
**ХИМИЧЕСКАЯ ТЕРМОДИНАМИКА
И ТЕРМОХИМИЯ**

УДК 530.1;541.182

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ЖИДКОГО ИНДИЯ МЕТОДОМ
МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ**
© 2021 г. Д. К. Белашенко^{a,*}^a *Национальный исследовательский технологический университет “Московский институт стали и сплавов”,
Москва, Россия***e-mail: dkbel75@gmail.com*

Поступила в редакцию 23.03.2021 г.

После доработки 23.03.2021 г.

Принята к публикации 19.04.2021 г.

Рассчитан потенциал ЕАМ для жидкого индия по опытным данным для парной корреляционной функции, плотности, энергии и сжимаемости при 433 К. Рассчитаны свойства моделей индия на бинодали при температурах до 3000 К. Получено хорошее согласие с опытом для плотности (до 1300 К), энергии (до 2000 К), коэффициентов самодиффузии и вязкости (до 1000 К), а также согласие с имеющимися парными корреляционными функциями (до 973 К). По форме ударной адиабаты индия рассчитаны дополнительные параметры потенциала ЕАМ (модель погруженного атома): без учета электронных вкладов в энергию и давление (ЕАМ-1) и с учетом этих вкладов по модели свободных электронов (ЕАМ-2). Построены две серии моделей при условиях ударного сжатия до степени сжатия $Z = 1.9$ (до давления 255 ГПа). Учет электронных вкладов при $Z = 1.9$ понижает температуру на ударной адиабате на ~35%. Изотермы холодного давления (при 298 К), рассчитанные с обоими потенциалами, хорошо согласуются друг с другом и с изотермой реального статического сжатия индия. Для нанокластеров индия размером от 13 до 5083 атомов рассчитаны значения избыточной поверхностной энергии, которые в макроскопическом пределе на 15–20% ниже поверхностного натяжения реального индия.

Ключевые слова: метод молекулярной динамики, моделирование структуры, жидкий индий, модель погруженного атома

DOI: 10.31857/S0044453721110054

В настоящей работе проведено моделирование структуры и физических свойств жидкого индия на основе модели погруженного атома (ЕАМ – Embedded atom model). Применена методика, при которой межатомный потенциал рассчитывается по структурным характеристикам жидкого индия алгоритмом Шоммерса [1], а также по энергии атомизации и по зависимости плотности металла вдоль бинодали от температуры [2, 3]. Рассмотрены состояния жидкого индия как вдоль бинодали, так и в условиях ударного сжатия при давлениях до 255 ГПа. Расчеты структуры и свойств моделей проводили методом классической молекулярной динамики (МД) [4].

МНОГОЧАСТИЧНЫЙ ПОТЕНЦИАЛ ЕАМ

В настоящее время при компьютерном моделировании металлов и сплавов часто используют потенциал ЕАМ [5] и модифицированный потенциал ЕАМ – МЕАМ [6]. В случае жидких и аморфных металлов с изотропной структурой хорошие результаты дает применение сферически-

симметричного потенциала ЕАМ, не включающего угловые переменные.

Потенциал ЕАМ имеет вид:

$$U = \sum_i \Phi(\rho_i) + \sum_{i<j} \varphi(r_{ij}). \quad (1)$$

Здесь U – потенциальная энергия системы, $\Phi(\rho_i)$ – потенциал погружения i -го атома, зависящий от эффективной электронной плотности ρ в месте нахождения центра атома, а вторая сумма по парам атомов – парный вклад – содержит обычный парный потенциал. Эффективная электронная плотность в точке нахождения атома создается окружающими атомами и определяется по формуле:

$$\rho_i = \sum_j \psi(r_{ij}), \quad (2)$$

где $\psi(r_{ij})$ – вклад в электронную плотность от соседа номер j . Функцию $\psi(r)$ удобно выбрать в виде:

$$\psi(r) = p_1 \exp(-p_2 r). \quad (3)$$

Потенциал погружения выбран ниже в виде кусочно-непрерывной функции вида:

$$\Phi(\rho) = a_1 + c_1(\rho - \rho_0)^2$$

при $\rho_1 \leq \rho \leq \rho_6$,

$$\Phi(\rho) = a_i + b_i(\rho - \rho_{i-1}) + c_i(\rho - \rho_{i-1})^2$$

при $\rho_i \leq \rho \leq \rho_{i-1}$ ($i = 2-5$),

$$\Phi(\rho) = [a_6 + b_6(\rho - \rho_5) + c_6(\rho - \rho_5)] [2\rho/\rho_5 - (\rho/\rho_5)^2]$$

при $\rho \leq \rho_5$, (4)

$$\Phi(\rho) = a_7 + b_7(\rho - \rho_6) + c_7(\rho - \rho_6)^m$$

при $\rho_6 \leq \rho \leq \rho_7$,

$$\Phi(\rho) = a_8 + b_8(\rho - \rho_7) + c_8(\rho - \rho_7)^n$$

при $\rho > \rho_7$,

причем $\rho_0 = 1$, а при $\rho = \rho_i$ непрерывны сама функция $\Phi(\rho)$ и ее первая производная. Функция $\Phi(\rho)$ и все коэффициенты a , b и c выражаются в эВ. Координаты точек деления оси абсцисс возрастают в последовательности $\rho_5 - \rho_4 - \rho_3 - \rho_2 - \rho_1 - \rho_0 - \rho_6 - \rho_7$. В итоге потенциал ЕАМ определяется параметрами $p_1, p_2, a_1, c_1 - c_8, \rho_1 - \rho_7, m, n$, которые позволяют в принципе подогнать свойства моделей к выбранным экспериментальным данным. Эту подгонку проводили по зависимости плотности и энергии индия от температуры вдоль бинодали, а также по данным статического и ударного сжатия индия. Выражения при $\rho < \rho_0$ используются при моделировании состояний с нормальной и пониженной плотностью, а при $\rho > \rho_6$ — для сжатых состояний. Параметр p_2 в (3) является подгоночным. Параметр p_1 определялся таким образом, чтобы получить для модели жидкости в “стандартном” состоянии (вблизи от точки плавления) среднее значение $\langle \rho \rangle = \rho_0 = 1$. В этом случае потенциал погружения не влияет на движение частиц, поскольку $d\Phi(\rho)/d\rho$ при $\rho \approx 1$ близко к нулю. Коэффициент a_1 определяется через энергию модели в “стандартном” состоянии при $\rho = 1$. Коэффициент c_1 определяется через модуль всестороннего сжатия в этом состоянии. Коэффициенты $c_2 - c_6$ подбираются по зависимости плотности индия от температуры вдоль бинодали, а c_7 и c_8 — по форме ударной адиабаты [2, 3]. Коэффициенты $a_2 - a_8, b_2 - b_8$ рассчитываются из условия непрерывности потенциала погружения и его производной в точках ρ_i .

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ДАННЫЕ ДЛЯ ЖИДКОГО ИНДИЯ

Экспериментальные значения плотности при температурах до 1100 К опубликованы в обзоре [7], в котором суммированы данные 11 исследований. В работе [8] соответствующие данные приве-

дены до 1300 К. При 298 К стандартная энтальпия газа In равна $\Delta H_{298}^0 = 243.3$ кДж/моль [9]. Для реакции сублимации $\Delta H = \Delta E + RT$, где E — внутренняя энергия. Отсюда стандартная энергия индия при 298 К по отношению к **покоящемуся** газу (с нулевой энергией) равна $E_{298}^0 = -[\Delta H_{298}^0 - (5/2)RT] = -237.1$ кДж/моль. Значения энтальпии твердого и жидкого индия при различных температурах по отношению к абсолютно нулю приведены в справочнике [10]. По этим данным можно рассчитать значения энергии индия при различных температурах по отношению к покоящемуся газу. Вблизи от температуры плавления (при 433 К) энергия жидкого индия равна -230.03 кДж/моль.

