Письма в ЖЭТФ, том 113, вып. 5, с. 341 – 347

К вопросу о механизме плавления простых металлов

Р. А. Кончаков[+1)], *А. С. Макаров*[+], *А. С. Аронин*[+*], *Н. П. Кобелев*[*], *В. А. Хоник*[+]

[+]*Воронежский государственный педагогический университет, 394043 Воронеж, Россия*

[*]*Институт физики твердого тела РАН, 142432 Черноголовка, Россия*

Поступила в редакцию 21 января 2021 г.
После переработки 21 января 2021 г.
Принята к публикации 4 февраля 2021 г.

Молекулярно-динамическое моделирование алюминия показало значительный рост колебательной энтропии формирования межузельных дефектов в гантельной конфигурации вблизи температуры плавления T_m. На этой основе, совместно с оценкой концентрации дефектов такого типа в расплаве тремя независимыми методами, определена конфигурационная составляющая энтропии дефектной системы и сделан вывод о том, что около 70 % полной энтропии плавления (и, соответственно, теплоты плавления), наблюдаемой в эксперименте, может быть интерпретировано как результат генерации межузельных гантелей при $T = T_m$.

DOI: 10.31857/S1234567821050086

Введение. Микроскопический механизм плавления веществ является одной из фундаментальных проблем физики конденсированного состояния. История ее изучения начинается с работы Линдемана, опубликованной в 1910 г., в которой был предложен одноименный критерий плавления [1]. Однако, несмотря на многочисленные попытки решения этой проблемы в течение более ста лет, микроскопический механизм плавления даже элементарных веществ остается дискуссионным. Один из последних обзоров моделей плавления представлен в работе [2].

Важнейшим термодинамическим параметром плавления является энтропия плавления – разность энтропий жидкой и твердой фазы. Интересный факт состоит в том, что энтропия плавления элементов Периодической системы в расчете на атом близка к $1.2k_B$ (k_B – постоянная Больцмана) лишь с некоторыми относительно небольшими отклонениями [3]. Это соотношение известно как “правило Ричардса” [3, 4]. Оценка отдельных составляющих энтропии плавления ряда металлов (Au, Cu и др.) показала, что значительная часть скачка энтропии при плавлении обусловлена изменением колебательного спектра атомов [5]. Можно отметить, что еще модель Мотта–Френкеля (1934 г.) предполагала, что основная причина изменения энтропии в точке плавления имеет колебательную природу [6]. Известно также, что для многих металлов относительное изменение объема при плавлении пропорционально энтропии плавления [7].

Многие теоретические представления о плавлении строятся на предполагаемой связи плавления с дефектами кристаллической решетки. Так, Френкель еще в 1920-х гг. прошлого века предложил вакансионную модель плавления [8]. Слейтером было однако позднее показано [9], что если интерпретировать энтропию плавления как результат генерации вакансий, то их концентрация при температуре плавления T_m для меди должна быть около 50 %, что нереалистично. Существуют и другие возражения против такого подхода [10, 4].

Тем не менее, идея о связи плавления с дефектами кристаллической решетки развивалась во многих работах. При этом рассматривались пары Френкеля, отдельно межузельные атомы и их кластеры, комбинации различных дефектов и роль дефектов в спусковых механизмах, вызывающих плавление [10–16].

Среди всех представлений, связывающих плавление с дефектами, наиболее обоснованной нам представляется Межузельная теория (МТ) Граната [17, 18]. Основным объектом МТ являются межузельные гантели – межузельные атомы в наиболее устойчивой гантельной конфигурации (два атома, стремящиеся занять один и тот же узел решетки), возникающей во всех основных кристаллических решетках. При этом одним из главных свойств этих дефектов является высокая энтропия формирования. Механизм плавления с точки зрения МТ состоит в лавинообразной генерации межузельных гантелей, концентрация c_i которых определяется энергией формирования Гиббса G_i^f и может быть описана стандартным соотношением

1) e-mail: konchakov.roman@gmail.com

$$c_i \approx \exp\left(-\frac{G_i^f}{k_B T}\right) = \exp\left(-\frac{H_i^f - TS_i^f}{k_B T}\right), \quad (1)$$

