

КОНКУРЕНЦИЯ КУБИЧЕСКОЙ ГРАНЕЦЕНТРИРОВАННОЙ И ИКОСАЭДРАЛЬНОЙ КЛАСТЕРНЫХ СТРУКТУР

Р. С. Бэрри^а, Б. М. Смирнов^б, А. Ю. Стрижев^б

*^а University of Chicago
IL 60637, Chicago, USA*

*^б Институт высоких температур Российской академии наук
127412, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 20 января 1997 г.

Для икосаэдральной и гранецентрированной кубической структуры кластеров на основе численных методов рассчитана энергия связи атомов в случае парного взаимодействия Морзе между атомами при числах атомов в кластерах от 561 до 923, что соответствует заполнению шестого слоя икосаэдра. Построена теория возмущений для расчета энергии кластеров, где малым параметром служит отношение энергии взаимодействия атомов, не являющихся ближайшими соседями, к энергии взаимодействия ближайших соседей. Найдены значения параметра в потенциале взаимодействия Морзе, при котором энергии кластеров разной структуры совпадают. При рассматриваемых условиях энергией натяжения кластера можно пренебречь; энергия взаимодействия неближайших соседей вносит малый вклад в полную энергию кластера, но оказывается существенной для параметра пересечения уровней.

1. ВВЕДЕНИЕ

Известны 230 кристаллических структур, которые реализуются при низких температурах [1–3]. Разнообразие кластерных структур еще шире. Например, конденсированные системы, состоящие из атомов с парным взаимодействием, образуют кристаллические структуры с плотной упаковкой, которые включают в себя гексагональную и гранецентрированную кубическую (ГЦК) структуры [3, 4]. Наряду с этим кластеры с парным взаимодействием атомов могут иметь структуру икосаэдра [5]. Как геометрическая фигура икосаэдр имеет поверхность, состоящую из 20 правильных треугольников. Внутренние атомы кластера-икосаэдра имеют 12 ближайших соседей подобно структурам плотной упаковки, в которой все расстояния между ближайшими соседями совпадают. Для кластера-икосаэдра расстояние между ближайшими соседями, принадлежащими одному и тому же слою, примерно на 5% превышает расстояние между ближайшими соседями, относящимися к соседним слоям. Поэтому структура икосаэдра невыгодна для макроскопической системы, тогда как для системы конечного числа связанных атомов-кластеров она может оказаться предпочтительной при низких температурах.

Преимущество структуры икосаэдра по сравнению со структурами плотной упаковки состоит в большем числе связей между ближайшими соседями. Поэтому такая структура энергетически более выгодна для малых кластеров. В частности, для кластеров инертных газов переход от структуры икосаэдра к ГЦК-структуре происходит при числе атомов в кластере $n = 1000\text{--}3000$ [6–8]. В случае кластеров с потенциалом Ленарда-Джонса для взаимодействия между атомами переход от структуры икосаэдра к структуре кубоэктаэдра — одной из ГЦК-структур — имеет место при числе атомов в кластере

$n \sim 10^4$ [9, 10], а переход между структурами икосаэдра и ГЦК для кластеров с короткодействующим взаимодействием атомов происходит при $n = 200-500$ [11, 12]. Столь высокая чувствительность области перехода к характеру взаимодействия атомов требует более тщательного анализа конкуренции данных структур. Далее мы проводим этот анализ на основе метода, разработанного в [13], для потенциала взаимодействия Морзе между атомами. Тогда характер конкуренции структур выражен в «фазовой диаграмме» [13], которая представляет собой зависимость от числа атомов в кластере параметра потенциала Морзе, отвечающего пересечению энергий для ГЦК- и икосаэдральной структур. Определение этой фазовой диаграммы и является задачей данной статьи.

Отметим, что мы исключили из рассмотрения гексагональную структуру кластеров. Эта структура конкурирует с ГЦК-структурой при малых размерах кластера, когда икосаэдральная структура является предпочтительной, но в области конкуренции икосаэдральной и ГЦК-структур эти структуры характеризуются более высокими энергиями связи атомов в кластере по сравнению с гексагональной структурой [14, 15]. Далее мы относим к структуре икосаэдра кластеры, кор которых имеет форму икосаэдра. Поверхностный, заполняемый слой этих кластеров может иметь как ГЦК-, так и икосаэдральную структуру [6, 7, 16] в зависимости от степени заполнения слоя. Мы выбираем такую структуру поверхностного слоя атомов с данным числом атомов, которому соответствует большая энергия связи атомов.

