

Received: 28.10.2023

Revised: 04.12.2023



Accepted: 29.12.2023

DOI: 10.17804/2410-9908.2023.6.035-044

THE BAIN AND ORTHORHOMBIC PATHS OF THE BCC–FCC TRANSFORMATION IN A BCC METAL

A. R. Kuznetsov^{a),*} and S. A. Starikov^{b)}

*M. N. Mikheev Institute of Metal Physics, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences,
18 S. Kovalevskoy St., Ekaterinburg, 620990, Russia*

^{a)}  <https://orcid.org/0000-0002-4490-0727>  a_kuznetsov@imp.uran.ru;

^{b)}  1.618034sergey@gmail.com

*Corresponding author. E-mail: a_kuznetsov@imp.uran.ru

Address for correspondence: ul. S. Kovalevskoy, 18, Ekaterinburg, 620990, Russia

Tel.: +7 (343) 374-4214; Fax: +7 (343) 374-5244

The energy of the Bain and orthorhombic paths in niobium and the instability of phonons during uniaxial deformation along $\langle 001 \rangle$ are studied with the application of the ab initio method. The orthorhombic transformation path is refined with regard to its symmetry. The calculation of the phonon spectrum in the entire irreducible Brillouin zone depending on deformation makes it possible to find the softest branches of the phonon spectrum responsible for the loss of stability of the structure. The nature of the loss of stability is revealed, and the strain at which stability is lost both in tension and compression is evaluated. Possible mechanisms determining the stability of the structure and theoretical strength of niobium are discussed. The results obtained can relate to experimental situations when small defect-free regions are deformed, for example, in nanostructured materials, when surface layers are modified by modern methods of plastic deformation, and during nanoindentation.

Keywords: first-principles calculation, Bain and orthorhombic paths, phonon spectrum, structure stability

Acknowledgment

The work was performed under the state assignment from the Ministry of Science and Higher Education of Russia, theme Structure, No. 122021000033-2. The Uran supercomputer, IMM UB RAS, was used for the calculations.

References

1. Bain, E.C. The Nature of Martensite. *Trans. AIME*, 1924, 70, 25–35.
2. Okatov, S.V., Kuznetsov, A.R., Gornostyrev, Yu.N., Urtsev, V.N., and Katsnelson, M.I. Effect of magnetic state on the α - γ transition in iron: first-principles calculations of the Bain transformation path. *Physical Review B*, 2009, 79 (9), 094111–094115. DOI: 10.1103/RevModPhys.84.945.
3. Grimvall, G., Magyari-Köpe, B., Ozoliņš, V., and Persson, K.A. Lattice instabilities in metallic. *Review of Modern Physics*, 2012, 84 (3), 945–986. DOI: 10.1103/PhysRevB.79.094111.
4. Kuznetsov, A.R., Starikov, S.A., and Sagaradze, V.V. Phonon instabilities in a metal on the Bain fcc-bcc transformation path. *Diagnostics, Resource and Mechanics of materials and structures*, 2022, 6, 86–94. DOI: 10.17804/2410-9908.2022.6.086-094. Available at: http://dream-journal.org/issues/2022-6/2022-6_385.html