где H_i^f и S_i^f – энтальпия и энтропия формирования межузельных гантелей соответственно. С ростом температуры T имеет место значительное уменьшение G_i^f, во-первых, за счет уменьшения энтальпии формирования H_i^f вследствие диаэластического эффекта (экспоненциального уменьшения модуля сдвига с ростом c_i) [17, 19]. Во-вторых, с ростом температуры колебательная часть энтропии формирования межузельных гантелей тоже растет, как будет показано ниже. Оба эффекта вызывают быстрый рост c_i. Гранато полагал, что практически вся энтропия плавления (т.е. $\approx 1.2k_B$ в расчете на атом) связана с межузельными гантелями [4]. МТ позволила термодинамически обосновать существование перегретого кристалла и переохлажденного расплава [17], количественно объяснить критерий Линдемана, одноименное эмпирическое правило плавления, корреляцию между температурой плавления и модулем сдвига [20], особенности высокотемпературной теплоемкости дефектных кристаллов [21], некоторые свойства переохлажденных и равновесных расплавов [4, 20], а также целый ряд релаксационных явлений в замороженных расплавах – металлических стеклах [22].

Между тем, оценки Гранато [4, 17, 18] носят в значительной степени качественный характер, а необходимые численные параметры были взяты в основном для меди. Поскольку МТ в целом дает ряд принципиально важных результатов как для простых металлов, так и для металлических стекол, ее базовые гипотезы и количественные оценки нуждаются в многосторонней проверке. Цель настоящей работы – показать посредством молекулярно-динамического моделирования алюминия, что значительный вклад в энтропию плавления действительно обусловлен межузельными гантелями. Это в первую очередь важно для понимания микроскопического механизма плавления простых металлов.

Методика моделирования. Молекулярно-динамические расчеты были выполнены в пакете LAMMPS [23] с межатомным потенциалом из работы [24], который ранее уже был использован нами при исследовании диаэластического эффекта в алюминии [19]. Размер модельной системы был выбран довольно малым – 4000 атомов ($10 \times 10 \times 10$ трансляций элементарной ячейки). Несмотря на то, что уменьшение размера модельной системы приводит к более грубой оценке ее колебательной энтропии [25], такой методический прием необходим для того, чтобы избежать самопроизвольной генерации равновесных пар Френкеля до как можно более высоких температур. Температура плавления T_m для модели составила 898 K [19]. Максимальная температура, при которой удалось оценить энтропию формирования межузельных гантелей, оказалась равной 880 K.

Межузельные гантели вносились в систему при $T = 0$ K в случайные узлы решетки, но так, чтобы они не занимали соседние узлы. Затем выполнялся нагрев и уравновешивание системы при заданной температуре и нулевом внешнем давлении. Для расчета колебательной энтропии при заданной температуре модельная система сначала уравновешивалась в течение 0.2 нс (с шагом интегрирования по времени 2 фс), а затем вычислялась автокорреляционная функция скорости. Колебательная плотность состояний (VDoS) $g(\nu)$ вычислялась как квадрат модуля преобразования Фурье автокорреляционной функции скорости, а расчет колебательной энтропии выполнялся по формуле [25]

$$S_v/k_B = 3\int_0^\infty g(\nu)[(n+1)\ln(n+1) - n\cdot\ln n]d\nu, \quad (2)$$

где $n(\nu) = 1/\exp(h\nu/k_B T - 1)$ и h – постоянная Планка. При расчете S_v для каждой конфигурации модельной системы проводилось усреднение 50-ти колебательных спектров VDoS.

Средняя колебательная энтропия системы с дефектами, определявшаяся по формуле (2), при малых c_i может быть представлена как

$$< S_v > = S_v^0 + c_i S_i^f, \quad (3)$$

где S_v^0 – средняя колебательная энтропия атомов идеальной решетки и S_i^f – колебательная энтропия формирования межузельной гантели. Для определения S_i^f при заданной температуре достаточно построить зависимость средней энтропии на атом $< S_v >$ от концентрации c_i и вычислить ее угловой коэффициент

$$S_i^f = \frac{d < S_v >}{dc_i}, \quad (4)$$

представляющий собой колебательную энтропию формирования дефекта.

Согласно МТ [17, 18], энтропию расплава можно рассматривать как энтропию кристалла, содержащего достаточно большое количество межузельных гантелей. Если S_m – средняя колебательная энтропия на атом в расплаве, то изменение колебательной энтропии при плавлении ΔS_v^i в расчете на атом, обусловленное только генерацией межузельных гантелей, можно представить как

$$\Delta S_v^i = S_m - S_v^0 = c_i S_i^f, \tag{5}$$

где c_i – концентрация межузельных гантелей в точке плавления.

