






**Received:** 30.08.2025  
**Revised:** 27.10.2025  
**Accepted:** 31.10.2025  
**DOI:** 10.17804/2410-9908.2025.5.053-065

## THE BAIN AND ORTHORHOMBIC PATHS OF THE STRUCTURAL AND PHASE TRANSFORMATIONS AND THEORETICAL STRENGTH OF MOLYBDENUM

A. R. Kuznetsov<sup>a, \*</sup> and S. A. Starikov<sup>b</sup>

*M. N. Mikheev Institute of Metal Physics, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences  
18 S. Kovalevskoy St., Ekaterinburg, 620137, Russia*

<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-4490-0727>  [a\\_kuznetsov@imp.uran.ru](mailto:a_kuznetsov@imp.uran.ru);

<sup>b</sup>  [starikov@imp.uran.ru](mailto:starikov@imp.uran.ru)

\*Corresponding author. Email: [a\\_kuznetsov@imp.uran.ru](mailto:a_kuznetsov@imp.uran.ru)  
Address for correspondence: ul. S. Kovalevskoy, 18, Ekaterinburg, 620108, Russia  
Tel.: +7 (343) 374-4214; fax: +7 (343) 374-5244

An ab initio method is used to study the energy of the Bain and orthorhombic paths of the structural and phase transformations in molybdenum and phonon instability during uniaxial deformation along  $\langle 001 \rangle$ . The calculation of the phonon spectrum in the whole irreducible Brillouin zone as dependent on strain for the Bain path makes it possible to find the softest phonon spectral regions, responsible for the loss of structural stability. The nature of the stability loss is revealed, and the strain at which stability is lost under both tension and compression is evaluated. The most probable mechanisms governing the structural stability and theoretical strength of molybdenum are discussed. The results can concern experiment situations when small defect-free regions are strained, e. g., in nanostructured materials, or when surface layers are modified by state-of-the-art plastic deformation techniques, or during nanoindentation, or for super-high ductility of Mo-based alloys.

**Keywords:** ab initio calculation, Bain and orthorhombic paths, phonon spectrum, structural stability

### Acknowledgment

*The work was performed under the state assignment for the IMP UB RAS from the Russian Ministry of Science and Higher Education. The Uran supercomputer of the 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  $\alpha$ - $\gamma$  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 elements. *Review of Modern Physics*, 2012, 84 (3), 945–986. DOI: 10.1103/PhysRevB.79.094111.
4. Clatterbuck, D.M., Krenn, C.R., Cohen, M.L., and 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.

5. 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.
6. Pokluda, J., Černý, M., Šob, M., and 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.
7. 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](http://dream-journal.org/issues/2022-6/2022-6_385.html)
8. Kuznetsov, A.R. and Starikov, S.A. The Bain and orthorhombic paths of the bcc–fcc transformation in a bcc metal. *Diagnostics, Resource and Mechanics of materials and structures*, 2023, 6, 35–44. DOI: 10.17804/2410-9908.2023.6.035-044. Available at: [http://dream-journal.org/issues/2023-6/2023-6\\_423.html](http://dream-journal.org/issues/2023-6/2023-6_423.html)
9. Kuznetsov, A.R. and Starikov, S.A. The Bain and orthorhombic paths of structural-phase transformations in a transition metal (V). *Diagnostics, Resource and Mechanics of materials and structures*, 2024, 6, 119–130. DOI: 10.17804/2410-9908.2024.6.119-130. Available at: [http://dream-journal.org/issues/2024-6/2024-6\\_490.html](http://dream-journal.org/issues/2024-6/2024-6_490.html)
10. Luo, W., Roundy, D., Cohen, M.L., and Morris, J.W. Ideal strength of bcc molybdenum and niobium. *Physical Review B*, 2002, 66, 094110. DOI: 10.1103/PhysRevB.66.094110.
11. Liu, Z. and Shang, J. First principles calculations of electronic properties and mechanical properties of bcc molybdenum and niobium. *Rare Metals*, 2011, 30 (suppl. 1), 354–358. DOI: 10.1007/s12598-011-0302-9.
12. Available at: arXiv:2406.16634 [cond-mat.mtrl-sci]
13. Tyumentsev, A.N., Litovchenko, I.Yu., Ditenberg, I.A., Pinzhin, Yu.P., Grinyaev, K.V., Smirnov, I.V., and Chernov, V.M. *Plasticheskaya deformatsiya v usloviyakh fazovoy nestabilnosti kristallicheskoy reshetki* [Plastic Deformation Under the Phase Instability of the Crystal Lattice]. NTL Publ., Tomsk, 2024, 212 p. (In Russian).
14. Dewaele, A., Torrent, M., Loubeyre, P., and Mezouar, M. Compression curves of transition metals in the Mbar range: experiments and projector augmented-wave calculations. *Physical review B: Condensed Matter*, 2008, 78 (10), 104102. DOI:10.1103/PhysRevB.78.104102.
15. Haas, P., Tran, F., and Blaha, P. Calculation of the lattice constant of solids with semilocal functionals. *Physical Review B*, 2009, 79 (8), 085104. DOI: 10.1103/physrevb.79.085104.
16. Ming, L. and Manghnani, M.H. Isothermal compression of BCC transition metals to 100 kbar. *Journal of Applied Physics*, 1978, 49, 208–212. DOI: 10.1063/1.324325.
17. 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, 094108–094121. DOI: 10.1103/PhysRevB.81.094108.
18. 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.
19. Dickinson, J.M. and Armstrong, P.E. Temperature dependence of the elastic constants of molybdenum. *Journal of Applied Physics*, 1967, 38, 602–606. DOI: 10.1063/1.1709381.
20. Bolef, D.I. and De Klerk, J. Elastic constants of single crystal Mo and W between 77° and 500°K. *Journal of Applied Physics*, 1962, 33, 2311–2314. DOI: 10.1063/1.1728952.
21. Zeng, Z.-Y., Hu, C.-E., Cai, L.-C., Chen, X.-R., and Jing, F.-Q. Lattice dynamics and thermodynamics of molybdenum from first-principles calculations. *The Journal of Physical Chemistry B*, 2010, 114, 298–310. DOI: 10.1021/jp9073637.
22. Kittel, C. *Introduction to Solid State Physics*, Wiley, New York, 1996, 674 p.

