

Исследование вакансий и их комплексов в металлах с ГЦК-структурой

© Л.Ю. Немирович-Данченко, А.Г. Липницкий, С.Е. Кулькова

Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук, 634021 Томск, Россия

E-mail: ndl@ispms.tsc.ru, kulkova@ispms.tsc.ru

(Поступила в Редакцию 5 сентября 2006 г.)

Методом погруженного атома в квазигармоническом приближении рассчитаны энергии образования вакансий и их комплексов в меди и никеле при нулевых и конечных температурах. Исследована роль температурных эффектов в реализации различных атомных конфигураций собственных точечных дефектов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (гранты № 04-02-39009 ГФЕН_2004а и 04-02-17221а) и в рамках комплексного проекта ИФПМ СО РАН № 3.6.2.3.

PACS: 61.72.Bb, 61.72.Ji, 61.72.Yx

1. Введение

Точечные дефекты и их комплексы оказывают существенное влияние на микроструктуру и ее эволюцию в материалах, подверженных деформациям, гидрированию, радиационному облучению и другим внешним воздействиям. Например, насыщение водородом многих металлов и сплавов приводит к индуцированию в системах аномально большого количества вакансий [1], что отражается на прочности материала в технологических циклах внедрения и извлечения водорода. В связи с повышенным интересом к водородной энергетике и водородонакопительным материалам необходимо иметь информацию о типах дефектных комплексов в конкретных материалах и их влиянии на процесс сорбции-десорбции. Важной характеристикой дефектных комплексов является их атомная конфигурация, которая ответственна за подвижность дефектов. Необходимо также подчеркнуть кинетический фактор, обусловленный процессами образования первичных дефектов и их последующей структурной эволюцией. Кинетика структурных превращений в палладии и его сплавах, как показано в работе [2], не является монотонной, обнаруживаются долговременные изменения их дефектной структуры. Важным фактором в этой связи является энергия связи комплекса, т.е. выигрыш в свободной энергии системы за счет слияния точечных дефектов в комплекс. Роль данного фактора возрастает с увеличением времени эволюции системы, развитие которой происходит в направлении уменьшения свободной энергии.

Основной величиной, контролирующей атомную структуру и размеры комплексов точечных дефектов (КТД), является энергия их образования. В большинстве материалов существует разнообразие точечных дефектов, включая вакансии, примеси внедрения и замещения, а также более протяженные дефекты, такие как дислокации, дисклинации и границы зерен. Поскольку различные КТД присутствуют в материале одновременно, трудности в выделении эффектов от комплекса конкрет-

ного типа делают экспериментальное определение их энергий образования затруднительным и даже проблематичным. Фундаментальные характеристики точечных дефектов и их комплексов получают преимущественно из теоретических расчетов. До настоящего времени расчеты энергии Гиббса КТД сводились к расчету энергии образования при нулевой температуре [3–6]. В то же время такие расчеты игнорируют энтропию тепловых колебаний атомов, которая может существенно влиять на величину энергии Гиббса дефектов при конечных температурах [7].

В настоящей работе на модельных системах, таких как медь и никель, выполнены расчеты энергии образования и связи вакансий и их комплексов при нулевых и конечных температурах.

2. Методика расчета

Расчеты энергии Гиббса, энтальпии, энтропии и энергии связи КТД как функций температуры проводились в квазигармоническом приближении, учитывающем тепловое расширение решетки. Величиной, контролирующей стабильность КТД, является энергия связи комплекса — разница между суммой свободных энергий Гиббса одиночных дефектов, образующих комплекс, и свободной энергией Гиббса комплекса дефектов. Основой для описания термодинамических величин дефектов служит концепция избыточных термодинамических величин. Определим избыточную термодинамическую величину (ΔX), связанную с дефектом соотношением

$$\Delta X = X_{\text{defect}} - (N_{\text{defect}}/N_{\text{bulk}})X_{\text{bulk}}, \quad (1)$$

