

4. Kawamura K., Watanabe K., Hiramatsu T. et al. // Ibid. -2001. -**144**. -P. 11.
5. Naito H., Sakai N., Otake T. et al. // Ibid. -2000. -**135**. -P. 669—673.
6. Ruiz L., Readey M.J. // J. Amer. Ceram. Soc. -1996. -**79**, № 9. -P. 2331—2340.
7. Wang J., Zheng X.H., Stevens R. // J. Mater. Sci. -1992. -**27**, № 19. -P. 5348—5356.
8. Duh J.G., Lee M.Y. // Ibid. -1989. -**24**. -P. 4467—4474.
9. Андреевская Е.Р., Герасимюк Г.И., Корниенко О.А. и др. // Порошк. металлургия. -2006. -№ 9/10. -С. 54—63.
10. Zhu H.Y. // J. Mater. Sci. -1994. -**29**. -P. 4351—4356.
11. Duh J.G., Dai H.T. // J. Amer. Ceram. Soc. -1988. -**71**, № 10. -P. 813—819.
12. Foschini C.R., Souza D.P., Filho P.I., Varela J.A. // J. Eur. Ceram. Soc. -2001. -**21**. -P. 1143—1150.
13. Maschio S., Sbaizero O., Mariani S., Bischoff E. // J. Mater. Sci. -1992. -**27**. -P. 2734—2738.
14. Seidensticker J.R., Mayo M.J. // J. Amer. Ceram. Soc. -1996. -**79**, № 9. -P. 401—406.
15. Certificate of Analysis: Standard Ref. Material 1976, Instrument Sensitivity Standard for X-Ray Powder Diffraction. -Gaithersburg: Natl. Inst. of Standards and Technology, 1991. -P. 1—4.
16. Чусовитина Т.В., Торопов Ю.С., Третникова М.Г. // Огнеупоры. -1991. -№ 6. -С. 14—16.
17. Белоус А.Г., Пашикова Е.В., Макаренко А.Н. и др. // Неорган. материалы. -2001. -**37**, № 3. -С. 314—319.
18. Накамото Н. Инфракрасные спектры неорганических и координационных соединений. -М.: Мир, 1966.
19. Dongare M.K., Dongare A.M., Tare V.B., Kemnitz E. // Solid State Ionics. -2002. -**152—153**. -P. 455—462.
20. Стрекаловский В.Н., Полежаев Ю.М., Пальгуев С.Ф. Оксиды с примесной разупорядоченностью: состав, структура, фазовые превращения. -М.: Наука, 1987.
21. Krauth A., Meyer H. // Ber. Dt. Keram. Ges. -1965. -**42**, № 3. -S. 61—72.
22. Garvie R.C. // J. Phys Chem. -1965. -**69**, № 4. -P. 1238—1243.
23. Вест А. Химия твердого тела. Теория и приложения. -1988. -М.: Мир. -Т. 1.
24. Коттон Ф., Уилкинсон Дж. Современная неорганическая химия. -М.: Мир, 1969.
25. Shannon R.D., Prewitt C.T. // Acta Cryst. -1969. -**25**. -P. 925—946.

Институт общей и неорганической химии  
им. В.И. Вернадского НАН Украины, Киев

Поступила 23.02.2007

УДК 546.289'57+546.289'623+546.289'59+546.28'57

**А.В. Самсонников, В.П. Казимиров, А.С. Роик, В.Э. Сокольский**

## **СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ СТРУКТУРНЫХ МОДЕЛЕЙ ЖИДКИХ МЕТАЛЛОВ (Na, K, Al), ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДАМИ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ И ОБРАТНОГО МОНТЕ-КАРЛО**

С использованием методов молекулярной динамики (МД), обратного Монте Карло (RMC) и данных рентгенодифракционного эксперимента получены структурные модели для жидких Na, K и Al. Потенциал межчастичного взаимодействия рассчитан по методу псевдопотенциала с учетом обменно-корреляционных взаимодействий в электронном газе. Для всех металлов рассчитанные из полученных моделей кривые парного распределения атомов согласуются с экспериментальными. Установлено, что для жидких Na и K значения коэффициента сферичности, его среднеквадратичного отклонения и топологических индексов полиэдров Вороного ( $n_4, n_5, n_6$ ) для моделей, полученных указанными методами и характеризующих локальную структуру атомов в расплаве, согласуются между собой с незначительными отклонениями в ту или иную сторону. Детальный анализ количества и типов политетраэдрических кластеров показывает, что RMC-модели дают более разупорядоченную картину распределения атомов, чем МД-модели.