23. *Molekulyarno-luchevaya epitaksiya i geterostruktury* [Molecular Beam Epitaxy and Heterostructures]. Mir Publ., Moscow, 1989, 582 p. (In Russian).
24. 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.
25. 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, 214101. DOI: 10.1103/PhysRevB.77.214101.
26. Johannes, M.D. and Mazin, I.I. Fermi surface nesting and the origin of Charge Density Waves in metals. *Physical Review. B, Condensed Matter*, 2007, 77 (16), 165135. DOI: 10.1103/PhysRevB.77.165135.

Подана в журнал: 30.08.2025



УДК 538.913:534-16

DOI: 10.17804/2410-9908.2025.5.053-065

## БЕЙНОВСКИЙ И ОРТОРОМБИЧЕСКИЙ ПУТИ СТРУКТУРНО-ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ И ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ПРОЧНОСТЬ МОЛИБДЕНА

А. Р. Кузнецов<sup>а,\*</sup>, С. А. Стариков<sup>б</sup>

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики металлов имени М. Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук, ул. С. Ковалевской, д. 18, Екатеринбург, 620137, Россия*

<sup>а</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-4490-0727>  [a\\_kuznetsov@imp.uran.ru](mailto:a_kuznetsov@imp.uran.ru);

<sup>б</sup>  [starikov@imp.uran.ru](mailto:starikov@imp.uran.ru)

\*Ответственный автор. Электронная почта: [a\\_kuznetsov@imp.uran.ru](mailto:a_kuznetsov@imp.uran.ru)  
Адрес для переписки: ул. С. Ковалевской, д. 18, Екатеринбург, 620108, Россия  
Тел.: +7 (343) 374-42-14; факс: +7 (343) 374-52-44

В работе методом *ab initio* изучена энергетика бейновского и орторомбического путей структурно-фазовых превращений в Мо и нестабильности фононов в ходе одноосной деформации вдоль  $\langle 001 \rangle$ . Расчет фононного спектра во всей неприводимой зоне Бриллюэна в зависимости от деформации для бейновского пути 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 наиболее вероятные механизмы, определяющие устойчивость структуры и теоретическую прочность Мо. 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, при сверхвысокой пластичности сплавов на основе Мо.

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

### 1. Введение

Бейновский путь (БП) превращения «объемноцентрированный кубический – границентрированный кубический кристалл» (ОЦК – ГЦК) в ОЦК-металле (тетрагональная деформация вдоль оси  $\langle 001 \rangle$ ) позволяет найти энергетiku превращения, и также определить стабильность кристаллической структуры [1–3]. Идеальная (теоретическая) прочность (ТП) материала характеризуется напряжением, при котором совершенный кристалл становится механически нестабильным [4–6], и определяет верхнюю границу напряжения, которое материал может выдержать без разрушения. Стабильность структуры требует, чтобы энергии фононов были положительны для всех волновых векторов в зоне Бриллюэна.

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. Данная работа продолжает серию работ по изучению методом *ab initio* структурно-фазовых превращений и устойчивости структуры (нахождению ТП) при деформации, в основном для важных переходных ОЦК-металлов [7–9]. Для Мо, важного в научном и прикладном аспектах переходного ОЦК-металла, превращения структуры при деформации и

прочностные свойства изучались методами *ab initio* в ряде работ [10–12], однако фононные спектры во всей зоне Бриллюэна не рассматривались.

В монографии [13] приведены результаты ряда работ по электронно-микроскопическим исследованиям эволюции микроструктуры сплавов на основе V и Mo–Re в процессе их прокатки при комнатной температуре. Показано, что основной или единственной модой деформации наблюдаемого превращения мартенситного типа является однородная деформация растяжения–сжатия типа деформации Бейна. Важной особенностью деформации превращения является высокая эффективность релаксации высокодефектных субструктур деформации в условиях фазовой динамической нестабильности кристалла. Это определяет возможность сверхвысокой технологической пластичности сплавов на основе V и Mo–Re, т. е. достижения в процессе деформации прокаткой при комнатной температуре практически неограниченных степеней пластической деформации. Носителями такой деформации являются нанобъемы превращений размерами в несколько нанометров с высокими значениями упругой кривизны кристаллической решетки и локальных градиентов внутренних напряжений, в которых облегчена однородная деформация бейновского типа и соответствующие структурные превращения.

