

Министерство образования и науки
Российской Федерации
Федеральное государственное
бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Тверской государственный университет»

**ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ
ИЗУЧЕНИЯ КЛАСТЕРОВ,
НАНОСТРУКТУР
И НАНОМАТЕРИАЛОВ**

МЕЖВУЗОВСКИЙ СБОРНИК НАУЧНЫХ ТРУДОВ

выпуск 9

ТВЕРЬ 2017

УДК 620.22:544+621.3.049.77+539.216.2:537.311.322: 530.145

ББК Ж36:Г5+В379

Ф50

Рецензирование статей осуществляется на основании Положения об рецензировании статей и материалов для опубликования в Межвузовском сборнике научных трудов «Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов».

**Официальный сайт издания в сети Интернет:
www.physchemaspects.ru**

Ф50 Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов [Текст]: межвуз. сб. науч. тр. / под общей редакцией В.М. Самсонова, Н.Ю. Сдобнякова. – Тверь: Твер. гос. ун-т, 2017. – Вып. 9. – 592 с.

ISBN 978-5-7609-1275-6

Зарегистрирован Федеральной службой по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций, свидетельство о регистрации СМИ ПИ № ФС 7747789 от 13.12.2011.

Сборник составлен из оригинальных статей теоретического и экспериментального характера, отражающих результаты исследований в области изучения физико-химических процессов с участием кластеров, наноструктур и наноматериалов физики, включая межфазные явления и нанотермодинамику. Сборник предназначен для научных и инженерно-технических работников, преподавателей ВУЗов, студентов и аспирантов. Издание подготовлено на кафедре общей физики Тверского государственного университета.

УДК 620.22:544+621.3.049.77+539.216.2:537.311.322: 530.145

ББК Ж36:Г5+В379

ISBN 978-5-7609-1275-6

ISSN 2226-4442

© Коллектив авторов, 2017
© Тверской государственной
университет, 2017

УДК 532.78+536.421+539.23

О ЗАВИСИМОСТИ ФАЗОВОЙ ДИАГРАММЫ СПЛАВА ЗАМЕЩЕНИЯ ОТ РАЗМЕРА И ФОРМЫ НАНОКРИСТАЛЛА

М.Н. Магомедов

ФГБУН «Институт проблем геотермии Дагестанского научного центра РАН»
367030, Россия, Махачкала, пр-т Шамиля, 39а
mahmag4@mail.ru

DOI: 10.26456/pcascnn/2017.9.291

Аннотация. Предложена методика расчета температур солидуса и ликвидуса для неупорядоченного сплава замещения. Методика была протестирована на сплаве $SiGe$ и показала хорошее согласие с экспериментальными данными. Показано, что при уменьшении размера нанокристалла твердого раствора замещения разница между температурами ликвидуса и солидуса уменьшатся тем больше, чем заметнее форма нанокристалла отклонена от наиболее энергетически оптимальной формы.

Ключевые слова: сплав замещения, температуры солидуса и ликвидуса, нанокристалл.

Для расчета температуры плавления бинарного сплава на основе формулы Линдемманна необходимо определить зависимость расстояния между центрами ближайших атомов c и температуры Дебая Θ (которая сама зависит от c) от концентрации сплава и параметров чистых компонент, составляющих данный сплав. Но на сегодняшний день нет единого мнения о том, как рассчитать температуру Дебая для сплава бинарного состава $A_{1-c}B_c$ по параметрам чистых компонентов. Поэтому используют различные процедуры усреднения. Чаще всего используется выражение для среднего арифметического по концентрации [1], т.е.

$$\Theta(A_{1-c}B_c) = (1-c)\Theta_A + c\Theta_B = \Theta_A + c(\Theta_B - \Theta_A), \quad (1)$$

где Θ_A – температура Дебая кристалла растворителя, Θ_B – температура Дебая кристалла растворенного элемента, c – атомная концентрация растворенного элемента.