где N_{defect} и N_{bulk} обозначают число атомов в системе с дефектом и без дефекта соответственно. Избыточная термодинамическая величина на дефекте определяется как разница между термодинамической величиной системы с дефектом и термодинамической величиной того же количества атомов в объеме идеального кристалла. Тогда

избыточная свободная энергия Гиббса дефекта $\Delta G(T)$, или энергия образования дефекта, может быть записана в виде [8]:

$$\Delta G(T) = \Delta H(T) - T\Delta S(T) - k_B T \ln g, \quad (2)$$

где $\Delta H(T)$ и $\Delta S(T)$ (энтальпия и энтропия дефекта соответственно) являются функциями температуры T ; g — геометрический фактор, задающий различные варианты дефектов; k_B — постоянная Больцмана. При нулевой температуре и нулевом давлении свободная энергия дефекта сводится просто к избыточной потенциальной энергии, связанной с дефектом, которая может быть рассчитана методом молекулярной статистики при заданных потенциалах межатомных взаимодействий. Вычисление энтальпии дефекта при конечной температуре осуществляется усреднением полной энергии системы по статистическому ансамблю, микросостояния которого задаются методами Монте-Карло или молекулярной динамики. Для расчета свободной энергии используются более сложные теоретические подходы, основанные на термодинамическом интегрировании. В этом случае необходим предварительный расчет энтальпии как функции температуры [7]. Все методы, использующиеся для подобных расчетов, требуют больших вычислительных затрат, и их применение даже для небольших по размеру КТД, кроме того, ограничено недостаточной точностью расчета энтальпии, поскольку при высоких температурах флуктуации энергии могут превосходить энергию образования дефекта [7]. Существенное упрощение вычислений может быть достигнуто за счет применения квазигармонического приближения [9]. Этот подход позволяет рассчитывать свободную энергию системы, состоящей из нескольких сотен атомов в расчетной ячейке, что достаточно для изучения КТД небольших размеров.

В квазигармоническом приближении полная конфигурационная энергия заменяется квадратичным разложением потенциальной энергии по смещениям атомов около равновесных положений при фиксированном значении постоянной решетки. Ангармонические эффекты включаются через изменение постоянной решетки. При каждом значении параметра решетки система эквивалента суперпозиции гармонических осцилляторов. В гармоническом приближении свободная энергия $F(a, T)$ твердого тела для постоянной решетки a и температуры T задается выражением

$$F(a, T) = E_0(a) + k_B T \sum_{\mathbf{k}, n} \ln \left[2 \operatorname{sh} \left(\frac{\hbar \omega_n(\mathbf{k})}{2k_B T} \right) \right], \quad (3)$$

где $E_0(a)$ — энергия статической решетки, $\omega_n(\mathbf{k})$ — частоты фоннных мод [10]. Уравнение (3) описывает свободную энергию как функцию постоянной решетки. Свободная энергия и объем при нулевом давлении рассчитываются из минимизации выражения (3) относительно постоянной решетки для каждой температуры. Другие термодинамические величины (энтропия, энтальпия) могут быть рассчитаны с помощью аналогичных

сумм по фоннным модам. Более детально метод расчета рассмотрен в работе [11]. Для задания потенциалов межатомных взаимодействий использовался метод погруженного атома [12,13]. В качестве модельных материалов для исследования были выбраны медь и никель, поскольку для них имеются хорошо апробированные потенциалы межатомных взаимодействий [14].

