

Коллективные движения атомов в перегретом кристалле и переохлажденном расплаве простого металла

Г. Э. Норман^{*×}, Д. Ю. Флейта^{+×1)}

⁺Национальный исследовательский университет “Высшая школа экономики”, 101000 Москва, Россия

^{*}Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), 141700 Долгопрудный, Россия

[×]Объединенный институт высоких температур РАН, 125412 Москва, Россия

Поступила в редакцию 6 января 2020 г.

После переработки 23 января 2020 г.

Принята к публикации 23 января 2020 г.

Исследованы равновесные и метастабильные состояния кристалла и расплава в окрестности точки равновесного фазового перехода кристалл–расплав. Инструментом исследования выбран четырехточечный корреляционный коэффициент, предложенный ранее для выявления коллективных движений атомов в жидкости. В качестве примера рассматривается модель погруженного атома меди, используется метод молекулярной динамики. Обнаружен сильный гистерезис значений корреляционного коэффициента по путям изохорического перегрева кристалла до его плавления вблизи спинодали и обратного переохлаждения расплава до его кристаллизации. Раскрыты возможности этого коэффициента для количественной оценки характера ближнего порядка, степени коррелированности движения соседних атомов и радиуса действия динамических коллективных эффектов в конденсированном веществе.

DOI: 10.31857/S0370274X20040104

Введение. Аппарат корреляционных функций (см., например, [1–11]) стал мощным инструментом исследования жидкостей и других неупорядоченных систем на атомном уровне. Крупные результаты получены с помощью метода молекулярной динамики [8–16], который позволяет находить временные зависимости изменения структурных свойств вещества и проводить изучение пространственно-временных особенностей упорядоченности любых систем. В работах [17–19], в рамках метода молекулярной динамики, было предложено рассчитывать четырехточечные двухатомные временные корреляционные функции для поиска пространственной неоднородности жидкой и стеклообразующей фаз. С помощью этого подхода был раскрыт характер динамики коллективных движений атомов в равновесных жидкостях на описательном уровне [19–23]. В работе [24] на их основе предложен корреляционный коэффициент, позволивший количественно описать степень коллективности движений атомов в жидкостях; получены первые результаты для примеров равновесных и метастабильных состояний простых жидкостей.

В настоящей работе подход [24] применен к твердым телам, в которых движения атомов принципиально отличны от движения в жидкостях. Тем не ме-

нее, этот подход позволяет обнаружить коллективные движения атомов и их близкодействующие корреляции в равновесных кристаллах простых металлов. Тот же подход используется и для перегретых состояний этих кристаллов и переохлажденных состояний их расплавов. Это справедливо, поскольку при рассмотрении метастабильных состояний на временах, меньших времени жизни, возможно определение любых величин в рамках тех же подходов, что и для равновесных состояний (см., например, [25–29]).

В следующем разделе кратко представлен корреляционный коэффициент – интегральная количественная характеристика в рамках метода четырехточечных корреляционных функций. Во втором разделе изложены способы получения изохор при охлаждении и нагреве системы в рамках метода молекулярной динамики. В третьем разделе приведены результаты для гистерезиса значений корреляционного коэффициента по путям нагрева кристалла до его плавления и обратного охлаждения расплава до его кристаллизации. В последнем разделе обсуждаются причины обнаруженного превышения значений данного коррелятора для кристалла над значениями для расплава.