Известно, что температура Дебая зависит от функции $c(C)$, которая в подавляющем большинстве твердых сплавов меняется с концентрацией C нелинейно. Для получения зависимости $c(C)$ рассмотрим сплав двух изоструктурных веществ A и B , используем приближение «взаимодействия только ближайших соседей», которое также называют «квазихимическим приближением» [2]. При изучении бинарной смеси AB сначала необходимо определить параметры парного межатомного взаимодействия как одинаковых ($A-A$ и $B-B$), так разных ($A-B$) атомов между собой. Для этого представим парное межатомное взаимодействие в сплаве в виде потенциала Ми–Леннард–Джонса, который имеет вид [3]:

$$\varphi(r) = \frac{D}{b-a} \left[a \left(\frac{r_0}{r} \right)^b - b \left(\frac{r_0}{r} \right)^a \right], \quad (2)$$

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

Вопрос о том, как из параметров потенциала (2) для чистых компонентов получить параметры межатомного потенциала для пары разнородных атомов до сих пор не решен. Поэтому часто используют правила комбинирования Лоренца-Бертло, в которых для получения r_0 и D для разных атомов используется среднее арифметическое и среднее геометрическое от соответствующих параметров чистых веществ [3]:

$$r_{0AB} = (r_{0A} + r_{0B}) / 2, \quad (3)$$

$$D_{AB} = (D_A \cdot D_B)^{1/2}. \quad (4)$$

Однако выражение (3) противоречит правилу аддитивности молярных объемов, и не учитывает того факта, что в большинстве твердых сплавов параметр решетки меняется с концентрацией нелинейно, т.е. наблюдается отклонение от правила Вегарда [4, 5]. Поэтому для получения функции $r_{0AB}(C)$ мы используем процедуру, которая учитывает отклонение параметра решетки сплава от правила Вегарда.

Пусть P_A и P_B это вероятности нахождения в узле смешанной решетки атома сорта A и B , соответственно. Тогда для вероятности одновременного нахождения в соседних узлах решетки атомов одного сорта и атомов разных сортов можно принять: $P_{AA} = P_A^2, P_{BB} = P_B^2, P_{AB} = 2P_A P_B$. Число парных связей для пар атомов одного сорта и для пар разных атомов равно [2]: $N_{AA} = (k_n / 2) N P_A^2, N_{BB} = (k_n / 2) N P_B^2, N_{AB} = k_n N P_A P_B$, где $N = N_A + N_B$ – общее число атомов в сплаве, k_n – первое координационное число, т.е. число ближайших к данному атому узлов решетки.

Тогда, учитывая, что общее число парных связей в сплаве равно: $N - N = (k_n / 2) N$, для среднего значения какого-либо H – параметра межатомного потенциала (2) сплава можно получить выражение:

$$H(A_{1-C}B_C) = P_A^2 H_A + P_B^2 H_B + 2P_A P_B H_{AB}, \quad (5)$$

где H_{AB} – параметр межатомного потенциала (2) для решетки с равным числом однородно распределенных по решетке атомов обеих сортов, с учетом релаксации такой решетки к минимуму энергии.

Входящие в (5) функции P_A и $P_B = 1 - P_A$ определим как геометрические вероятности того, что точка, случайно поставленная на линию длиной $(1 - C)r_{0A} + Cr_{0B}$, попадет на отрезки r_{0A} или r_{0B} , соответственно:

$$P_A(C) = \frac{(1 - C)r_{0A}}{(1 - C)r_{0A} + Cr_{0B}}, \quad P_B(C) = \frac{Cr_{0B}}{(1 - C)r_{0A} + Cr_{0B}}. \quad (6)$$

При внесении атомов одного сорта в решетку из атомов другого

сорта объем общей решетки V_{AB} релаксирует так, чтобы достигался минимум свободной энергии. Поэтому разложим удельную (на атом своей подрешетки) свободную энергию для каждой из подрешеток в ряд по степеням отклонения удельного объема $\Delta V_i = V_{AB} - V_{i0}$ при постоянной температуре T . Таким образом, добавочная удельная свободная энергия решетки с равным числом атомов разного сорта будет равна:

$$\Delta F_{AB} = -P(\Delta V_A + \Delta V_B) + \frac{1}{2} \left[\frac{B_A}{V_A} (\Delta V_A)^2 + \frac{B_B}{V_B} (\Delta V_B)^2 \right], \quad (7)$$

где $P = -(\partial F(A)/\partial V)_T = -(\partial F(B)/\partial V)_T$ – давление, которое одинаково для обеих решеток, $B_i = V_i (\partial^2 F(i)/\partial V^2)_T = -V_i (\partial P/\partial V_i)_T$ – изотермический модуль упругости для решетки i -го компонента.