Изотермическая сжимаемость индия β_T была рассчитана в [11] по данным о скорости звука:

$$\beta_T, \text{ Па}^{-1} = (2.030 + 21.0 \times 10^{-4} T) \times 10^{-11}. \quad (5)$$

Эта формула пригодна до $T \sim 800$ К. Модуль всестороннего сжатия $K_T = \beta_T^{-1}$. При 433 К модуль равен $K_T = 34.02$ ГПа.

Самодиффузия в жидком индии исследована экспериментально в нескольких работах, при температурах преимущественно до 750–1000 К. В [12] рассмотрены работы, опубликованные до 2018 г., и проведены расчеты коэффициента самодиффузии приближенным методом с модифицированным псевдопотенциалом пустого иона до ~ 2500 К.

Значения вязкости индия в интервале до 1000 К приведены в обзоре [7].

РАСЧЕТ ПОТЕНЦИАЛА ЕАМ

Парный вклад в потенциал ЕАМ. Парные корреляционные функции (ПКФ) индия в интервале 433–973 К приведены в книге [13]. Для уточнения формы ПКФ на малых расстояниях, где играют заметную роль ложные осцилляции, эта ПКФ при 433 К была пересчитана методом наименьших квадратов [14] по таблицам структурных факторов из [13]. Поскольку ПКФ является продуктом фурье-преобразования структурного фактора (СФ), то метод [14] предполагает, что ложные осцилляции ПКФ на малых расстояниях являются результатом фурье-преобразования ошибок измерения структурного фактора (СФ). В итоге поправка к измеренному СФ определяется путем обратного фурье-преобразования ложных осцилляций ПКФ. Исходная и преобразованная ПКФ (см. рис. 1) немного отличаются в области первого минимума и вблизи минимального межчастичного расстояния. Невязка (стандартное отклонение, см. ниже) между ними на интервале 2.6–6.7 Å равна $R_g = 0.032$. Исходная ПКФ [13] обращается в нуль при 2.65 Å, а расчи-

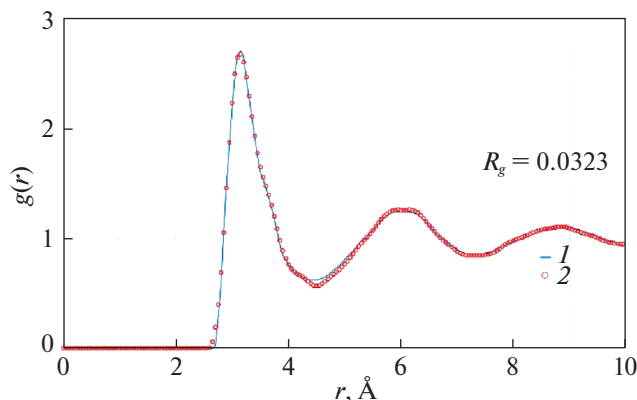


Рис. 1. Парные корреляционные функции индия при 433 К. Сплошная линия (1) – дифракционная функция [13], 2 – расчет по методу [14]. Невязка между ними на интервале 2.6–7.6 Å равна 0.0323.

танная по методу [14] – при 2.55 Å. Невязка на интервале 0–2.55 Å (т.е. средняя квадратичная амплитуда ложных осцилляций) равна 0.662 для исходной ПКФ и значительно меньше (0.125) для преобразованной. Неточности ПКФ на малых расстояниях заметно влияют на форму парного вклада в потенциал.

При сравнении графиков одного и того же свойства (например, двух различных гистограмм ПКФ $g_1(r)$ и $g_2(r)$), можно определять степень их различия как стандартное отклонение (“невязку”) с помощью формулы:

$$R_g = \left\{ \frac{1}{n_2 - n_1 + 1} \sum_{n_1}^{n_2} [g_1(r_j) - g_2(r_j)]^2 \right\}^{1/2}. \quad (6)$$

Здесь n_1 и n_2 – номера точек гистограмм ПКФ, между которыми вычисляется невязка. При невязке $R_g < 0.04$ две ПКФ визуально неразличимы. Величина R_g позволяет оценить различия между аналогичными данными, полученными в разных работах.

Парный вклад в потенциал ЕАМ был рассчитан в виде таблицы алгоритмом Шоммерса [1] по преобразованной ПКФ при 433 К. Модель состояла из 2048 частиц в основном кубе и имела плотность 7.02 г/см³ [7]. Радиус обрыва взаимодействия $r_c = 6.70$ Å был выбран равным координате на правом склоне второго пика ПКФ при $g(r) \approx 1.00$. В результате ~200 итераций была получена небольшая невязка $R_g \sim 0.04$ между ПКФ модели и преобразованной ПКФ. Давление модели составило при этом всего 0.0062 ГПа.

Наконец, таблица значений парного потенциала была аппроксимирована кусочно-непрерывной функцией с шестью участками по оси расстояний (точки деления r_1, r_2, \dots, r_6). На отрезке $r_1 - r_6$ она описывается формулой:

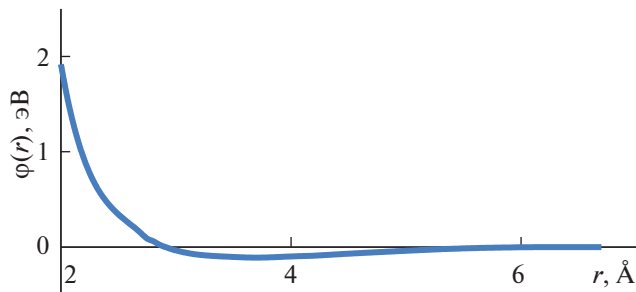


Рис. 2. Парный вклад в потенциал ЕАМ.

$$\varphi(r), \text{ эВ} = \sum_{i=1}^k \sum_{n=0}^L a_{in} (r - r_{i+1})^n H(r_i, r_{i+1}) \quad (7)$$

при $r_1 < r < r_6$.

Для индия выбрали $k = 5$ и $L = 8$. В этом выражении $H(r_i, r_{i+1})$ – функция Хевисайда, равная единице при $r_i \leq r \leq r_{i+1}$ и нулю в остальных случаях, i – это номер интервала на оси r ($i = 1, 2, \dots, 5$). Условие непрерывности в точках $r = r_i$ было применено к самому потенциалу и к его производной. Величина r_1 – это минимальное межчастичное расстояние в модели или близкое к нему значение. Радиус обрыва потенциала $r_c = r_6$ является границей второй координационной сферы. Радиусы r_i и коэффициенты a_{in} парного вклада для расстояний $2.55 \leq r \leq 6.70$ Å приведены в табл. 1.

На расстояниях меньше $r_{\min} = 2.65$ Å значения потенциала в процедуре Шоммерса не определяются и были выбраны эмпирически в виде восходящей ветви:

$$\varphi(r) = 0.194286 + 0.949092(r_{\min} - r) + 5.00(r_{\min} - r)^{3.50}. \quad (8)$$

При этом функция $\varphi(r)$ и ее производная непрерывны в точке $r = r_{\min}$. График парного потенциала ЕАМ показан на рис. 2. Этот вклад определяет структуру и свойства жидкого индия при условии $\langle \rho \rangle = 1$, т.е. вблизи от точки плавления при нулевом давлении.

