

ТЕОРИЯ
МЕТАЛЛОВ

УДК 536.413.001

ИЗМЕНЕНИЕ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ
И ТЕМПЕРАТУРЫ ПЛАВЛЕНИЯ НИОБИЯ С РОСТОМ ДАВЛЕНИЯ

© 2019 г. С. П. Крамынин^а, *, Э. Н. Ахмедов^б

^аФГБУН Институт физики им. Х.И. Амирханова Дагестанского НЦ РАН,
ул. М. Ярагского 94, Махачкала, Республика Дагестан, 367015 Россия

^бФГБУН Институт проблем геотермии Дагестанского НЦ РАН,
пр-т Шамиля 39-а, Махачкала, 367030 Россия

*e-mail: kraminin@mail.ru

Поступила в редакцию 07.12.2018 г.

После доработки 06.04.2019 г.

Принята к публикации 05.06.2019 г.

Исходя из парного межатомного потенциала Ми–Леннард–Джонса и модели кристалла Эйнштейна, получены термическое уравнение состояния и барические зависимости теплофизических свойств ниобия. Изучены барические зависимости следующих свойств: температура Дебая, первый, второй и третий параметры Грюнайзена, изотермический модуль сжатия, изохорная и изобарная теплоемкость, коэффициент теплового расширения и производные этих параметров по давлению вдоль изотерм 300 и 3000 К. Результаты расчетов показали хорошее согласие с экспериментальными данными. На основании полученных результатов рассчитана барическая зависимость температуры плавления ниобия и ее производная по давлению.

Ключевые слова: ниобий, температура Дебая, параметр Грюнайзена, уравнение состояния, модуль сжатия, температура плавления

DOI: 10.1134/S0015323019110093

ВВЕДЕНИЕ

Зависимость свойств ниобия от давления изучена сравнительно мало, и до сих пор для него не вполне ясна зависимость коэффициента теплового объемного расширения: $\alpha_p = (\partial \ln V / \partial T)_p$, теплоемкости (C_v и C_p) и температуры плавления (T_m) от величины гидростатического (всестороннего) давления (P) вдоль различных изотерм. Используемые для изучения уравнения состояния кристалла различные методы (как компьютерные, так и аналитические) содержат в своем формализме очень много подгоночных констант, лишенных физического смысла. Поэтому затруднительно как однозначно восстановить их из экспериментальных данных, так и предсказать их барическую зависимость вдоль изотермы. Это делает результаты, полученные такими методами, неудобными для дальнейших приложений. Только в одной работе [1] были рассчитаны барические зависимости для α_p и теплоемкости (C_v и C_p) ниобия. Практически нет данных по барической зависимости температуры плавления ниобия $T_m(P)$. Зависимость $T_m(P)$ была рассчитана только в одной работе [2] в очень узком диапазоне давлений от 0 до $P = 2.5$ ГПа. Что касается барической

зависимости поверхностной энергии (σ), то для ниобия этих данных в литературе нет.

В связи с этим в данной работе сравнительно простым методом рассчитаны как уравнение состояния, так и изменение теплофизических свойств ниобия при гидростатическом сжатии вдоль двух изотерм: для низкой (300 К) и высокой (3000 К) температуры. Расчеты показали хорошее согласие с имеющимися в литературе экспериментальными оценками. На основании этих результатов рассчитана как зависимость $T_m(P)$, так и зависимости $T_m'(P)$ и $\sigma(P)$ для ниобия.

МЕТОД РАСЧЕТА
ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ

Представим парное межатомное взаимодействие в виде потенциала Ми–Леннард–Джонса, имеющего вид:

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

где D и r_0 – глубина и координата минимума потенциала, $b > a > 1$ – параметры.

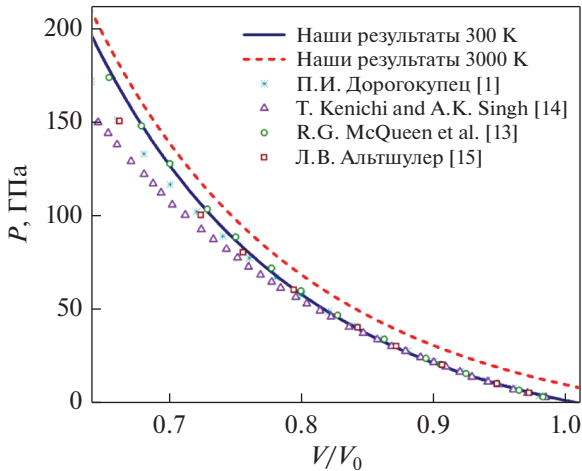


Рис. 1. Изотерма уравнения состояния ниобия.