Корреляционный коэффициент. Четырехточечный коррелятор был введен в [19] и может быть раскрыт как

¹⁾e-mail: fleyta.du@phystech.edu

$$\begin{aligned}
V2(t) &\equiv \langle [\mathbf{r}_{ik}(t) - \mathbf{r}_{ik}(0)]^2 \rangle_R = \\
&= \langle [\mathbf{r}_k(t) - \mathbf{r}_k(0)]^2 + [\mathbf{r}_i(t) - \mathbf{r}_i(0)]^2 \rangle_R - \\
&\quad - 2 \langle [\mathbf{r}_k(t) - \mathbf{r}_k(0)] \cdot [\mathbf{r}_i(t) - \mathbf{r}_i(0)] \rangle_R, \quad (1)
\end{aligned}$$

где $\mathbf{r}_{ik}(t) = \mathbf{r}_k(t) - \mathbf{r}_i(t)$, а $\mathbf{r}_k(t)$ и $\mathbf{r}_i(t)$ – радиус-векторы атомов k и i в момент времени t ; угловые скобки $\langle \dots \rangle_R$ означают усреднение величины по ансамблю, с учетом всех пар атомов, которые отдалены друг от друга на расстояние $(R \pm \epsilon)$ в начальный момент времени для данной конфигурации. По своему смыслу, функция $V2(t)$ характеризует согласованность движения соседних атомов между собой. Значение изначального расстояния в паре R естественно выбирать, начиная с радиуса первой координационной сферы. Исходя из определения, видно, что функция $V2(t)$ позволяет выявлять коллективные движения атомов, но она не является оптимальной для этих целей. Если выделить и опустить тривиальные диффузионные вклады, то можно определить коррелятор $DP(t) \equiv \langle [\mathbf{r}_i(t) - \mathbf{r}_i(0)] \cdot [\mathbf{r}_k(t) - \mathbf{r}_k(0)] \rangle_R$, который описывает исключительно коллективные перемещения как эволюцию среднего скалярного произведения векторов перемещений двух атомов, отдаленных на R в начальный момент времени. Нормируя коррелятор $DP(t)$, получаем выражение

$$\begin{aligned}
CC(t) &\equiv \left\langle \frac{[\mathbf{r}_i(t) - \mathbf{r}_i(0)] \cdot [\mathbf{r}_k(t) - \mathbf{r}_k(0)]}{|\mathbf{r}_i(t) - \mathbf{r}_i(0)| \cdot |\mathbf{r}_k(t) - \mathbf{r}_k(0)|} \right\rangle_R = \\
&= \langle \cos \varphi(t) \rangle_R. \quad (2)
\end{aligned}$$

Полученная функция описывает эволюцию среднего косинуса угла $\cos \varphi(t)$ между векторами перемещений двух атомов, отдаленных на расстояние R в начальный момент времени. Иными словами, корреляционная функция $CC(t)$ описывает временную зависимость степени сонаправленности векторов перемещений двух атомов, близких друг к другу. Функция $CC(t)$ монотонно спадает для любого состояния системы [30], и, в силу своего определения, не должна явно зависеть от температуры системы. Зависимость от температуры проявляется только через температурные зависимости параметров, определяющих значение $CC(t)$. Это удобно при изучении величины согласованности движения при охлаждении или нагреве системы вдоль изохор. Рассмотрим значения $CC(t)$ для различных температур T при фиксированном времени наблюдения τ . Корреляционный коэффициент вводится как [30]

$$\begin{aligned}
CC(T, R, \tau) &= \\
&= \left\langle \frac{[\mathbf{r}_i(t + \tau) - \mathbf{r}_i(t)] \cdot [\mathbf{r}_k(t + \tau) - \mathbf{r}_k(t)]}{|\mathbf{r}_i(t + \tau) - \mathbf{r}_i(t)| \cdot |\mathbf{r}_k(t + \tau) - \mathbf{r}_k(t)|} \right\rangle_R = \\
&= \langle \cos \varphi \rangle_R, \quad (3)
\end{aligned}$$

где усреднение по ансамблю заменяется усреднением величины по времени. Зависимость от температуры и диагностического радиуса R является неявной. Величина $CC(T, R, \tau)$ позволяет сравнить степени сонаправленности смещений, т.е. степени коллективности движения атомов при различных температурах. Этот коэффициент будет применяться далее для изучения свойств системы в зависимости от температуры и диагностического радиуса R при нагреве кристалла и охлаждении расплава вдоль изохоры.