Отметим, что для расчета парного вклада в потенциал ЕАМ использованы только значение плотности и дифракционная ПКФ жидкого индия вблизи от точки плавления.

Потенциал погружения. Этот вклад определяется формулами (3)–(4). Коэффициент $p_2 = 1.200$ – подгоночный, а $p_1 = 3.8404$ найден из условия, что $\langle \rho \rangle = 1$ при 433 К. Коэффициент $a_1 = -1.6986$ найден по известной энергии индия при 433 К (–230.02 кДж/моль), а $c_1 = 1.2188$ – по величине модуля всестороннего сжатия [11, 15]. В первом варианте расчета потенциала (потенциал ЕАМ-1) электронные вклады в давление и энергию не

Таблица 1. Коэффициенты разложения парного вклада в потенциал ЕАМ индия

a_{in}	Номер интервала i /Границы интервала $r_i - r_{i+1}$, Å				
	1/2.55–2.85	2/2.85–3.40	3/3.40–4.20	4/4.20–6.20	5/6.20–6.70
a_{i0}	0.28790207579732D–01	–0.98203137516975D–01	–0.90621046721935D–01	–0.11112447828054D–02	0.00000000000000D+00
a_{i1}	–0.54603308439255D+00	–0.59092823415995D–01	0.62023375183344D–01	–0.12457665288821D–02	0.00000000000000D+00
a_{i2}	0.24961190259093D+02	0.14236783683883D+00	0.46805484048862D+00	–0.44737160225177D–01	0.52088645449744D–01
a_{i3}	0.85353813510338D+03	0.17011298395360D+01	0.31112381194033D+01	–0.32009424179952D–01	0.88419036528623D+00
a_{i4}	0.11256088460076D+05	0.17465714370491D+02	0.88838780767650D+01	0.41180372922851D–01	0.55057929979120D+01
a_{i5}	0.71879605953736D+05	0.65150900923425D+02	0.13304057334364D+02	0.15698320932799D+00	0.19068804337084D+02
a_{i6}	0.23839584021068D+06	0.12539762870229D+03	0.12157427940802D+02	0.15547180314791D+00	0.38058816253067D+02
a_{i7}	0.39286451071906D+06	0.12173795882269D+03	0.68859085644049D+01	0.64700779995440D–01	0.40078402303117D+02
a_{i8}	0.25359827189694D+06	0.47467898456664D+02	0.18665516078792D+01	0.98709117421256D–02	0.17055229658189D+02

учитывались. Впрочем, на бинодали эти вклады малы; согласно модели свободных электронов (МСЭ), давление электронов даже при 1300 К равно 0.040 ГПа и энергия 1.074 кДж/моль.

Остальные коэффициенты c_2 – c_6 найдены по зависимости плотности индия на бинодали от температуры. При расчетах использовали опытные данные по плотности до 1100 К из обзора [7] и до 1300 К из [8]. Значения коэффициентов потенциала погружения в ЕАМ-1 приведены в табл. 2.

Таким образом, для построения потенциала погружения использованы только данные по энергии и сжимаемости жидкого индия вблизи от точки плавления, а также значения плотности вдоль бинодали.

МД-расчет свойств моделей

Структура реального индия ГЦТ – границен-трированная тетрагональная, с отношением параметров $c/a = 1.521$. Однако, поскольку нас интересовали преимущественно свойства жидкого индия, то для исходных кристаллических моделей выбрали более удобную для моделирования структуру ГЦК. При молекулярно-динамических (МД) расчетах применяли алгоритм Л. Верле, расчеты вели в режимах NVT и NpT . Свойства моделей в состояниях вдоль бинодали приведены в табл. 3. Как видно из таблицы, в случае применения потенциала ЕАМ-1 (без учета электронных вкладов) получено хорошее согласие между плотностью моделей и реальными значениями до 1300 К (колонки 2 и 3). Стандартное отклонение между величинами в этих колонках равно всего 0.023 г/см³ (около 0.35%). Получено также очень хорошее согласие с опытом [10] по энергии (колонки 7 и 8 в табл. 3) при всех температурах до 2000 К.

Модуль всестороннего сжатия K_T рассчитывали по зависимости давления от объема модели при постоянной температуре. Он приведен в 9-й колонке табл. 3 в сравнении с опытными данными (10-я колонка). Расчетное значение модуля при 433 К хорошо согласуется с опытом, но при нагревании моделей наблюдается постепенное занижение значений K_T . Этот эффект наблюдался и раньше во многих случаях моделирования жидких металлов. Он объясняется существенным недостатком модели погруженного атома – отсутствием средств влияния на температурные зависимости свойств металла [17].

Температура плавления модели индия при нулевом давлении, определенная методом отогрева, равна 484 К. Эта температура немного выше, чем у реального индия (429.7 К), из-за перегрева, обычного для этого метода.

Таблица 2. Коэффициенты разложения потенциала ЕАМ индия

p_1		p_2	
3.8404		1.2000	
Без учета электронных вкладов		С учетом электронных вкладов	
m	n	m	n
2.21	2.50	2.21	2.00

Коэффициенты потенциала погружения				
i	ρ_i	a_i , эВ	b_i , эВ	c_i , эВ
1	0.93	–1.698600	1.218800	1.2188
2	0.80	–1.692628	–0.170632	0.0000
3	0.70	–1.670446	–0.170632	0.4000
4	0.65	–1.649383	–0.250632	0.0000
5	0.50	–1.636851	–0.250632	0.0000
6	1.30	–1.599256	–0.250632	0.0000
Без учета электронных вкладов				
7	2.60	–1.588908	0.731280	0.7700
8	–	0.736765	3.068795	1.2800
С учетом электронных вкладов по МСЭ				
7	2.60	–1.588908	0.731280	0.8030
8	–	0.795693	3.168974	1.5000

Основная характеристика структуры жидкого индия – парная корреляционная функция (ПКФ) при 433 К показана на рис. 3. Она получена при моделировании индия с потенциалом ЕАМ-1. Невязка по отношению к дифракционной ПКФ [13, 14] на интервале 2.45–6.70 Å равна 0.040. Эти функции практически совпадают, немного различаясь только высотой первого пика. Аналогично выглядит и сравнение дифракционных [13] и модельных ПКФ при 773 и 973 К (рис. 4).

Невязка между модельными и дифракционными ПКФ остается небольшой даже при 973 К (6-я колонка, табл. 3). Хорошее согласие модельных и реальных ПКФ в широком интервале температур подтверждает адекватность межчастичного потенциала.

Коэффициенты самодиффузии индия рассчитаны по средним значениям квадратов смещений атомов и приведены в 11 колонке табл. 3. Их зависимость от температуры хорошо описывается выражением:

$$D, \text{ см}^2/\text{с} = 5.795 \times 10^{-10} T^{1.7062}. \quad (9)$$

Таблица 3. Расчетные свойства индия, полученные методом МД с потенциалом EAM-1

T, K	Плотность, г/см ³		⟨ρ⟩	p, ГПа	R _g	-E, кДж/моль		K _T , ГПа		D × 10 ⁵ , см ² /с		
	Опыт [7]	ЕАМ при p = 0				ЕАМ	Опыт [10]	ЕАМ	Опыт [11, 15]	ЕАМ	[16]	[12]
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
298	7.362	7.202	1.025	0.000	—	235.17	237.1	38.9	35.3 [9]	—	—	—
433	7.020	7.020	1.000	0.0035	0.036	229.8	230.02	34.0	34.02	1.70	1.39	1.77
500	6.968	6.973	0.9941	0.000	—	227.93	228.08	—	32.47	2.31	2.20	2.18
600	6.892	6.900	0.9836	<0.001	0.034	225.18	225.66	—	30.40	3.12	3.44	2.84
700	6.816	6.834	0.9732	<0.001	—	222.53	222.45	—	28.57	4.40	4.71	3.68
800	6.740	6.761	0.9636	<0.001	0.062	219.87	220.64	24.1	26.95	5.38	5.99	4.72
900	6.664	6.681	0.9521	0.003	—	217.12	216.93	—	25.51*	6.82	7.30	5.97
1000	6.587	6.612	0.9404	<0.001	0.056	214.52	214.20	—	24.21*	7.60	8.64	7.43
1100	6.511 6.550 [8]	6.532	0.9332	0.004	—	211.69	211.77	—	23.04*	9.12	—	9.09
1200	6.480 [8]	6.453	0.9182	<0.001	—	209.20	208.75	15.8	22.0*	10.32	—	10.9
1300	6.410 [8]	6.368	0.9045	-0.004	—	206.51	206.04	—	21.01*	11.66	—	12.9
1500	—	6.198	0.8827	0.0012	—	201.30	200.61	—	19.3*	15.22	—	17.4
2000	—	5.672	0.8017	0.005	—	187.3	187.00	—	16.05*	23.96	—	—
2500	—	5.088	0.7200	0.005	—	173.03	—	4.8	—	36.4	—	—
3000	—	4.618	0.6525	<0.001	—	159.64	—	—	—	49.1	—	—

Примечание. Стандартное отклонение в ячейках 4-й колонки возрастает сверху вниз от 0.037 до 0.145, * – экстраполяция.

Для сравнения в колонке 12 показаны экспериментальные данные [16], измеренные в серии 1958 года (см. рис. 5).

Недавно получены также теоретические оценки [12], основанные на анализе формы автокорреляционной функции скоростей (колонка 13). Они близки к [16] и к результатам МД-расчетов с потенциалом EAM.

Сдвиговая вязкость моделей индия была рассчитана по методу Грина–Кубо через автокорре-

ляционную функцию тензора вязких напряжений. С учетом работ [18, 19] вязкость можно рассчитывать по уравнению:

$$\eta = \frac{V}{10k_B T} \int_0^\infty \left(\sum_{\alpha\beta} \langle P_{\alpha\beta}(0) P_{\alpha\beta}(t) \rangle \right) dt, \quad (10)$$

где $\alpha\beta = xx, xy, xz, yx, yy, yz, zx, zy, zz$, и k_B – постоянная Больцмана. Далее, компоненты тензора

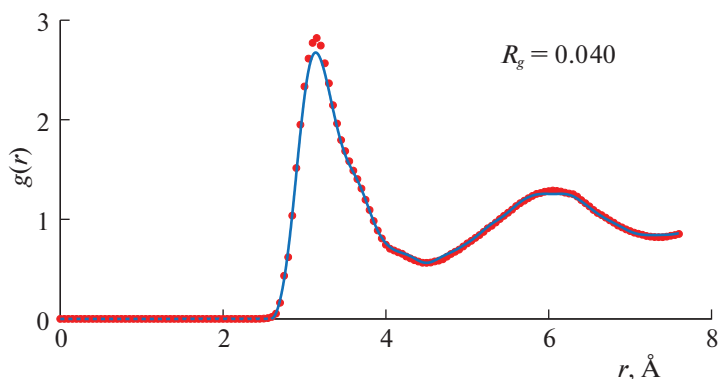


Рис. 3. Парные корреляционные функции индия. Сплошная линия – дифракционная функция [14] при 433 К, маркеры – метод МД с потенциалом EAM. Невязка между ними на интервале 2.5–7.6 Å равна 0.040.

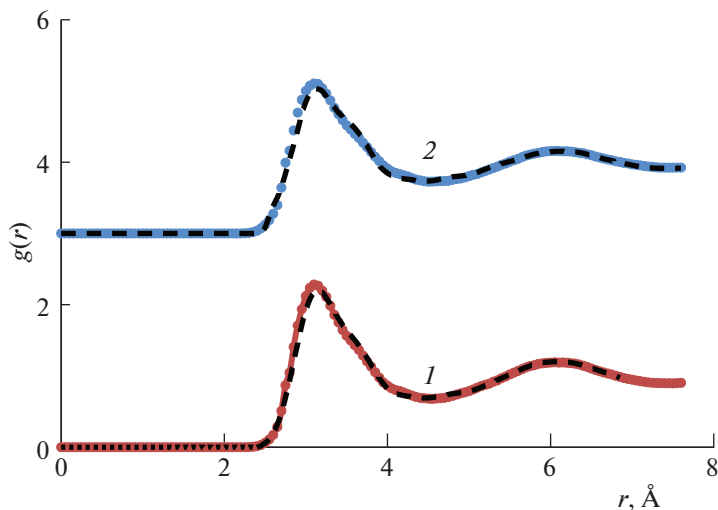


Рис. 4. Парные корреляционные функции индия при 773 и 973 К. Штриховые линии – дифракционные функции [13], маркеры – метод МД с потенциалом ЕАМ; R_g – невязки между ними на интервале 2.25–7.6 Å: 1 – 773 К, $R_g = 0.065$, 2 – 973 К, $R_g = 0.056$.

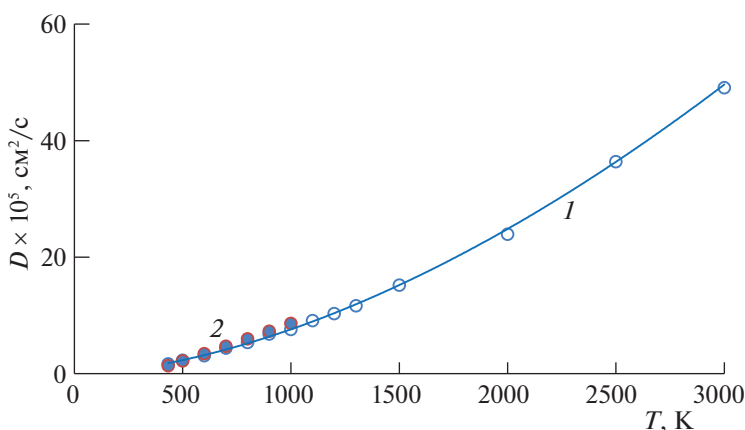


Рис. 5. Коэффициенты самодиффузии индия: 1 – МД-расчет с потенциалом ЕАМ (уравнение (9)), 2 – данные [16].

$$P_{\alpha\beta} = (\pi_{\alpha\beta} + \pi_{\beta\alpha})/2 - \delta_{\alpha\beta} \left(\sum_y \pi_{yy} \right) / 3,$$

где $\delta_{\alpha\beta}$ – символ Кронекера, и

$$\pi_{\alpha\beta} = \frac{1}{V} \left[\sum_j m_j v_{j\alpha} v_{j\beta} + \sum_j \sum_{k>j} (r_{j\alpha} - r_{k\alpha}) f_{jk\beta} \right].$$

Здесь m_j – масса атома j , $r_{j\alpha}$ и $r_{j\beta}$ – координаты атома j , $v_{j\alpha}$ и $v_{j\beta}$ – компоненты его скорости, $f_{jk\beta}$ – β -компонента силы, с которой атом j действует на атом k . Расчеты проводили прогонами длиной 10000 шагов по времени, величины $P_{\alpha\beta}(t)$ вычисляли на каждом шаге, интегралы (10) рассчитывали на интервалах длиной 4999 шагов по времени. Усреднение путем сдвига расчетного интервала вдоль таблицы данных одного МД-

прогона проводилось с использованием 5000 точек входа. Число прогонов составляло обычно 50. Таким образом, значение вязкости в (10) получалось усреднением по 2.25×10^6 значениям. Рас-

Таблица 4. Вязкость моделей жидкого индия на бинаодали, сПуаз

T , К	Вязкость моделей, потенциал ЕАМ-1	Опыт [7]
450	1.84 ± 0.017	1.748
600	1.21 ± 0.10	1.234
800	0.87 ± 0.10	0.951
1000	0.82 ± 0.08	0.813

Примечание. Со знаком \pm указаны вероятностные ошибки математического ожидания.