Для расчета термодинамических свойств ниобия использовали формализм, полученный в [3–6]. Выражения [3–6] позволяют рассчитать зависимость как уравнения состояния, так и различных решеточных свойств от относительного объема V/V_0 и температуры T для данной структуры одноатомного кристалла, если известны все четыре параметра межатомного потенциала (1). Данный формализм был использован для изучения термодинамических свойств железа [4, 6, 7], алмаза [5, 8], кремния, германия [5, 9] и молибдена [10] при различных P – T -условиях и показал хорошие результаты. Поэтому мы использовали данный метод для расчета свойств ниобия.

ПАРАМЕТРЫ МЕЖАТОМНОГО ПОТЕНЦИАЛА НИОБИЯ

Кристалл ниобия (масса атома $m(\text{Nb}) = 92.906$ а. е. м.) имеет объемно центрированную кубическую (ОЦК) структуру. Ниобий является одним из самых твердых и тугоплавких кристаллов, в связи с чем экспериментальное изучение его термодинамических свойств при высоких P – T -условиях очень затруднительно. Поэтому экспериментальных данных для барической зависимости теплоемкости, коэффициента теплового расширения и температуры плавления в литературе нет.

Параметры парного межатомного потенциала Ми–Леннард–Джонса (1) для Nb, определенные по методу, описанному в [3, гл. 3; 11], равны:

$$r_0 = 2.8648 \times 10^{-10} \text{ м}, \quad D/k_B = 21706.44 \text{ К}, \quad (2)$$

$$a = 1.88, \quad b = 5.81.$$

Заметим, что первоначально в [3, гл. 3; 11] все четыре параметра потенциала (1) однозначно определяли из замкнутой системы четырех уравнений, в которую входили четыре определенных из

эксперимента при $T = 0$ К и $P = 0$ величины: V_0 – молярный объем, L_0 – удельная энергия атомизации, Θ_0 – температура Дебая и γ_0 – первый параметр Грюнайзена. Таким путем в [3] был получен набор параметров (2). Но, как было указано в [6–10], величины Θ_0 и γ_0 определяются из экспериментальных данных не вполне точно. Особенно это касается тугоплавких металлов. Поэтому в данной работе использовали другой метод определения параметров потенциала (1), который не связан со значениями Θ_0 и γ_0 . Так как для ниобия $k_B \Theta_0 / D \ll 1$, то неопределенность величин Θ_0 и γ_0 слабо скажется на параметре r_0 , но существенно изменит величину D и степени потенциала. Поэтому в данной работе величины D , b и a были скорректированы как по изотерме $T = 300$ К термического уравнения состояния $P(V/V_0, 300 \text{ К})$, так и по величине $\alpha_p(P, T)$ измеренной при нормальных условиях: $P = 0$, $T = 300$ К. Здесь V/V_0 – отношение молярных объемов кристалла при давлении P и температуре T , и при $P = 0$ и $T = 0$ К.

Для ниобия величина $\alpha_p(0, 300 \text{ К}) = 21.3 \times 10^{-6} \text{ К}^{-1}$ [12, стр. 173]. Зависимость $P(V/V_0, 300 \text{ К})$ была взята из [1, 13–15]. Она показана на рис. 1. Значения D , b и a были определены путем согласования рассчитанных по методу работ из [6–10] величины $\alpha_p(0, 300 \text{ К})$ и зависимости $P(V/V_0, 300 \text{ К})$ с указанными экспериментальными данными.