Из условия минимума функции (7) $(\partial \Delta F_{AB}/\partial V_{AB})_{T,P} = 0$, можно получить выражение для удельного объема смешанной решетки, состоящей из равного числа атомов разных сортов (т.е. для решетки эквиатомного состава), которая находится под давлением:

$$V_{AB} = \frac{V_A + C_N V_B}{1 + C_N} + 2 \frac{P V_A}{B_A (1 + C_N)}, \quad (8)$$

где функция C_N учитывает разницу в сжимаемостях чистых компонент:

$$C_N = \frac{B_B V_A}{B_A V_B}. \quad (9)$$

Так как исходные и смешанная решетки имеют одинаковую структуру, то для параметра r_{0AB} смешанной решетки эквиатомного состава, находящейся при $P = 0$ и $T = 0$ К можно принять:

$$r_{0AB} = \left(\frac{r_{0A}^3 + C_N r_{0B}^3}{1 + C_N} \right)^{1/3}, \quad (10)$$

где параметр, учитывающий разницу в сжимаемостях чистых компонент для смешанной решетки эквиатомного состава, будет иметь вид:

$$C_N = \frac{B_B}{B_A} (r_{0A}/r_{0B})^3. \quad (11)$$

Для простоты расчет параметра D_{AB} будем проводить с помощью выражения (4), а для расчета величин b_{AB} и a_{AB} используем среднее арифметическое от соответствующих значений для чистых компонент:

$$D_{AB} = (D_A D_B)^{1/2}, b_{AB} = (b_A + b_B)/2, a_{AB} = (a_A + a_B)/2. \quad (12)$$

Значение средней массы атома для сплава $m(C)$ будем рассчитывать, как среднее геометрическое от масс составляющих сплав атомов:

$$m(C) = \left(\frac{P_A}{m_A} + \frac{P_B}{m_B} \right)^{-1}. \quad (13)$$

Таким образом, твердый раствор $A_{1-C}B_C$ из N_A и N_B атомов с разной атомной массой мы моделируем изоструктурным виртуальным кристаллом из $N = N_A + N_B$ одинаковых атомов, масса каждого из которых меняется с концентрацией ($C = N_B / N$) по формуле (13), а параметры межатомного взаимодействия меняются с изменением C согласно соотношениям (5), (6), (10)-(12).

Получив зависимость параметров потенциала (2) и средней масса атома от концентрации компонентов, можно рассчитать температуру Дебая для сплава по методике, предложенной нами в [6, 7] для однокомпонентного кристалла:

$$\Theta(m) = A_w(m) \xi \left[-1 + \left(1 + \frac{8D}{k_B A_w(m) \xi^2} \right)^{1/2} \right], \quad (14)$$

где k_B – постоянная Больцмана, функция $A_w(m)$ возникает из-за учета энергии «нулевых колебаний» атомов в кристалле:

$$A_w(m) = K_R(m) \frac{5k_n ab(b+1)}{144(b-a)} \left(\frac{r_0}{c} \right)^{b+2}, \quad K_R(m) = \frac{\hbar^2}{k_B r_0^2 m}, \quad \xi = \frac{9}{k_n}, \quad (15)$$

где \hbar – постоянная Планка.

С помощью (14) и (15) можно рассчитать как температуру Дебая для всего сплава $\Theta(m)$, так и парциальное значение температуры Дебая для составляющих сплав компонентов $\Theta(m_i)$, т.е. для подрешетки атомов массой m_i , в которой все параметры межатомного потенциала меняются с концентрацией по предложенным здесь формулам (5), (6) и (10)-(12).

Исходя из модели плавления Линдемманна, для температуры плавления однокомпонентного вещества было получено выражение [8]:

$$k_B T_m = (3/16) X_L^2 m (c k_B \Theta / \hbar)^2, \quad (16)$$

где $X_L = (\langle r^2 \rangle / c^2)^{1/2}$ – параметр Линдемманна, представляющий собой отношение амплитуды колебания атомов к расстоянию между центрами ближайших атомов при температуре плавления c .