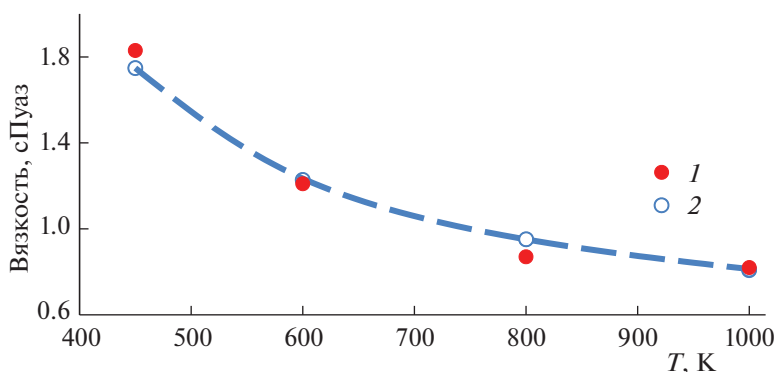


Рис. 6. Вязкость индия: 1 – модели с потенциалом EAM-1, 2 – данные обзора [7].

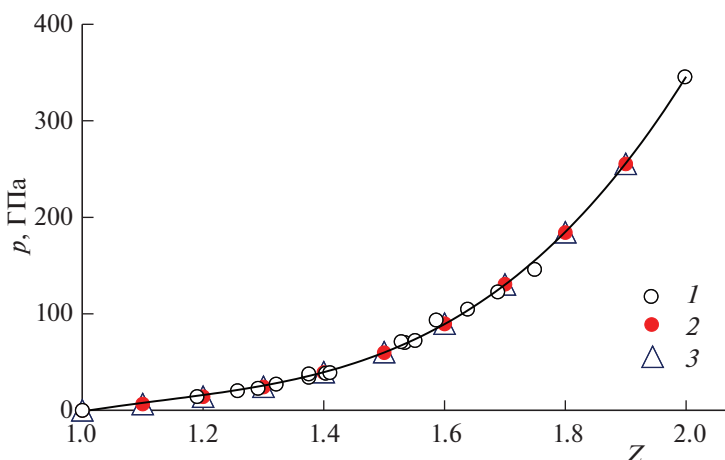


Рис. 7. Ударная адиабата индия: 1 – опыт [22, 23], 2 – МД-расчет с потенциалом EAM-1, 3 – расчет с потенциалом EAM-2.

четные значения вязкости при температурах 450–1000 К приведены в табл. 4 и на рис. 6. При всех температурах наблюдается хорошее согласие МД-расчета вязкости с реальными значениями.

МОДЕЛИРОВАНИЕ УДАРНОЙ АДИАБАТЫ (УА)

Наряду с моделированием свойств индия при обычных давлениях, интересно провести исследование поведения индия при высоких температурах и давлениях, а именно в условиях ударного сжатия. Уравнение ударной адиабаты (УА) (Гюгонио) имеет вид:

$$\Delta E = (1/2)(p + p_0)(V_0 - V), \quad (11)$$

где ΔE – изменение энергии при переходе из исходного состояния в сжатое, p_0 и V_0 – давление и объем в исходном состоянии, а p и V – то же в сжатом состоянии [20]. Ударное сжатие компактного индия исследовано в ряде работ [21]. При подборе данных для целей моделирования ис-

пользованы работы [22, 23]. Экспериментальные точки на адиабате Гюгонио хорошо описываются полиномом 3-й степени ($R^2 = 0.9980$):

$$p, \text{ ГПа} = 4.0696\text{E}+02Z^3 - 1.3822\text{E}+03Z^2 + 1.6446\text{E}+03Z - 6.7058\text{E}+02, \quad (12)$$

где $Z = V_0/V$, $V_0 = 16.356 \text{ см}^3/\text{моль}$ – исходный мольный объем индия при 298 К, а V – объем в данной точке ударной адиабаты (УА). Эта адиабата показана на рис. 7.

Потенциал EAM-1. Неучет электронных вкладов. По форме ударной адиабаты были рассчитаны методом [2, 3, 17] параметры потенциала EAM-1 для сжатых состояний индия $\rho_6, \rho_7, c_7, c_8, m$ и n без учета электронных вкладов. Они равны $\rho_6 = 1.30, \rho_7 = 2.60, c_7 = 0.77, c_8 = 1.28, m = 2.21, n = 2.50$ (табл. 2). На рис. 7 показаны расчетные давления моделей индия на УА в сравнении с опытом. В табл. 5 приведены характеристики моделей индия на УА, рассчитанные методом МД с потенциалом EAM-1. Согласие с опытом очень

Таблица 5. Свойства моделей индия в условиях ударного сжатия, потенциал ЕАМ-1, $V_0 = 16.356 \text{ см}^3/\text{моль}$

Z	p , ГПа (9)	ΔE , кДж/моль	T , К моделей	$p_{\text{МД}}$, ГПа модель	$E_{298}^0 + \Delta E$, кДж/моль	$E_{\text{МД}}$, кДж/моль
1	2	3	4	5	6	7
1.00*	0.90	0.0	298	0.9	-237.1	-235.4
1.10*	7.68	5.71	350	6.51	-231.39	-231.28
1.20*	15.8	21.53	570	14.1	-215.57	-215.91
1.30	25.57	48.26	990	24.14	-188.84	-188.90
1.40	39.45	92.17	1400	39.12	-144.93	-144.69
1.50	59.86	163.18	3000	59.73	-73.92	-73.86
1.60	89.26	273.73	6370	89.64	36.63	36.75
1.70	130.08	438.02	12240	130.7	200.92	200.49
1.80	184.76	671.55	21670	184.21	434.45	435.02
1.90	255.76	990.75	35590	255.3	753.65	753.45

Примечания: * ГЦК структура, $E_{298}^0 = -237.1$ кДж/моль, $Z = V_0/V$.

хорошее. Стандартное отклонение от данных опыта по давлению для жидкого индия (2-я и 5-я колонки табл. 5) равно 0.39 ГПа, а по энергии (6-я и 7-я колонки) – 0.27 кДж/моль. Зависимость температуры в сжатых состояниях от степени сжатия Z показана на рис. 8.

Холодное давление. Изотерма давления индия (холодное давление) при температуре 298 К была измерена при давлениях $p \leq 67$ ГПа [24] методом сжатия в алмазных ячейках. Эти результаты описываются выражением

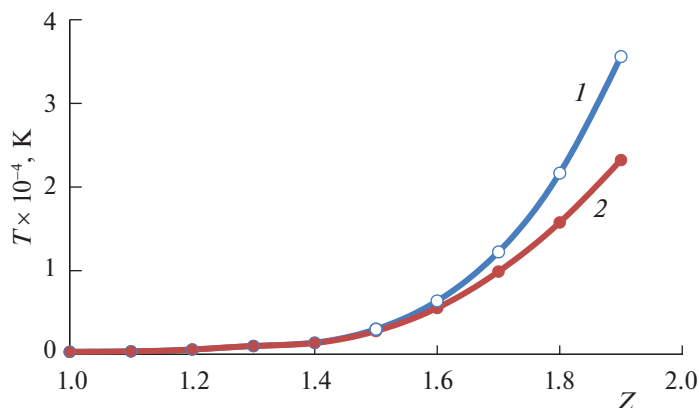
$$p = 3K_0x^{-5}(1-x)\exp[C_{02}(1-x)], \quad (13)$$

где $x = (1/Z)^{1/3}$, $C_{02} = (3/2)(K'_0 - 3)$, $K_0 = 39$ ГПа, $K'_0 = 5.43$. С потенциалом ЕАМ-1 были построены модели индия при 298 К и степенях сжатия Z до 1.9. Значения холодного давления (при 298 К)

показаны на рис. 9 в сравнении с экспериментальными данными [24]. Расчетные значения давления очень хорошо согласуются с опытом.