Такой подход дает для параметров потенциала (1) ОЦК-Nb следующие значения:

$$r_0 = 2.8648 \times 10^{-10} \text{ м}, \quad D/k_B = 30200 \text{ К}, \quad (3)$$

$$a = 2.3, \quad b = 6.2.$$

Отметим, что в используемом нами формализме из [6–10] не учитываются ни вакансии, ни самодиффузия атомов, ибо как показано в [4, 5], их влияние при сжатии кристалла становится пренебрежимо малым. Здесь так же, как и в [4–10] не учитывается вклад в термодинамические параметры электронной подсистемы, ибо потенциал (1) описывает парное взаимодействие нейтральных атомов. Возникает вопрос, насколько точны будут расчеты по представленным в [6–10] сравнительно простым аналитическим выражениям применительно к ниобию? Ответ на этот вопрос содержится ниже.

РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ УРАВНЕНИЯ СОСТОЯНИЯ И БАРИЧЕСКИХ СВОЙСТВ НИОБИЯ

Используя формализм [6–10] и параметры межатомного потенциала (3), мы рассчитали как уравнение состояния, так и барические зависимости различных свойств ОЦК-Nb.

На рис. 1 показана изотерма уравнения состояния ОЦК-Nb. Сплошная линия – расчетные

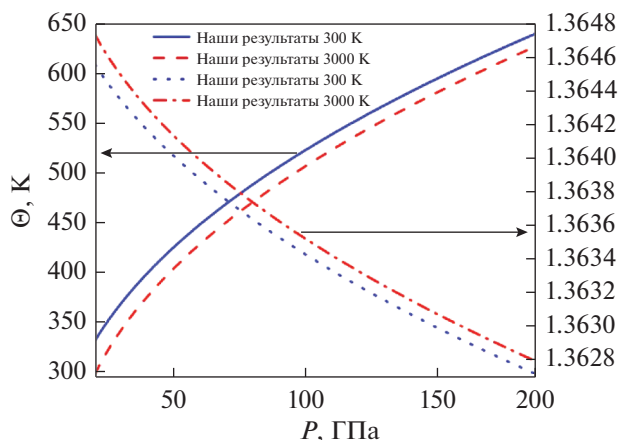


Рис. 2. Изотермы барической зависимости температуры Дебая $\Theta(P)$ для 300 (сплошная линия) и 3000 К (штриховая линия), и первого параметра Грюнайзена $\gamma(P)$ вдоль изотерм 300 (пунктирная линия) и 3000 К (штрихпунктирная линия).

значения для 300 К, штриховая – для 3000 К. Открытыми кружками показаны экспериментальные значения из работы [13]. Звездочками указаны данные расчетов [1], треугольниками – расчетные данные [14], квадраты – расчетные данные [15]. Как видно из рис. 1, наши зависимости хорошо согласуются с данными [1, 13–15].

Рассчитав зависимость $P(V)$ и зависимость какого-либо свойства $X(V)$ вдоль определенной изотермы, можно получить барическую зависимость этого свойства $X(P)$ вдоль этой же изотермы. На рис. 2 показаны изотермы 300 и 3000 К зависимостей для температуры Дебая $\Theta(P)$ и первого параметра Грюнайзена $\gamma(P)$ ОЦК-ниобия. Из рисунка видно, что при изобарическом нагреве ОЦК-ниобия функция $\Theta(P)$ уменьшается, а величина $\gamma(P)$ возрастает.

Оценки других авторов для Θ и γ при низких температурах (от $T = 0$ до 298 К) и $P = 0$ лежат в интервале: $\Theta/K = 260–280$ [3, 11], 276.6 [16], 300 [17], $\gamma = 1.3–1.69$ [3, 11], 1.27 [16], 1.536 [17]. Наши значения $\Theta(0\text{ К}, P = 0)$ и $\gamma(0\text{ К}, P = 0)$ хорошо вписываются в указанные интервалы.

Также были рассчитаны барические зависимости второго $q(P)$ и третьего $z(P)$ параметров Грюнайзена. Расчеты показали, что оба параметра монотонно возрастают с ростом давления. Заметим, что данных по барической зависимости для $q(P)$ и $z(P)$ в литературе нет, и в большинстве работ необоснованно полагают, что величина q не зависит от V/V_0 , т.е. принимают, что $q = \text{const}$ и $z = 0$ [18, 19]. Как следует из наших результатов это предположение не вполне корректно.