## 2. Постановка задачи и методы решения

В данной статье методом *ab initio* изучена энергетика БП и орторомбического пути (ОРП) и структурно-фазовые превращения при одноосной деформации вдоль оси  $\langle 001 \rangle$  (с релаксацией объема) переходного ОЦК-металла (Mo). 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 Mo проведены с использованием пакета программ Quantum ESPRESSO (<https://www.quantum-espresso.org>) для расчета электронной структуры псевдопотенциальным методом плоских волн и моделирования материалов. Использован рекомендованный в данном пакете ультрамягкий псевдопотенциал (Mo.pbesol-spn-rrkjus\_psl.1.0.0.UPF). Фононные частоты рассчитаны с использованием теории возмущений функционала плотности. Фононные частоты как функция деформации рассчитаны с использованием сетки  $k$ -точек размером  $20 \times 20 \times 20$  и сетки  $q$ -точек (с интерполяцией) размером  $16 \times 16 \times 16$  для получения частот с высокой точностью [4, 7–9, 12].

## 3. Результаты и их обсуждение

В таблице приведены результаты реперных расчетов параметра решетки и упругих модулей, использованных для проверки качества псевдопотенциала. Видно, что псевдопотенциал удовлетворительно описывает эксперимент с точностью, характерной для расчетов в рамках теории функционала плотности. Фононные спектры ОЦК-Mo при нормальном давлении приведены в работе [12] (эксперимент и расчет) и удовлетворительно согласуются с полученными нами фононными спектрами ОЦК-Mo.

Реакция переходных ОЦК-металлов группы VB [8, 9, 17] и Mo [10] на одноосную нагрузку растяжения вдоль оси  $\langle 001 \rangle$  рассмотрена в указанных работах, где также приведена схема образующихся структур вдоль БП с возможностью при строго одноосной нагрузке бифуркации на ОРП. Симметрия кристалла и особенности переходных ОЦК-металлов приводят к тому, что вдоль бейновского (тетрагонального) пути наблюдаются три свободных от напряжения состояния в следующей последовательности: ОЦК, ГЦК, ОЦТ (объемноцентрированный тетрагональный кристалл). В случае бифуркации на ОРП указанная выше последовательность такова: ОЦК, ОЦТ, ОЦК.

На рис. 1 приведена схема БП при одноосной нагрузке Mo 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 склонах пика слева и справа от ГЦК-состояния ( $c/a = \sqrt{2}$ ) структуры внутренне нестабильны по отношению к тетрагональной деформации. Рисунок 1 *a* удовлетворительно совпадает с результатами расчетов ab initio БП Мо в работе [10]. Дополнительно на рис. 1 *б* приведены зависимости параметров решетки от тетрагональной деформации, виден характер релаксации параметра  $a$  при деформации.

Таблица

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

	Данная работа	Предыдущие расчеты	Эксперимент
$a_0$ , А	5,916 а.е. = 3,131А	5,916 [12, PBEsol] 5,914 [14] 5,920 [15]	5,944 [14] 5,951 [16]
$c'$ , ГПа	165	154 [17] 162 [12, PBEsol]	159 [18] 162 [19]
$c_{44}$ , ГПа	108	105 [17] 108 [12, PBEsol]	112 [18] 110 [20]
$B$ , ГПа	285	283 [12, PBEsol] 264 [21]	273 [22] 266 [18] 272 [20]

На рис. 2 показаны зависимости полной энергии для БП, ОРП (рис. 2 *a*) и параметров решетки для ОРП (рис. 2 *б*) в системе отсчета ГЦТ-решетки от величины  $c/a$ , характеризующей деформацию (в скобках указаны названия структур в системе отсчета ОЦТ-решетки (подробнее в работе [17])). На рис. 2 *a* видно, что ОРП является энергетически более выгодным, особенно, при заметном отклонении от величины  $c/a = \sqrt{2} = 1,414$ , соответствующей ОЦК-фазе.

Ранее было показано [8, 9] для ОЦК-металлов группы VB V и Nb (имеющих качественно похожие БП и ОРП), что ОЦК-фаза, соответствующая  $c/a = 1/\sqrt{2} = 0,707$  на ОРП и возникающая при данной одноосной деформации (растяжение вдоль оси  $a$ ), 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 «недеформированный кристалл ГЦТ (ОЦК)», а ось  $c$ , которая сокращается, становится равной оси  $a$  в исходном состоянии «недеформированный кристалл ГЦТ (ОЦК)». Аналогичная картина наблюдается и для Мо. Получается, что отрезки графиков (для ОРП) при  $c/a = 1 \dots \sqrt{2}$  и  $1 \dots 1/\sqrt{2}$  на рис. 2 *a*, *б* 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 *a*, *б* на всем протяжении оси  $X$  отложена величина  $c/a$ , чтобы показать величину одноосной деформации, поэтому отрезки графиков на рис. 2 *a*, *б* при  $c/a = 1 \dots \sqrt{2}$  и  $1 \dots 1/\sqrt{2}$  получаются не совсем зеркально симметричными относительно вертикальной прямой  $c/a = 1$ .