Известно, что при нагреве твердого раствора сначала плавится подрешетка более легкоплавкого компонента B , а при охлаждении жидкого сплава сперва кристаллизуется подрешетка более тугоплавкого компонента A . Исходя из этого и формулы (16) для T_s – температуры солидуса (для плавления подрешетки более легкоплавкого компонента B) и T_l – температуры ликвидуса (для кристаллизации более тугоплавкого компонента A) можно принять выражения следующего вида:

$$T_s(C) = T_m(B) P_B(C) \frac{m(C)}{m_B} \left[\frac{c(C) \Theta(m)}{c_B \Theta(m_B)} \right]^2 \left[\frac{X_{LB}}{X_L(C)} \right]^2 + T_m(A) P_A(C), \quad (17)$$

$$T_l(C) = T_m(A)P_A(C) \frac{m(C)}{m_A} \left[\frac{c(C)\Theta(m)}{c_A\Theta(m_A)} \right]^2 \left[\frac{X_{LA}}{X_L(C)} \right]^2 + T_m(B)P_B(C). \quad (18)$$

Здесь $T_m(i)$ – температура плавления чистой решетки для i -го компонента, $c(C)/c_i, \Theta(m)/\Theta(m_i), X_L(C)/X_{Li}$ – отношение расстояний между центрами ближайших атомов, отношение температур Дебая и отношение параметров Линдемманна в решетке раствора и в чистой решетке i -го компонента соответственно. Отметим, что на сегодняшний день в литературе нет выражений типа (17) и (18), позволяющих рассчитать функции $T_s(C)$ и $T_l(C)$ по параметрам парного межатомного потенциала чистых компонент.

Для проверки методики был выбран сплав замещения $SiGe$, который на всем интервале концентрации имеет структуру алмаза ($k_n = 4$). Параметры парного межатомного потенциала (2) для чистых кристаллов Si и Ge были определены нами в [7, 9] и представлены в Таблице 1. Там же показаны экспериментальные значения модуля упругости из [10] и температуры плавления из [11], а также рассчитанные в [12] значения параметра Линдемманна для кремния и германия.

Таблица 1. Параметры межатомного потенциала (2), определенные в [7, 9], экспериментальные значения модуля упругости из [10] и температуры плавления из [11], рассчитанные в [12] значения параметра Линдемманна

Вещество m , а.е.м.	r_0 , 10^{-10} м	D/k_B , К	b	a	B , ГПа [9, 10]	T_m , К [11]	X_L [12]
Si (28,09)	2,351	64286,16	4,0	2,48	97,7	1687,15	$0,1360 \pm 0,015$
Ge (72,59)	2,450	46764,12	4,3	2,75	74,9	1211,45	$0,1245 \pm 0,015$

Используя указанные в Таблице 1 характеристики, из выражений (10)-(12) получим значения, определяющие изменение параметров межатомного потенциала (2) с концентрацией Ge для сплава $Si_{1-C}Ge_C$:

$$C_N = 0,677024, \quad r_{0SiGe} = 2,39196 \cdot 10^{-10} \text{ м}, \quad D_{SiGe} / k_B = (D_{Si} D_{Ge})^{1/2} / k_B = 54829,61 \text{ К},$$

$$b_{SiGe} = (b_{Si} + b_{Ge}) / 2 = 4,15, \quad a_{SiGe} = (a_{Si} + a_{Ge}) / 2 = 2,615.$$

На рис. 1 (верхний график) показана экспериментальная зависимость для $c(C)$ и для рассчитанного нами значения параметра координаты минимума парного потенциала (2) $r_0(C)$ для сплава $Si_{1-C}Ge_C$. Верхняя пунктирная прямая – расчет по правилу Вегарда:

$$r_{0,v} = 2,351 \cdot (1-C) + 2,45 \cdot C, \quad 10^{-10} \text{ м}. \quad (19)$$

Сплошная кривая – это экспериментальная зависимость из [4]:

$$c_{exp} = 2,35205 + 0,08661 \cdot C + 0,0112 \cdot C^2, \quad 10^{-10} \text{ м}. \quad (20)$$

Эта зависимость определена из экспериментальных данных для параметра

решетки l , который для структуры алмаза связан с r_0 соотношением: $c = (\sqrt{3}/4)l = 0,4330127 \cdot l$. Нижняя точечная кривая, которая практически сливается с зависимостью (20), это результат наших расчетов для $r_0(C)$.