5. Clatterbuck, D.M., Krenn, C.R., Cohen, M.L., Morris Jr., J.W. Phonon instabilities and the ideal strength of aluminum. *Physical Review Letters*, 2003, 91 (13), 135501–135504. DOI: 10.1103/PhysRevLett.91.135501.
6. Pokluda J., Cern M., Sandera P., and Sob, M. Calculations of theoretical strength: state of the art and history. *Journal of Computer-Aided Materials Design*, 2004, 11, 1–28. DOI: 10.1007/s10820-004-4567-2.
7. Pokluda, J., Černý, M., Šob, M., Umeno, Y. Ab initio calculations of mechanical properties: methods and applications. *Progress in Materials Science*, 2015, 73, 127–158. DOI: 10.1016/j.pmatsci.2015.04001.
8. Li, J., Yip, S. Atomistic measures of materials strength. *CMES-Computer Modeling in Engineering and Sciences*, 2002, 3, 219. DOI: 10.3970/cmcs.2002.003.219.
9. Luo, W., Roundy, D., Cohen, M.L., and Morris Jr., J.W. Ideal strength of bcc molybdenum and niobium. *Physical Review B*, 2002, 66 (9), 094110W. DOI: 10.1103/PhysRevB.66.094110.
10. Černý, M. and Pokluda, J. Influence of superimposed biaxial stress on the tensile strength of perfect crystals from first principles. *Physical Review B*, 2007, 76 (2), 024115. DOI: 10.1103/PhysRevB.76.024115.
11. Nagasako, N., Jahnátek, M., Asahi, R., and Hafner, J. Anomalies in the response of V, Nb, and Ta to tensile and shear loading: ab initio density functional theory calculations. *Physical Review B*, 2010, 81 (9), 094108. DOI: 10.1103/PhysRevB.81.094108.
12. Wang, Yi.X., Geng, H.Y., Wu, Q., Chen, X.R., and Sun, Y. First-principles investigation of elastic anomalies in niobium at high pressure and temperature. *Journal of Applied Physics*, 2017, 122 (23), 235903. DOI: 10.1063/1.5006396.
13. Landa, A., Söderlind, P., Naumov, I.I., Klepeis, J.E., and Vitos, L. Kohn Anomaly and phase stability in group VB transition metals. *Computation*, 2018, 6, 29. DOI: 10.3390/computation6020029.
14. Gouldstone, A., Koh, H.-J., Zeng, K.Y., Giannakopoulos, A.E., and Suresh, S. Discrete and continuous deformation during nanoindentation of thin films. *Acta Materialia*, 2000, 48 (9), 2277–2295. DOI: 10.1016/S1359-6454(00)00009-4.
15. De la Fuente, O.R., Zimmerman, J.A., Gonzales, M.A., De la Figuera, J., Hamilton, J.C., Pai, W.W., and Rojo, J.M. Dislocation emission around nanoindentations on a (001) fcc metal surface studied by scanning tunneling microscopy and atomic simulation. *Physical Review Letters*, 2002, 88 (3), 036101–036104. DOI: 10.1103/PhysRevLett.88.036101.
16. Chang, L.L. and Plog, K., eds. *Molecular Beam Epitaxy and Heterostructures*, Martinus Nijhoff Publishers, Dordrecht 1985, 1985, 700 p. DOI: 10.1007/978-94-009-5073-3.
17. Kimminau, G., Erhart, P., Bringa, E.M., Remington, B., and Wark, J.S. Phonon instabilities in uniaxially compressed fcc metals as seen in molecular dynamics simulations. *Physical Review B*, 2010, 81, 092102. DOI: 10.1103/PhysRevB.81.092102.
18. Available at: arXiv:cond-mat/0504077 [cond-mat.supr-con]
19. Hellwege, K.-H. and Madelung, O., eds. *Phonon States of Elements. Electron States and Fermi Surfaces of Alloys*, Landolt-Börnstein, New Series, Group III, 13, Pt. a., Berlin, SpringerVerlag, 1981.
20. Koči, L., Ma, Y., Oganov, A. R., Souvatzis, P., and Ahuja, R. Elasticity of the superconducting metals V, Nb, Ta, Mo, and W at high pressure. *Physical Review B*, 2008, 77 (21), 214101. DOI: 10.1103/PhysRevB.77.214101.
21. Söderlind, P., Eriksson, O., Wills, J.M, and Boring, A.M. Theory of elastic constants of cubic transition metals and alloys. *Physical Review B*, 1993, vol. 48, 5844.
22. Landolt-Börnstein: *Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology*, New Series, ed. by O. Madelung, Group III: Crystal and Solid State Physics, vol. 14: Structure Data of Elements and Intermetallic Phases, Springer Verlag, Berlin, 1988.

23. Katahara, K.W., Manghnani, M.H., and Fisher, E. Elastic moduli of paramagnetic chromium and Ti–V–Cr alloys. *Journal of Physics F: Metal Physics*, 1979, 9, 773. DOI: 10.1088/0305-4608/9/11/008.
24. James, A.M. and Lord, M.P. *Macmillan's Chemical and Physical Data*, Macmillan, London, UK, 1992.

Подана в журнал: 28.10.2023



УДК 538.913:534-16


DOI: 10.17804/2410-9908.2023.6.035-044

БЕЙНОВСКИЙ И ОРТОРОМБИЧЕСКИЙ ПУТИ ОЦК-ГЦК ПРЕВРАЩЕНИЯ В ОЦК-МЕТАЛЛЕ

А. Р. Кузнецов^{a)}, * , С. А. Стариков^{b)}

*Институт физики металлов имени М. Н. Михеева УрО РАН,
ул. С. Ковалевской, 18, Екатеринбург, 620990, Россия*

a)  <https://orcid.org/0000-0002-4490-0727>  a_kuznetsov@imp.uran.ru;

b)  1.618034sergey@gmail.com

*Ответственный автор. Электронная почта: a_kuznetsov@imp.uran.ru
Адрес для переписки: ул. С. Ковалевской, 18, 620990, Екатеринбург, Россия
Телефон: +7 (343) 374-42-14; факс: +7 (343) 374-52-44