Рост кластеров ГЦК-структуры происходит путем заполнения его плоских граней [14, 17]. При этом кор ГЦК-кластера может содержать или не содержать центральный атом. Из этих двух структур ГЦК-кластера для заданного числа атомов в кластере мы выбираем такую структуру, у которой энергия связи атомов больше. Таким образом, при сопоставлении структур ГЦК и икосаэдра мы выбираем оптимальную конфигурацию атомов в рамках каждой структуры, обеспечивающей максимальную энергию связи. Реально каждая из оптимальных конфигураций атомов соответствует максимальному числу связей между ближайшими соседями.

Далее мы проводим сравнение энергий для оптимальных конфигураций атомов ГЦК и икосаэдральной структур кластеров для чисел атомов в кластере $n = 561-923$, что соответствует заполнению шестого слоя структуры икосаэдра. Такое сравнение позволяет понять основные закономерности конкуренции рассматриваемых структур.

Следует отметить, что разнообразие кристаллических структур, наблюдаемых в природе, определяется разным характером взаимодействия в атомных системах. Рассматриваемое парное взаимодействие в системе связанных атомов, при котором атомы сохраняют свою индивидуальность в системе, справедливо, если потенциал взаимодействия двух атомов не зависит от расположения окружающих атомов системы. Это имеет место, если потенциал взаимодействия двух атомов мал по сравнению с характерными атомными величинами, в частности, по сравнению с потенциалом взаимодействия атомов, так что рассматриваемый случай относится к кластерам, состоящим из атомов инертных газов или газовых молекул. В других случаях взаимодействия атомов они теряют свою индивидуальность в кластерах, что усложняет анализ кластерных структур. Однако даже в рассматриваемом простейшем случае парного взаимодействия атомов может быть несколько кластерных структур и их гибридов, причем оптимальным структурам кластеров отвечает ГЦК или икосаэдральный кор.

2. ЭНЕРГЕТИКА БОЛЬШИХ КЛАСТЕРОВ

Потенциал Морзе взаимодействия двух атомов как функция расстояния R между ними имеет вид

$$U(R) = D \{ \exp [2\alpha(R_e - R)] - 2 \exp [\alpha(R_e - R)] \}, \quad (1)$$

так что минимум соответствует равновесному расстоянию R_e между атомами для двухатомной молекулы: ниже мы положим энергию диссоциации двухатомной молекулы $D = 1$. Мы используем стандартную компьютерную программу для определения энергии кластера при данной конфигурации его атомов, так что полная энергия связи атомов кластера определяется как

$$E = - \sum_{i,k} U(r_{ik}), \quad (2)$$

где i, k — номера атомов, r_{ik} — расстояние между ними.

Необходимо учесть, что взаимодействие ближайших соседей изменяет расстояние между ближайшими соседями по сравнению с равновесным расстоянием R_e в двухатомной молекуле. Мы сделаем это в рамках стандартного метода [4] для потенциала взаимодействия Морзе. Представим полную энергию атомов кластера (2) в виде

$$E = 2 \exp(\alpha R_e) F(\alpha a) - \exp(2\alpha R_e) F(2\alpha a), \quad (3)$$

где

$$F(\alpha a) = \sum_{i,k} \exp(-\alpha r_{ik}), \quad (4)$$

a — расстояние между ближайшими соседями (базис для данного кластера), а сумма берется по всем связям. Определим производную от данной функции как

$$F'(\alpha a) = \frac{dF}{d(\alpha a)} = \sum_{i,k} r_{ik} \exp(-\alpha r_{ik}). \quad (5)$$

Оптимизируя энергию кластера E , найдем оптимальное расстояние a между ближайшими соседями из соотношения

$$\exp(\alpha R_e) = g(\alpha a) = F'(\alpha a) / F'(2\alpha a), \quad (6)$$

так что оптимальная энергия связи рассматриваемого кластера равна

$$E = g(\alpha a) F(\alpha a) - \frac{1}{2} g^2(\alpha a) F(2\alpha a). \quad (7)$$

Выделим из суммы (4) части, относящиеся к взаимодействию ближайших соседей F_{nn} и ближайших соседей F_{nnn} , так что $F = F_{nn} + F_{nnn}$. Тогда удобно разделить энергию кластера стандартным методом [13] на энергию взаимодействия ближайших соседей E_{nn} , энергию взаимодействия ближайших соседей E_{nnn} и энергию натяжения E_{str} :

$$E = E_{nn} + E_{nnn} + E_{str}. \quad (8)$$

Здесь

$$E_{nn} = 2 \exp(\alpha R_e) F_{nn}(\alpha a) - \exp(2\alpha R_e) F_{nn}(2\alpha a). \quad (9)$$