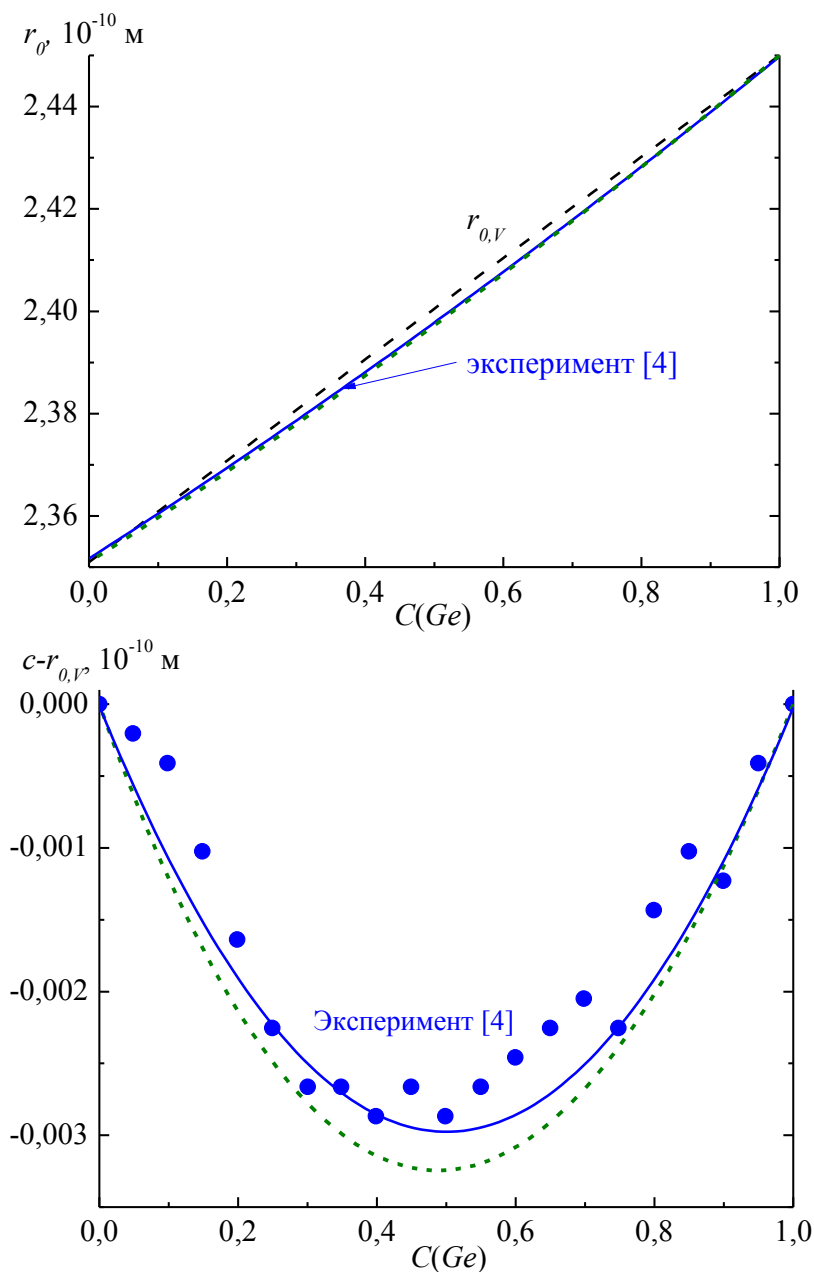


Рис. 1. Сверху показана зависимость величины $c(C)$ для сплава $SiGe$. На нижнем графике показана разность $c(C) - r_{0,v}(C)$. Точки и сплошная кривая – экспериментальные данные [4] и разность между зависимостями (19) и (20) соответственно, точечная линия – наши расчеты.

На рис. 1 (нижний график) показана зависимость разности

$c(C) - r_{0,v}(C)$ от концентрации Ge . Из рис. 1 видно, что наша зависимость достаточно хорошо согласуется с экспериментальными данными, которые получены в [4] при $T = 300$ К, с точностью $\pm 0,0005 \cdot 10^{-10}$ м.

Отметим, что расчеты методом функционала плотности, проведенные в работе [5], показали плохое согласие с экспериментальными данными работы [4]. Значение $|\Delta c(C)|$ в точке максимума, т.е. при $C(Ge) = 0,5$ в [5] получилось очень большим $\Delta c(C = 0,5) = -0,039$, в то время как в [4] было получено значение $\Delta c(C = 0,5) = -0,00299 \pm 0,0005$, в наших расчетах: $\Delta r_0(C = 0,5) = -0,00324 \cdot 10^{-10}$ м.