В работе *ab initio* методом изучена энергетика бейновского и орторомбического путей в ниобии и нестабильности фононов в ходе одноосной деформации вдоль $\langle 001 \rangle$. Уточнен орторомбический путь превращения с учетом его симметрии. Расчет фононного спектра во всей неприводимой зоне Бриллюэна в зависимости от деформации позволил найти наиболее мягкие ветви фононного спектра, ответственные за потерю устойчивости структуры. Выявлен характер потери устойчивости, а также оценена величина деформации, при которой теряется устойчивость как при растяжении, так и при сжатии. Обсуждаются возможные механизмы, определяющие устойчивость структуры и теоретическую прочность ниобия. Полученные результаты могут относиться к ситуациям в эксперименте, когда деформируются малые свободные от дефектов области, например, в наноструктурированных материалах, при модифицировании поверхностных слоев современными методами пластического деформирования, при наноиндентировании.

Ключевые слова: первопринципный расчет, бейновский и орторомбический пути, фононный спектр, стабильность структуры

1. Введение

Бейновский путь (БП) превращения «объемноцентрированный кубический – граничноцентрированный кубический кристалл» (ОЦК-ГЦК) в ОЦК-металле (тетрагональная деформация вдоль оси $\langle 001 \rangle$) позволяет найти энергетiku превращения, а также определить стабильность кристаллической структуры [1–4]. Идеальная (теоретическая) прочность (ТП) материала характеризуется напряжением, при котором совершенный кристалл становится механически нестабильным [5–7], и определяет верхнюю границу напряжения, которое материал может выдержать не разрушаясь. Стабильность структуры требует, чтобы энергии фононов были положительны для всех волновых векторов в зоне Бриллюэна [8]. Амплитуда понижающей энергию кристалла фонона будет расти до тех пор, пока структура не перейдет в новое стабильное состояние. Для такого важного в научном и прикладном аспектах ОЦК-металла, как ниобий, превращения структуры при деформации и идеальная прочность которого *ab initio* методами изучались в ряде работ [7, 9–13], ситуация усложняется тем, что при строго одноосной нагрузке вдоль оси $\langle 001 \rangle$ происходит бифуркация на траекторию орторомбического пути (ОРП) [9, 11].

ТП относится к ситуациям в эксперименте, когда деформируются малые свободные от дефектов области, например, в наноструктурированных материалах, при модифицировании поверхностных слоев современными методами пластического деформирования, при наноин-

дентирования. Так, ТП играет решающую роль в фундаментальной теории разрушения. Она контролирует как начало разрушения, так и зарождение дислокаций в свободных от дефектов тонких пленках, а также в наноструктурированных материалах. Это подтверждено, в частности, в экспериментах и расчетах наноиндентирования [7, 14, 15], в которых показано, что начало текучести на наноуровне контролируется гомогенным зарождением дислокаций в малом свободном от дислокаций объеме под наноиндентором, где напряжения достигают ТП. Возможна также псевдоморфная эпитаксия фазы с большой тетрагональной деформацией на субстратах, сохраняющих тетрагональную структуру [3, 16].

Расчеты на основе теории функционала плотности, используемые в настоящей работе, не содержат подгоночных параметров, действительны при всех деформациях и в принципе позволяют количественно определить устойчивость структуры при деформации и идеальную прочность. *Ab initio* расчеты электронной структуры позволяют изучать фазы с любой кристаллической структурой, что существенно расширяет возможности исследования. Проблема неустойчивости фононов при деформации рассмотрена в ряде обзоров [3, 6, 7]. В [4, 5] показано, что неустойчивости фононов возникают в *ab initio* расчетах алюминия при одноосном растяжении и сдвиге; также показано, что для данного простого металла и данного типа деформации ТП ограничена неустойчивостью коротковолновых фононов. Для этого необходимо было провести уточненные расчеты фононного спектра в зависимости от деформации во всей неприводимой зоне Бриллюэна. В [17] приведены результаты для меди, полученные методом классической молекулярной динамики. Авторы этой работы показали, что генерация дефектов при низкой температуре и одноосном сжатии может быть описана в терминах мягких неустойчивых фононных мод. Подчеркивается важность расчета фононного спектра во всей неприводимой зоне Бриллюэна (без интерполяции) для правильной оценки устойчивости структуры при деформации.