Комплексы вакансий задавались в расчетной ячейке удалением соответствующих атомов из узлов идеальной ГЦК решетки. Размер ячейки был $a(6 \times 6 \times 6)$ с 864 атомами в идеальной структуре. Изучались также ячейки меньшего ($a(5 \times 5 \times 5)$) и большего ($a(8 \times 8 \times 8)$) размеров. Для релаксации атомных конфигураций КТД использовался метод молекулярной динамики с демпфированием скоростей атомов. Релаксация осуществлялась с одновременным изменением объема ячейки и прекращалась, когда сила, действующая на каждый атом, была менее 10^{-4} eV/Å, а давление не превышало 10^{-10} GPa. Для проведения расчетов термодинамических величин в рамках квазигармонического приближения необходимо знать координаты атомов системы при заданной температуре. В этом случае также возможна минимизация свободной энергии по отношению к расположению атомов в ячейке [7]. Однако эта процедура требует расчета третьих производных от потенциальной энергии по смещению атомов, что приведет к большим затратам расчетного времени при использовании метода погруженного атома. Поэтому координаты атомов системы с дефектом мы рассчитывали исходя из предположения, что тепловое расширение материала однородно, т.е. пренебрегали различным коэффициентом теплового расширения идеального кристалла и дефектной области. Координаты атомов вычислялись по следующей схеме: 1) определялся параметр решетки идеального кристалла при заданной температуре в рамках квазигармонического приближения; 2) определялись равновесные положения атомов в системе с дефектом из минимизации полной энергии при нулевой температуре; 3) полученные координаты атомов равномерно изменялись в соответствии с параметром решетки, рассчитанным на первом шаге. Полученная геометрия использовалась для расчета термодинамических величин дефектов согласно определению избыточных термодинамических величин, рассмотренному выше.

3. Геометрия комплексов точечных дефектов

Были рассмотрены вакансии и комплексы вакансий, включающие до четырех точечных дефектов. Схематичное изображение исследованных комплексов точечных дефектов приведено на рис. 1. Кроме моновакансии и дивакансии (рис. 1, *a, b*) была рассмотрена тривакансия в двух возможных атомных конфигурациях (рис. 1, *c, d*). В первом случае все вакансии находятся в одной плоскости, образуя равносторонний треугольник. Вторая

Таблица 1. Энергия образования (E_f), объем и энтропия моновакансии и дивакансии при нулевой температуре. E_b — энергия связи вакансий

Дефект	E_f , eV	S/k	V_f/V_0	E_b , eV
Медь				
Моновакансия				
Настоящий расчет	1.27	1.36	0.70	
Другие расчеты	1.09 [8], 1.11 [16], 1.13 [17], 1.21 [5], 1.26, 1.27 [14], 1.29 [18], 1.32 [19], 1.33 [20], 1.41 [21]	1.245 1.404 [14]	0.75 [16] 0.74, 0.70 [14] 0.80 [5]	
Эксперимент	1.03 [22], 1.15 [23], 1.3 [24], 1.17–1.29 [25], 1.28 [26]	2.35 [26]	0.75–0.85 [25]	
Дивакансия				
Настоящий расчет	2.39	2.63	1.38	0.15
Другие расчеты	2.25 [5], 2.79 [27]		1.63 [5]	0.15 [27] 0.16 [5]
Эксперимент	2.15 [23]	7.4 [22]		
Никель				
Моновакансия				
Настоящий расчет	1.59	1.95	0.82	
Другие расчеты	1.51 [16], 1.63 [19], 1.67 [28], 1.77 [17], 1.76 [21]		0.86 [16]	
Эксперимент	1.6 [29], 1.78 [30], 1.79 [24]		0.97 [31]	
Дивакансия				
Настоящий расчет	2.99	3.97	1.59	0.19
Другие расчеты	3.47 [27]			0.21 [27]

конфигурация получается в результате смещения атома из узла, образующего правильный тетраэдр вместе с тремя вакантными узлами, в центр этого тетраэдра. Этот атом показан маленьким темным кружком в исходном и конечном положении на рис. 1, *c, d* соответственно. Эта конфигурация, представляющая собой три вакансии, „размазанные“ по четырем кристаллическим узлам, является тетраэдром дефектов упаковки минимального размера. Впервые данная конфигурация была описана в работе [15]. Были рассмотрены три варианта ком-