Результаты моделирования и обсуждение. На рисунке 1 в качестве примера показана зависимость колебательной энтропии $< S_v >$ от концентрации межузельных гантелей при $T = 865$ K. Согласно уравнению (4), угловой коэффициент этой зависимости определяет колебательную энтропию формирования $S_i^f = (6.5 \pm 0.3) k_B$. Аналогичные вычисления были проделаны для других температур в интервале $0.67 \le T/T_m \le 0.98$.

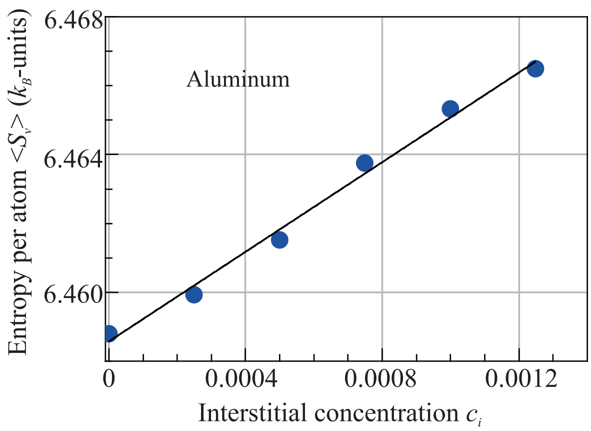

Рис. 1. (Цветной онлайн) Зависимость средней колебательной энтропии на атом $< S_v >$ от концентрации межузельных гантелей c_i в алюминии при $T = 865$ K

На рисунке 2 показана рассчитанная колебательная энтропия идеальной решетки S_v^0, а также полная энтропия кристалла, взятая по данным эксперимента [26]. Как и следовало ожидать, S_v^0 несколько меньше полной экспериментальной энтропии и хорошо воспроизводит ее температурную зависимость. Подчеркнем, что увеличение размеров модели этот результат не меняет. Колебательная энтропии формирования межузельных гантелей S_i^f / k_B составляет около 3.5 при низких температурах $T/T_m \approx 0.5$ и быстро увеличивается до ≈ 7 вблизи T_m.

Полученные результаты можно дополнить следующим анализом. В работе [19] были выполнены прецизионные измерения температурной зависимости модуля сдвига C_{44} монокристалла Al и независимо методом молекулярной динамики была рассчитана температурная зависимость концентрации межузельных гантелей c_i. Энтальпия их формирования определяется как $H_i^f = \alpha_1 \Omega C_{44}$, где Ω – объем на

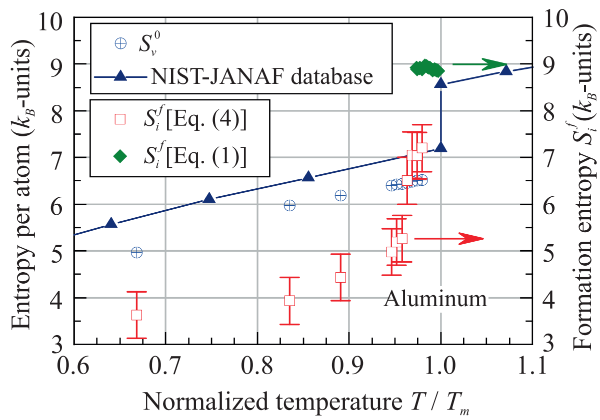

Рис. 2. (Цветной онлайн) Температурная зависимость колебательной энтропии S_v^0 атомов идеальной решетки (перечеркнутые кружки) и ее сравнение с полной энтропией по данным эксперимента [26] (темные треугольники) (левая ось), а также температурная зависимость энтропии формирования межузельной гантели S_i^f, рассчитанная с помощью уравнений (4) (светлые квадраты) и (1) (темные ромбы) (правая ось)

атом [19]. Тогда полную энтропию формирования межузельных гантелей можно определить по формуле (1), приняв рассчитанную для Al безразмерную константу $\alpha_1 = 0.78$ (см. ниже). Результат расчета показан темными ромбами на рис. 2. Видно, что в непосредственной близости к T_m полная энтропия формирования составляет $\approx 8.9 k_B$.