2. Постановка задачи и методы решения

В данной статье *ab initio* методом изучена энергетика БП и ОРП при одноосной деформации вдоль оси $\langle 001 \rangle$ (с релаксацией объема) ОЦК-металла (ниобия). Также рассчитаны фононные спектры во всей неприводимой зоне Бриллюэна при различной величине данной деформации для анализа устойчивости структуры.

Первопринципные расчеты упругих постоянных и фононных спектров ниобия проведены с использованием пакета программ для расчета электронной структуры псевдопотенциальным методом плоских волн и моделирования материалов Quantum ESPRESSO (<https://www.quantum-espresso.org>). Использован опробованный в работе [18] ультрамягкий псевдопотенциал из данного пакета (Nb.lda.v1.uspp.F.UPF). Фононные частоты рассчитаны с использованием теории возмущений функционала плотности. Фононные частоты как функция деформации рассчитаны (без интерполяции) с использованием $16 \times 16 \times 16$ Monkhorst-Pack сетки q -точек для получения частот с высокой точностью (следуя работам [4, 5]).

3. Результаты и их обсуждение

В таблице приведены результаты реперных расчетов, использованных для проверки качества псевдопотенциала. Видно, что псевдопотенциал удовлетворительно описывает эксперимент с точностью, характерной для расчетов в рамках теории функционала плотности. Более детальный анализ особенностей расчета упругих модулей ниобия с использованием данного потенциала приведен в работе [18]. Низкие значения модуля c_{44} в теоретических расчетах обсуждаются в работе [11]. Фононные спектры ОЦК-Nb при нормальном давлении также приведены в [18] и удовлетворительно описывают эксперимент [19]. Нами получены аналогичные фононные спектры ОЦК-Nb.

Таблица

Результаты реперных расчетов параметра решетки a_0 и модулей упругости c' , c_{44} , B

	Данная работа	Предыдущие расчеты	Эксперимент
a_0 , Å	3,24	3,25 [18] 3,4 [11]	3,30 [22]
c' , ГПа	63	55 [11] 55 [20] 60 [21]	57 [23]
c_{44} , ГПа	17	17 [11] 10 [20] 27 [21]	29 [23]
B , ГПа	192	192 [18]	170 [24]

Реакция ниобия на одноосную нагрузку растяжения вдоль оси $\langle 001 \rangle$ подробно рассмотрена в работе [11], где также приведена схема образующихся структур вдоль БП и ОРП. Симметрия кристалла и особенности ОЦК-переходных металлов приводят к тому, что вдоль бейновского (тетрагонального) пути наблюдаются три свободных от напряжения состояния в следующей последовательности: ОЦК, ГЦК, ОЦТ (объемноцентрированный тетрагональный кристалл). При этом при строго одноосной нагрузке возможна бифуркация на орторомбический путь. В этом случае указанная выше последовательность такова: ОЦК, ОЦТ, ОЦК.

На рис. 1 приведена схема БП при одноосной нагрузке вдоль $\langle 001 \rangle$. Структуры вдоль БП описываются в системе отсчета ОЦТ-решетки. Видно, что последовательность состояний при растяжении меняется от ОЦК ($c/a = 1$) через ГЦК ($c/a = \sqrt{2}$) до ОЦТ ($c/a = 1,8$), где a , c – параметры тетрагональной решетки. На отрезках бейновского пути на пике слева и справа от ГЦК-состояния ($c/a = \sqrt{2}$) структуры внутренне нестабильны по отношению к тетрагональной деформации и определяют деформированные состояния, которые могут быть получены путем псевдоморфной эпитаксии фазы на субстратах, сохраняющих тетрагональную структуру. Полученные результаты удовлетворительно совпадают с результатами ab initio расчетов в работе [11].