Дифракционный эксперимент является единственным и надежным методом получения информации о структуре вещества в конденсированном состоянии. Однако в случае неупорядоченных систем есть определенные сложности, обусловленные как характером полученной дифракционной картины, так и методикой интерпретации полученной информации с использованием кривых стру-

ктурного фактора (СФ) и радиального распределения атомов. Действительно, указанные кривые являются достаточно размытыми и, как следствие, слабо информативными, хотя они и являются единственным источником информации о структуре исследуемого объекта. Таким образом, повышения эффективности дифракционного метода применительно к неупорядоченным системам сводится, при

© А.В. Самсонников, В.П. Казимиров, А.С. Роик, В.Э. Сокольский, 2007

наличии необходимой точности экспериментальных данных, к усовершенствованию методики интерпретации экспериментальных данных. Существенный успех в этом направлении достигнут благодаря использованию статистических методов, позволяющих генерировать трехмерную структурную модель в виде массива координат атомов, которая наилучшим образом согласуется с данными дифракционного эксперимента. Сравнительно молодой метод обратного Монте-Карло, известный как метод RMC (Reverse Monte Carlo method) [1], реконструирует структурную модель из экспериментальной кривой СФ, используя стандартный алгоритм метода Монте-Карло. Оптимизация модели осуществляется путем минимизации суммы квадратов разности между модельной и экспериментальной кривой СФ. Метод молекулярной динамики (МД) для генерации структурной модели использует потенциал межчастичного взаимодействия, а адекватность ее проверяется сравнением рассчитанной кривой  $g(R)$  с экспериментальной. Считается, что метод RMC дает более разупорядоченную, по сравнению с МД, модель, поскольку здесь явно не присутствует потенциал межчастичного взаимодействия. Вместе с тем использование экспериментальной кривой СФ, в которой в той или иной мере отражены эффекты взаимодействия, несколько сглаживает эту некорректность метода. Существующая в литературе дискуссия относительно метода RMC в достаточной мере отражена в обзорах [2, 3]. Для обоих методов важным является точность экспериментальных данных, однако здесь следует иметь в виду, что на кривую  $g(R)$ , кроме экспериментальных, накладываются ошибки, связанные с применением Фурье-преобразования к кривой СФ. Поскольку оба метода интенсивно применяются при исследовании и интерпретации структуры металлических расплавов, нами была предпринята попытка проанализировать адекватность полученных моделей на примере жидких Na, K и Al.

Моделирование структуры жидких металлов методом RMC проводилось для расплавов натрия (373, 473 К), калия (338, 508 К) и алюминия (973, 1073, 1173 К). Кривые СФ для щелочных металлов брались из работы [4], для жидкого алюминия — определялись экспериментально на рентгеновском  $\Theta$ — $\Theta$  дифрактометре с использованием монохроматизированного  $MoK_{\alpha}$ -излучения. Исходная конфигурация задавалась случайным образом и содержала 5000 атомов в основной ячейке, размеры которой согласовывались с плотностью расплава при температуре исследования. Оп-

тимизация моделей проводилась минимизацией выражения:

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^N (a^M(s_i) - a^E(s_i))^2 / \sigma^2(s_i), \quad (1)$$

где  $a^M(s)$  и  $a^E(s)$  — соответственно модельный и экспериментальный СФ;  $(\sigma_{s_i})$  — экспериментальная ошибка.

Моделирование структуры расплавов методом МД проводилось для NTV-ансамбля частиц в системах, содержащих 5832 ( $18^3$ ), 10648 ( $22^3$ ) и 15625 ( $25^3$ ) атомов металла. Весь цикл моделирования выполнялся с помощью программного пакета DL\_POLY 2.14. Начальная ячейка строилась путем линейной трансляции микроячейки, содержащей один атом по трем измерениям. Размеры микроячейки согласовывались с плотностью расплава при температуре исследования. Временной шаг моделирования составил 0.002 пс для всех систем. Моделирование проводилось на протяжении 75000 шагов (150 пс). Время выхода системы на равновесие было установлено на уровне 50000 шагов (100 пс), хотя реально оно достигалось за 3—5 пс, что контролировалось путем анализа значений внутренней энергии. Начиная с 50000 шагов, рассчитывались кривые парного распределения атомов  $g(R)$  и усреднялись на всем временном диапазоне моделирования. Для всех металлов парный потенциал межчастичного взаимодействия  $U(R)$  рассчитывался по методу псевдопотенциала [5]:

$$U(R) = \frac{Z^2 e^2}{R} - \frac{2Z^2 e^2}{\pi} \int_0^{\infty} G(s) \frac{\sin(sR)}{sR} ds, \quad (2)$$