С другой стороны, в той же работе [19] было получено значение полной энтропии формирования межузельных гантелей, равное $22\, k_B$ за несколько Кельвинов до T_m, что существенно больше значений, приведенных на рис. 2. Однако более поздний анализ [27] показал, что прямая оценка S_i^f по формуле (1), если не учитывать температурную зависимость энтальпии формирования (что и предполагалось в [19]), дает значительно завышенное значение энтропии формирования (как для межузельных атомов, так и для точечных дефектов вообще). Анализ литературных экспериментальных данных для Al с учетом этой температурной зависимости дал значение полной энтропии формирования $7.1 k_B$ [27], что хорошо соответствует показанным на рис. 2 данным для предплавильных температур.

При низких температурах, когда миграция межузельных гантелей практически отсутствует, колебательную энтропию формирования можно оценить по положениям характерных пиков VDoS атомов, формирующих межузельную гантель. Рассчитанный нами для таких условий спектр VDoS для атомов межузельной гантели показан на рис. 3. Видны ха-

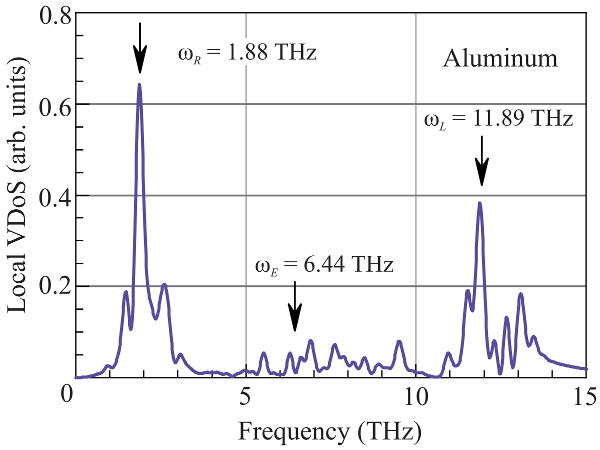

Рис. 3. (Цветной онлайн) Колебательная плотность состояний атомов межузельной гантели в алюминии при $T = 100$ K. Стрелками показаны резонансные и локальные частоты (ω_R и ω_L), а также частота Эйнштейна ω_E

рактерные большие резонансные и локальные пики, обусловленные синфазными и противофазными колебаниями атомов гантели на частотах ω_R и ω_L соответственно. Колебательную энтропию формирования можно тогда оценить по формуле [18]

$$S_i^f/k_B \approx 5\ln\frac{\omega_E}{\omega_R} + 6\ln\frac{\omega_E}{\omega_L}, \tag{6}$$

где ω_E – частота Эйнштейна, а коэффициенты 5 и 6 отражают число резонансных и локальных мод для межузельных гантелей в ГЦК решетке соответственно [28]. Подставляя значения частот ω_R, ω_L и ω_E (см. рис. 3), получаем колебательную энтропию формирования $S_i^f/k_B = 2.5$, что хорошо согласуется с результатами нашего модельного расчета S_i^f при низких температурах (рис. 2). Подчеркнем, что именно низкочастотные резонансные колебательные моды межузельных гантелей являются источником их высокой энтропии и это обстоятельство фактически составляет физическую основу МТ.

Помимо вышеизложенных данных по энтропии формирования межузельных гантелей в Al, в литературе нам известна только работа [29], где для довольно малой системы из 256 атомов методом молекулярной динамики показано, что при низких температурах $S_i^f/k_B = 5.9$, а вблизи T_m увеличивается до $S_i^f/k_B = 12.9$, что в принципе качественно согласуется с нашими результатами. Авторы [29] отмечают, что рост энтропии формирования может являться проявлением ангармонизма межатомного взаимодействия, хотя детали такого механизма непонятны.

Какие-либо другие данные об энтропии формирования межузельных гантелей в алюминии нам неизвестны, но для меди, имеющей ту же ГЦК решетку, в литературе также указываются весьма большие значения S_i^f. Так, вышеуказанная работа [29] дает колебательную энтропию вблизи T_m, равную $17.6k_B$. Приведенные в работе [30] оценки разными методами для меди дают значения $S_i^f/k_B \approx 10 - 14$, что близко к значениям $S_i^f/k_B = 15 \pm 2$, представленным авторами [31]. Для сравнения отметим, что энтропию формирования вакансий S_{vac}^f в металлах оценивают в (1–2)k_B [32]. Подчеркнем, однако, что соответствующие расчеты выполнялись в приближении постоянной энтальпии формирования H_{vac}^f (см., например, [33]). Анализ экспериментальных данных для Al с учетом температурной зависимости $H_{\text{vac}}^f = f(T)$ приводит к отрицательной энтропии формирования вакансии $S_{\text{vac}}^f/k_B \approx -1$ [27].