Подобным образом определяется энергия взаимодействия ближайших соседей:

$$E_{nnn} = 2 \exp(\alpha R_e) F_{nnn}(\alpha a) - \exp(2\alpha R_e) F_{nnn}(2\alpha a). \quad (10)$$

В этих формулах величина a берется как базис короткодействующего взаимодействия, включающего только взаимодействие между ближайшими соседями. Энергия натяжения учитывает изменение расстояния между ближайшими соседями в кластере от этой величины до оптимальной.

Рассмотрим сначала случай короткодействующего взаимодействия атомов в кластере, когда учитывается только взаимодействие между ближайшими соседями. Тогда получим для ГЦК-кластера

$$F_{nn}(a) = K \exp(-\alpha a), \quad F_{nnn} = 0, \quad (11)$$

где K — полное число связей между ближайшими соседями для данного кластера. Далее мы берем значения этой величины из [17]. Соответственно, имеем в данном случае $F'_{nn} = -F_{nn}$, так что оптимизация энергии дает $g(\alpha a) = \exp(-\alpha a)$ и $a = R_e$ для ближайших соседей. Тогда получаем

$$E = K. \quad (12)$$

Энергия взаимодействия ближайших соседей E_{nnn} и энергия натяжения E_{str} равны нулю.

В случае икосаэдрального кластера имеются два расстояния между ближайшими соседями. Обозначим через R расстояние между ближайшими соседями, принадлежащими соседним слоям, и R_0 — расстояние между ближайшими соседями одного и того же слоя, причем $R = 0.951R_0$. Вводя в рассмотрение A — число связей между ближайшими соседями соседнего слоя (длина связи R) — и B — число связей между ближайшими соседями одного и того же слоя (длина связи R_0), получим

$$F_{nn} = A \exp(-\alpha R) + B \exp(-\alpha R_0). \quad (13)$$

Оптимизируя энергию связи атомов кластера, найдем для оптимального расстояния между ближайшими соседями соседних слоев [11, 12]

$$R = R_e [1 - 0.047B / (0.904A + B)]. \quad (14)$$

Если мы ограничимся только взаимодействием между ближайшими соседями, это ведет к следующему выражению для полной энергии икосаэдрального кластера для потенциала Морзе взаимодействия атомов [11, 12]:

$$E = A + B - 0.0024\alpha^2 AB / (0.904A + B). \quad (15)$$

Равенство энергий икосаэдрального и ГЦК-кластеров в случае короткодействующего взаимодействия атомов в кластере отвечает следующему значению параметра в потенциале взаимодействия Морзе:

$$\alpha_* = 20.4 [(A + B - K)(0.904A + B) / (AB)]^{1/2}. \quad (16)$$

Таблица 1

Параметры кластеров (m — число заполненных слоев икосаэдрального кластера, n — число атомов кластера)

m	n	A	B	K	$\alpha_* R_e$
3	147	276	420	668	8.21
4	309	648	900	1507	6.60
5	561	1260	1650	2844	6.07
6	923	2172	2730	4809	5.54
7	1415	3444	4200	7527	4.96
8	2057	5136	6120	11118	4.44

Таблица 2

Параметры икосаэдрального кластера, имеющего m заполненных слоев и 10 заполненных поверхностных треугольников сверх этого (n — число атомов кластера)

m	n	A	B	K	$\alpha_* R_e$
4	216	442	603	1024	5.74
5	420	928	1203	2094	5.31
6	724	1684	2103	3730	4.93
7	1148	2770	3363	6042	4.89
8	1712	4246	5043	9181	4.32

В табл. 1 даны результаты сравнения параметров кластеров для чисел атомов в кластере, соответствующих заполненным слоям для структуры икосаэдра. Табл. 2 содержит эти параметры для чисел атомов в кластере, когда в структуре икосаэдра сверх заполненного слоя заполнено 10 поверхностных треугольников. В этих таблицах приводятся значения параметра α_* , соответствующего пересечению уровней и определяемого формулой (16). Проведенное сравнение выделяет область значений параметра α , в которой имеет место конкуренция структур.