На рис. 3 показаны барические зависимости для изотермического модуля сжатия $B_T(P) = -(\partial P / \partial \ln V)_T$. Наши расчетные значения для 300 и 3000 К

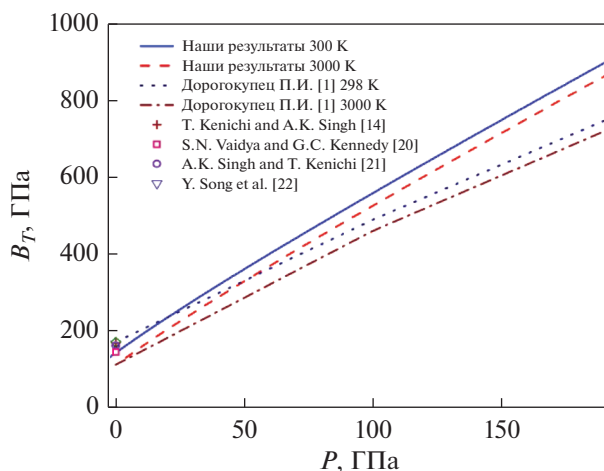


Рис. 3. Барические зависимости модуля сжатия $B_T(P)$.

(сплошная и штриховая линии, соответственно) сравниваются с данными работ [1] для 298 и 3000 К и [14, 20–22]. Оценки для изотермического модуля сжатия и его производной по давлению ($B_T'(P) = (\partial B_T / \partial P)_T$) при $P = 0$ и $T = 300$ К лежат в интервале:

$$B_T(0\text{ ГПа}) = 144.2[20] - 161[21] - 166[22] - 174[23],$$

$$B_T'(P)_0 = 3.2[21] - 3.4[14] - 3.6[1] - 3.85[23].$$

На рис. 4 приведен расчетный график барической зависимости для $B_T'(P) = (\partial B_T / \partial P)_T$ вдоль изотерм 300 и 3000 К, также приведены зависимости $B_T'(P)$ вдоль изотерм 298 и 3000 К из работы [1] и данные из работ [14, 21, 23] при $P = 0$ и $T =$

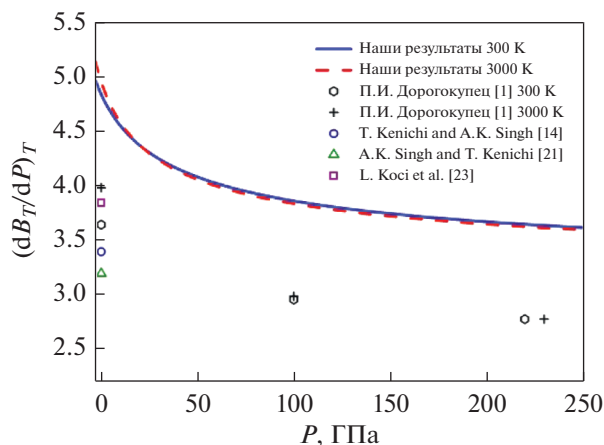


Рис. 4. Барическая зависимость функции $B_T'(P)$ вдоль изотерм 300 и 3000 К; символы – расчетные данные работы [1] вдоль изотерм 298 и 3000 К, данные работ [14, 21, 23] при $P = 0$ и $T = 300$ К.

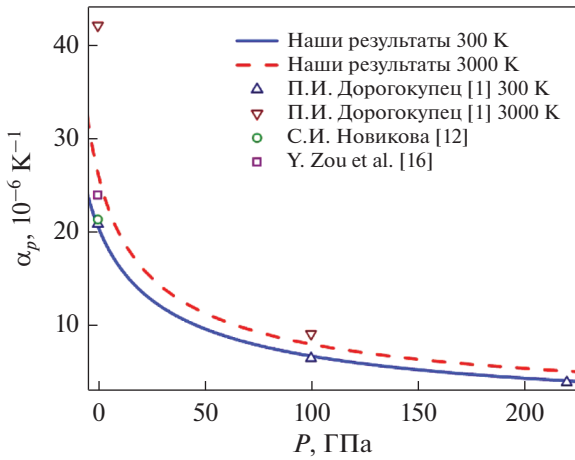


Рис. 5. Барическая зависимость коэффициента объемного теплового расширения $\alpha_p(P)$.