В целом, с учетом вышеизложенных результатов можно принять, что для Al колебательная энтропия формирования межузельных гантелей $S_i^f/k_B \approx \approx 8$ вблизи T_m (рис. 2). Далее возникают вопросы о том, чему равна конфигурационная и полная энтропия системы межузельных гантелей, а также каков вклад полной энтропии в экспериментально наблюдаемую энтропию плавления. Для ответа на эти вопросы необходимо оценить концентрацию межузельных гантелей в расплаве. Отметим прежде всего, что по данным работы [34] межузельные гантели в результате плавления простого металла не теряют свою индивидуальность, а в рамках МТ дефектный кристалл и его расплав с энергетической точки зрения отличаются только концентрацией межузельных гантелей[2)]. Концентрацию межузельных гантелей в расплаве можно оценить следующими независимыми способами.

Во-первых, можно использовать основное уравнение МТ, связывающее модуль сдвига C_{44} расплава (или дефектного кристалла) с модулем сдвига материнского идеального кристалла C_{44}^{perf} и концентрацией межузельных гантелей c_i [17, 18]:

$$C_{44} = C_{44}^{\text{perf}} \exp(-\alpha\beta c_i), \tag{7}$$

где α – безразмерный параметр порядка единицы, связанный с полем деформации дефекта [35] и β – безразмерная сдвиговая восприимчивость. Для дальнейших расчетов можно с хорошей точностью считать, что модули сдвига идеального и дефектного кристалла вблизи T_m одинаковы. Значения модуля C_{44}^{perf} вблизи T_m, а также величину C_{44} непосредственно после плавления Al можно взять из рабо-

2)Подчеркнем, что эта точка зрения нашла довольно убедительные экспериментальные подтверждения для замороженных расплавов – металлических стекол [36, 37].

ты [38]. Результаты этой работы воспроизведены на рис. 4, где представлены результаты молекулярно-

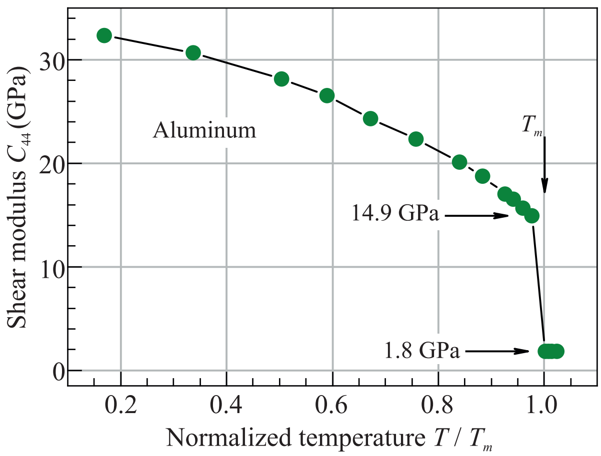

Рис. 4. (Цветной онлайн) Молекулярно-динамический расчет температурной зависимости модуля сдвига C_{44} алюминия в твердом и жидком состояниях по данным [38]. Отмечены значения C_{44} непосредственно до и после плавления

динамического расчета температурной зависимости модуля сдвига Al до и после плавления. Из рисунка 4 можно определить, что $C_{44}^{\rm perf} = 14.9$ ГПа чуть ниже T_m и $C_{44} = 1.8$ ГПа чуть выше T_m. В полном согласии с МТ, модуль сдвига расплава является малым, но ненулевым. Тогда, принимая значение сдвиговой восприимчивости для алюминия $\beta = 27$ [19] (фактически в этой работе находилось произведение $\alpha\beta$, но предполагалось $\alpha = 1$), с помощью формулы (7) получаем искомую концентрацию межузельных гантелей в точке плавления расплава $c_i = \ln(14.9/1.8)/27 \approx 0.078$.