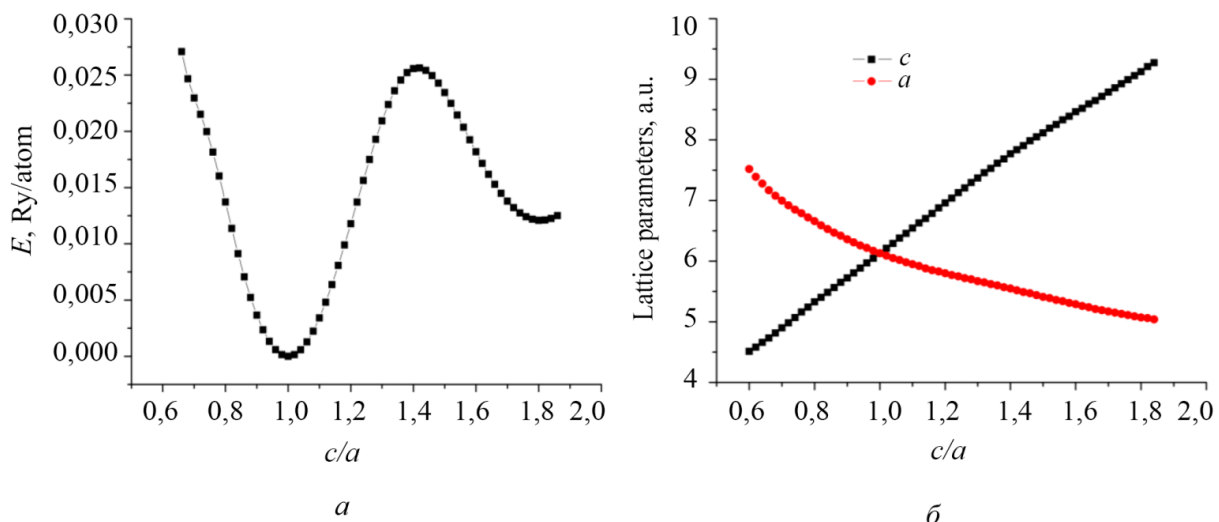


Рис. 1. Изменение полной энергии, приходящейся на атом, и параметров решетки a , c в зависимости от величины бейновской (тетрагональной) деформации c/a .

Структуры вдоль БП описываются в системе отсчета ОЦТ-решетки

На рис. 2 показаны зависимости полной энергии для БП и ОРП и параметров решетки для ОРП в системе отсчета ГЦТ-решетки от величины c/a , характеризующей деформацию (в скобках указаны названия структур в системе отсчета ОЦТ-решетки, подробнее см. рис. 2 в [11]). На рис. 2 а видно, что ОРП является энергетически более выгодным, особенно при заметном отклонении от величины $c/a = \sqrt{2} = 1,414$, соответствующей ОЦК-фазе.

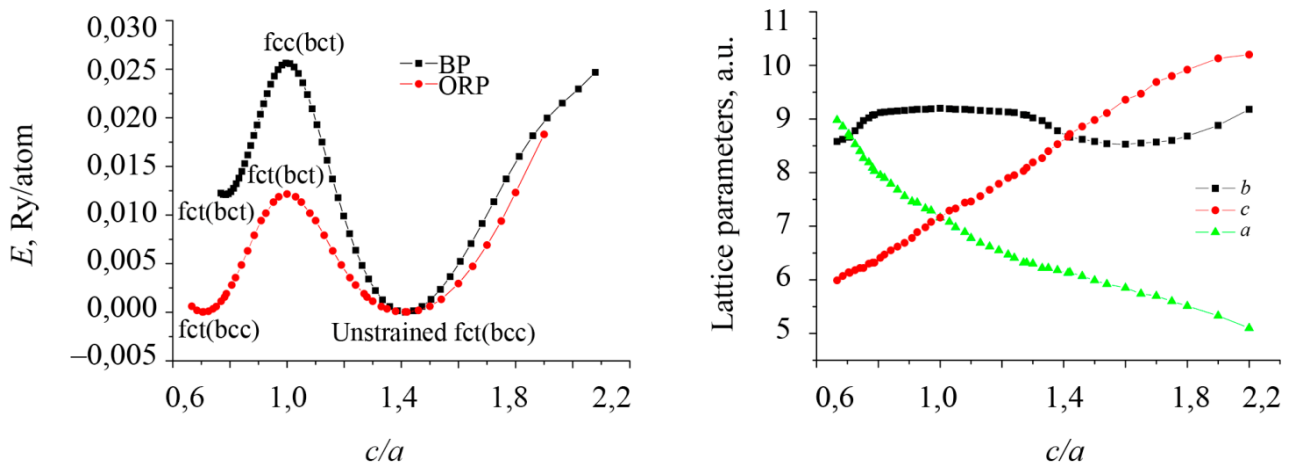


Рис. 2. Бейновский (тетрагональный) и орторомбический пути. Структуры вдоль обоих путей описываются в системе отсчета ГЦТ-решетки, и их названия указаны на графиках зависимости полной энергии (в скобках указаны названия структур в системе отсчета ОЦТ-решетки): зависимость полной энергии (а); зависимость параметров решетки (б)