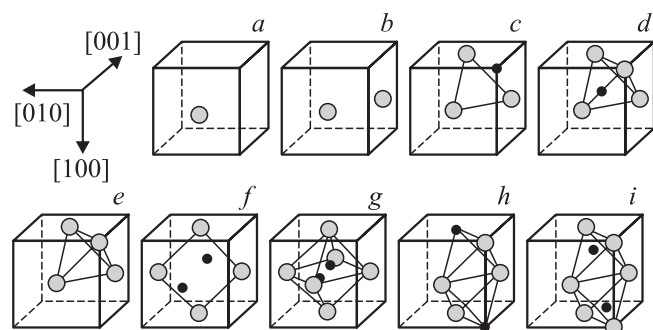


Рис. 1. Исследованные точечные дефекты и КТД: моновакансия (*a*), дивакансия (*b*), три вакансии в плоской (*c*) и тетраэдрической (*d*) атомных конфигурациях, четыре вакансии, образующие тетраэдрическую микропору (*e*), четыре вакансии в конфигурации квадрата до (*f*) и после релаксации (*g*) и алмаза до (*h*) и после релаксации (*i*).

плексов из четырех вакансий (тетравакансия). Первый вариант сводится к удалению атома из центра тетраэдра (рис. 1, *e*), в котором комплекс из четырех вакансий образует микропору. Следующей является конфигурация, у которой четыре вакансии находятся в углах квадрата. Два маленьких темных атома (рис. 1, *f*) релаксируют к центру квадрата так, что расстояние между ними становится $\sim a/\sqrt{2}$. Релаксируя, эти атомы оставляют за собой две вакансии, в результате чего конечная конфигурация состоит из шести вакансий по углам октаэдра вокруг смещенных атомов (рис. 1, *g*). Последняя конфигурация — тетравакансия алмазного типа (рис. 1, *h*). Конфигурация включает в себя два равносторонних треугольника, составленных из вакансий с одной общей стороной. В этом случае возможно смещение атомов, подобное рассмотренному выше для тривакансии. После релаксации атомы стремятся занять место в центре тетраэдра и начинают сильнее взаимодействовать друг с другом (рис. 1, *i*).

4. Результаты и обсуждение

Прежде всего обсудим результаты для комплексов вакансий, полученные при нулевой температуре. Результаты расчета моновакансии и дивакансии в меди и никеле представлены в табл. 1. Медь является наиболее изученным материалом. Образование моновакансий в меди изучалось как в рамках полуэмпирических [5,8,14,16,28],

так и *ab initio* методик [17–21]. Как видно из табл. 1, наши результаты находятся в хорошем согласии с результатами других теоретических расчетов и экспериментальными данными. В целом разброс в теоретических значениях лежит в тех же пределах, что и в эксперименте. Энергия образования моновакансии больше в никеле, чем в меди. Как следует из эксперимента [24] и теоретических расчетов [20], выполненных в рамках полнопотенциального линейного метода МТ-орбиталей (ПП ЛМТО), наблюдается увеличение энергии образования одиночных вакансий в переходных металлах при уменьшении числа *d*-электронов. Отметим, что наши оценки, проведенные в рамках полнопотенциального метода присоединенных плоских волн (ПП ЛППВ) с использованием обобщенного градиентного приближения (GGA) для ячейки с 32 атомами с учетом полной релаксации положений атомов и объема, показали, что энергия образования вакансий в меди равна 1.14 eV, что несколько меньше, чем значение, полученное по описанной выше методике, а также на 0.2 eV ниже значения из [20], полученного методом ПП ЛМТО. Следует отметить, что в работе [20] не проводилось структурной релаксации атомов вблизи вакансий, и объем решетки с дефектом был таким же, как для идеальной решетки. Кроме того, в работе [20] использовалось приближение локальной плотности для обменно-корреляционного потенциала. Значительно меньше расчетов было выполнено для дивакансий [5]. Величина энергии образования дивакансий корректно согласуется с результатом работы [5], в которой использовались методы молекулярной динамики и Монте-Карло. Большее отличие наблюдается по изменению объема образования дефекта (табл. 1). Энергия взаимодействия вакансий (E_b) лишь на 0.01 eV меньше, чем в [5]. Энергия образования дивакансий несколько больше экспериментального значения, равного 2.15 eV [23]. Следует отметить, что эксперимент дается только для моновакансий или моновакансий совместно с дивакансиями. Результаты расчета энергии образования моновакансии в никеле также удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными. Энергия связи вакансий в никеле лишь незначительно больше, чем в меди. В литературе предполагается [32], что именно тетраэдрическая конфигурация тривакансии, являясь практически неподвижной, может служить первичным зародышем роста пор в материале. Зародыш увеличивается за счет присоединения четвертой вакансии. Считается, что непосредственное объединение в пору большого количества избыточных вакансий не реализуется из-за экспоненциального уменьшения вероятности встречи большого числа вакансий. С другой стороны, тривакансия в плоской конфигурации обладает малой энергией миграции [32] и способна быстро уходить в стоки при высоких температурах. Отсюда большой интерес представляет понимание физической природы реализации той или другой конфигурации дефектов. В табл. 2 представлены значения энергий образования КТД, состоящих из трех или четырех вакансий,

