# ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие . . . 7
Введение . . . 8

Глава 1. **Аналитическая модель простого вещества, учитывающая вакансии в решетке и самодиффузию атомов** . . . 11
1.1. Трехфазная модель простого вещества: делокализация и локализация частиц . . . 12
1.2. Гамильтониан и интеграл по фазовому пространству модели . . . 14
1.3. Факторизация интеграла по фазовому пространству . . . 18
1.4. Свободная энергия трехфазной модели простого вещества . . . 23
1.5. Условия, которым должен удовлетворять формализм модели простого вещества . . . 24
1.6. Энтропия трехфазной модели простого вещества . . . 25
1.7. Условия для энергии образования вакансий и энергии делокализации . . . 26
1.8. Проверка трехфазной модели простого вещества . . . 30
1.9. Выводы . . . 32

Глава 2. **Метод расчета температуры Дебая и параметра Грюнайзена в кристаллах** . . . 33
2.1. Об учете температурной зависимости характеристической температуры . . . 33
2.2. О соблюдении третьего начала термодинамики . . . 35
2.3. О соблюдении закона Дюлонга–Пти . . . 36
2.4. Метод вычисления характеристической температуры, предложенный автором . . . 37
2.5. Расчет температуры Дебая и параметра Грюнайзена при $T = 0\,\mathrm{K}$ . . . 42
2.6. Расчеты температуры Дебая и параметра Грюнайзена для пятидесяти двух простых веществ . . . 44
2.7. О вычислении температуры Дебая и параметра Грюнайзена для бинарных кристаллов . . . 53
2.8. Об ангармонизме колебаний атомов в кристалле . . . 54
2.9. О температуре Дебая и параметре Грюнайзена при различных давлениях . . . 55



2.10. О влиянии вакансий на величины температуры Дебая и параметра Грюнайзена . . . 57
2.11. Выводы . . . 59

Глава 3. **Метод самосогласованного определения параметров межатомного потенциала Ми–Леннарда-Джонса** . . . 60
3.1. Расчет координаты минимума потенциала . . . 61
3.2. Расчет глубины минимума потенциала . . . 65
3.3. Обзор методов определения степеней потенциала . . . 66
3.4. Метод расчета параметров потенциала, предложенный автором . . . 68
3.5. Расчет параметров межатомного потенциала для ван-дер-ваальсовых кристаллов . . . 68
3.6. Расчет параметров межатомного потенциала для металлов . . . 71
3.7. Интервалы допустимых значений параметров потенциала . . . 81
3.8. Расчет параметров межатомного потенциала для подгруппы углерода . . . 82
3.9. Тестирование потенциальных параметров подгруппы углерода . . . 93
3.10. Прогноз параметров межатомного потенциала для радона . . . 95
3.11. Прогноз потенциальных параметров для соединений элементов подгруппы углерода . . . 97
3.12. Расчет параметров межионного потенциала для бинарных ионных кристаллов . . . 100
3.13. Расчеты и прогнозы межмолекулярного потенциала для фуллеритов 101
3.14. Апробация потенциальных параметров фуллеритов . . . 107
3.15. Использование потенциальных параметров при прогнозе свойств методом скейлинга . . . 112
3.16. Изменение параметров потенциала при вариации изотопного состава кристалла . . . 117
3.17. Прогноз параметров потенциала для $T_2$, HD, HT и DT . . . 122
3.18. Об изменении фазовой диаграммы вещества при вариации изотопного состава . . . 124
3.19. О корреляции параметров межатомного взаимодействия с положением элемента в Периодической системе . . . 127
3.20. Корректировка параметров потенциала для лантаноидов . . . 129
3.21. Оценка параметров потенциала для актиноидов . . . 136
3.22. Выводы . . . 144

Глава 4. **Метод расчета параметров образования вакансий в структуре простого вещества** . . . 146
4.1. Метод расчета вакансионных параметров . . . 146
4.2. Определение среднеквадратичного смещения для атома в Л- или Д-состоянии . . . 149
4.3. Термодинамические параметры образования вакансий . . . 152
4.4. Оценочные расчеты энергии создания вакансии . . . 154