где  $G(s)$  — характеристическая функция вида:

$$G(s) = \left[ \frac{4\pi Z e^2}{\Omega_0 s^2} \right]^{-2} |W(s)|^2 \frac{\epsilon(s) - 1}{[1 - f(s)] \epsilon(s)}. \quad (3)$$

Здесь  $W(s)$  — формфактор псевдопотенциала;  $Z$  и  $e$  — валентность металла и заряд электрона соответственно;  $\Omega_0$  — атомный объем;  $f(s)$  — функция, учитывающая обменно-корреляционные взаимодействия в электронной подсистеме через модифицированную диэлектрическую функцию Хартри  $\epsilon(s)$ . В уравнении (2) первый член описывает ион-ионное отталкивание, второй — прямое ион-электрон-ионное взаимодействие. В качестве псевдопотенциала использовался однопараметрический модельный потенциал Ашкрофта [5], форм-фактор которого задается уравнением:

$$W(s) = - \left( \frac{4\pi Z e^2}{\Omega_0 s} \right) \cos(sR_c a_0), \quad (4)$$

где  $a_0$  — радиус Бора;  $R_c$  — параметр, который имеет смысл радиуса ионного остова.

Для аппроксимации функции  $f(s)$  использовали уравнение, предложенное в работе [6]:

$$f(s) = A(1 - \exp[-B(s/k_F)^2]), \quad (5)$$

которое наилучшим образом зарекомендовало себя при расчете электросопротивления жидких щелочных металлов [7]. В уравнении (5)  $A$  и  $B$  — параметры, зависящие от электронной плотности металла. Значение параметра  $R_c$  оптимизировали таким образом [8], чтобы положение первого минимума кривой  $U(R)$  согласовывалось со значением наиболее вероятного ближайшего межатомного расстояния  $R_1$ , определенного из экспериментальной кривой радиального распределения атомов. Полученные таким образом значения  $R_c$  составили  $0.88 \text{ \AA}$  для Na,  $1.115 \text{ \AA}$  — для K и  $0.57 \text{ \AA}$  — для Al. Рассмотренный подход к расчету потенциала межчастичного взаимодействия широко используется при МД-моделировании жидких непериодических металлов [9—11]. Для алюминия дополнительно использовали потенциал из работы [12], полученный по методу внедренного атома, который, по мнению авторов, успешно описывает многие свойства металла (рис. 1). Обрыв потенциала во всех случаях производился при  $7 \text{ \AA}$ .

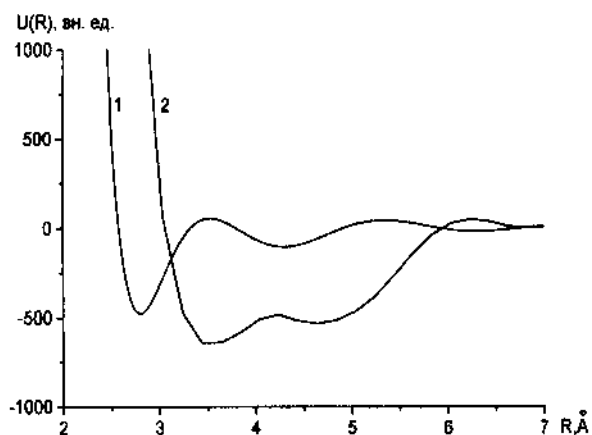


Рис. 1. Потенциалы межчастичного взаимодействия для жидкого алюминия при 973 К: 1 — расчет по методу псевдопотенциала; 2 — из работы [12] (1 в.ед. =  $1.6605402 \cdot 10^{-23}$  Дж).

Для проверки корректности полученных моделей проводилось сравнение рассчитанных и экспериментальных кривых  $g(R)$ . Как видно из рис. 2, модельные кривые удовлетворительно согласуются с экспериментальными, что позволяет говорить об адекватности МД- и RMS-моделей реальной структуре исследованных металлов.