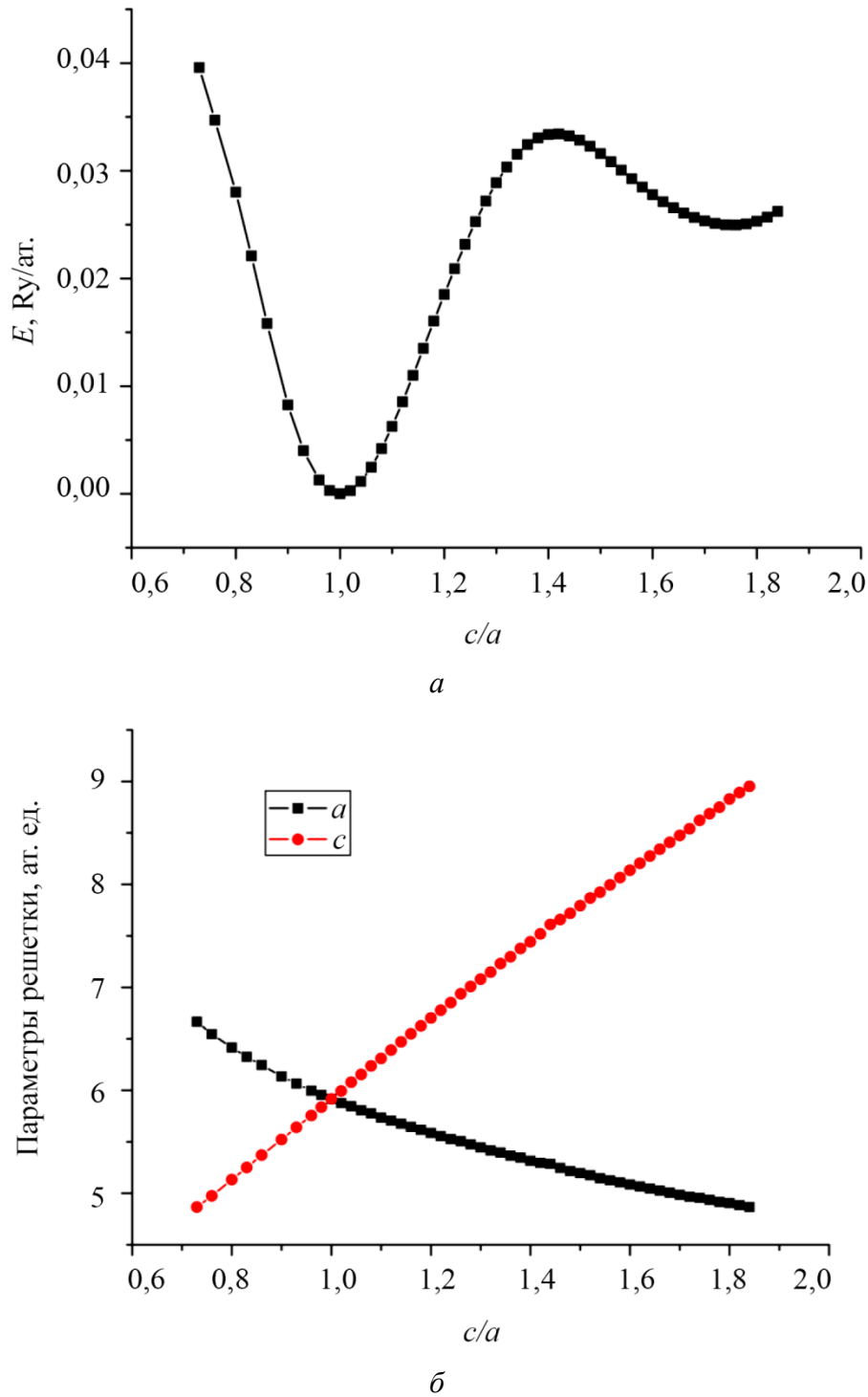


Рис. 1. Изменение полной энергии, приходящейся на атом, и параметров решетки  $a$ ,  $c$  в зависимости от величины бейновской (тетрагональной) деформации  $c/a$  (структуры вдоль БП описываются в системе отсчета ОЦТ-решетки)