Таблица 2. Энергия образования, объем, энтропия и энергия связи комплексов из трех и четырех вакансий при нулевой температуре

Дефект	E_f , eV	S/k	V/V_0	E_b , eV
Медь				
Тривакансия, плоскость	3.38	3.77	2.08	0.44
Тривакансия, тетраэдр	3.41	6.32	1.58	0.40
Тетравакансия, тетраэдр	4.22	3.96	3.05	0.87
Тетравакансия, квадрат	4.35	4.84	2.46	0.73
Тетравакансия, алмаз	4.4	5.74	2.69	0.69
Никель				
Тривакансия, тетраэдр	3.96	9.17	1.94	0.82
Тетравакансия, тетраэдр	5.52	6.06	3.36	0.85
Тетравакансия, квадрат	5.34	11.45	2.70	1.03
Тетравакансия, алмаз	4.93	11.89	2.46	1.43

геометрия которых была обсуждена выше. Обсуждение результатов расчетов проведем по группам комплексов одинакового размера. Настоящий расчет предсказывает энергетическую выгодность тривакансии в плоской конфигурации в меди, хотя разница в энергиях по сравнению с тетраэдрической конфигурацией достаточно мала (~ 0.03 eV). Самые ранние расчеты [15] предсказывали стабильность тривакансии в виде тетраэдра, тогда как плоская конфигурация была найдена стабильной в более поздних расчетах [32]. Заметим, что в никеле более стабильной при нулевой температуре оказывается тетраэдрическая конфигурация тривакансии. Среди рассмотренных комплексов из четырех вакансий в меди наиболее стабильным является комплекс с образованием тетраэдрической конфигурации, или микропоры (табл. 2). В никеле энергетически выгодней образование комплекса из четырех вакансий в виде алмаза (рис. 1, *h*). В этом случае энергия образования данной конфигурации вакансий по сравнению с тетраэдрической конфигурацией ниже на 0.59 eV. Отметим, что в меди разница между энергиями данных конфигураций составляет 0.18 eV. Кроме того, энергия образования квадратного комплекса вакансий в меди лишь незначительно отличается от энергии КТД в виде алмаза (~ 0.05 eV).

Температурные зависимости энергий образования и связи КТД в меди и никеле приведены на рис. 2 и 3 соответственно. На данных рисунках не представлены зависимости энергии образования от температуры для моно- и дивакансий, поскольку наблюдается их незначительное изменение с температурой как в никеле, так и в меди, что согласуется с результатами работы [28]. Например, энергия образования моновакансии в меди при температуре 800 К равна 1.177 eV (1.181 eV [28]). В работе [28] в интервале температур от 0 до 1000 К энергия образования моновакансии в меди изменяется от 1.25 до 1.15 eV. Рассчитанные значения термодинамических величин, таких как энтальпия и энтропия, также хорошо согласуются с результатами работы [28]. Сопоставление