Ранее было показано [9], что ОЦК-фаза, соответствующая $c/a = 1/\sqrt{2} = 0,707$ на ОРП и возникающая при данной одноосной деформации (растяжение вдоль оси a_{ORP}), эквивалентна ОЦК-фазе при $c/a = \sqrt{2}$, но при этом ось a , вдоль которой происходит растяжение кристаллита, становится равной оси c в исходном состоянии Unstrained fct(bcc), а ось c , которая сокращается, становится равной оси a в исходном состоянии Unstrained fct(bcc). Таким образом, получается, что отрезки графиков (для ОРП) при $c/a = 1 \dots \sqrt{2}$ и $1 \dots 1/\sqrt{2}$ на рис. 2 обладали бы строгой зеркальной симметрией относительно вертикальной прямой $c/a = 1$, если отрезки графиков при $c/a = 1 \dots 1/\sqrt{2}$ построить, взяв отношение a/c (т. е. по оси X отложить величины от 1,414 до 1 и далее от 1 до 1,414). Это происходит из-за того, что в силу симметрии процесс деформации на данных участках совпадает. В данном случае на рис. 2 на всем протяжении оси X отложена величина c/a , для того чтобы показать величину одноосной деформации, поэтому отрезки графиков на рис. 2 при $c/a = 1 \dots \sqrt{2}$ и $1 \dots 1/\sqrt{2}$ получаются не совсем зеркально симметричными относительно вертикальной прямой $c/a = 1$. Следует отметить, что указанная зеркальная симметрия ОРП ниобия (как и других металлов группы VB: V, Ta) не была замечена ранее [11], что привело к получению некоторых метастабильных состояний при расчете структуры при $c/a = 1 \dots 1/\sqrt{2}$.

На рис. 3 приведены ветви фононного спектра в зависимости от величины c/a (для одноосной нагрузки сжатия вдоль оси $\langle 001 \rangle$) вдоль направления волнового вектора $\langle x00 \rangle$ и вдоль вектора $\langle x0x \rangle$ (для одноосной нагрузки растяжения вдоль $\langle 001 \rangle$).

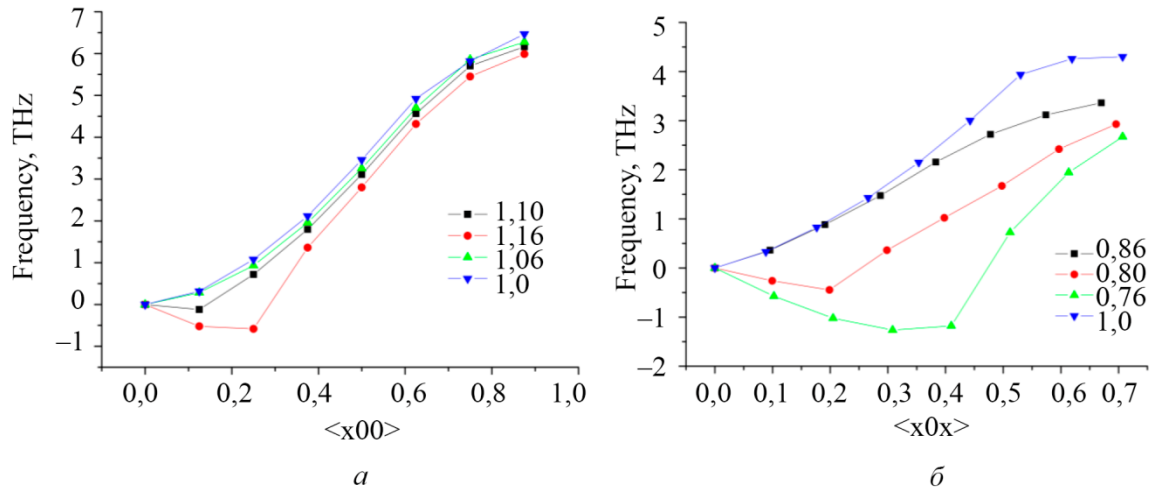


Рис. 3. Фононные частоты для БП (описывается в системе отсчета ОЦТ-решетки, см. рис. 1): вдоль направления $\langle x00 \rangle$ (а); $\langle x0x \rangle$ (б). Указаны величины c/a .

Эти ветви фононного спектра соответствуют поперечной поляризации, а результат анализа фононных спектров вдоль различных направлений во всей неприводимой зоне Бриллюэна вдоль БП показал, что фононы вдоль данных направлений размягчаются при указанных нагрузках в первую очередь. При $c/a = 1,06...1,10$ (инженерная деформация $e = 0,06...0,1$) для ветви $\langle x00 \rangle$ и при $c/a = 0,86...0,80$ ($|e| = 0,14...0,2$) для ветви $\langle x0x \rangle$ наблюдается упругая потеря устойчивости структуры. При этом частоты соответствующих фононов становятся мнимыми (на графике отображаются как отрицательные). Полученный результат для деформации, соответствующей упругой потере устойчивости структуры при растяжении, согласуется с результатами, полученными ранее *ab initio* методами для аналогичной деформации ниобия в работах [9, 11].