Сканирование изохоры. Поведение твердой фазы изучалось на основе моделирования кристалла меди, в которой взаимодействие между атомами было представлено в виде модели погруженного атома с параметрами, рассчитанными в работах [31, 32]. В рамках этой модели температура равновесного плавления равняется 1380 К [32, 33], при экспериментальном значении в 1360 К. Корреляционные функции рассчитывались на основе траекторий атомов для последовательных моделируемых состояний системы вдоль изохоры. Область моделирования представляет собой куб размерами $22a_{Cu} \times 22a_{Cu} \times 22a_{Cu}$, содержащий 42 592 атомов с наложенными периодическими условиями по трем осям x, y, z . В качестве начальной конфигурации атомы размещались в узлах гранцентрированной кубической решетки ($a_{Cu} = 3.612 \text{ \AA}$), что соответствует плотностям кристалла в окрестности точки равновесного плавления. Начальные скорости атомов задавались максвелловским распределением.

Изучение свойств кристалла на изохоре для каждой температуры проводилось в несколько этапов. Изначально система, исходная конфигурация которой представляет собой идеальную ГЦК решетку, стабилизировалась при целевой температуре с помощью термостата Нозе–Гувера в течении 500 пс. Затем проводилось зануление скорости центра масс. Для расчета значений корреляционных функций использовались состояния ансамбля частиц с постоянной энергией, записываемые после проведения упомянутых процедур. Указанные расчеты проводились не менее 16 раз для каждой температуры на изохоре. Статистическая независимость траекторий обеспечивалась различными розыгрышами начальных максвелловских распределений скоростей. Усреднение по нескольким независимым траекториям позволяло проводить расчеты параллельно, что существенно сокращало время расчета по сравнению с усреднением по одной траектории той же суммарной длины.

Длина каждой траектории (порядка десятка наносекунд) была намного выше ожидаемого характер-

ного времени исследуемых корреляций, что позволяет усреднять значения корреляций на большом количестве отрезков одной траектории, каждый раз сдвигая точку отсчета на интервал, больший не только времени памяти [13], но и времени жизни гидродинамических флуктуаций (50 пс). Таким образом осуществляется усреднение по времени. Процедура обратного охлаждения проводилась по алгоритму, описанному в [24].

Расчеты проводились с использованием пакета LAMMPS [34]. Программа расчета корреляционного коэффициента (4) написана дополнительно. Параметр допустимого отклонения величины межчастичного расстояния ϵ в паре выбирался равным 0.5 \AA при исследовании температурных зависимостей и 0.05 \AA при рассмотрении пространственного поведения.

Температурная зависимость корреляционного коэффициента. Пример результатов расчета корреляционного коэффициента $CC(T, R, \tau)$ для изохоры меди при плотности 8.9 г/см^3 при постоянном R , соответствующем радиусу первой координационной сферы, представлен на рис. 1. Качественный характер кривых лишь незначительно меняется с изменением характерного времени τ , поэтому далее положим его равным 800 пс (как и в работе [24] для жидкости, см. рис. 2) и опустим из рассмотрения как аргумент функции. Выделим следующие особенности на рис. 1, следуя последовательности состояний, возникающих при нагреве.

Значения коэффициента $CC(T, R)$ для перегретого кристалла оказываются близкими к значениям $CC(T, R)$ для равновесного кристалла в области точки равновесного плавления 1375 К. Заметное отклонение наблюдается только при сильном перегреве до 1900 К. Снижение ускоряется с дальнейшим ростом температуры и заканчивается распадом около 2100 К. Природу этого распада можно соотнести с приближением к точке спинодали, когда среднее время жизни метастабильного состояния сравнивается с временем молекулярно-динамического расчета.

Все состояния на температурной зависимости $CC(T, R)$ для температур, меньших температуры распада, являются обратимыми. То есть, если остановить нагрев в любой из этих точек и, начав с нее, запустить, наоборот, охлаждение кристалла, то полученная зависимость для $CC(T, R)$ воспроизведет в обратном направлении кривую, найденную при проведении нагрева. Этот факт отражен около зависимостей на рис. 1 в виде стрелок в двух направлениях: красные (нагрев) и синие (охлаждение).