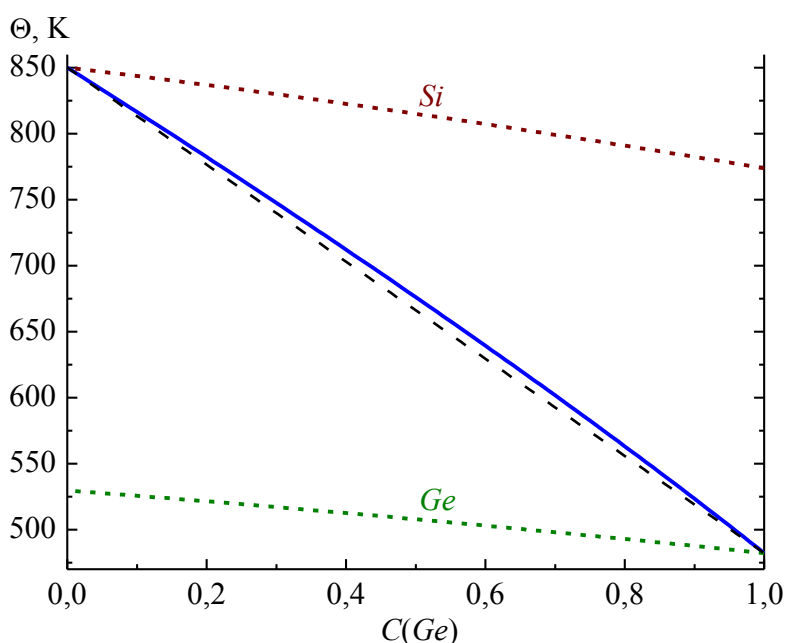


Рис. 2. Концентрационные зависимости температуры Дебая для сплава $SiGe$.

На рис. 2 показаны зависимости $\Theta(C)$ рассчитанные по (14) при $c = r_0$, т.е. при $P = 0$ и $T = 0$ К. Сплошной центральной кривой показана рассчитанная нами зависимость для общей температуры Дебая. Точечные линии – это результат расчета парциальных значений температуры Дебая для виртуальной подрешетки с массой атома одного из компонент, но межатомное взаимодействие между атомами в которой описывается межатомным парным потенциалом (2) с параметрами, зависящими от концентрации компонент. На рис. 2 символом элемента указано, что данная зависимость относится к подрешетке данного компонента. Пунктирной прямой показана зависимость, рассчитанная как среднее арифметическое по концентрации от температур Дебая вычисленных для чистых кристаллов: $\Theta = 850,185(1 - C) + 482,222C$, К.

Из рис. 2 видно, что зависимости общей температуры Дебая $\Theta(m)$ от концентрации германия нелинейные. Это обусловлено как нелинейной зависимостью параметра $r_0(C)$ (см. рис. 1), так и нелинейной зависимостью других трех параметров парного потенциала (2) от концентрации Ge .

На рис. 3 показаны концентрационные зависимости для температуры солидуса и ликвидуса сплава $SiGe$. Сплошными кривыми на рис. 3 показаны экспериментальные зависимости из [11]. Пунктирные кривые получены нами из формул (17) и (18) для подрешеток германия $T_s(Ge)$ (нижняя вогнутая кривая) и кремния $T_l(Si)$ (верхняя выпуклая кривая) при использовании данных из Таблицы 1. При этом для концентрационной зависимости параметра Линдемманна, в соответствии с результатами [12], использовалась формула вида: $X_L(C) = 0,136P_{Si} + 0,1245P_{Ge}$, откуда следует: $X_L(C)/X_{LSi}(C) = P_{Si} + 0,91544P_{Ge}$ и $X_L(C)/X_{LGe}(C) = P_{Ge} + 1,09237P_{Si}$.