Далее мы учтем взаимодействие ближайших соседей как возмущение, т.е. построим теорию возмущений для потенциала Морзе взаимодействия атомов кластера, где малый параметр есть $\Delta = F_{nnn}(\alpha R_e)/F_{nn}(\alpha R_e)$. Эта теория возмущений справедлива для $\alpha > 4$. В табл. 3 представлены значения этого малого параметра для ГЦК (Δ_{fcc}) и икосаэдральных (Δ_{ico}) кластеров. Кроме того, табл. 3 содержит значения параметра $\gamma = -d \ln F_{nnn}(\alpha R_e)/d \ln(\alpha R_e)$. Так как R_e/γ — характерное расстояние между атомами кластера, определяющее величину F_{nnn} , отсюда следует $\gamma > 1$. По этой причине в формуле (10) можно пренебречь вторым членом по сравнению с первым. Действительно, в рассматриваемой области размеров кластеров $n = 561-923$ величина $\exp(\alpha R_e)F_{nnn}(2\alpha R_e)/F_{nnn}(\alpha R_e)$ равна 0.11 для $\alpha R_e = 4$, 0.074 для $\alpha R_e = 5$ и 0.054 для $\alpha R_e = 6$.

Таким образом, в рамках рассматриваемой теории возмущений для энергии связи атомов ГЦК-кластера получаем

$$E = 2K \exp[\alpha(R_e - a)] - K \exp[2\alpha(R_e - a)] + 2F_{nnn}(\alpha a) \exp(\alpha R_e). \quad (17)$$

Таблица 3

Параметры взаимодействия ближайших соседей для кластеров с потенциалом взаимодействия Морзе между атомами

αR_e	γ_{fcc}	Δ_{fcc}	γ_{ico}	Δ_{ico}
4	1.68	0.21	1.72	0.23
5	1.61	0.11	1.64	0.12
6	1.56	0.061	1.60	0.071
7	1.52	0.036	1.56	0.042
8	1.50	0.021	1.53	0.026
10	1.46	0.0082	1.50	0.010

Оптимизируя энергию кластера относительно расстояния между ближайшими соседями a , для этого расстояния получим

$$\alpha(R_e - a) = \gamma F_{nnn}(\alpha R_e) / F_{nn}(\alpha R_e) = \gamma \Delta. \quad (18)$$

Отсюда для слагаемых в формуле (8) находим

$$E_{nn} = K, \quad E_{nnn} = 2K\Delta, \quad E_{str} = \gamma^2 \Delta^2 K. \quad (19)$$

Подобным образом получаем для полной энергии связи атомов в икосаэдральном кластере

$$E = A + B - 0.0024\alpha^2 AB / (0.904A + B) - (A + 1.106B)(R' - R)^2 + 2F_{nnn}(\alpha R) \exp(\alpha R_e), \quad (20)$$

где расстояние R' дается формулой (14): $R' = R_e [1 - 0.047B / (0.904A + B)]$. Оптимизируя энергию связи атомов кластера при заданном значении параметра αR_e по отношению к параметру R , получим для отдельных членов формулы (8)

$$E_{nn} = A + B - 0.0024\alpha^2 AB / (0.904A + B), \quad E_{nnn} = 2F_{nnn}(\alpha R') \exp(\alpha R_e),$$

$$E_{str} = (\gamma\alpha)^2 F_{nnn}^2(\alpha R') \exp(2\alpha R_e) / (A + 1.106B). \quad (21)$$

Как и в случае ГЦК-кластеров, в данном случае из этих формул следует, что $E_{nnn}/E_{nn} \sim \Delta$, $E_{str}/E_{nn} \sim \Delta^2$.

Заметим, что удельные величины F_{nn}/n и F_{nnn}/n при заданном значении параметра αR_e являются плавными функциями числа атомов n в кластере. Например, в рассматриваемом интервале размеров кластера величина K изменяется от 2844 для $n = 561$ до 4809 для $n = 923$. Соответственно, величина K/n изменяется от 5.07 до 5.21, т. е. в пределах нескольких процентов. Число связей между ближайшими соседями как функция n имеет скачки при магических числах атомов в кластере в отличие от описывающей эту зависимость плавной функции, однако разность этих функций даже при магических числах атомов не превышает 20, т. е. относительно мала по сравнению с полным числом связей. Функция F_{nnn}/n является более плавной функцией числа атомов в кластере, поскольку она описывает взаимодействие ближайших соседей. Таким образом, при

расчете энергии связи атомов в кластере можно считать удельные энергетические параметры не зависящими от n в некоторой области n . Это, однако, может привести к ошибке при анализе конкуренции ГЦК- и икосаэдральной структур.