При распаде коэффициент $CC(T, R)$ скачком уменьшается в четыре раза около 2120 К. Кристалл

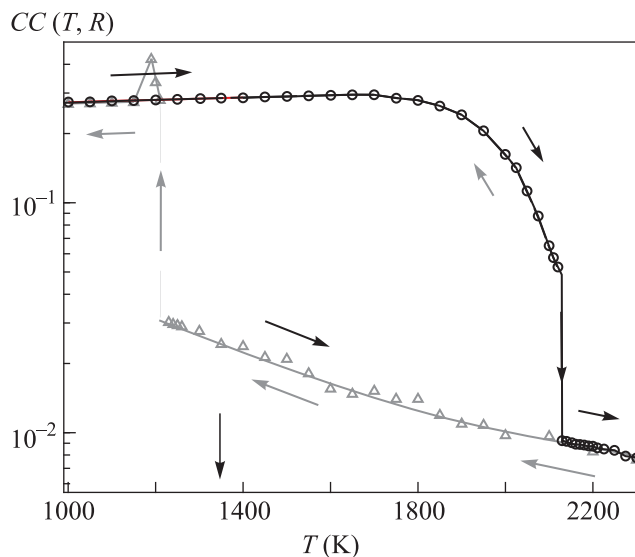


Рис. 1. (Цветной онлайн) Температурные зависимости корреляционного коэффициента $CC(T, R)$ при изохорическом нагреве кристалла меди (красные кружки) и охлаждения полученного расплава (синие треугольники), образующегося после спинодального распада твердой фазы; линии проведены для наглядности. Величина диагностического радиуса $R = 2.5 \text{ \AA}$. Красные и синие стрелки у кривых нагрева и охлаждения показывают обратимость этих процессов. Красная и синяя вертикальные стрелки указывают на необратимые скачки, т.е. границы существования твердой фазы при перегреве (2120 К) и жидкой при переохлаждении (1210 К). Черная стрелка обозначает точку равновесного плавления/кристаллизации

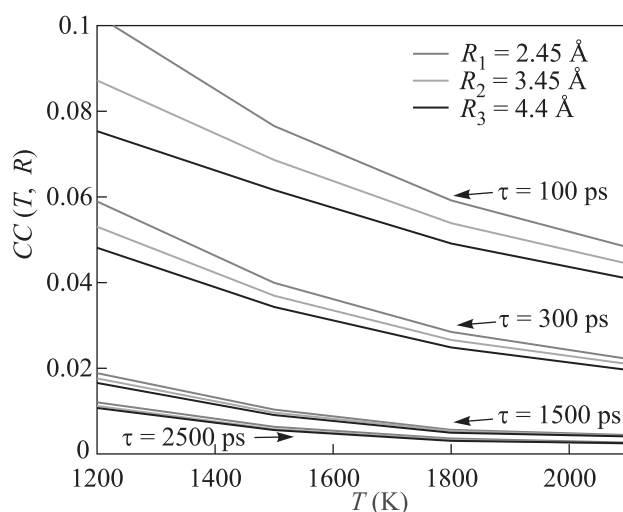


Рис. 2. (Цветной онлайн) Температурная зависимость кривых коррелятора $CC(T, R)$ при разных значениях характерного времени $\tau = 100, 300, 1500$ и 2500 пс (сверху вниз)