На рис. 2 а видно, что БП и ОРП при $c/a = \sqrt{2}$ (ОЦК-структура) близки при деформации $e \sim 0,1$. Можно предположить, что полученные результаты по потере устойчивости ОЦК-структуры при данной одноосной нагрузке будут приблизительно справедливы и для ОРП. Уточнение этого вопроса требует расчета фононного спектра во всей неприводимой зоне Бриллюэна по ходу ОРП, что является отдельной задачей.

Упругие и фононные аномалии в ниобии и других металлах группы VB (V, Ta), в основном под давлением, широко обсуждались в связи с электронными свойствами, и было показано, что они связаны со свойствами поверхности Ферми [13, 22]. В частности, мягкая поперечная фононная ветвь вдоль [100] и необычная мягкость c_{44} , как было показано в работе [22], может возникать из-за электронного топологического перехода, в процессе которого развивается шейка на поверхности Ферми вдоль направления $\Gamma-N$. Также имеются данные о влиянии нестинга поверхности Ферми на изменение упругих свойств и стабильности структуры данной группы металлов под давлением [13]. В случае одноосной деформации ниобия эти вопросы требуют дополнительного изучения.

4. Заключение

Ab initio методом изучена энергетика бейновского и орторомбического путей превращения структуры при одноосной деформации ОЦК-металла (ниобия). Уточнен орторомбический путь превращения с учетом его симметрии. Рассчитан фононный спектр во всей неприводимой зоне Бриллюэна в зависимости от деформации для БП. Показано, что при $c/a = 1,06...1,10$ (инженерная деформация $e = 0,06...0,1$) для ветви $\langle x00 \rangle$ и при $c/a = 0,86...0,80$ ($|e| = 0,14...0,2$) для ветви $\langle x0x \rangle$ (эти ветви оказались наиболее мягкими) наблюдается упругая потеря устойчивости структуры. При этом частоты соответствующих фононов становятся мнимыми. Отмечены наиболее вероятные механизмы (электронный

топологический переход, нестинг поверхности Ферми), связанные с электронной структурой ниобия и определяющие устойчивость его структуры при деформации и теоретическую прочность.

Благодарность

Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России по теме «Структура» № 122021000033-2. Расчеты проведены с использованием суперкомпьютера «Уран» ИММ УрО РАН.

Литература

1. Bain E. C. The Nature of Martensite // Trans. AIME. – 1924. – Vol. 70. – P. 25–35.
2. Effect of magnetic state on the α - γ transition in iron: first-principles calculations of the Bain transformation path / S. V. Okatov, A. R. Kuznetsov, Yu. N. Gornostyrev, V. N. Urtsev, M. I. Katsnelson // Physical Review B. – 2009. – Vol. 79, No. 9. – P. 094111–094115. – DOI: 10.1103/RevModPhys.84.945.
3. Lattice instabilities in metallic elements / G. Grimvall, B. Magyari-Köpe, V. Ozoliņš, K. A. Persson // Review of Modern Physics. – 2012. – Vol. 84, No. 3. – P. 945–986. – DOI: 10.1103/PhysRevB.79.094111.
4. Kuznetsov A. R., Starikov S. A., Sagaradze V. V. Phonon instabilities in a metal on the Bain fcc–bcc transformation path // Diagnostics, Resource and Mechanics of materials and structures. – 2022. – Iss. 6. – P. 86–94. – DOI: 10.17804/2410-9908.2022.6.086-094. – URL: http://dream-journal.org/issues/2022-6/2022-6_385.html
5. Phonon Instabilities and the ideal strength of aluminum / D. M. Clatterbuck, C. R. Krenn, Marvin L. Cohen, J. W. Morris Jr. // Physical Review Letters. – 2003. – Vol. 91, No. 13. – P. 135501–135504. – DOI: 10.1103/PhysRevLett.91.135501.
6. Calculations of theoretical strength: state of the art and history / J. Pokluda, M. Cern, P. Sandera, M. Sob // Journal of Computer-Aided Materials Design. – 2004. – Vol. 11. – P. 1–28. – DOI: 10.1007/s10820-004-4567-2.
7. Ab initio calculations of mechanical properties: methods and applications / J. Pokluda, M. Černý, M. Sob, Y. Umeno // Progress in Materials Science. – 2015. – Vol. 73. – P. 127–158. – DOI: 10.1016/j.pmatsci.2015.04001.
8. Li Ju, Yip S. Atomistic measures of materials strength // CMES-Computer Modeling in Engineering and Sciences. – 2002. – Vol. 3. – P. 219. – DOI: 10.3970/cmcs.2002.003.219.
9. Ideal strength of bcc molybdenum and niobium / W. Luo, D. Roundy, M. L. Cohen, J. W. Morris Jr. // Physical Review B. – 2002. – Vol. 66, iss. 9. – P. 094110. – DOI: 10.1103/PhysRevB.66.094110.
10. Černý M., Pokluda J. Influence of superimposed biaxial stress on the tensile strength of perfect crystals from first principles // Physical Review B. – 2007. – Vol. 76, iss. 2. – P. 024115. – DOI: 10.1103/PhysRevB.76.024115.
11. Anomalies in the response of V, Nb, and Ta to tensile and shear loading: ab initio density functional theory calculations / N. Nagasako, M. Jahnátek, R. Asahi, J. Hafner // Phys. Rev. B. – 2010. – Vol. 81, iss. 9. – P. 094108. – DOI: 10.1103/PhysRevB.81.094108.
12. First-principles investigation of elastic anomalies in niobium at high pressure and temperature / Y. X. Wang, H. Y. Geng, Q. Wu, X. R. Chen, Y. Sun // Journal of Applied Physics. – 2017. – Vol. 122, iss. 23. – P. 235903. – DOI: 10.1063/1.5006396.
13. Kohn anomaly and phase stability in group VB transition metals / A. Landa, P. Söderlind, I. I. Naumov, J. E. Klepeis, L. Vitos // Computation. – 2018. – Vol. 6 (29). – P. 1–19. – DOI: 10.3390/computation6020029.