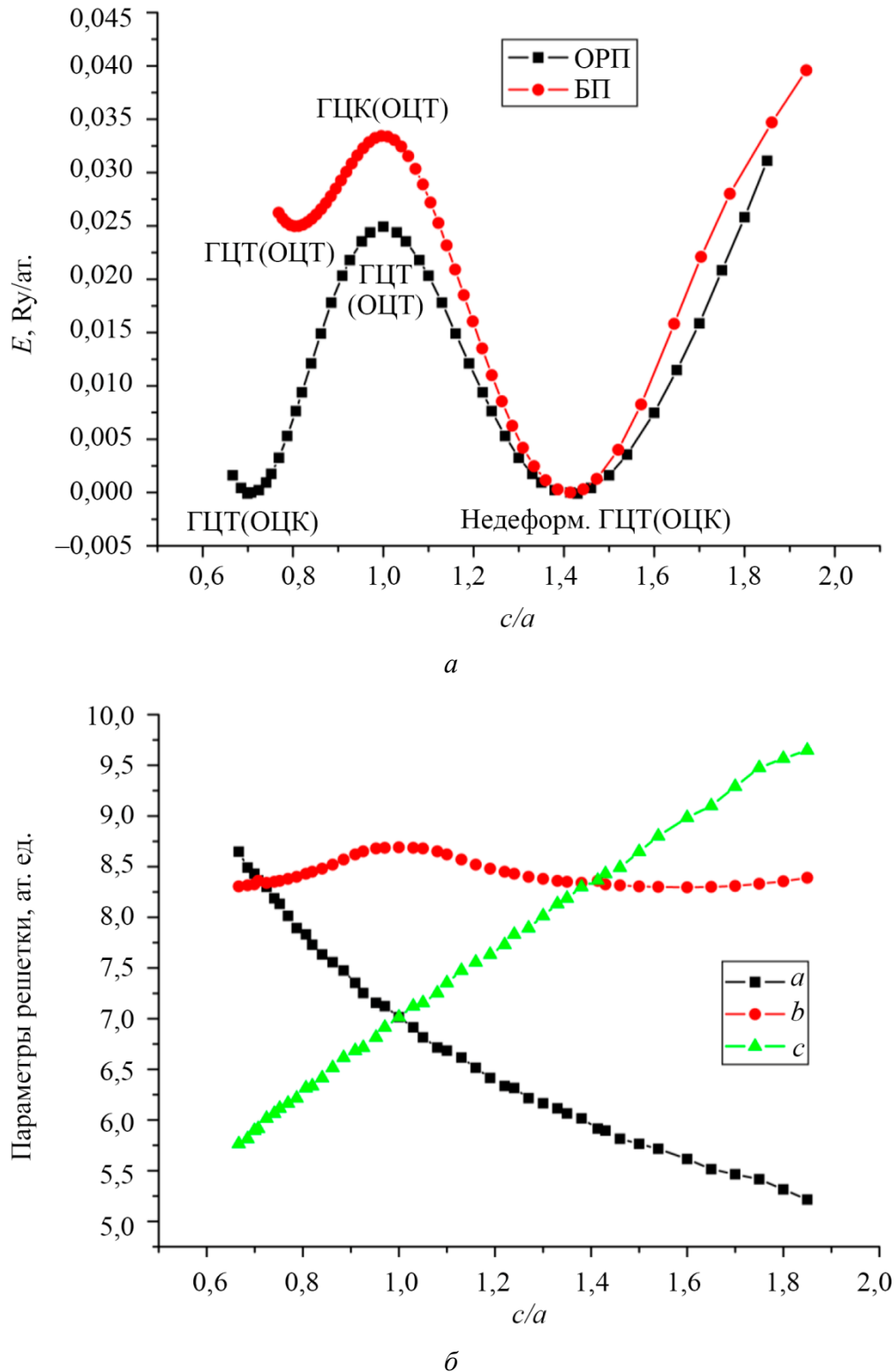
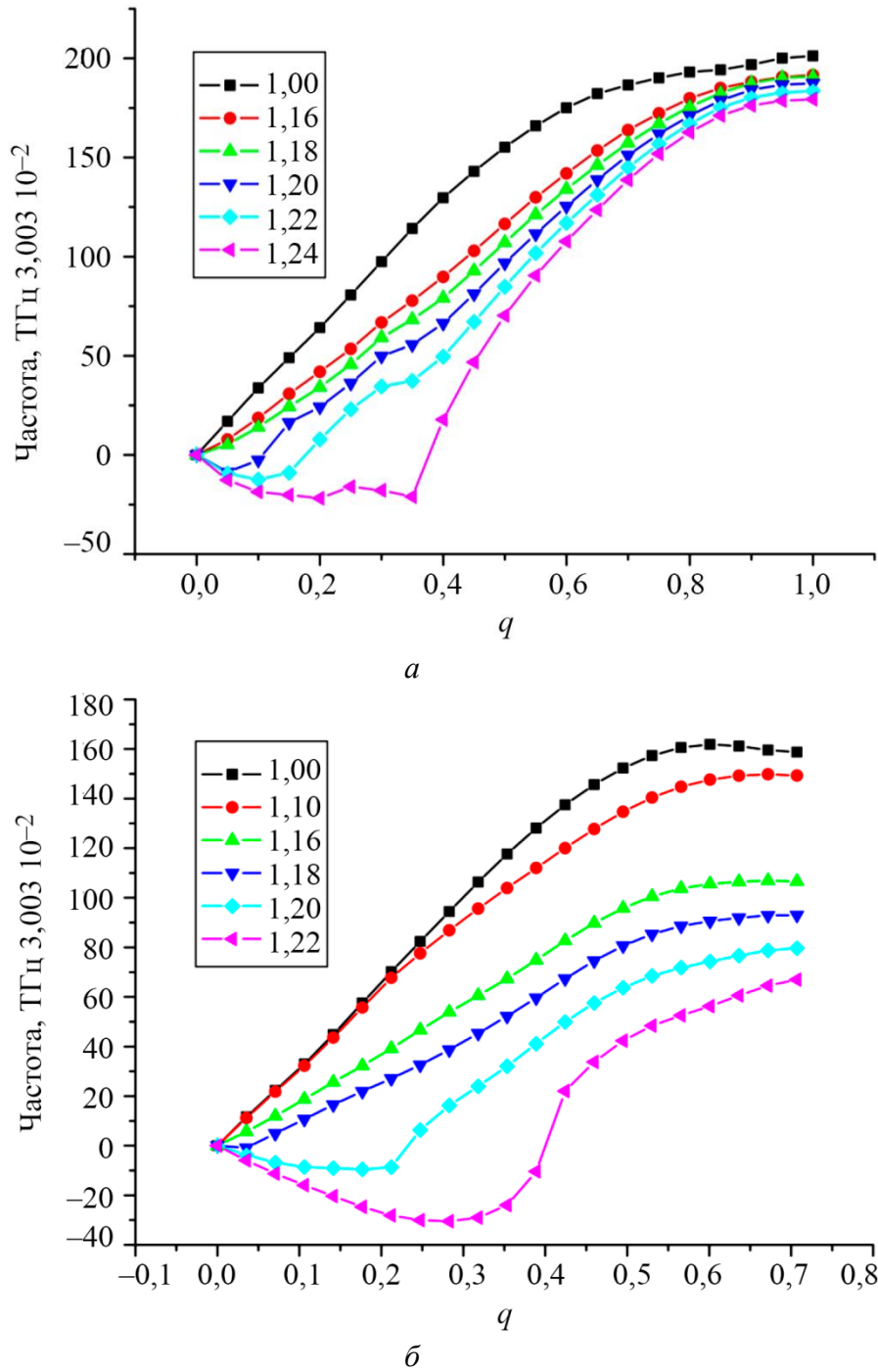