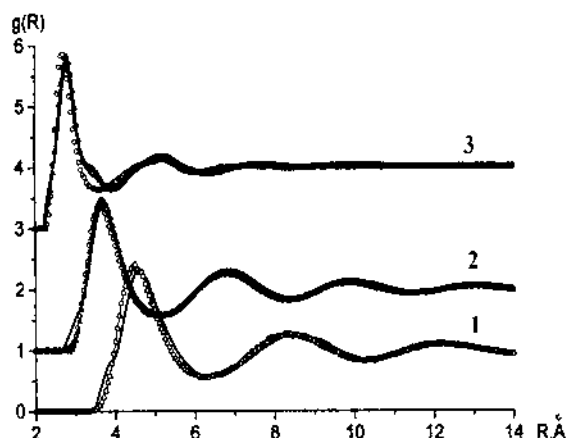


Рис. 2. Кривые парного распределения атомов, полученные методом МД (o), методом RMS (—) и экспериментально ( $\Delta$ ) для жидких металлов: 1 — K, 338 К; 2 — Na, 373 К; 3 — Al(P<sub>3</sub>-P), 973 К.

Наблюдаемые расхождения в кривых в области первого минимума, скорее всего, связаны с “эффектом обрыва”.

Полученные МД- и RMS-модели анализировались статистически-геометрическим методом Вороного–Делоне, который на количественном уровне позволяет описывать локальную структуру атомов, а также исследовать ее на более дальних расстояниях [13, 14]. Последнее связано с наличием структурных образований (кластеров) нанометрического размера, определяющих так называемый “средний порядок”. Согласно методу Вороного–Делоне конфигурационное пространство моделей разбивалось на полиэдры Вороного с последующим расчетом метрических и топологических параметров, которые количественно характеризуют локальную структуру атомов. Наиболее информативными метрическими и топологическими параметрами являются значения коэффициента сферичности ( $K_{сф} = 3\pi V^2/S^3$ , где  $V$  — объем, а  $S$  — площадь поверхности полиэдра Вороного), среднеквадратичного отклонения коэффициента сферичности ( $\sigma$ ) и содержание полиэдров с топологическими индексами  $n_4 n_5 n_6$ . Для нахождения наиболее характерных локальных конфигураций (кластеров), образованных атомами расплава, был проведен перколяционный анализ сетки симплексов Делоне, являющихся слабодеформированными тетраэдрами. При анализе закономерностей расположения симплексов выделялись только те узлы (центры симплексов), у которых мера тетраэдричности была равна или меньше 0.018 [13].

Полученные в ходе анализа значения метри-

Динамические и структурные характеристики жидких металлов \*, полученных методами МД- и RMC-моделирования

Металл	T, К	$K_{сф}$		$\sigma$ , %		$x(n_4n_5n_6)$ , %		$x_a$ , %		$D \cdot 10^9$ , м <sup>2</sup> /с
		МД	RMC	МД	RMC	МД	RMC	МД	RMC	
Na	373	0.699	0.698	2.46	2.67	27.08	24.86	13.17	12.58	5.58
	473	0.688	0.689	2.69	2.76	20.23	19.78	5.02	4.64	10.01
K	338	0.698	0.699	2.49	2.58	27.14	25.12	14.70	12.84	5.33
	508	0.690	0.694	2.66	2.63	21.60	21.30	6.32	7.76	8.48
Al	973	0.676	0.687	2.63	2.58	13.14	19.30	5.34	5.64	7.56
	973 [12]	0.703	—	2.26	—	32.78	—	27.91	—	4.52
	1073	0.681	0.688	2.63	2.57	16.88	17.56	8.50	5.10	9.57
	1173	0.679	0.685	2.65	2.64	15.80	17.00	6.78	3.52	10.92

\* Все значения рассчитаны для систем, содержащих 10648 атомов.

