3] T. Vasileiadis, J. Varghese, V. Babacic, J. Gomis-Bresco, D.N. Urrios, B. Graczykowski. J. Appl. Phys. **129**, 160901 (2021).
- [4] P. Bhalla, P. Kumar, N. Das, N. Singh. Phys. Rev. B **94**, 11, 115114 (2016).
- [5] S. Cao, S. Xiao, Y. Chen, L. Xu, X. Wang, J. Han, Yi Jia. Mater. Des. **121**, 61 (2017).
- [6] J. Chakraborty, K. Kumar, R. Ranjan, S. Ghosh Chowdhury, S.R. Singh. Acta Mater. **59**, 7, 2615 (2011).
- [7] X.Z. Ji, F. Jona, P.M. Marcus. Phys. Rev. B **68**, 075421 (2003).
- [8] G.E. Hill, J. Marklund, J. Martinson, B.J. Hopkins. Surface Sci. **24**, 2, 435 (1971).
- [9] E.B. Dolgusheva, V.Yu. Trubitsin. Comp. Mater. Sci. **111**, 231 (2016).
- [10] E.B. Dolgusheva. Comp. Mater. Sci. **155**, 55 (2018).
- [11] Е.Б. Долгушева, В.Ю. Трубицин. ФТТ **60**, 5, 835 (2018).
- [12] Е.И. Саламатов, Е.Б. Долгушева. ХФМ **23**, 4, 486 (2021).
- [13] Е.Б. Долгушева. ХФМ **24**, 3, 370 (2022).
- [14] S.M. Foiles, M.I. Baskes, M.S. Daw. Phys. Rev. B **33**, 7983 (1986).
- [15] H. Sheng. <https://sites.google.com/site/eampotentials/Home/ZrAl>
- [16] R.R. Zope, Y. Mishin. Phys. Rev. B **68**, 024102 (2003).
- [17] J.S.C. Jang, Y.W. Chen, L.J. Chang, H.Z. Cheng, C.C. Huang, C.Y. Tsau. Mater. Chem. Phys. **89**, 122 (2005).
- [18] R. Tewari, G.K. Dey, S. Banerjee, N. Prabhu. Met. Mater. Trans. A **37**, 49 (2006).
- [19] W.J. Meng, J.J. Faber, P.R. Okamoto, L.E. Rehn, B.J. Kestel, R.L. Hitterman. J. App. Phys. **67**, 1312 (1990).
- [20] N. Arikan, M. Ersen, H.Y. Ocak, A. Iyigor, A. Candan, S. Ugur, G. Ugur, R. Khenata, D. Varshney. Mod. Phys. Lett. B **27**, 30, 1350224 (2013).
- [21] N. Arikan. J. Phys. Chem. Solids **74**, 794 (2013).
- [22] H.L. Kagdada, H.J. Trivedi, S.B. Pillai, N.N. Som, P.K. Jha. AMR **1141**, 204 (2016).
- [23] S. Plimpton. J. Comput. Phys. **117**, 1 (1995). <http://lammps.sandia.gov>
- [24] P. Wirmsberger, D. Frenkel, C. Dellago. J. Chem. Phys. **143**, 124104 (2015).
- [25] D.J. Evans, W.G. Hoover. Annu. Rev. Fluid Mech. **18**, 243 (1986).
- [26] F. Müller-Plathe. J. Chem. Phys. **106**, 14, 6082 (1997).
- [27] R.G. Ross, P. Andersson, G. Backstrom. Nature **290**, 322 (1981).
- [28] A.I. Krivchikov, B.Ya. Gorodilov, O.A. Korolyuk, V.G. Manzhelii, O.O. Romantsova, H. Conrad, W. Press, J.S. Tse, D.D. Klug. Phys. Rev. B **73**, 064203 (2006).
- [29] A.I. Krivchikov, A.N. Yushchenko, O.A. Korolyuk, F.J. Bernmejo, R. Fernandez-Perea, I. Bustinduy, M.A. González. Phys. Rev. B **77**, 024202 (2008).
- [30] E. Salamatov. Chin. Phys. B **27**, 7, 076502 (2018).
- [31] J.S. Kim, D. Seol, J. Ji, H.S. Jang, Y. Kim, B.J. Lee. Calphad **59**, 131 (2017).

Редактор Ю.Э. Кутяев