Рис. 2. Бейновский (тетрагональный) и орторомбический пути. Структуры вдоль обоих путей описываются в системе отсчета ГЦТ-решетки, и их названия указаны на графиках зависимости полной энергии (в скобках указаны названия структур в системе отсчета ОЦТ-решетки): зависимость полной энергии для БП и ОРП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



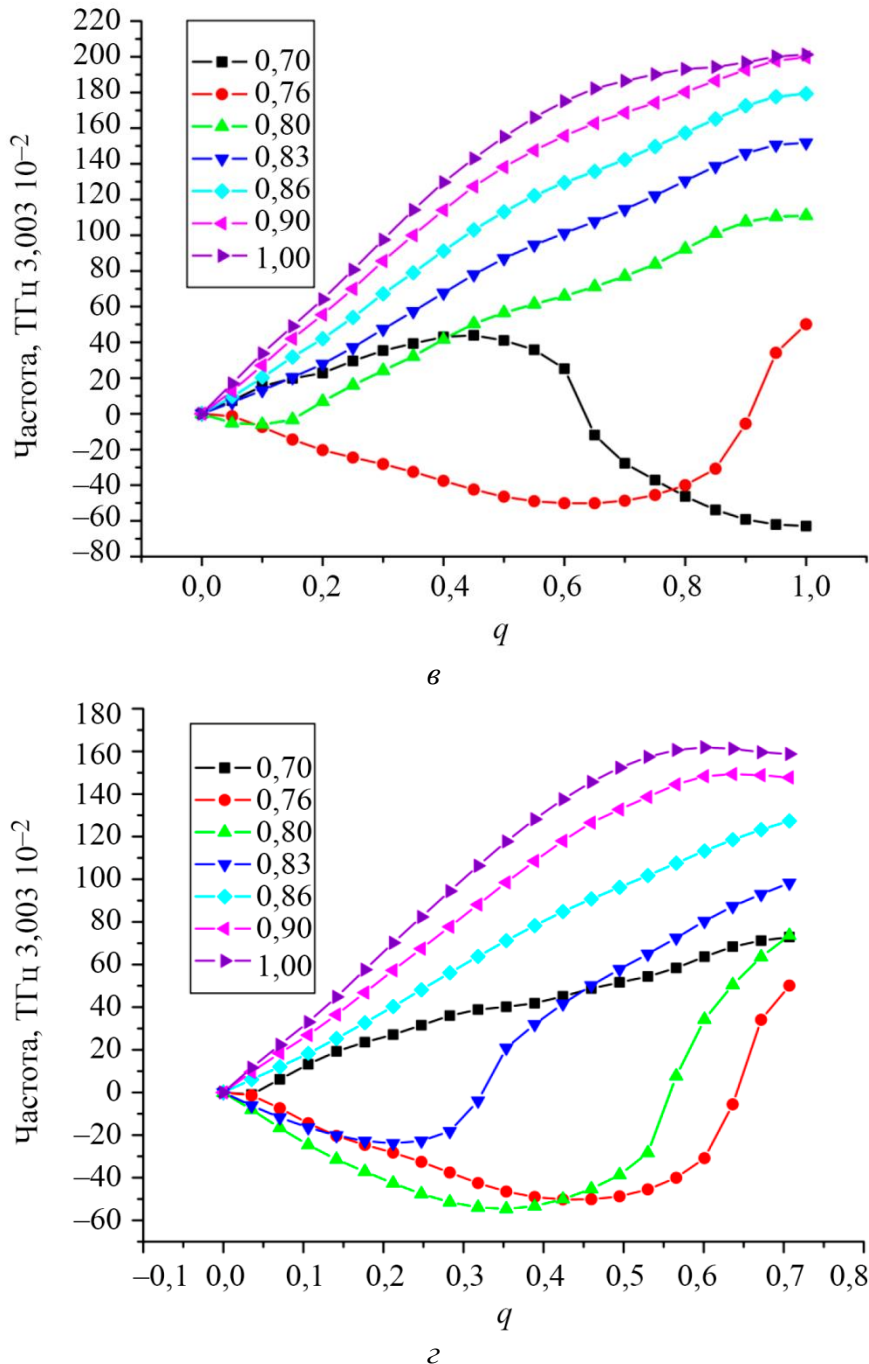


Рис. 3. Фононные частоты для БП (описываются в системе отсчета ОЦТ-решетки, см. рис. 1): вдоль направления  $\langle x00 \rangle$  (а, в); вдоль  $\langle x0x \rangle$  (б, г); указаны величины  $c/a$