Второй способ оценки концентрации дефектов в расплаве состоял в воспроизведении расчета Гранато, который был исходно выполнен для меди [17]. Гранато записал трансцендентное уравнение, дающее изменение энергии Гиббса $\Delta\mathcal{G}$ в зависимости от концентрации межузельных гантелей и температуры. Полученное уравнение (не приводится здесь ввиду громоздкости) содержит в качестве параметров безразмерные величины α_1 и α_2, характеризующие доли сдвиговой и дилатационной энергии в упругой энергии межузельного дефекта, сдвиговую восприимчивость β, модуль сдвига при нулевой температуре $C_{44}(0)$, параметр Грюнайзена γ, а также характерные частоты ω_R, ω_L и ω_E спектра колебательной плотности состояний межузельной гантели (см. выше). Для алюминия значение α_1 было рассчитано при нулевой температуре как $\alpha_1 = H_i^f/(\Omega C_{44}(0) = 0.78$, где $H_i^f = 2.58$ эВ – энтальпия формирования дефекта и $C_{44}(0) = 31.7$ ГПа [39]. Величина $\alpha_2 = 0.03$ была взята такой же, как и для меди, параметр Грюнайзена $\gamma = 2.47$, объем на атом алюминия $\Omega = 1.66 \cdot 10^{-29}$ м^3. Значения частот ω_R, ω_L и ω_E приведены выше.

Результаты расчета $\Delta\mathcal{G}$ в относительных единицах по уравнению $f\,[\Delta\mathcal{G}, c_i, \alpha_1, \alpha_2, \omega_R, \omega_L, \omega_E, \beta, C_{44}(0), \gamma] = 0$ в зависимости от концентрации дефектов при различных температурах показаны на рис. 5. При относительно

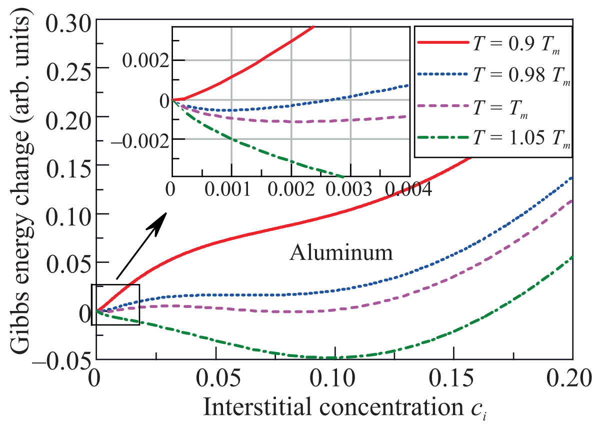

Рис. 5. (Цветной онлайн) Изменение энергии Гиббса $\Delta\mathcal{G}$ алюминия в зависимости от температуры и концентрации межузельных гантелей. На вставке показана та же зависимость вблизи начала координат в увеличенном масштабе

низкой температуре $T = 0.9T_m$ имеется только один минимум энергии Гиббса, соответствующий равновесной концентрации межузельных гантелей в кристалле. Чуть ниже температуры плавления ($T = 0.98T_m$) появляются два минимума $\Delta\mathcal{G}$, первый отвечает равновесной концентрации дефектов в кристалле ($c_i \approx 9 \cdot 10^{-4}$), а второй (менее глубокий) при концентрации $c_i = 0.066$ соответствует метастабильному равновесию переохлажденного расплава. При температуре плавления ($T = T_m$) сосуществуют два минимума одинаковой глубины, что можно интерпретировать как термодинамическое равновесие кристалла с концентрацией дефектов $c_i = 0.003$ и расплава с концентрацией дефектов $c_i = 0.081$. Выше температуры плавления ($T = 1.05T_m$) имеется только один минимум энергии Гиббса, отвечающий равновесному расплаву с концентрацией дефектов $c_i = 0.098$. Итак, этот расчет дает концентрацию дефектов в точке плавления $c_i \approx 0.08$, что вполне согласуется с расчетом Гранато для меди, который дал $c_i \approx 0.09$ [17].