ческих и топологических параметров сведены в таблице. Видно, что для жидких щелочных металлов значения указанных параметров хорошо совпадают для разных методов получения моделей. Некоторое отличие в значениях среднеквадратичного отклонения коэффициента сферичности для МД-моделей указывают на чуть большую локальную упорядоченность атомов в данных моделях по сравнению с RMC-моделями, что также отображается на повышенном содержании полиэдров с топологическими индексами  $n_4n_5n_6$  и доли атомов ( $X_a$ ), входящих в состав замкнутых политетраэдрических кластеров. Иная картина наблюдается для моделей жидкого алюминия. Разные методы моделирования дают значения параметров, которые существенно отличаются между собой. Для МД-моделей, полученных при использовании псевдопотенциала, по сравнению с RMC-моделями значения коэффициента сферичности и содержание полиэдров с топологическими индексами  $n_4n_5n_6$  меньше, что свидетельствует о менее плотной упаковке атомов в МД-моделях. Наряду с этим меньшие значения  $\sigma$  для МД-моделей свидетельствуют о более высокой однородности структуры расплава. Повышенные значения  $X_a$ , наряду с вышесказанным, свидетельствуют, что в МД-моделях подобных кластеров больше, но их размер меньше, нежели в RMC-моделях. Для МД-моделей, полученных при использовании потенциала из работы [12], значения всех параметров значительно отличаются от рассчитанных для моделей, полученных с использованием псевдопотенциала и указывают на столь высокую степень упорядочения и такое увеличение плотности упаковки атомов, которые нельзя считать реальными. Причина — чрезвычайно большая область притяже-

ния упомянутого потенциала (рис. 1), которая не имеет физического обоснования. Надо отметить, что все метрические и топологические параметры для МД-моделей жидкого алюминия имеют экстремальный характер при температуре 1073 К. Для RMC-моделей указанная особенность проявляется менее заметно. В литературе имеются указания на немонотонную зависимость структурных параметров жидкого Al, рассчитанных из данных рентгенодифракционного эксперимента, вблизи 1073 К [15] и 1233 К [16], что объясняется изменением структуры ближнего порядка расплава.

Анализ сетки Делоне показал, что в рамках выбранной меры тетраэдричности наиболее часто встречающиеся локальные группировки атомов реализуются в виде одиночных декаэдров (пентагональная бипирамида) (рис. 3, а) и двух взаимопроникающих декаэдров (рис. 3, б), которые являются фрагментами икосаэдра (рис. 3, в), поскольку последний можно рассматривать как два развернутых на угол  $\pi/5$  декаэдра с общей вершиной. В меньшем количестве присутствуют группировки атомов из десяти и одиннадцати тетраэдров,

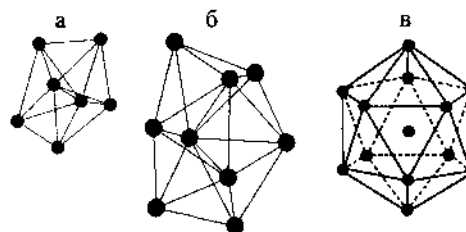


Рис. 3. Наиболее характерные замкнутые политетраэдрические кластеры в жидких металлах: а — декаэдр; б — кластер, состоящий из 8 тетраэдров, являющихся фрагментами икосаэдрической упаковки (в) 20 тетраэдров.

которые следует рассматривать как недостроенные икосаэдры.

Параллельно исследовалось влияние размера базовой ячейки и значений параметра  $R_c$  на характер упорядочения атомов в полученных моделях. Выяснилось, что увеличение числа атомов в базовой ячейке от 5832 до 15625 практически не влияет на такие среднестатистические характеристики локальной структуры атомов как коэффициент сферичности, величину его среднеквадратичного отклонения и топологические индексы полиэдров Вороного. Не установлено и определенной зависимости между содержанием замкнутых кластеров, числом атомов в базовой ячейке и температурой. Полученные результаты, скорее всего, свидетельствуют о слабых краевых эффектах для данных систем, хотя следует иметь в виду и то, что они получены на моделях, характеризующих мгновенную структуру расплава.

Влияние параметра  $R_c$  на форму потенциала проявляется в линейном увеличении глубины и положения первого минимума на кривой потенциала, и увеличении радиуса жесткой сердцевины атома, что обуславливает более высокую структурированность системы и отображается в увеличении значений коэффициента сферичности, содержания полиэдров с топологическими индексами  $n_4 n_5 n_6$ , доли атомов в замкнутых кластерах и уменьшении значений среднеквадратичного отклонения коэффициента сферичности.