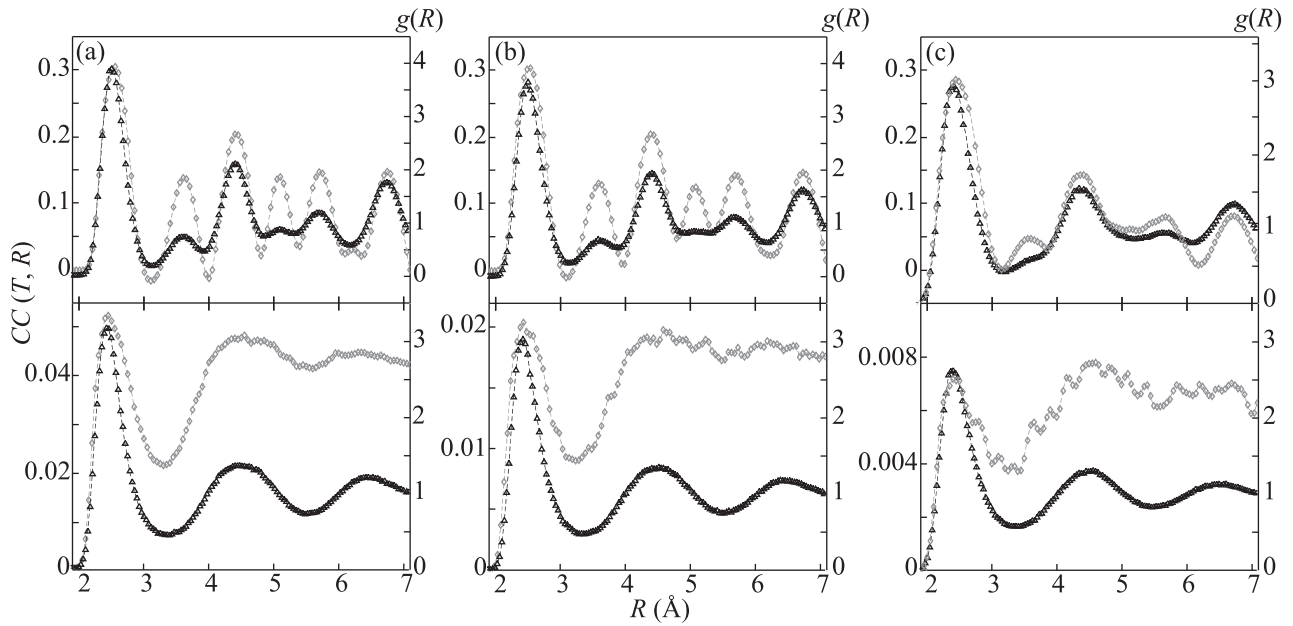


Рис. 3. (Цветной онлайн) Пространственное распределение корреляционных коэффициентов $CC(T, R)$ (красные линии) и парных корреляционных функций $g(R)$ (синие линии) в кристалле (верхние графики) и расплаве (нижние графики) при $T = 1230$ К (a), $T = 1400$ К (b) и $T = 2100$ К (c)

плавится и температурная зависимость $CC(T, R)$ переходит на ветвь для жидкости. Этот переход является необратимым. То есть, если остановить нагрев в любой из точек при температуре выше 2120 К и, начав с нее, запустить, наоборот, охлаждение расплава, то полученная зависимость для $CC(T, R)$ не воспроизведет в обратном направлении скачок на ветвь кристалла, а останется при дальнейшем охлаждении на зависимости, соответствующей расплаву. Эта зависимость совпадает с результатами для $CC(T, R)$, найденными в [24] при исследовании перехода от равновесного к метастабильному состоянию расплава.

При дальнейшем охлаждении зависимость $CC(T, R)$ проходит точку равновесной кристаллизации при 1375 К. Заметим, что точки, полученные в области перехода от метастабильной на равновесную ветвь, не противоречат сингулярности, обнаруженной в [24]. Однако в настоящей работе эта точка не исследовалась в силу сильного увеличения шага по температуре.