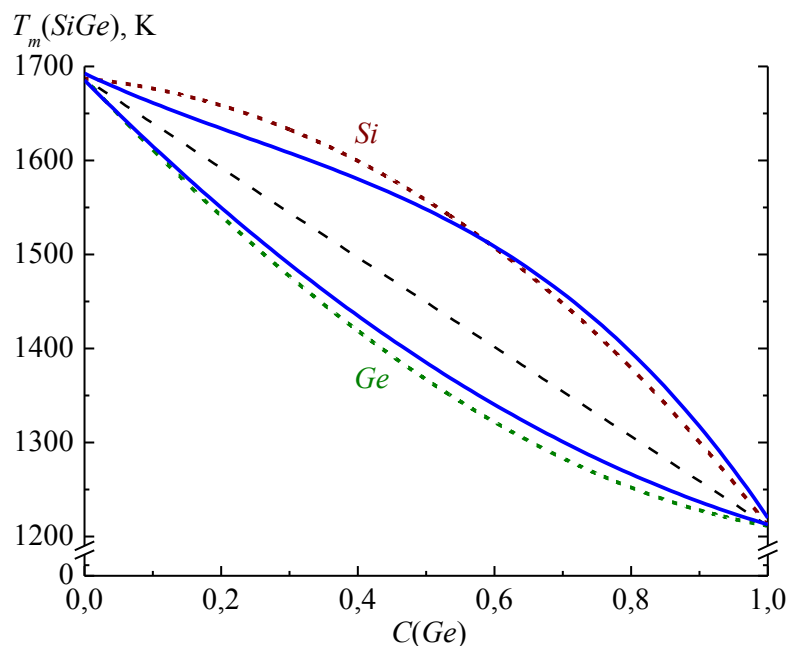


Рис. 3. Фазовая диаграмма сплава $SiGe$. Верхние выпуклые кривые – зависимости для температуры ликвидуса, нижние вогнутые кривые – зависимости для температуры солидуса.

Пунктирной прямой на рис. 3 показана зависимость, рассчитанная как среднее арифметическое по концентрации от температур плавления чистых решеток Si и Ge : $T_m(C) = 1211,45C + 1687,15(1-C)$, К. Как видно из рис. 3 согласие рассчитанной фазовой диаграммы с экспериментальной вполне хорошее, что говорит о корректности как метода усреднения

параметров межатомного потенциала, так и метода расчета общей и парциальной температуры Дебая и формул (17), (18).

Так как формулы (14) и (16) применимы и для нанокристалла, то данную методику также можно использовать для изучения эволюции фазовой диаграммы сплава замещения при уменьшении размера системы. Известно [7, 13], что при уменьшении размера кристалла (или числа атомов N) уменьшается среднее (по нанокристаллу) координационное число $k_n(N)$, причем уменьшение будет тем больше, чем заметнее форма нанокристалла отклонена от наиболее энергетически оптимальной формы (для RP-модели это куб). Уменьшение $k_n(N)$, согласно (14), ведет к уменьшению температуры Дебая: $\Theta(N) \sim k_n(N)^{1/2}$, и, согласно (16), приводит к уменьшению температуры плавления: $T_m(N) \sim \Theta(N)^2 \sim k_n(N)$. Применительно к нанокристаллу твердого раствора замещения это приведет к тому, что в формулах (17) и (18) с уменьшением размера будут уменьшаться только значения T_{mA} и T_{mB} . Из этого следует, что разность между температурой ликвидуса и солидуса нанокристалла сплава будет уменьшаться при уменьшении его размера (т.е. числа атомов в нем) согласно зависимости: $\Delta T_{ls}(C, N) = T_l(C, N) - T_s(C, N) = k_n(N) \Delta T_{ls}(C, N = \infty)$.

Этот вывод о понижении значений T_{mA} , T_{mB} и ΔT_{ls} при уменьшении размера нанокристалла согласуется с результатами, полученными более сложными методами для сплавов замещения *SiGe* в [14] и *NiCu* в [15, 16].

Отметим, что как было показано в [7, 13] на примере RP-модели, при отклонении формы нанокристалла от наиболее оптимальной формы (для RP-модели это форма куба) функция $k_n(N)$ уменьшается с уменьшением N сильнее. Поэтому при переходе к менее энергетически стабильным формам нанокристалла (стержневидные или пластинчатые) значения T_{mA} , T_{mB} и ΔT_{ls} будут уменьшаться с уменьшением N более заметно.

С другой стороны, как было показано в работах [17, 18] на примере чистых металлов и кремния, при некотором значении числа атомов N_0 теплота фазового перехода кристалл-жидкость (ФПК-Ж) исчезает, т.е. $h(N_0) = 0$. В кластере такого размера ФПК-Ж уже невозможен. Из этого следует, что для кластера из N_0 атомов (при любой концентрации компонент) классифицировать в каком фазовом состоянии (твердом или жидком) находится данный кластер невозможно, и для такого кластера выполняется условие $\Delta T_{ls}(C, N_0) = 0$.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 16-03-00041_a) и Программы Президиума РАН (программа № I.III(1)).