На рис. 3 приведены ветви фононного спектра в зависимости от величины  $c/a$  (для одноосной нагрузки растяжения, рис. 3 а, в) вдоль направления волнового вектора  $\langle x00 \rangle$  и вдоль  $\langle x0x \rangle$  (для одноосной нагрузки сжатия, рис. 3 б, г). 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  $c/a = 1,16 \dots 1,18$  (инженерная деформация  $e = 0,16 \dots 0,18$ ) при растяжении (рис. 3 б) и при  $c/a = 0,86 \dots 0,83$  ( $|e| = 0,14 \dots 0,17$ ) при сжатии (рис. 3 г) наблюдается упругая потеря устойчивости структуры. При этом частоты соответствующих фононов становятся мнимыми (на графике отображаются как отрицательные). Полученные результаты для деформации, соответ-

ствующей упругой потере устойчивости структуры при одноосной нагрузке, можно сравнить с аналогичными результатами, полученными методом *ab initio* для аналогичной деформации Nb в работе [8]. В указанной работе упругая потеря устойчивости структуры наблюдалась при  $c/a = 1,06 \dots 1,10$  (инженерная деформация  $e = 0,06 \dots 0,1$ ) при растяжении для ветви  $\langle x00 \rangle$  и при  $c/a = 0,86 \dots 0,80$  ( $|e| = 0,14 \dots 0,2$ ) при сжатии для ветви  $\langle x0x \rangle$ . Видно, что Mo несколько более стабилен, чем Nb при одноосной деформации.

На рис. 3 *в, г* видно, что при увеличении сжатия устойчивость структуры начинает восстанавливаться (практически восстановилась на рис. 3 *г* при  $c/a = 0,70$ ). При этом наблюдается динамическая потеря устойчивости структуры за счет коротковолновых фононов ветви  $\langle x00 \rangle$  (рис. 3 *в*), которая при дальнейшем сжатии может исчезнуть в силу наблюдаемой тенденции. Таким образом, в данном случае при сжатии структура снова становится практически устойчивой. Такое поведение может облегчать на практике псевдоморфную эпитаксию фазы с большой тетрагональной деформацией на субстратах, сохраняющих тетрагональную структуру [3, 23]. Псевдоморфизм возникает, когда эпитаксиальная пленка принимает те же параметры решетки в плоскости, что и подложка, что приводит к кристаллической форме, отличной от той, которую вещество обычно имеет. Существует множество примеров псевдоморфизма.

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

Упругие и фононные аномалии в металлах группы VB (V, Nb, Ta), в основном под давлением, широко обсуждались в связи с электронными свойствами, и было показано, что они связаны со свойствами поверхности Ферми [24, 25]. В частности, мягкая поперечная фононная ветвь вдоль  $[100]$  и необычная мягкость  $c_{44}$ , как было показано в работе [25], может возникать из-за электронного топологического перехода. Важную роль в изменении упругих свойств и стабильности структуры данной группы металлов под давлением играет нестинг поверхности Ферми и близость сингулярности ван Хофа к уровню Ферми в электронной плотности состояний [11, 17, 25]. Следует отметить, что для Mo расстояние между пиком ван Хофа и уровнем Ферми велико, и уровень Ферми расположен в псевдощели, где мало электронных состояний и которая разделяет связывающие и разрыхляющие состояния. Заполнение разрыхляющих состояний приведет к увеличению энергии системы и, следовательно, к ослаблению стабильности связи [11]. Существенное значение может иметь электрон-фононное взаимодействие, которое влияет на многие физические свойства, например, на устойчивость структуры слоистых материалов [26]. В случае одноосной деформации Mo эти вопросы требуют дополнительного изучения.

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. Также результаты могут быть полезны для выявления микроскопических механизмов сверхвысокой технологической пластичности сплавов на основе V и Mo–Re, когда в процессе деформации прокаткой при комнатной температуре достигаются практически неограниченные степени пластической деформации. Носителями такой деформации являются нанобъемы превращений размерами в несколько нанометров с высокими значениями упругой кривизны кристаллической решетки и локальных градиентов внутренних напряжений. Основной или единственной модой деформации такого превращения является однородная деформация растяжения–сжатия типа деформации Бейна [13].

#### 4. Заключение

Методом *ab initio* изучена энергетика бейновского и орторомбического путей структурно-фазовых превращений при одноосной деформации важного переходного ОЦК-металла (Mo). Рассчитан фононный спектр во всей неприводимой зоне Бриллюэна в зависимости от деформации для бейновского пути. Найдены наименее устойчивые ветви фононного спектра и показано, что при  $c/a = 1,06 \dots 1,10$  (инженерная деформация  $e = 0,06 \dots 0,10$ ) при растяжении и при  $c/a = 0,86 \dots 0,83$  ( $|e| = 0,14 \dots 0,17$ ) при сжатии наблюдается упругая потеря устойчивости структуры, что определяет и теоретическую прочность. При этом частоты соответствующих фононов становятся мнимыми. Отмечены наиболее вероятные механизмы (особенности структуры электронной плотности состояний Mo, электрон-фононное взаимодействие), определяющие устойчивость его кристаллической структуры.