Наконец, третий реализованный нами способ оценки концентрации дефектов в расплаве состоял в следующем. Как отмечалось выше, с термодинамической точки зрения расплав, в рамках МТ, можно рассматривать как кристалл с большой концентрацией дефектов. Можно предположить поэтому, что основной рост объема при плавлении обусловлен генерацией межузельных гантелей. Как известно [7], относительное изменение объема при плавлении алюминия $\Delta V/V_s \approx 0.06$, где V_s – объем твердой фазы. С другой стороны, то же самое изменение объема можно рассчитать по формуле $\Delta V/V_s = (r_i - 1)c_i$, где r_i – так называемый релаксационный объем, характеризующий относительное изменение объема при формировании межузельной гантели и равный 1.76 для алюминия [40]. С учетом изложенного получаем концентрацию дефектов в расплаве $c_i = 0.06/0.76 \approx 0.079$, что хорошо согласуется с вышеприведенными оценками.

Таким образом, три независимые оценки дают практически одинаковую концентрацию межузельных гантелей в кристалле $c_i \approx 0.08$. Теперь можно оценить полный вклад этих дефектов в энтропию плавления как сумму колебательной ΔS_v^i и конфигурационной S_c^i составляющих:

$$\Delta S_m^i = \Delta S_v^i + S_c^i, \tag{8}$$

где колебательная компонента ΔS_v^i определяется соотношением (5), а конфигурационная составляющая S_c^i может быть оценена как $S_c^i/k_B = c_i(1+\ln\frac{3}{c_i})$ (множитель 3 соответствует трем возможным ориентациям межузельной гантели в ГЦК решетке)[18]. Тогда подстановка в (8) значений $c_i = 0.08$ и $S_v^i/k_B = 8$ (см. выше) дает полное изменение энтропии в расчете на атом, связанное с генерацией межузельных гантелей при плавлении алюминия, равное $\Delta S_m^i \approx 1.0k_B$. Примерно две третьих этой величины составляет колебательная и одну треть – конфигурационная составляющая энтропии системы межузельных дефектов.

С другой стороны, как видно из рис. 2, эксперимент показывает рост полной энтропии на атом при плавлении на $\Delta S_m^{\mathrm{exp}}/k_B = 8.57 - 7.19 = 1.38$. Можно заключить, таким образом, что около 70 % наблюдаемой в эксперименте энтропии плавления (и, соответственно, такая же часть теплоты плавления $Q_m = T_m \Delta S_m^{\mathrm{exp}}$) может быть интерпретирована как результат генерации межузельных атомов в гантельной конфигурации при температуре плавления.

Проведенный расчет является, конечно, приближенным, но вполне очевидно показывает важнейшую роль межузельных дефектов в процессе плавления, в соответствии с Межузельной теорией. Можно ожидать, что этот вывод будет справедлив для простых металлов в целом.

Заключение. Методом молекулярной динамики показано, что колебательная энтропия формирования межузельных гантелей в алюминии увеличивается с температурой от $S_i^f/k_B \approx 3.5$ при $T/T_m = 0.65$ (T_m – температура плавления) до примерно $S_i^f/k_B \approx 7$ непосредственно вблизи T_m. Тремя независимыми способами оценена концентрация этих дефектов в расплаве при $T = T_m$, которая составила $c_i \approx 0.08$. Это позволило рассчитать колебательную и конфигурационную составляющие энтропии формирования дефектов межузельного типа. Показано, что эта энтропия составляет около 70 % от полной энтропии плавления алюминия, наблюдаемой в эксперименте. Сделан вывод о том, что генерация межузельных дефектов играет важнейшую роль в процессе плавления.

Работа поддержана грантом Российского научного фонда # 20-62-46003.