с результатами для никеля, полученными с изменением температуры в той же работе [28], также обнаруживает удовлетворительное согласие. Энергия образования моновакансии в никеле при $T = 800$ К равна 1.467 eV (1.503 eV [28]). Значения энтальпии и энтропии образования дивакансии в меди, приведенные в работе [8], равны 2.33 и 2.84 eV, что удовлетворительно согласуется с нашими результатами 2.38 и 2.63 eV соответственно. К сожалению, температурные данные для комплексов вакансий мы не можем сопоставить с результатами других авторов вследствие их отсутствия. С повышением температуры выше 150 К тетраэдрическая конфигурация тривакансии становится более стабильной по сравнению

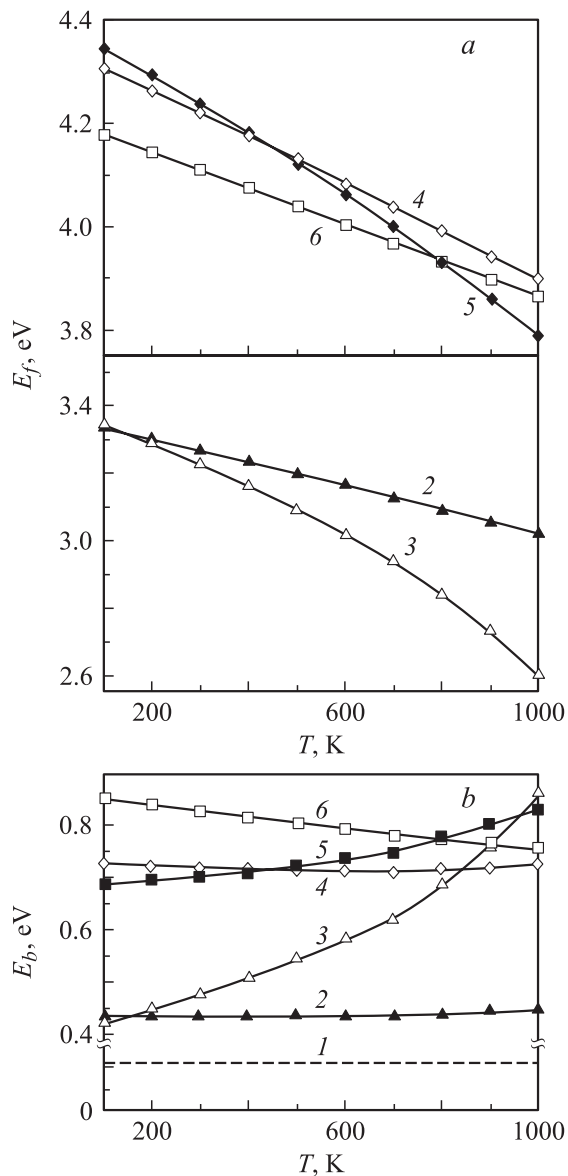


Рис. 2. Энергии образования (a) и связи (b) комплексов вакансий как функции температуры в меди. 1 — дивакансия, 2 — плоская тривакансия, 3 — тривакансия в виде тетраэдра, 4 — тетравакансия в виде алмаза, 5 — тетравакансия в виде квадрата, 6 — тетравакансия в виде тетраэдра.