#### Благодарность

*Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России для ИФМ УрО РАН. 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  $\alpha$ - $\gamma$  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 (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 (3). – P. 945–986. – DOI: 10.1103/PhysRevB.79.094111.
4. 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 (13). – P. 135501–135504. – DOI: 10.1103/PhysRevLett.91.135501.
5. Calculations of theoretical strength: state of the art and history // J. Pokluda, M. Cerny, P. Sandera, M. Sob // Journal of Computer-Aided Materials Design. – 2004. – Vol. 11. – P. 1–28. – DOI: 10.1007/s10820-004-4567-2.
6. *Ab initio* calculations of mechanical properties: methods and applications / J. Pokluda, M. Cerny, M. Sob, Y. Umeno // Progress in Materials Science. – 2015. – Vol. 73. – P. 127–158. – DOI: 10.1016/j.pmatsci.2015.04001.
7. Kuznetsov A. R., Starikov S. A., Sagaradze V. V. Phonon instabilities in a metal on the bcc–fcc 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](http://dream-journal.org/issues/2022-6/2022-6_385.html)
8. Kuznetsov A. R., Starikov S. A. The Bain and orthorhombic paths of the bcc–fcc transformation in a bcc metal // Diagnostics, Resource and Mechanics of materials and structures. – 2023. – Iss. 6. – P. 35–44. – DOI: 10.17804/2410-9908.2023.6.035-044. – URL: [http://dream-journal.org/issues/2023-6/2023-6\\_423.html](http://dream-journal.org/issues/2023-6/2023-6_423.html)
9. Kuznetsov A. R., Starikov S. A. The Bain and orthorhombic paths of structural-phase transformations in a transition metal (V) // Diagnostics, Resource and Mechanics of materials and structures. – 2024. – Iss. 6. – P. 119–130. – DOI: 10.17804/2410-9908.2024.6.119-130. – URL: [http://dream-journal.org/issues/2024-6/2024-6\\_490.html](http://dream-journal.org/issues/2024-6/2024-6_490.html)
10. Ideal strength of bcc molybdenum and niobium / W. Luo, D. Roundy, M. L. Cohen, J. W. Morris, Jr. // Physical Review B. – 2002. – Vol. 66. – P. 094110. – DOI: 10.1103/PhysRevB.66.094110.

11. Liu Z., Shang J. First principles calculations of electronic properties and mechanical properties of bcc molybdenum and niobium // *Rare Metals*. – 2011. – Vol. 30 (suppl. 1). – P. 354–358. – DOI: 10.1007/s12598-011-0302-9.
12. URL: [arXiv:2406.16634](https://arxiv.org/abs/2406.16634) [cond-mat.mtrl-sci]
13. Пластическая деформация в условиях фазовой нестабильности кристаллической решетки // А. Н. Тюменцев, И. Ю. Литовченко, И. А. Дитенберг, Ю. П. Пинжин, К. В. Гриняев, И. В. Смирнов, В. М. Чернов. – Томск : НТЛ, 2024. – 212 с.
14. Compression curves of transition metals in the Mbar range: experiments and projector augmented-wave calculations / A. Dewaele, M. Torrent, P. Loubeyre, M. Mezouar // *Physical Review B: Condensed Matter*. – 2008. – Vol. 78 (10). – 104102. – DOI: 10.1103/PhysRevB.78.104102.
15. Haas P., Tran F., Blaha P. Calculation of the lattice constant of solids with semilocal functionals // *Physical Review B*. – 2009. – Vol. 79 (8). – 085104. – DOI: 10.1103/physrevb.79.085104.
16. Ming L., Manghnani M. H. Isothermal compression of BCC transition metals to 100 kbar // *Journal of Applied Physics*. – 1978. – Vol. 49. – P. 208–212. – DOI: 10.1063/1.324325.
17. 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 // *Physical Review B*. – 2010. – Vol. 81. – P. 094108–094121. – DOI: 10.1103/PhysRevB.81.094108.
18. 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. – P. 773. – DOI: 10.1088/0305-4608/9/11/008.
19. Dickinson J. M., Armstrong P. E. Temperature dependence of the elastic constants of molybdenum // *Journal of Applied Physics*. – 1967. – Vol. 38. – P. 602–606. – DOI: 10.1063/1.1709381.
20. Bolef D. I., De Klerk J. Elastic constants of single crystal Mo and W between 77° and 500°K // *Journal of Applied Physics*. – 1962. – Vol. 33. – P. 2311–2314. – DOI: 10.1063/1.1728952.
21. Lattice dynamics and thermodynamics of molybdenum from first-principles calculations / Z.-Y. Zeng, C.-E. Hu, L.-C. Cai, X.-R. Chen, and F.-Q. Jing // *The Journal of Physical Chemistry B*. – 2010. – Vol. 114. – P. 298–310. – DOI: 10.1021/jp9073637.
22. Kittel C. *Introduction to Solid State Physics*. – New York : Wiley, 1996. – 674 p.
23. 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.
24. 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. – P. 29. – DOI: 10.3390/computation6020029.
25. 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. – 214101. DOI: 10.1103/PhysRevB.77.214101.
26. Johannes M. D., Mazin I. I. Fermi surface nesting and the origin of Charge Density Waves in metals // *Physical Review B: Condensed Matter*. – 2007. – Vol. 77 (16). – 165135. – DOI: 10.1103/PhysRevB.77.165135.