---

1. F. A. Lindemann, Phys. Z. **11**, 609 (1910).
2. Q. S. Mei and K. Lu, Prog. Mater. Sci. **52**, 1175 (2007).
3. M. de Podesta, *Understanding the Properties of Matter*, Taylor and Francis, London, N.Y. (2001).
4. A. V. Granato, J. Non-Cryst. Sol. **352**, 4821 (2006).
5. D. O. Nason and W. A. Tiller, Acta Metall. **21**, 747 (1973).
6. N. F. Mott, Proc. Roy. Soc. A **146**, 465 (1934).
7. M. Lasocka, Phys. Lett. A **51**, 137 (1975).
8. J. Frenkel, Z. Phys. **35**, 652 (1926).
9. J. C. Slater, *Introduction to Chemical Physics*, McGraw-Hill Book Company, N.Y., NY, USA; Toronto, ON, Canada; London, UK (1963).
10. A. Kanigel, J. Adler, and E. Polturak, Int. J. Mod. Phys. C **12**, 727 (2001).
11. F. H. Stillinger and T. A. Weber, J. Chem. Phys. **81**, 5095 (1984).
12. G. C. S. Lee and J. C. M. Li, Phys. Rev. B **39**, 9302 (1989).
13. V. Sorkin, E. Polturak, and J. Adler, Phys. Rev. B **68**, 174102 (2003).
14. Y. Zhou and X. Jin, Phys. Rev. B **71**, 224113 (2005).
15. H. Zhang, M. Khalkhali, Q. Liu, and J. F. Douglas, J. Chem. Phys. **138**, 12A538 (2013).
16. A. Samanta, M. E. Tuckerman, T.-Q. Yu, and E. Weinan, Science **346**, 729 (2014).
17. A. V. Granato, Phys. Rev. Lett. **68**, 974 (1992).
18. A. V. Granato, Eur. Phys. J. B **87**, 18 (2014).
19. E. V. Safonova, Yu. P. Mitrofanov, R. A. Konchakov, A. Yu. Vinogradov, N. P. Kobelev, and V. A. Khonik, J. Phys.: Condens. Matter **28**, 215401 (2016).
20. A. V. Granato, D. M. Joncich, and V. A. Khonik, Appl. Phys. Lett. **97**, 171911 (2010).

21. Е. В. Сафонова, Р. А. Кончаков, Ю. П. Митрофанов, Н. П. Кобелев, А. Ю. Виноградов, В. А. Хоник, Письма в ЖЭТФ **103**, 861 (2016).
22. V. Khonik and N. Kobelev, Metals **9**, 605 (2019).
23. J. Plimpton, J. Comput. Phys. **117**, 1 (1995).
24. H. W. Sheng, M. Kramer, A. Cadien, T. Fujita, and M. Chen, Phys. Rev. B **83**, 134118 (2011).
25. I. Kruglov, O. Sergeev, A. Yanilkin, and A. R. Oganov, Sci. Rep. **7**, 8512 (2017).
26. M. W. Chase, *NIST-JANAF thermochemical tables*, Part I: Al-Co, American Chemical Society and the American Institute of Physics for the National Institute of Standards and Technology, N.Y. (1998); https://janaf.nist.gov/tables/Al-001.html.
27. Н. П. Кобелев, В. А. Хоник, ЖЭТФ **153**, 409 (2018).
28. P. H. Dederichs, C. Lehman, H. R. Schober, A. Scholz, and R. Zeller, J. Nucl. Mater. **69–70**, 176 (1978).
29. S. R. de Debiaggi, M. de Koning, and A. M. Monti. Phys. Rev. B **73**, 104103 (2006).
30. Y. Mishin, Philos. Mag. A **81**, 2591 (2001).
31. K. Nordlund and R. S. Averback, Phys. Rev. Lett. **80**, 4201 (1998).
32. H. Numakura, *Defects in Metals*, in: *Physical Metallurgy*, fifth edition, ed. by D. E. Laughlin and K. Hono, Elsevier (2014), p. 561.
33. G. Neumann, V. Tölle, and C. Tuijn, Physica B **271**, 21 (1999).
34. K. Nordlund, Y. Ashkenazy, R. S. Averback, and A. V. Granato, Europhys. Lett. **71**, 625 (2005).
35. N. P. Kobelev and V. A. Khonik, J. Non-Cryst. Sol. **427**, 184 (2015).
36. G. V. Afonin, Yu. P. Mitrofanov, A. S. Makarov, N. P. Kobelev, W. H. Wang, and V. A. Khonik, Acta Mater. **115**, 204 (2016).
37. G. V. Afonin, Yu. P. Mitrofanov, N. P. Kobelev, M. W. da Silva Pinto, G. Wilde, and V. A. Khonik, Scr. Mater. **166**, 6 (2019).
38. M. Forsblom and G. Grimvall, Nat. Mater **4**, 388 (2005).
39. Р. А. Кончаков, А. С. Макаров, Г. В. Афонин, М. А. Кретова, Н. П. Кобелев, В. А. Хоник, Письма в ЖЭТФ **109**, 473 (2019).
40. R. A. Konchakov, A. S. Makarov, N. P. Kobelev, A. M. Glezer, G. Wilde, and V. A. Khonik, J. Phys.: Condens. Matter **31**, 385703 (2019).