Действительно, из данных табл. 1, 2 следует, что числа связей между ближайшими соседями для оптимальных конфигураций атомов ГЦК- и икосаэдральной структур близки, так что их относительная разность составляет несколько процентов в широкой области размеров кластера. Из табл. 3 видно, что взаимодействия ближайших соседей также близки. Результаты сравнения кластеров разной структуры представлены в табл. 4, причем в рамках каждой структуры выбирается оптимальная конфигурация атомов. Заполняемый слой икосаэдрального кластера может иметь как ГЦК-, так и икосаэдральную структуру, тогда как его кор имеет только икосаэдральную структуру. Структура поверхностного слоя отмечена вблизи числа связей между ближайшими соседями как ic или fcc соответственно. ГЦК-структура поверхностного слоя икосаэдрального кластера предпочтительна, пока заполнено не более 8 поверхностных треугольников кластера. При большем числе заполненных треугольников энергетически более выгодной становится икосаэдральная структура поверхностного слоя.

Таблица 4
Параметры конкуренции ГЦК- и икосаэдральной структур

n	A	B	K	$\alpha_* R_e$
561	1260(ic)	1650	2844(nc)	7.1
606	1395(fcc)	1740	3093(nc)	6.8
636	1485(fcc)	1800	3255(nc)	6.4
681	1620(fcc)	1890	3490(c)	6.2
688	1592(ic)	1996	3529(c)	6.7
724	1677(ic)	2103	3730(c)	6.7
760	1774(ic)	2210	3934(c)	6.6
817	1916(ic)	2385	4234(c)	6.8
874	2058(ic)	2564	4575(c)	6.5
923	2172(ic)	2730	4809(c)	7.1

Что касается ГЦК-кластеров, имеет место конкуренция между структурами кора с центральным атомом и без него. По мере увеличения числа атомов в кластере происходит чередование этих структур. В рассмотренном интервале размеров кластера в основном оказывается выгодней структура кора кластера с центральным атомом. Предпочтительная структура кора кластеров ГЦК-структуры отмечена в табл. 4 в скобках при числе связей между ближайшими соседями кластера K как c или nc в зависимости от наличия или отсутствия центрального атома в коре кластера.

В табл. 4 даны значения параметра $\alpha_* R_e$, при которых энергии связи кластера, состоящего из данного числа атомов, становятся одинаковыми для кластеров ГЦК- и икосаэдральной структуры при оптимальной конфигурации атомов. Для энергии ГЦК- и икосаэдрального кластера были использованы формулы (19), (20). Параметры оптимальной конфигурации атомов для икосаэдрального кластера с короткодействующим взаимодействием атомов взяты из [11, 12], а параметры оптимальной конфигурации атомов ГЦК-кластера — из [14, 17]. Параметры дальнего взаимодействия атомов кластера, которые включают взаимодействие ближайших соседей, рассчитаны

для потенциала взаимодействия Морзе численными методами с использованием формулы (4). Заметим, что в области конкуренции рассматриваемых структур кластеров для анализируемого интервала размеров кластеров $n = 561-923$ значения искомого параметра $\alpha_* R_e$ сосредоточены в диапазоне $\alpha_* R_e = 6-7$, так что взаимодействие между ближайшими соседями дает основной вклад в полную энергию связи атомов кластера. Это оправдывает использованный метод, в котором мы выбираем оптимальные конфигурации атомов, реализуемые при короткодействующем взаимодействии атомов. Тем не менее взаимодействие ближайших соседей в кластере существенно для анализа конкуренции структур.

Действительно, из данных табл. 1, 2, 4 следует, что числа связей между ближайшими соседями для ГЦК- и икосаэдральных кластеров оказываются близкими, так что, хотя потенциал взаимодействия ближайших соседей в кластере мал по сравнению со взаимодействием между ближайшими соседями, он может оказаться сравнимым с разностью потенциалов взаимодействия между ближайшими соседями для рассматриваемых структур. Действительно, как следует из табл. 1, 2, 4, разность $A + B - K$, которая фигурирует в формуле (16), составляет несколько процентов от $A + B$. Тот же порядок величины имеет потенциал взаимодействия ближайших соседей в области значений параметра $\alpha R_e = 6-7$, где данные структуры конкурируют (см. табл. 3). Для структуры икосаэдра потенциал взаимодействия ближайших соседей больше, чем в случае ГЦК-структуры, так что это взаимодействие увеличивает параметр $\alpha_* R_e$ пересечения энергий данных структур по сравнению со случаем взаимодействия только между ближайшими соседями. Отметим, что энергия натяжения в области пересечения уровней энергии, согласно формулам (19), (21), пропорциональна Δ^2 и незначительна для данного эффекта.