= 300 К. Отметим, что наши результаты хорошо вписываются в данные интервалы. Видно, что с ростом давления функция $V_T(P)$ выходит на линейную зависимость, и, следовательно, функция $V_T'(P)$ стремится к постоянной величине.

На рис. 5 показаны изотермы зависимости коэффициента теплового расширения ($\alpha_p(P)$ в 10^{-6} K^{-1}) от давления для ниобия для 300 и 3000 К вместе с расчетными значениями из [1] для 298 и 3000 К, для 300 К из [16]; экспериментальными данными для 300 К [12]. Расчеты изотерм барической зависимости для функций: $\alpha_p(P)$ и $\alpha_p'(P) = (\partial\alpha_p/\partial P)_T$ — производной $\alpha_p(P)$ по давлению, показали, что при $P \rightarrow \infty$ функция $\alpha_p(P)$ монотонно стремится к нулю, а функция $\alpha_p'(P)$ стремится к нулю из отрицательной области значений.

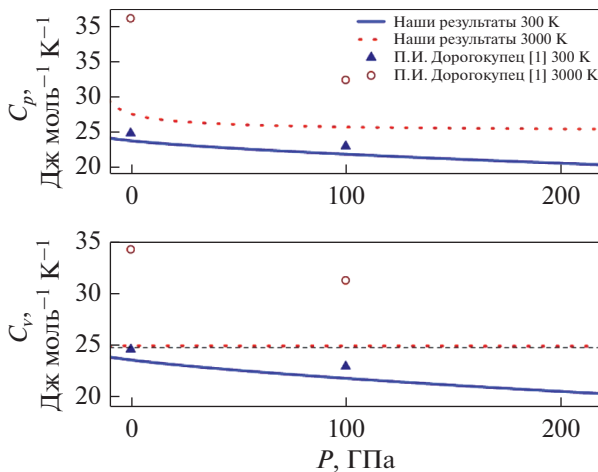


Рис. 6. Изотермы барических зависимостей C_p — изобарной и C_v — изохорной теплоемкостей для ниобия.

На рис. 6 показаны изотермы барических зависимостей для C_v — изохорной и для C_p — изобарной теплоемкостей ниобия для 300 и 3000 К вместе с расчетными данными C_v и C_p из [1] для 298 и 3000 К. Слабая зависимость наших значений C_v от давления при 3000 К обусловлена тем, что при этой температуре достигается область выполнения закона Дюлонга—Пти: $C_v/(Nk_B) = 3$, или $C_v = 24.943 \text{ Дж моль}^{-1} \text{ K}^{-1}$.

Из рис. 6 видно, что при $P \rightarrow \infty$ функции $C_v(P)$ и $C_p(P)$ стремятся к постоянной величине, а разность $C_p(P) - C_v(P)$ стремится к нулю.

Также нами были рассчитаны изотермы барических зависимостей производных изохорной $C_v'(P)$ и изобарной $C_p'(P)$ теплоемкостей по давлению. Было показано, что функции $C_v'(P)$ и $C_p'(P)$ при $P \rightarrow \infty$ стремятся к нулю.

Барические зависимости для $\sigma(100)$ — удельной (на единицу площади) поверхностной энергии грани (100) вдоль изотерм 300 и 3000 К представлены на рис. 7. Здесь так же, как и для железа [4, 6, 7], алмаза [5, 8], кремния [5, 9] и молибдена [10], функция $\sigma(P)$ при сжатии сначала возрастает до максимума при P_{max} , а потом резко уменьшается, переходя при P_{fr} в отрицательную область: $\sigma(P_{fr}) = 0$. Координаты точки максимума и нулевой точки для ниобия равны:

$$\begin{aligned} \sigma(100)_{\text{max}} &= 4.447 \text{ Дж/м}^2 \\ \text{при } P &= 76.5123 \text{ ГПа для } 300 \text{ К,} \\ \sigma(100)_{\text{max}} &= 4.288 \text{ Дж/м}^2 \\ \text{при } P &= 84.9383 \text{ ГПа для } 3000 \text{ К,} \\ P_{fr} &= 732.3 \text{ ГПа для } 300 \text{ К,} \\ P_{fr} &= 725.0 \text{ ГПа для } 3000 \text{ К.} \end{aligned} \tag{4}$$