Потенциал ЕАМ-2. Учет электронных вкладов. При проведении расчета УА индия с учетом электронных вкладов в энергию и давление по методу [2, 25] было принято, что давление модели равно сумме давлений ионной подсистемы с новым потенциалом ЕАМ-2 и вклада от электронного газа, а энергия модели также равна соответствующей сумме энергий. Суммарные давление и энергия модели при заданном значении Z должны равняться по-прежнему реальным значениям на УА при том же Z . В связи с этим параметры потенциала ЕАМ-2, относящиеся к сжатым состояниям, должны отличаться от параметров ЕАМ-1. Расчеты параметров проводили методом итераций.

Поскольку сведения о поведении электронного газа в индии у нас отсутствовали, то было ре-

**Рис. 8.** Температура на ударной адиабате: 1 – потенциал ЕАМ-1, 2 – потенциал ЕАМ-2.

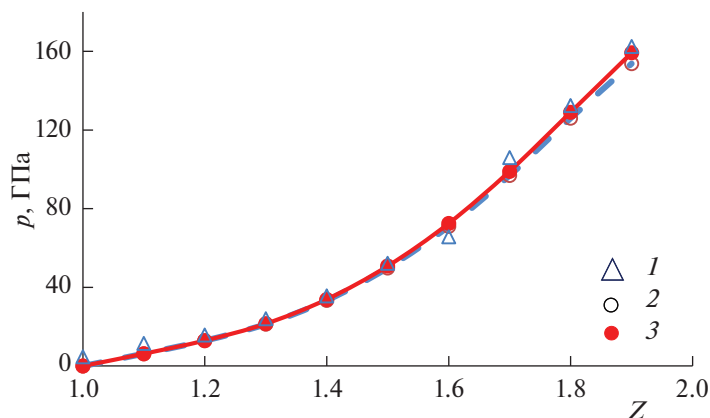


Рис. 9. Изотермы давления индия при 298 К (холодное давление): 1 – опытные данные [24] (выше 67 ГПа – экстраполяция по уравнению (13)), 2 – потенциал ЕАМ-1, 3 – потенциал ЕАМ-2.

шено применить в качестве приближения модель свободных электронов (МСЭ). В этой модели можно использовать два уравнения для числа электронов и их энергии [26]:

$$N_{el} = C \int_0^\infty \frac{\varepsilon^{1/2} d\varepsilon}{1 + e^{(\varepsilon - \mu)/kT}}, \quad E_{el} = C \int_0^\infty \frac{\varepsilon^{3/2} d\varepsilon}{1 + e^{(\varepsilon - \mu)/kT}}. \quad (14)$$

В этих уравнениях величина N_{el} – число электронов, ε и μ – энергия и химический потенциал электронов. В модели свободных электронов коэффициент $C = 4\pi(2m)^{3/2}V/h^3$, где m – масса электрона, V – объем металла и h – постоянная Планка. Эти уравнения обычно хорошо выполняются для простых жидких металлов, структура которых изотропна. Задав N_{el} , объем V и температуру T , можно найти из первого уравнения величину μ , а потом из второго уравнения – энергию электро-

нов E_{el} . При невысоких температурах из этих уравнений получается известное решение А. Зоммерфельда. Обычно при расчетах используют не саму величину E_{el} , а ее инкремент $E_{elT}(T) = E_{el}(T) - E_{el}(298 \text{ К})$, который при $T = 298 \text{ К}$ обращается в нуль.

В результате итерационного подбора были приняты следующие оптимальные значения коэффициентов потенциала погружения в ЕАМ-2: $\rho_7 = 2.60$, $m = 2.21$, $n = 2.0$, $c_7 = 0.803$, $c_8 = 1.50$ (табл. 2). С применением потенциала ЕАМ-2 были рассчитаны свойства моделей на УА. Они приведены в табл. 6. Как видно из таблицы, сумма давлений модели и электронного газа в точках на УА (7 колонка) хорошо согласуются с давлением на УА (2 колонка). Соответственно, сумма энергий модели и электронного газа (11 колонка) близки к энергии на УА (8 колонка). Согласие не-

Таблица 6. Свойства моделей индия в условиях ударного сжатия, потенциал ЕАМ-2, $V_0 = 16.356 \text{ см}^3/\text{моль}$

Z	p, ГПа (7)	ΔE , кДж/моль	T, К моделей	p, ГПа моделей	p_{elT} , ГПа	$p + p_{elT}$, ГПа	$E_{298}^0 + \Delta E$, кДж/моль	E_{elT} , кДж/моль	E_{MD} , кДж/моль	$E_{MD} + E_{elT}$, кДж/моль
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
1.00*	0	0	298	0.90	0	0.90	-237.1	0	-235.4	-235.4
1.10*	7.68	5.71	350	6.51	0.001	6.51	-231.39	0.020	-231.28	-231.26
1.20*	15.8	21.53	570	14.15	0.006	14.16	-215.57	0.132	-215.00	-214.87
1.30*	25.57	48.26	990	24.37	0.025	24.39	-188.84	0.473	-188.79	-188.32
1.40	39.45	92.17	1350	39.52	0.050	39.57	-144.93	0.875	-145.65	-144.78
1.50	59.86	163.18	2780	60.07	0.225	60.29	-73.92	3.681	-77.98	-74.30
1.60	89.26	273.73	5540	88.94	0.919	89.86	36.63	14.10	21.76	35.86
1.70	130.08	438.02	9890	127.45	2.980	130.43	200.92	43.00	158.28	201.26
1.80	184.76	671.55	15760	176.84	7.63	184.47	434.45	103.96	330.54	434.50
1.90	255.76	990.75	23220	23940	16.47	255.51	753.65	212.66	541.34	754.00

Примечания: * ГЦК-структура, $E_{298}^0 = -237.1 \text{ кДж/моль}$, $Z = V_0/V$.

сколько ухудшается для твердого индия, для которого потенциал ЕАМ работает хуже.

Результаты расчетов для температуры на адиабате показаны на рис. 8. Заметная разница между температурами в случаях ЕАМ-1 и ЕАМ-2 наблюдается лишь при $Z > 1.5$. При $Z = 1.9$ учет электронных вкладов по МСЭ приводит к понижению температуры на $\sim 35\%$. Знание фактической температуры на УА было бы очень полезно для анализа поведения электронного газа. Поэтому опыты по ударному сжатию под действием импульса лазера с одновременным измерением температуры [27–29] очень перспективны.

Холодное давление при учете потенциала ЕАМ-2. Аналогично случаю потенциала ЕАМ-1, можно рассчитать график холодного давления (изотерму при 298 К) моделей индия, используя потенциал ЕАМ-2. Эта изотерма показана на рис. 9. Хотя опытные данные получены только до 67 ГПа, хорошее согласие расчетного давления с аппроксимантой (9) наблюдается до 160 ГПа.