4.5. О проблемах расчета вакансионных параметров для кристаллов гелия . . . 167
4.6. Расчет вакансионных параметров для квантовых криокристаллов . . 173
4.7. О корреляции вакансионных параметров с температурой плавления и массой атома . . . 188
4.8. О корреляции вакансионных параметров криокристаллов друг с другом . . . 194
4.9. Зависимость вакансионных параметров аргона от температуры . . . 195
4.10. О параметрах «нулевых вакансий» при $T = 0\,\mathrm{K}$ . . . 201
4.11. О некоторых эффектах, вызванных наличием «нулевых вакансий» при низких температурах . . . 206
4.12. Об изменении концентрации вакансий при плавлении аргона . . . 208
4.13. Расчет вакансионных параметров для металлов и полупроводников 216
4.14. Об эмпирических соотношениях для вакансионных параметров металлов . . . 254
4.15. Изменение вакансионных параметров при плавлении металлов и полупроводников . . . 261
4.16. Зависимость параметров образования вакансий от изотопного состава кристалла . . . 263
4.17. Выводы . . . 265

Глава 5. **Метод расчета параметров самодиффузии в структуре простого вещества** . . . 267
5.1. Метод расчета коэффициента самодиффузии в кристалле . . . 267
5.2. Термодинамические параметры самодиффузии . . . 272
5.3. О «компенсационных эффектах» для самодиффузии . . . 275
5.4. Об эмпирических соотношениях для параметров самодиффузии . . 281
5.5. Особенности процесса самодиффузии при низких температурах . . . 286
5.6. Об эффекте «вневакансионной самодиффузии» . . . 289
5.7. Изменение параметров самодиффузии при плавлении металлов и полупроводников . . . 293
5.8. Оценка доли делокализованных атомов при плавлении гелия . . . 298
5.9. Зависимость параметров самодиффузии аргона от температуры . . . 301
5.10. Расчеты параметров самодиффузии для криокристаллов . . . 310
5.11. Расчеты параметров самодиффузии для металлов и полупроводников . . . 321
5.12. О величине самодиффузии в кристалле из Д-атомов . . . 374
5.13. Зависимость параметров самодиффузии от изотопного состава кристалла . . . 377
5.14. О пределах выполнимости закона Аррениуса для самодиффузии изотопов . . . 383
5.15. Выводы . . . 390



Глава 6. **Зависимость свойств нанокристалла от размера и формы его поверхности** . . . 393
6.1. Модель нанокристалла с варьируемой формой поверхности . . . 394
6.2. Зависимость среднего координационного числа от размера, формы поверхности и микроструктуры нанокристалла . . . 396
6.3. О биморфизме и соотношении неопределенности для размера нанокристалла . . . 401
6.4. Вычисление поверхностной энергии нанокристалла . . . 409
6.5. Влияние температуры, размера и формы на величину поверхностной энергии . . . 419
6.6. О поверхностной энергии криокристаллов при $T = 0\,\mathrm{K}$ . . . 426
6.7. Зависимость температуры перехода в сверхпроводящее состояние от размера, формы и микроструктуры металлических нанокристаллов . . . 432
6.8. Об условиях фрагментации и дендритизации нанокристалла . . . 439
6.9. О поверхностном давлении (давлении Лапласа) в нанокристалле . . 448
6.10. О зависимости поверхностного давления от размера и температуры 452
6.11. О влиянии поверхностного давления на параметры плавления нанокристалла . . . 461
6.12. Зависимость активационных параметров от размера и формы нанокристалла . . . 469
6.13. О локализационном критерии фазового перехода «кристалл–жидкость» . . . 476
6.14. Выводы . . . 486
Заключение и основные выводы . . . 489
Список основных обозначений . . . 494
Список цитированных работ других авторов . . . 504
Список цитируемых работ автора . . . 533