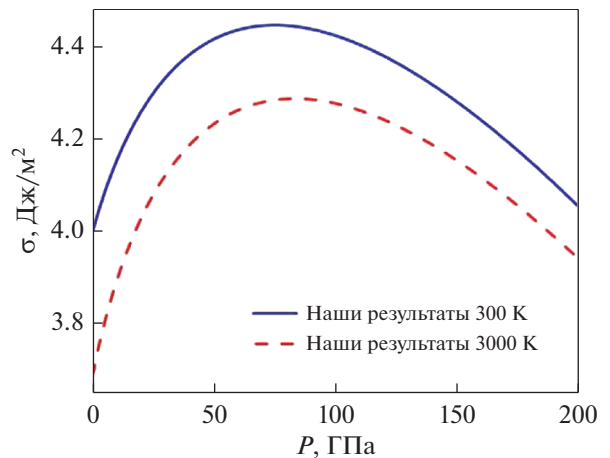


Рис. 7. Барическая зависимость для σ — удельной (на единицу площади) поверхностной энергии грани (100). Сплошная линия — 300 К, пунктирная 3000 К.

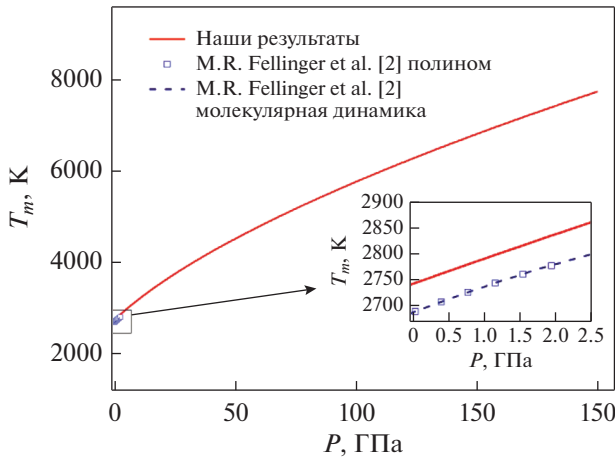


Рис. 8. Барические зависимости температуры плавления $T_m(P)$. Символы – результаты расчетов [2], штриховая линия – результат их аппроксимации полиномом (6).

Легко понять, что при $\sigma < 0$ структура кристалла будет распадаться на домены, увеличивая площадь междоменной поверхности.

Известные из литературы оценки величины $\sigma(100)$ для Nb при $P = 0$ лежат в интервале:

$$\sigma(100)/[\text{Дж}/\text{м}^2] = 1.93\text{--}2.79 [2],$$

$$2.00\text{--}2.99 [3], 2.66\text{--}2.99 [24], 1.968\text{--}2.715 [25].$$

Как видно из рис. 7, наши данные хорошо согласуются с этими оценками.

БАРИЧЕСКАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ТЕМПЕРАТУРЫ ПЛАВЛЕНИЯ НИОБИЯ

Используя полученное уравнение состояния и барическую зависимость температуры Дебая, можно оценить барическую зависимость температуры плавления (T_m). Как было показано в [3, 26], исходя из критерия плавления Линдемманна, для зависимости температуры плавления от относительного объема (V/V_0) можно получить выражение:

$$T_m(P) = T_m(0) \left(\frac{V(P)}{V(P=0)} \right)^{2/3} \left[\frac{\Theta \left(\frac{V(P)}{V_0} \right)}{\Theta \left(\frac{V(P=0)}{V_0} \right)} \right], \quad (5)$$

где $T_m(0)$ и $V(P=0)$ – температура плавления и объем при $P = 0$.

Взяв для ниобия значение $T_m(0) = 2742$ К [2] и используя полученные барические зависимости для объема и температуры Дебая, мы рассчитали изменение функции $T_m(P)$. К сожалению, как это отмечено и авторами работы [2], экспериментальных данных для барической зависимости температуры плавления ниобия в литературе нет. Поэтому

результаты наших расчетов мы сопоставляли только с расчетами, полученными в [2] методом молекулярной динамики.