Для проверки корректности использованных потенциалов взаимодействия были рассчитаны не только статические, но и динамические характеристики исследованных расплавов. Из таблицы видно, что полученные значения коэффициента самодиффузии ( $D$ ) неплохо согласуются с известными в литературе (отклонения в пределах 20—30 %). Например, экспериментальные значения коэффициента самодиффузии составляют: для жидкого калия  $3.85 \cdot 10^{-9} \text{ м}^2/\text{с}$  (338 К) [9], для жидкого алюминия [17] —  $(6.0 \pm 0.5) \cdot 10^{-9} \text{ м}^2/\text{с}$  (1000 К), для жидкого натрия —  $4.78 \cdot 10^{-9} \text{ м}^2/\text{с}$  (388 К) и  $8.40 \cdot 10^{-9} \text{ м}^2/\text{с}$  (470 К) [18]. Значение коэффициента самодиффузии для жидкого алюминия, рассчитанное с использованием потенциала из работы [12], значительно отличается как от литературных данных, так и от значений, полученных для МД-моделей при использовании метода псевдопотенциала, что подтверждает недостаточную корректность указанного потенциала, о чем уже говорилось выше. При увеличении  $R_c$  происходит заметное уменьшение коэффициента самодиффузии, что обусловлено увеличением диаметра жесткой сердцевины

атома и, при сохранении постоянства объема системы, ограничивает перемещение атомов. Отдельно проводился сравнительный анализ МД- и RMC-моделей жидкого алюминия (973 К) на содержание политетраэдрических кластеров при мере тетраэдричности 0.018 и 0.036 (рис. 4). Для обоих значений общее число указанных кластеров в МД-моделях выше, чем в RMC-моделях, хо-

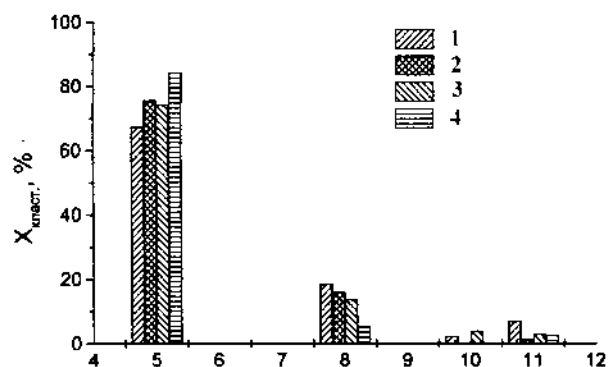


Рис. 4. Распределение типов замкнутых политетраэдрических кластеров в зависимости от размера МД-модели для жидкого алюминия при 973 К ( $T=0.018$ ) в сравнении с RMC-моделью: 1 — МД 5832 ат; 2 — МД 10648 ат; 3 — МД 15625 ат; 4 — RMC 5000 ат.

тя при увеличении меры тетраэдричности различие уменьшается. Относительное содержание декаэдров в RMC-моделях выше, чем в МД-моделях за счет уменьшения количества более крупных кластеров. Следовательно, наличие притяжения в потенциале взаимодействия благоприятствует формированию более крупных политетраэдрических кластеров. Полученные результаты указывают на большую разупорядоченность атомов в RMC-моделях по сравнению с МД-моделями.

При выборе потенциала в МД-моделировании следует соблюдать определенную осторожность, поскольку, как следует из вышеизложенного, кривые  $g(R)$  (или СФ) недостаточно чувствительны к конкретной форме используемого потенциала. Следовательно, совпадение модельных и экспериментальных кривых  $g(R)$  (или СФ) является недостаточно полным критерием адекватности полученной модели реальной структуре исследуемого расплава. Дополнительным критерием выступает значение коэффициента самодиффузии, который достаточно чувствителен к потенциалу взаимодействия (таблица).

Таким образом, на микроскопическом уровне проведено сравнение структурных моделей жидких Na, K и Al, полученных МД- и RMC-методами. Потенциал межатомного взаимодействия

рассчитан в рамках метода псевдопотенциала. В качестве параметров, характеризующих локальную структуру атомов, выбраны значения коэффициента сферичности, его среднеквадратичное отклонение и топологические индексы  $n_4n_5n_6$  полиэдров Вороного, усредненные по всем атомам системы. Для жидких Na и K получено удовлетворительное согласие указанных параметров в МД- и RMC-моделях. На основании количественного сопоставления типов политетраэдрических кластеров в жидком Al при температурах 973, 1073 и 1173 К показано, что RMC-модели дают более разупорядоченную картину распределения атомов, чем МД-модели. Для жидкого Al при 1073 К оба типа моделей показывают аномальное поведение параметров, характеризующих локальную структуру атомов.