Проведя по аналогии с [24] анализ температурной зависимости $CC(T, R)$ для кристалла, не удалось обнаружить указания на наличие сингулярности в поведении кривой в точке перехода от равновесного к метастабильному состоянию кристалла. Можно ожидать, что вклады коллективных эффектов, предшественников нуклеации, в $CC(T, R)$ близки по абсолютной величине для метастабильных со-

стояний разных фаз. А абсолютные фоновые значения $CC(T, R)$ для равновесных состояний для кристалла более, чем на порядок выше, чем для расплава. Поэтому эффект, замеченный в [24] для перехода от равновесного к метастабильному расплаву, остался незамеченным для перехода от равновесного к метастабильному кристаллу. В этом случае требуется большая точность, чем для эффектов, рассматриваемых в настоящей работе.

Точки на линии охлаждения являются обратимыми. То есть, если остановить охлаждение в любой из этих точек и, начав с нее, запустить, наоборот, нагрев расплава, то полученная зависимость для $CC(T, R)$ воспроизведет в обратном направлении кривую, найденную при проведении охлаждения. Обратимость сохраняется вплоть до температуры около 1210 К, когда расплав кристаллизуется и происходит необратимый скачок $CC(T, R)$ на порядок величины вверх на кривую значений для равновесного кристалла. После короткого всплеска вверх, точки при дальнейшем охлаждении ложатся на обратимую зависимость.

Температура скачка растет, т.е. приближается к точке равновесного плавления при уменьшении скорости охлаждения расплава. Это свидетельствует, что скачок соответствует фазовому переходу первого рода. Однако смещение температуры скачка незначительно, в интервале (1210–1225) К при уменьше-

нии величины скорости охлаждения на три порядка, вплоть до 10^{11} К с⁻¹, и увеличении длительности наблюдения вплоть до 14 нс. Экстраполяция температуры скачка на меньшие скорости охлаждения пока технически недоступна. Переход в аморфное состояние заслуживает отдельного рассмотрения.

Обсуждение. При анализе полученных результатов, представленных на рис. 1, видно наличие гистерезиса значений $CC(T, R)$ по путям нагрева кристалла до его плавления и обратного охлаждения расплава до его кристаллизации. Превышение значений $CC(T, R)$ для кристалла над значениями для расплава достигает порядка величины и более в области гистерезиса. Отсюда следует, что характер коллективных движений атомов в жидкости и кристалле принципиально различны при одной и той же температуре. Для выяснения причин такой большой разницы рассмотрим примеры зависимостей $CC(T, R)$ от R для кристалла и расплава вблизи равновесного фазового перехода (1400 К, рис. 3b), при сильном переохлаждении расплава (1230 К, рис. 3a) и при сильном перегреве кристалла (2100 К, рис. 3c). Сопоставим их с парными корреляционными функциями $g(R)$, приведенными на тех же рисунках, и между собой.

Видно, что осцилляции функции $CC(T, R)$ в целом, следуют за осцилляциями $g(R)$, однако существенно более ярко выражены. При этом некоторые максимумы и минимумы, которые четко прослеживаются для $CC(T, R)$, оказываются сглаженными для $g(R)$. То есть функции $CC(T, R)$ диагностируют коллективные корреляции, которые не улавливает функция $g(R)$. Таким образом, функция $CC(T, R)$ является более чувствительным инструментом, чем $g(R)$, для исследования корреляций положений атомов в конденсированных средах. Об этом говорит и то, что функции $g(R)$ как для расплава, так и кристалла слабо изменились при переходе от 1230 к 1400 К и далее к 2100 К. Изменения кривой $CC(T, R)$ для расплава не сильно заметны по форме, но по абсолютным величинам отличия составляют 2–3 раза между 1230 и 1400 К и между 1400 и 2100 К. Для кристалла при переходе от 1230 к 1400 К несколько изменились амплитуды осцилляций при близости абсолютных значений, а для 2100 К и абсолютная величина $CC(T, R)$ уменьшилась более чем в четыре раза.