На рис. 8 сплошной линией представлены результаты наших расчетов. Символами показаны значения $T_m(P)$ рассчитанные на интервале от 0 до $P = 2.5$ ГПа методом молекулярной динамики для ниобия в [2]. Эти данные авторы аппроксимировали с помощью полинома:

$$T_m(P) = T_0 + \alpha P + \beta P^2, \quad (6)$$

где $T_0 = 2685.8 \pm 0.2$ К, $\alpha = 53.9 \pm 0.3$ К/ГПа, и $\beta = -3.4 \pm 0.1$ К/ГПа². Зависимость (6) показана на рис. 8 квадратами. Из рис. 8 видно, что наша барическая зависимость $T_m(P)$ для ОЦК-Nb более реальна, ибо значения температуры плавления при $P = 0$, полученные в работе [2], оказались ниже экспериментальной величины.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Используя формализм работ [6–10], самосогласованным образом определены параметры межатомного потенциала Ми–Леннард–Джонса (1) для ОЦК ниобия.

Показано, что при использовании корректной функциональной зависимости для характеристической температуры $\Theta(V/V_0)$ и самосогласованно определенных четырех параметров межатомного потенциала Ми–Леннард–Джонса (1), как уравнение состояния, так и барическую зависимость термодинамических свойств ниобия можно рассчитать в рамках сравнительно простой аналитической модели [6–10].

Изучены барические свойства ниобия вдоль изотерм 300 и 3000 К. Получены барические зависимости для следующих свойств ниобия: температура Дебая и параметры Грюнайзена, изотермический модуль сжатия, изохорная и изобарная теплоемкости, коэффициент теплового расширения, удельная поверхностная энергия и температура плавления. Расчеты показали хорошее согласие с известными из литературы экспериментальными данными.

Показано, что для ниобия при $P \rightarrow \infty$ функция $V_T(P)$ возрастает по линейной зависимости, а функция $\alpha_p(P)$ убывает, стремясь к постоянному значению. Поэтому при $P \rightarrow \infty$ выполняется: $V_T'(P) \rightarrow \text{const} > 0$, а функция $\alpha_p'(P)$ стремится к нулю из отрицательной области значений.

Показано, что барическая зависимость $\sigma(P)$ достигает максимума, а затем с увеличением давления стремится к отрицательным значениям, достигая нуля при P_{fr} . Оценены значения этих характеристических точек зависимости $\sigma(P)$ для ниобия.

Рассчитана барическая зависимость температуры плавления ОЦК-ниобия и ее производной по давлению: $T'_m(P) = (\partial T_m / \partial P)_T$. Расчеты показали, что функция $T'_m(P)$ на интервале от 0 до $P = 2.5$ ГПа убывает линейно от $T'_m(0) = 62$ до $T'_m(2.5 \text{ ГПа}) = 56$ (К/ГПа).