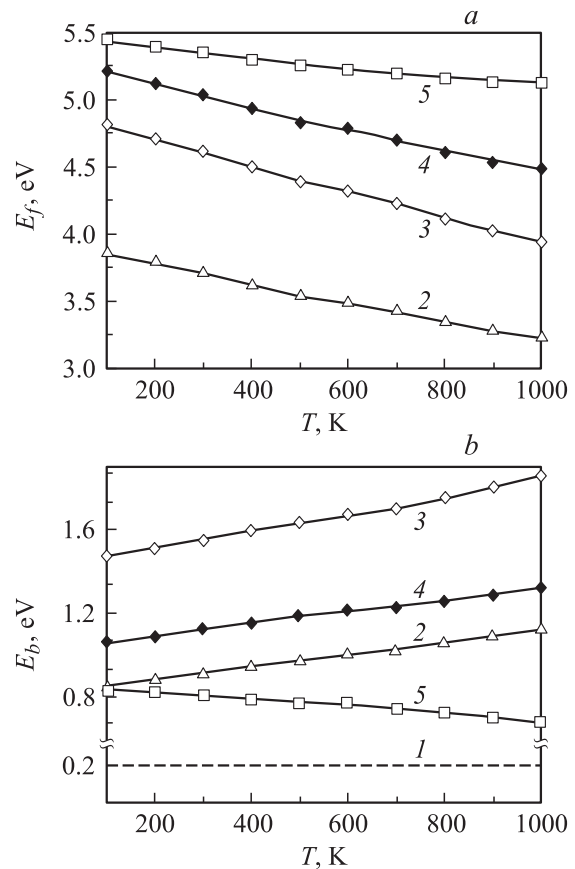


Рис. 3. Энергии образования (a) и энергии связи (b) комплексов вакансий как функции температуры в никеле. 1 — дивакансия, 2 — тривакансия в виде тетраэдра, 3 — тетравакансия в виде алмаза, 4 — тетравакансия в виде квадрата, 5 — тетравакансия в виде тетраэдра.

с плоской конфигурацией (рис. 2). Из рис. 2 видно, что энергия связи тривакансии в тетраэдрической конфигурации быстро увеличивается с ростом температуры, тогда как энергия образования понижается. При температуре 800 К эта разница составляет 0.26 eV.

На рис. 4 представлены результаты расчетов вкладов тепловых колебаний атомов в энтропию образования двух конфигураций комплексов из трех вакансий в меди. Энтропия тривакансии в тетраэдрической конфигурации существенно превышает энтропию плоской конфигурации и увеличивается с ростом температуры. Это также объясняет значительную температурную зависимость энергии связи тривакансии в данной конфигурации, поскольку энтальпия образования КТД практически не меняется с температурой [11]. Относительно высокие значения энтропии тривакансии обусловлены особенностями ее атомной конфигурации. Атом в центре тетраэдра, составленного из вакантных узлов (рис. 1, d), слабо взаимодействует с атомами остальной решетки, что обуславливает низкие частоты его тепловых колебаний и большой вклад в избыточную энтропию тривакансии в тетраэдрической конфигурации. Энтропия тепловых

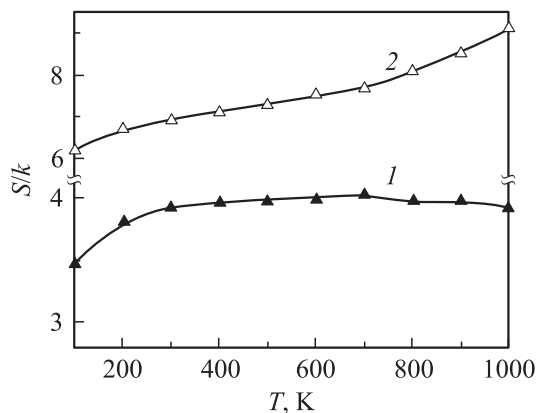


Рис. 4. Энтропия комплексов вакансий как функция температуры в меди. 1 — плоская тривакансия, 2 — тетраэдрическая тривакансия.