Библиографический список:

1. Electronic archive: New semiconductor materials. Characteristics and properties. Режим доступа: [www.url: http://www.ioffe.ru/SVA/NSM/Semicond/SiGe/basic.html](http://www.ioffe.ru/SVA/NSM/Semicond/SiGe/basic.html). – 15.11.2017.
2. **Соколовская, Е.М.** Металлохимия / Е.М. Соколовская, Л.С. Гузей. – М.: Изд-во МГУ, 1986. – 264 с.
3. **Гиршфельдер, Дж.** Молекулярная теория газов и жидкостей / Дж. Гиршфельдер, Ч. Кертисс, Р. Берд. – М.: Изд-во Иностранной Литературы, 1961. – 931 с.
4. **Dismukes, J.P.** Lattice parameter and density in germanium-silicon alloys / J.P. Dismukes, L. Ekstrom, R.J. Paff // The Journal of Physical Chemistry A. – 1964. – V. 68. – I. 10. – P. 3021-3027.
5. **Pulikkotil, J.J.** Structure of $Sn_{1-x}Ge_x$ random alloys as obtained from the coherent potential approximation / J.J. Pulikkotil, A. Chroneos, U. Schwingenschlögl // Journal of Applied Physics. – 2011. – V. 110. – I. 3. – P. 036105-1-036105-5.
6. **Магомедов, М.Н.** Об определении температуры Дебая из экспериментальных данных / М.Н. Магомедов // Физика твердого тела. – 2003. – Т. 45. – Вып. 1. – С. 33-36.
7. **Магомедов, М.Н.** Изучение межатомного взаимодействия, образования вакансий и самодиффузии в кристаллах / М.Н. Магомедов – М.: Физматлит, 2010. – 544 с.
8. **Магомедов, М.Н.** О критерии плавления-кристаллизации и энергии активационных процессов для нанокристаллов / М.Н. Магомедов // Журнал технической физики. – 2010. – Т. 80. – Вып. 9. – С. 141-145.
9. **Магомедов, М.Н.** О природе ковалентной связи в кристаллах подгруппы углерода / М.Н. Магомедов // Журнал неорганической химии. – 2004. – Т. 49. – № 12. – С. 2057-2067.
10. **Стишов, С.М.** Энергия, сжимаемость и ковалентность в подгруппе углерода / С.М. Стишов // Письма в журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2000. – Т. 71. – Вып. 1. – С. 25-27.
11. **Olesinski, R.W.** The $Ge-Sn$ (germanium-silicon) system / R.W. Olesinski, G.J. Abbaschian // Bulletin of Alloy Phase Diagrams. – 1984. – V. 5. – I. 2. – P. 180-183.
12. **Soma, T.** Pressure derivatives of the melting point for Sn and Ge / T. Soma // Journal of Physics C: Solid State Physics. – 1982. – V. 15. – I. 9. – P. 1873-1882.
13. **Магомедов, М.Н.** Зависимость упругих свойств от размера и формы нанокристаллов алмаза, кремния и германия / М.Н. Магомедов // Журнал технической физики. – 2014. – Т. 84. – Вып. 11. – С. 80-90.
14. **Bajaj, S.** Phase stability in nanoscale material systems: extension from bulk phase diagrams / S. Bajaj, M.G. Haverty, R. Arroyave, W.A. Goddard III FRSC, S. Shankare // Nanoscale. – 2015. – V. 7. – I. 21. – P. 9868-9877.
15. **Shirinyan, A.S.** Two-phase equilibrium states in individual $Cu-Ni$ nanoparticles: size, depletion and hysteresis effects / A.S. Shirinyan // Beilstein Journal of Nanotechnology. – 2015. – V. 6. – P. 1811-1820.
16. **Cui, M.J.** Phase diagram of continuous binary nanoalloys: size, shape, and segregation effects / M.J. Cui, Lu H., H. Jiang, Z. Cao, X. Meng // Scientific Reports. – 2017. – V. 7. – Article number 41990. – P. 1-9.
17. **Mei, Q.S.** Melting and superheating of crystalline solids: From bulk to nanocrystals / Q.S. Mei, K. Lu // Progress in Materials Science. – 2007. – V. 52. – I. 8. – P. 1175-1262.
18. **Магомедов, М.Н.** О размерной зависимости параметров плавления кремния / М.Н. Магомедов // Журнал технической физики. – 2016. – Т. 86. – Вып. 5. – С. 92-95.