Авторы выражают благодарность М.Н. Магомедову, Н.Ш. Газановой и А.А. Аливердиеву за плодотворные дискуссии и помощь в работе.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-29-11013_мк и Программы Президиума РАН (программа № 1.13).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Дорогокупец П.И., Соколова Т.С., Данилов Б.С., Литасов К.Д. Почти абсолютные уравнения состояния алмаза, Ag, Al, Au, Cu, Mo, Nb, Pt, Ta, W для квазигидростатических условий // Геодинамика и тектонофизика. 2012. Т. 3. № 2. С. 129–166.
2. Fellingner M.R., Park H., Wilkins J.W. Force-matched embedded-atom method potential for niobium // Physical Review B. 2010. V. 81. № 14. P. 144119-1–144119-15.
3. Магомедов М.Н. Изучение межатомного взаимодействия, образования вакансий и самодиффузии в кристаллах. М.: Физматлит, 2010. 544 с.
4. Магомедов М.Н. О самодиффузии в железе при сильном сжатии кристалла // ФММ. 2013. Т. 114. № 3. С. 227–236.
5. Магомедов М.Н. О самодиффузии и поверхностной энергии при сжатии алмаза, кремния и германия // ЖТФ. 2013. Т. 83. № 12. С. 87–96.
6. Магомедов М.Н. Изменение теплофизических свойств ОЦК-железа при изотермическом сжатии // ЖТФ. 2015. Т. 85. № 11. С. 48–54.
7. Магомедов М.Н. Изменение решеточных свойств и температуры плавления гранецентрированной кубической структуры железа при сжатии // ЖТФ. 2017. Т. 87. № 4. С. 549–556.
8. Магомедов М.Н. Изменение теплофизических свойств алмаза при изотермическом сжатии // ЖТФ. 2017. Т. 87. № 5. С. 643–650.
9. Магомедов М.Н. Об уравнении состояния и свойствах различных полиморфных модификаций кремния и германия // ФТТ. 2017. Т. 59. № 6. С. 1065–1072.
10. Akhmedov E.N. Molybdenum Lattice Properties at High Pressure // J. Physics and Chemistry of Solids. 2018. V. 121. P. 62–66.
11. Магомедов М.Н. О вычислении параметров потенциала Ми–Леннарда–Джонса // Теплофизика Высокотемператур. 2006. Т. 44. № 4. С. 518–533.
12. Новикова С.И. Тепловое расширение твердых тел. М.: Наука. 1974. 173 с.
13. McQueen R.G., Marsh S.P., Taylor J.W., Fritz J.N., Carter W.J. The equation of state of solids from shock wave studies / In High-Velocity Impact Phenomena, edited by R. Kinslow (Academic, N.Y., 1970). P. 345.
14. Kenichi T., Singh A.K. High-pressure equation of state for Nb with a helium-pressure medium: Powder X-ray diffraction experiments // Physical Review B. 2006. V. 73. № 22. P. 224119(9).
15. Альтиулер Л.В., Брусникин С.Е., Кузьменко Е.А. Изотермы и функции Грюнайзена 25 металлов // Журн. Прикладной Механики и Технической Физики. 1987. № 1. С. 134–146.
16. Zou Y., Qi X., Wang X., Chen T., Li X., Welch D., Baosheng Li. High-pressure behavior and thermoelastic properties of niobium studied by in situ x-ray diffraction // J. Applied Physics. 2014. V. 116. № 1. P. 013516(6).
17. Karbasi A., Saxena S.K., Hrubciak R. The thermodynamics of several elements at high pressure // Calphad Comput. Coupling Phase Diagrams Thermochem. 2011. V. 35. № 1. P. 72–81.
18. Nie C., Zong B., Wang J. Pressure Dependency Grüneisen Parameter γ for bcc Mo // Applied Physics Research. 2014. V. 6. № 4. P. 26–30.
19. Zeng Z.Y., Hu C.E., Chen X.R., Zhang X.L., Cai L.C., Jing F.Q. Density functional theory investigation of the phonon instability, thermal equation of state and melting curve of Mo // Physical Chemistry Chemical Physics. 2011. V. 13. № 4. P. 1669–1675.
20. Vaidya S.N., Kennedy G.C. Compressibility of 22 elemental solids to 45 kb // J. Physics and Chemistry of Solids. 1972. V. 33. № 7–9. P. 1377–1389.
21. Singh A.K., Kenichi T. Measurement and analysis of nonhydrostatic lattice strain component in niobium to 145 GPa under various fluid pressure-transmitting media // J. Applied Physics. 2001. V. 90. № 7. P. 3269–3275.
22. Song Y., Yang R., Li D., Wu W.T., Guo Z.X. Calculation of theoretical strengths and bulk moduli of bcc metals // Phys. Rev. B. 1999. V. 59. № 22. P. 14220–14225.
23. Koči L., Ma Y., Oganov A.R., Souvatzis P., Ahuja R. Elasticity of the superconducting metals V, Nb, Ta, Mo, and W at high pressure // Phys. Rev. B. 2008. V. 77. № 21. P. 214101(5).
24. Jiang Q., Lu H.M., Zhao M. Modelling of surface energies of elemental crystals // J. Physics: Condensed Matter. 2004. V. 16. № 4. P. 521–530.
25. Dai X.D., Li J.H., Kong Y. Long-range empirical potential for the bcc structured transition metals // Phys. Rev. B. 2007. V. 75. № 5. P. 052102(4).
26. Магомедов М.Н. О критерии фазового перехода кристалл–жидкость // ФММ. 2008. Т. 105. № 2. С. 127–136.