Сопоставим функции $CC(T, R)$ для кристалла и расплава при $T = 1400$ К. Видно, что не только по своим значениям (рис. 1), но и по своему характеру (рис. 3b) они сильно отличаются друг от друга. Коррелятор $CC(T, R)$ для кристалла сильно осцил-

лирует в области значений от нуля (возможны даже отрицательные значения в случае низких температур кристалла) до максимальных, а для жидкости число осцилляций более, чем вдвое меньше, и они заметно слабее выражены. Можно предположить, что осцилляции $CC(T, R)$ в кристалле связаны с равновесными фононами. Период осцилляций привязан к среднему расстоянию между атомами, поэтому речь идет о нелинейной части дисперсии акустических колебаний в области больших волновых векторов k .

Это объяснение согласуется и с изменением $CC(T, R)$ для кристалла при переходе к $T = 2100$ К (рис. 3c). При таком сильном перегреве в кристалле образуется много дефектов, приводящих к усилению затухания акустических колебаний при больших k . И, действительно, амплитуда колебаний $CC(T, R)$ резко уменьшилась по сравнению с $T = 1400$ К, и они стали быстро затухать с ростом R , т.е. корреляции движения атомов оказались близкодествующими. Коррелятор $CC(T, R)$ для расплава при переходе от 1400 к 2100 К, напротив, не претерпел столь разительных изменений.

Выводы. Рассмотрено применение четырехточечных корреляционных коэффициентов $CC(T, R)$ к анализу коллективной динамики атомов и атомной структуры в конденсированном состоянии на примере модели погруженного атома меди при различных температурах.

1. Проведено сравнение значений $CC(T, R)$ для кристалла и расплава в области температур, где для одной и той же температуры возможны состояния как кристалла, так и расплава, одно из которых – равновесное, а другое – метастабильное. Показано, что значения $CC(T, R)$ для кристалла превышают значения для расплава более, чем на порядок величины. Таким образом, значения $CC(T, R)$ обнаруживают сильный гистерезис при перегреве и последующем охлаждении.

2. Проведен анализ зависимости $CC(T, R)$ от R при разных температурах. Характер зависимостей для перегретого кристалла начинает резко меняться при приближении к спинодали. Получены указания на то, что коллективные движения атомов в перегретом кристалле являются короткодествующими и относятся к нелинейной части дисперсии акустических колебаний в области больших волновых векторов k . Изменение характера зависимостей при переходе к переохлажденному расплаву не столь ярко выражено.

3. Четырехточечный корреляционный коэффициент $CC(T, R)$ оказался уникальным средством количественной оценки степени коллективности дви-

жения атомов, степени коррелированности движения соседних атомов и радиуса действия коллективных эффектов. Вместе с тем коэффициент $CC(T, R)$ оказался и более чувствительным инструментом определения характера ближнего порядка в жидкости и кристаллической структуре с дефектами, чем парная корреляционная функция $g(R)$.

Статья подготовлена в ходе проведения работы в рамках Программы фундаментальных исследований НИУ “Высшая школа экономики” и с использованием средств субсидии в рамках государственной поддержки ведущих университетов Российской Федерации “5-100” (Д. Ю. Флейта) и гранта Российского научного фонда 18-19-00734 (Г. Э. Норман).

Благодарим Суперкомпьютерные центры ОИВТ РАН и МФТИ за предоставленное вычислительное время.