Случай индия уникален в том смысле, что потенциалы ЕАМ-1 и ЕАМ-2, рассчитанные по форме УА, хорошо описывают и график холодного давления. Анализ других случаев показывает, что такое согласование данных при сильно отличающихся температурах – довольно редкое явление [17].

Нанокластеры индия. Анализ поверхностных свойств нанокластеров методом МД проводился ранее в ряде работ ([30–32] и др.). В частности, проводилась проверка применимости к нанокластерам макроскопических уравнений термодинамики (уравнения Лапласа для давления, формулы Толмена для зависимости поверхностного натяжения от кривизны поверхности, уравнения Кельвина для давления пара). В [30] исследовали методом МД нанокластеры с потенциалом Леннард-Джонса, а в [31] – нанокластеры серебра, построенные с потенциалом ЕАМ [5], а также методом *ab initio*. В [32] были исследованы нанокластеры Ag, а также Ag, Fe и Zn с потенциалами ЕАМ. Обычная погрешность расчета поверхностного натяжения металлических кластеров методом МД с потенциалами ЕАМ составляет $\sim 15\text{--}25\%$ (Li, [33], Sn [34]), причем в сторону как завышения, так и занижения.

Методом МД значительно проще определять не поверхностное натяжение σ , а избыточную энергию поверхности h . В силу термодинамического соотношения

$$\sigma = h + Td\sigma/dT \quad (15)$$

можно было бы ожидать, что $\sigma < h$ (поскольку обычно $d\sigma/dT < 0$), причем разница между σ и h должна быть невелика. В [31] величины σ и h оценивали для моделей кристаллических кластеров Ag приближенным образом, по изменению пара-

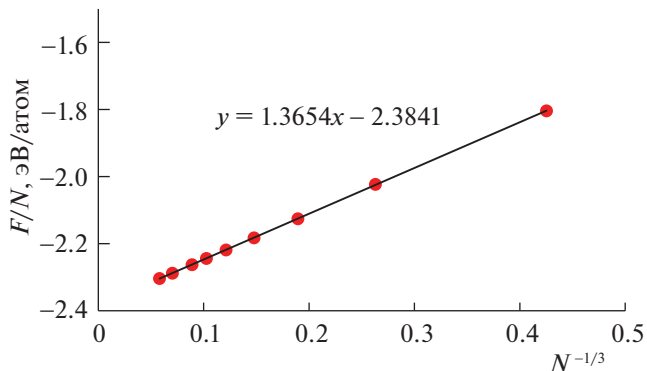


Рис. 10. Зависимость удельной энергии нанокластеров индия E/N (эВ/атом) от размеров кластера N . Расчет по данным табл. 7.

метра решетки. Для кластеров Ag размером от 13 до 249 атомов при расчетах методом *ab initio* (SIESTA) отклонения σ от h были невелики (разница в несколько процентов) и знакопеременны, а при расчетах методом МД с потенциалом ЕАМ из [5] величина σ при всех размерах кластеров Ag от 249 до 5233 атомов была на несколько процентов больше, чем h [31]. Это означает, что либо применяемые методы оценки поверхностных свойств кластеров неточны, либо не выполняется соотношение (15) для нанокластеров.

В соответствии с [32], энергию E нанокластера с N атомами можно записать в виде

$$E = aN + bN^{2/3}, \quad \text{или} \quad E/N = a + bN^{-1/3}. \quad (16)$$

В [32] показано, что для Ag, Ag, Fe и Zn зависимость E/N от $N^{-1/3}$ действительно спрямляется в этих координатах с высокой точностью. Для кластеров Ag при 0 К из [31] экстраполяция величин h и σ на макроскопический размер при 0 К по правилу $N^{-1/3}$ (16) дает близкие значения: $h = 1.00$ и $\sigma = 1.04$ Дж/м², причем фактическое значение для Ag $\sigma = 1.34$ Дж/м² [29]. В работе [32] такая экстраполяция с другим потенциалом ЕАМ дает при 0 К для серебра $h = 0.84$ Дж/м². Отсюда видно, что из-за расчетных неточностей метод МД не позволяет решить однозначно вопрос о соотношении между σ и h .

Аналогично [32], можно построить серию икозаэдрических нанокластеров Маккея с потенциалом ЕАМ-1 индия и исследовать их поведение в различных условиях. Значения энергии этих нанокластеров были рассчитаны методом МД при 433 К и приведены в табл. 7. Зависимость (16) выполняется и для нанокластеров индия, причем $a = -2.3841$ эВ/атом = -230.02 кДж/моль, а $b = 1.3654$ эВ/атом^{2/3} (см. рис. 10).

Величина a совпадает с удельной энергией жидкого индия при 433 К (-230.02 , см. табл. 3).

Таблица 7. Поверхностные свойства кластеров индия при 433 К

N	$E, \text{эВ}$	$N^{-1/3}$	E/N	$E_{\text{surf}}, \text{эВ}$	$S_s, \text{Å}^2$	$E_{\text{surf}}/S_s, \text{мДж/м}^2$	$S_s^*, \text{Å}^2$	$E_{\text{surf}}/S_s^*, \text{мДж/м}^2$
13	-23.453	0.42529	-1.80408	7.55	96.116	1258	95.82	1262
55	-111.268	0.26295	-2.02305	19.75	411.783	768.3	408.0	775.4
147	-312.473	0.18948	-2.12567	38.03	972.396	626.6	939.4	648.6
309	-674.523	0.14792	-2.18292	62.41	1676.85	596.3	1638	610.4
561	-1244.84	0.12125	-2.21897	92.88	2642.82	563.0	2569	579.2
923	-2071.25	0.10271	-2.24404	129.44	3815.09	543.6	3686	562.6
1415	-3201.74	0.08907	-2.26271	172.09	5087.95	541.9	4968	555.0
2869	-6563.78	0.07038	-2.28783	275.69	8482.68	520.7	8213	537.8
5083	-11712.0	0.05816	-2.30415	403.65	12528.1	516.2	12151	532.2
∞	-	-	-2.3841	-	-	458.9	-	474.5

Коэффициент же b отвечает за поверхностную энергию кластеров [32].

В наших обозначениях поверхностная энергия кластера равна $E_{\text{surf}} = bN^{2/3}$. Эти величины для кластеров с размерами $13 \leq N \leq 5083$ приведены в табл. 7. Чтобы провести сравнение с поверхностным натяжением σ , оценим поверхность кластеров, полагая ее равной сумме S_s площадей внешних граней поверхностных симплексов Делоне [32]. В табл. 7 приведены значения S_s и удельной поверхностной энергии кластеров E_{surf}/S_s . График величины S_s также спрямляется в координатах $S_s - N^{-1/3}$ при $N > 145$ (см. рис. 11). Предельное значение отношения E_{surf}/S_s при $N \rightarrow \infty$ равно 458.9 мДж/м².

Реальное значение поверхностного натяжения индия при 433 К известно с разбросом: 560 [35], 595 [36], 556 [37], 572 мДж/м² [8]. Как видно из табл. 7, удельная поверхностная энергия индия E_{surf}/S_s в пределе $N \rightarrow \infty$ ниже реальной величины

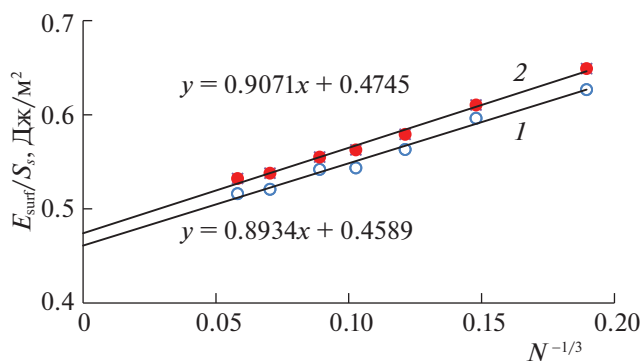


Рис. 11. Зависимости удельной энергии поверхности (Дж/м²) от размеров кластера: 1 – с учетом площади поверхности S_s , 2 – с учетом скорректированной площади поверхности S_s^* . Расчет по данным табл. 7.