РЕЗЮМЕ. З використанням методів молекулярної динаміки (МД), оберненого Монте-Карло (RMC) та даних рентгенодифракційного експерименту отримані структурні моделі для рідких Na, K та Al. Потенціал міжчастинкової взаємодії розрахований за методом псевдопотенціалу з урахуванням обмінно-кореляційних взаємодій у електронному газі. Для всіх металів розраховані з отриманих моделей криві парного розподілу атомів узгоджуються з експериментальними. Встановлено, що для рідких Na і K значення коефіцієнту сферичності, його середньоквадратичного відхилення і топологічних індексів поліедрів Вороного ( $n_4n_5n_6$ ) для моделей, отриманих вказаними методами і такими, що характеризують локальну структуру атомів у розплаві, узгоджуються між собою з незначними відхиленнями в той чи інший бік. Детальний аналіз кількості і типів політетраедричних кластерів вказує, що RMC-моделі дають більш розупорядковану картину розподілу атомів, ніж МД-моделі.

SUMMARY. With use of molecular dynamic method (MD), reverse Monte-Carlo method and experimental diffraction data structural models for liquid Na, K and Al were obtained. The potential of interatomic interaction was calculated with a method of pseudo-potential in view of exchange-correlation interactions in electronic gas. For all metals the curves of atomic pair distribution obtained from received models are coordinated with experimental.

It is established, that for liquid Na and K values of factor of sphericity, its root-mean-square deviation and topological indexes of Voronoy polyhedrons ( $n_4n_5n_6$ ) for the models received by the specified methods and describing local structure of atoms in melts, are coordinated among themselves to insignificant deviations in this or that side. The detailed analysis of quantity and types of polytetrahedron clusters shows, that RMC-models give more disordered picture of atomic distribution than MD-models.

1. *McGreevy R.L., Pusztai L.* // Mol. Simulation. -1988. -№ 1. -P. 359—367.
2. *McGreevy R.L.* // J. Phys.: Condens. Matter. -2001. -**13**, № 46. -P. R877—R913.
3. *Fisher H.E., Barnes A.C., Salmon P.S.* // Rep. Progr. Phys. -2006. -**69**. -P. 233—299.
4. *Greenfield A.J., Wellendorf J.* // Phys. Rev. -1971. -**4**, № 4. -P. 1607—1612.
5. *Хейне В., Коэн М., Уэйр Д.* Теория псевдопотенциала. -М.: Мир, 1973.
6. *Singwi K.S., Sjolander A., Tosi M.P., Land R.H.* // Phys. Rev. B: Solid state. -1970. -**2**, № 3. -P. 1044—1053.
7. *Казимиров В.П., Баталин Г.И., Шовский В.А.* // Металлы. -1976. -№ 6. -С. 84—86.
8. *Казимиров В.П., Баталин Г.И.* // Физика металлов и металловед. -1974. -**38**, вып. 3. -С. 493—499.
9. *Gonzales Miranda J.M.* // J. Phys. F: Met. Phys. -1986. -**16**, № 1. -P. 1—10.
10. *Canales M., Padro J.A.* // Phys. Rev. E. -1997. -**56**, № 2. -P. 1759—1764.
11. *Dong K.J., Liu R.S., Yu A.B. et al.* // J. Phys.: Condens. Matter. -2003. -**15**, № 6. -P. 743—753.
12. *Mishin Y., Farkas D.* // Phys. Rev. B. -1999. -**59**, № 5. -P. 3393—3407.
13. *Медведев Н.Н.* Метод Вороного–Делоне в исследовании структуры некристаллических систем. -Новосибирск: Изд-во СО РАН НИЦ ОИГГМ, 2000.
14. *Роук А.С., Казимиров В.П., Сокольский В.Э.* // Журн. структур. химии. -2004. -**45**, № 4. -С. 682—691.
15. *Ватолин Н.А., Пастухов Э.А.* Дифракционные исследования высокотемпературных расплавов. -М.: Наука, 1980.
16. *Базин Ю.А., Емельянов А.В., Баум Б.А., Клименков Е.А.* // Металлофизика. -1986. -**8**, № 2. -С. 11—15.
17. *Aleman M.M.G., Gallego L.G., Gonzalez D.J.* // Phys. Rev. B. -2004. -**70**, № 13. -P. 134206-1—134206-6.
18. *Cocking S.J.* // J. Phys. C: Solid State Phys. -1969. -**2**, № 2. -P. 2047—2062.