Величина $A + B - K$ чувствительна к структуре кластеров. Она имеет локальные максимумы при магических числах икосаэдрального кластера и минимумы при магических числах ГЦК-кластера. Следовательно, в соответствующей области размеров кластера, которая включает определенный набор магических чисел, величина $\alpha_* R_e$ является нерегулярной функцией n . Взаимодействие ближайших соседей делает эту функцию более плавной, поскольку это взаимодействие нечувствительно к магическим числам.

Заметим, что популярный потенциал взаимодействия Ленарда-Джонса соответствует потенциалу взаимодействия Морзе с параметром $\alpha R_e = 6$. Тогда из вышеприведенного анализа следует, что конкуренция рассматриваемых структур кластеров для взаимодействия Ленарда-Джонса происходит при $n > 1000$, что соответствует [11].

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, для анализа конкуренции структур кластеров с парным потенциалом взаимодействия атомов удобно использовать параметр αR_e потенциала взаимодействия Морзе, при котором энергии икосаэдральной и ГЦК-структур кластера для оптимальной конфигурации атомов и заданного их числа совпадают [13]. Мы провели численные расчеты для энергии кластеров, содержащих $n = 561-923$ атома, что отвечает заполнению шестого слоя икосаэдрального кластера. Как следует из этих расчетов и вышеприведенного анализа, параметр пересечения уровней энергий определяется взаимодействием как ближайших соседей в кластере, так и ближайших соседей. Пара-

метр $\alpha_* R_e$ изменяется для заданной области размеров кластера в пределах $\alpha_* R_e = 6-7$ и является немонотонной функцией числа атомов в кластере. В этой области значений параметра αR_e основной вклад в энергию кластеров обеих структур дает взаимодействие между ближайшими соседями, так что взаимодействие неближайших соседей составляет несколько процентов от полной энергии кластера. Тем не менее, поскольку числа связей между ближайшими соседями для оптимальных конфигураций атомов обеих структур оказываются близкими, учет взаимодействия между неближайшими соседями является существенным для определения параметра $\alpha_* R_e$, при котором энергии рассматриваемых структур совпадают. Взаимодействие неближайших соседей увеличивает величину $\alpha_* R_e$ и делает зависимость этого параметра от числа атомов в кластере более плавной.

Работа частично поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (грант 96-02-16016).

Литература

1. M. J. Buerger, *Elementary Crystallography*, John Wiley, New York (1963).
2. R. W. G. Wyckoff, *Crystal Structures*, Interscience, New York (1963).
3. N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, *Solid State Physics*, Holt, Rinehart and Winston, New York (1976).
4. Ch. Kittel, *Solid State Physics* (6 Edition) John Wiley, New York (1986).
5. A. L. Mackay, *Acta Crystallogr.* **15**, 916 (1962).
6. J. Farges, M. F. deFeraudi, B. Raoul, and G. Torchet, *J. Chem. Phys.* **78**, 5067 (1983).
7. J. Farges, M. F. deFeraudi, B. Raoul, and G. Torchet, *J. Chem. Phys.* **83**, 3491 (1986).
8. J. W. Lee and G. D. Stein, *J. Phys. Chem.* **91**, 2450 (1987).
9. B. W. van de Waal, *J. Chem. Phys.* **90**, 3407 (1989).
10. J. Xie, J. A. Northby, D. L. Freemann, and J. P. Doll, *J. Chem. Phys.* **91**, 612 (1989).
11. В. М. Смирнов, *Chem. Phys. Lett.* **232**, 395 (1995).
12. Б. М. Смирнов, *УФН* **164**, 665 (1994).
13. J. P. K. Doye, D. J. Wales, and R. S. Berry, *J. Chem. Phys.* **103**, 4234 (1995).
14. В. М. Смирнов, *Phys. Scripta* **52**, 710 (1995).
15. Б. М. Смирнов, *ТВТ* **33**, 700 (1995).
16. J. A. Northby, *J. Chem. Phys.* **87**, 6166 (1987).
17. Б. М. Смирнов, *ЖЭТФ* **107**, 2080 (1995).