1. Г. Темперли, Д. Роулинсон, Д. Рашбрук, *Физика простых жидкостей. Статистическая теория*, Мир, М. (1971), 308 с.
2. А. В. Затовский, Н. П. Маломуж, И. З. Фишер, *ЖЭТФ* **65**(1), 207 (1973).
3. Р. Балеску, *Равновесная и неравновесная статистическая механика*, Мир, М. (1978), т. 2, 400 с.
4. T. V. Lokotosh and N. P. Malomuzh, *Physica A* **286**(3), 447 (2000).
5. T. Egami and S. J. L. Billinge, *Underneath the Bragg peaks. Structural analysis of complex materials*, 2nd edition, Elsevier, Amsterdam (2012), 422 p.
6. W. Schirmacher, B. Schmid, and H. Sinn, *Eur. Phys. J. Special Topics* **196**(1), 3 (2011).
7. J. P. Hansen and I. R. McDonald, *Theory of Simple Liquids. With Applications to Soft Matter*, Academic Press, Oxford (2013), 636 p.
8. N. V. Priezjev, *Phys. Rev. E* **87**(5), 052302 (2013).
9. N. V. Priezjev and A. Kharazmi, *J. Chem. Phys.* **142**(23), 234503 (2015).
10. N. M. Chtchelkatchev and R. E. Ryltsev, *Письма в ЖЭТФ* **102**(10), 732 (2015).
11. Yu. D. Fomin, E. N. Tsiok, V. N. Ryzhov, and V. Brazhkin, *J. Mol. Liq.* **287**, 110992 (2019).
12. Д. К. Рапапорт, *Искусство молекулярной динамики*, РХД НИЦ, М. (2012), 632 с.
13. Г. Э. Норман, В. В. Стегайлов, *Матем. моделирование* **24**(6), 3 (2012).
14. Д. Френкель, Б. Смит, *Принципы компьютерного моделирования молекулярных систем: от алгоритмов к приложениям*, Научный мир, М. (2013), 559 с.
15. X. Wang, W. Xu, H. Zhang, and J. F. Douglas, *J. Chem. Phys.* **151**(18), 184503 (2019).
16. W. Zhang, J. F. Douglas, and F. W. Starr, *J. Chem. Phys.* **151**(12), 184904 (2019).
17. P. H. Poole, C. Donati, and S. C. Glotzer, *Phys. A* **261**, 51 (1998).
18. N. Lacevic, F. W. Starr, T. B. Schroder, and S. C. Glotzer, *J. Chem. Phys.* **119**, 7372 (2003).
19. В. П. Волошин, Г. Г. Маленков, Ю. И. Наберухин, *Журн. структ. химии* **54**(2), 2397 (2013).
20. А. В. Аникеенко, Г. Г. Маленков, Ю. И. Наберухин, *Журн. структ. химии* **57**(8), 1758 (2016).
21. А. В. Аникеенко, Г. Г. Маленков, Ю. И. Наберухин, *ДАН* **472**(3), 298 (2017).
22. А. В. Аникеенко, Ю. И. Наберухин, *Письма в ЖЭТФ* **106**(5), 269 (2017).
23. A. V. Anikeenko, G. G. Malenkov, and Yu. I. Naberukhin, *J. Chem. Phys.* **148**(9), 094508 (2018).
24. Г. Э. Норман, В. В. Писарев, Д. Ю. Флейта, *Письма в ЖЭТФ* **109**(10), 689 (2019).
25. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Статистическая физика*, Наука, М. (1976), 606 с.
26. P. G. Debenedetti, *Metastable Liquids. Concepts and Principles*, Princeton University Press, New Jersey (1996), 412 p.
27. В. П. Скрипов, М. З. Файзуллин, *Фазовые переходы кристалл-жидкость-пар и термодинамическое подобие*, Физматлит, М. (2003), 160 с.
28. А. Ю. Куксин, Г. Э. Норман, В. В. Стегайлов, *ТВТ* **45**(1), 43 (2007).
29. V. G. Baidakov and A. O. Tipeev, *J. Non-Cryst. Solids* **503–504**, 302 (2019).
30. D. Iu. Fleita, V. V. Pisarev, and G. E. Norman, *J. Phys.: Conf. Ser.* **1147**, 012015 (2019).
31. M. S. Daw, S. M. Foiles, and M. I. Baskes, *Mat. Sci. Rep.* **9**(7–8), 251 (1993).
32. F. J. Cherne, M. I. Baskes, and P. A. Deymier, *Phys. Rev. B* **65**, 024209 (2001).
33. H. Loulijat, H. Zerradi, S. Mizani, E. M. Achhal, A. Dezairi, and S. Ouaskit, *J. Mol. Liq.* **211**, 695 (2015).
34. S. Plimpton, *J. Comput. Phys.* **117**(1), 1 (1995).