14. Discrete and continuous deformation during nanoindentation of thin films / A. Gouldstone, H. J. Koh, K. Y. Zeng, A. E. Giannakopoulos, S. Suresh // *Acta Materialia*. – 2000. – Vol. 48, No. 9. – P. 2277–2295. – DOI: 10.1016/S1359-6454(00)00009-4.
15. Dislocation emission around nanoindentations on a (001) fcc metal surface studied by scanning tunneling microscopy and atomic simulation / O. R. de la Fuente, J. A. Zimmerman, M. A. Gonzales, J. de la Figuera, J. C. Hamilton, W. W. Pai, J. M. Rojo // *Physical Review Letters*. – 2002. – Vol. 88, No. 3. – P. 036101–036104. – DOI: 10.1103/PhysRevLett.88.036101.
16. Молекулярно-лучевая эпитаксия и гетероструктуры / под ред. Л. Ченга, К. Плога; пер. с англ. под ред. Ж. И. Алферова, Ю. В. Шмарцева. – Москва : Мир, 1989. – 582 с.
17. Phonon instabilities in uniaxially compressed fcc metals as seen in molecular dynamics simulations / G. Kimminau, P. Erhart, E. M. Bringa, B. Remington, J. S. Wark // *Physical Review B*. – 2010. – Vol. 81. – P. 092102. – DOI: 10.1103/PhysRevB.81.092102.
18. URL: [arXiv:cond-mat/0504077](https://arxiv.org/abs/cond-mat/0504077) [cond-mat.supr-con]
19. Phonon States of Elements. Electron States and Fermi Surfaces of Alloys / ed. by K.-H. Hellwege, O. Madelung. – Book series Landolt-Börnstein. – Vol. 3. – Berlin : SpringerVerlag, 1981.
20. Elasticity of the superconducting metals V, Nb, Ta, Mo, and W at high pressure / L. Koči, Y. Ma, A. R. Oganov, P. Souvatzis, R. Ahuja // *Physical Review B*. – 2008. – Vol. 77, iss. 21. – P. 214101. – DOI: 10.1103/PhysRevB.77.214101.
21. Theory of elastic constants of cubic transition metals and alloys / P. Söderlind, O. Eriksson, J. M. Wills, A. M. Boring // *Physical Review B*. – 1993. – Vol. 48. – P. 5844. – DOI: 10.1103/PhysRevB.48.5844.
22. Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology / ed. by O. Madelung. – Landolt-Börnstein New Series. – Group III : Crystal and Solid State Physics. – Vol. 14 : Structure Data of Elements and Intermetallic Phases. – Berlin : Springer Verlag, 1988.
23. Katahara K. W., Manghnani M. H., Fisher E. Elastic moduli of paramagnetic chromium and Ti-V-Cr alloys // *Journal of Physics F: Metal Physics*. – 1979. – Vol. 9 (11). – P. 773. – DOI: 10.1088/0305-4608/9/11/008.
24. James A. M., Lord M. P. *Macmillan's Chemical and Physical Data*. – London, UK : Macmillan, 1992.