σ на ~20%. Аналогичное занижение поверхностной энергии по отношению к величине σ было получено для кластеров Ag в [32].

Одной из причин этого занижения могло бы быть завышение поверхности кластеров, образованной поверхностными гранями симплексов Делоне, из-за своей естественной негладкости по типу черепичной крыши. При проверке этой возможности каждая грань симплексов, выходящая на поверхность кластера, поворачивалась перпендикулярно к вектору, соединяющему эту грань с центром масс кластера. Новая сумма площадей граней симплекса (повернутых) S_s^* оказалась ниже исходной в среднем всего на 3–4% (см. табл. 7). На соответствующую долю увеличивается при этом удельная поверхностная энергия (см. рис. 11). Очевидно, этот эффект составляет лишь небольшую часть расхождения между h моделями и σ реального индия.

Другая причина связана с тем, что, возможно, не сохраняется линейная зависимость удельной поверхностной энергии от $N^{-1/3}$ в интервале размеров кластера $N^{-1/3} < 0.06$. Наконец, причина расхождений может быть связана с формой потенциала ЕАМ.

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

МД моделирование жидкого индия проведено в настоящей работе, видимо, впервые. Результаты моделирования являются весьма показательными с точки зрения применимости потенциалов ЕАМ. Почти все рассмотренные выше свойства индия очень хорошо описываются предложенным потенциалом ЕАМ. Удалось даже получить высокую степень согласованности при описании ударной адиабаты и изотермы холодного давления единым потенциалом. Такая согласованность пока не достигалась в случае калия, руби-

дия, алюминия, железа, никеля, олова и др. [17]. В этом смысле индий выделяется из целого ряда других металлов. Очень вероятно, что такие же хорошие результаты могут быть получены при моделировании других свойств индия, не рассмотренных в этой статье.

Возникает вопрос, нельзя ли для металлов, рассмотренных в [17], добиться иным выбором потенциалов ЕАМ лучшей согласованности результатов, полученных по форме ударной адиабаты и по форме изотермы холодного давления. Если такая задача будет решена, то это будет означать многозначность выбора потенциалов ЕАМ, причем не тривиальную многозначность, связанную с эквивалентными комбинациями парного вклада в потенциал ЕАМ и потенциала погружения. Пример такой неоднозначности был отмечен в случае нескольких парных потенциалов лития [38].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Schommers W.* // Phys. Lett. 1973. V. 43A. P. 157.
2. *Belashchenko D.K.* Liquid Metals. From Interparticle Potentials to the Properties, Shock Compression, Earth's Core and Nanoclusters. Nova Science Publ. N.Y. 2018.
3. *Белащенко Д.К.* // УФН. 2013. Т. 183. № 12. С. 1281.
4. *Норман Г.Э., Стегайлов В.В.* // Математическое моделирование. 2012. Т. 24. № 6. С. 3.
5. *Daw M.S., Baskes M.I.* // Phys. Rev. 1984. V. B 29. P. 6443.
6. *Baskes M.I., Chen S.P., Cherne F.J.* // Phys. Rev. B. 2002. V. 66. 104107.
7. *Assael M.J., Armyra I.J., Brillo J. et al.* // J. Phys. Chem. Ref. Data. 2012. V. 41. № 3. P. 033101-16.
8. *Ченцов В.П., Шевченко В.Г., Мозговой А.Г., Покрасин М.А.* // Перспективные материалы. 2011. № 3. С. 46.
9. Данные на сайте: www.webelements.com.
10. Термодинамические свойства индивидуальных веществ /Под ред. В.П. Глушко. Т. 3. М.: Наука, 1981 г.
11. *Almond D.P., Blairs S.* // J. Chem. Thermodyn. 1980. V. 12. P. 1105.
12. *Patel A.B., Bhatt N.K.* // AIP Conference Proceedings. 2018. V. 1951. 020003.
13. *Waseda Y.* The Structure of Non-Crystalline Materials. Liquids and Amorphous Solids. N.Y.: McGraw-Hill, 1980. 325 p.
14. *Белащенко Д.К.* // Кристаллография. 1998. Т. 43. № 3. С. 400.
15. *Li Huaming, Sun Yongli, Mo Li.* // AIP Advances. 2015. V. 5. 097163.
16. *Careri G., Paoletti A., Vicentini M.* // Nuovo cimento. 1958. V. 10. № 6. P. 1088.
17. *Белащенко Д.К.* // УФН. 2020. Т. 190. № 12. С. 1.
18. *Davis P.J., Evans D.J.* // J. Chem. Phys. 1994. V. 100. P. 541.
19. *Lee S.H., Chang T.* // Bull. Korean Chem. Soc. 2003. V. 24. P. 1590.
20. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теоретическая физика. Т. VI. Гидродинамика. М.: Наука, 1986.
21. Данные на сайте: <http://www.ihed.ras.ru/rusbank/>.
22. *Marsh S.P.* (Ed.). LASL Shock Hugoniot Data (Univ. California Press, Berkeley, 1980)
23. *Al'tshuler L.V., Bakanova A.A., Dudoladov I.P. et al.* // J. Appl. Mech. Techn. Phys. 1981. V. 22. P. 145.
24. *Schulte O., Holzapfel W.B.* // Phys. Rev. B. 1993. V. 48. № 2. P. 767.
25. *Белащенко Д.К.* // ТВТ. 2013. Т. 51. № 5. С. 697.
26. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Статистическая физика. М.: ГИТТЛ, 1951.
27. *Ozaki N., Tanaka K.A., Ono T. et al.* // Phys. Plasmas. 2004. V. 11. № 4. P. 1600.
28. *Koenig M., Henry E., Huser G. et al.* // Nucl. Fusion. 2004. V. 44. S208.
29. *Qiao Z., Yan L., Cao Z., Xie Y.* // J. Alloys and Compounds. 2001. V. 325. P. 180.
30. *Thompson S.M., Gubbins K.E., Walton J.P.R.B. et al.* // J. Chem. Phys. 1984. V. 81. P. 530.
31. *Medasani B., Park Y.H., Vasiliev I.* // Phys. Rev. B. 2007. V. 75. 235436.
32. *Белащенко Д.К.* // Журн. физ. химии. 2015. Т. 89. № 3. С. 517.
33. *Vella J.R., Stillinger F.H., Panagiotopoulos A.Z. et al.* // J. Phys. Chem. B. 2015. V. 119. P. 8960.
34. *Vella J.R., Stillinger F.H., Panagiotopoulos A.Z. et al.* // Phys. Rev. B. 2017. V. 95. 064202.
35. *White D.W.G.* // Met. Trans. 1972. V. 3. P. 1933.
36. *Sageman D.R.* Surface Tension of Molten Metals Using the Sessile Drop Method: Dissertation. Iowa State University. 1972.
37. Physical constants of pure Indium // Indium Corp.
38. *Canales M., Padro J.A., Gonzales L.E., Giro A.* // J. Phys.: Condens. Matter. 1993. V. 5. № 19. P. 3095.