колебаний тем больше, чем больше плотность колебательных состояний при низких частотах. В результате теплового расширения решетки взаимодействие атома в тетраэдре с остальными атомами ослабевает, что приводит к еще большему увеличению энтропии тривакансии. Ввиду небольшой величины потенциального барьера между тетраэдрической и плоской конфигурациями тривакансии (0.024 eV при 0 K) с повышением температуры атом в центре тетраэдра будет находиться в более пологом эффективном потенциале, чем параболический потенциал квазигармонического приближения. Отметим также, что те же самые тенденции, отмеченные выше для меди, с возрастанием температуры обнаруживаются при образовании дивакансии в никеле. Понижение энергии образования тривакансии с температурой также существенно выражено в никеле (рис. 3, а). Как отмечалось выше, в меди минимальной энергией образования в группе тетравакансий обладает конфигурация в виде тетраэдра, или микропора, в то же время с повышением температуры более стабильной становится конфигурация в виде квадрата. Энергии двух типов комплексов вакансий (квадрат и алмаз) различаются незначительно в интервале температур до 600 K, так что другие факторы, в том числе примеси, могут существенно повлиять на стабильность тетравакансий в меди. Отметим также, что полученные результаты показывают, что добавление четвертой вакансии с образованием микропоры энергетически выгодно только ниже критической температуры порядка 900 K, при которой энергия связи тривакансии в тетраэдрической конфигурации совпадает с энергией связи микропоры. Этот вывод качественно согласуется с результатами исследований высокотемпературной коагуляции избыточных вакансий в ГЦК-металлах [33,34].

В никеле в группе комплексов из четырех вакансий наименьшей энергией образования обладает комплекс вакансий в виде алмаза. Эта термодинамическая выгода сохраняется при всех рассмотренных температурах и увеличивается с ростом температуры. Нами

была получена слабая температурная зависимость энтропии всех конфигураций из четырех вакансий (за исключением структуры алмаза), что свидетельствует об отсутствии в них особенностей атомного строения, присущих структуре тривакансии. Интересно отметить, что в никеле наблюдается рост энтропийного вклада в интервале температур 100–600 K и последующая его стабилизация для всех изученных комплексов из четырех вакансий. Как видно из рис. 3, б, энергия связи комплексов вакансий в никеле (кроме конфигурации микропоры) увеличивается с ростом температуры. Образование тетраэдрической конфигурации тривакансии становится более выгодным с повышением температуры.

5. Заключение

Проведены расчеты термодинамических характеристик одиночных вакансий и их комплексов в рамках квазигармонического приближения с использованием межатомных потенциалов, построенных методом погруженного атома. Полученные значения энергий и объемов образования изученных дефектов при нулевой температуре находятся в удовлетворительном согласии с результатами других теоретических расчетов и экспериментальными данными. Проведен расчет термодинамических характеристик КТД при конечных температурах. Показано, что решающим фактором стабилизации тетраэдрической конфигурации тривакансии в меди является энтропия, связанная с тепловыми колебаниями атомов. Энтропия образования тетраэдрической конфигурации тривакансии в меди значительно больше энтропии образования ее плоской конфигурации, и с ростом температуры это различие возрастает. В то же время образование комплекса из четырех вакансий, образующих микропору, термодинамически более выгодно в меди лишь до критической температуры порядка 900 K, после чего возможна коагуляция избыточных вакансий. Энергии образования комплексов из четырех вакансий в меди различаются не столь существенно во всем интервале температур. В никеле энергия связи вакансий в тетравакансии в виде алмаза значительно выше по сравнению с исследованными комплексами вакансий во всем интервале температур.

Список литературы

- [1] В.М. Авдюхина, А.А. Анищенко, А.А. Кацнельсон, Г.П. Ревкевич. Перспективные материалы **4**, 5 (2002).
- [2] В.М. Авдюхина, А.А. Кацнельсон, Г.П. Ревкевич. Кристаллография **44**, 49 (1999).
- [3] P. Zhao, Y. Shimomura. Comp. Mater. Sci. **14**, 84 (1999).
- [4] N. Tajima, O. Takai, Y. Kogure, M. Doyama. Comp. Mater. Sci. **14**, 152 (1999).
- [5] H. Deng, D.J. Bacon. Phys. Rev. B **48**, 10022 (1993).
- [6] K.J. Morishita. Nucl. Mater. **283–287**, 753 (2000).
- [7] S.M. Foiles. Phys. Rev. B **49**, 14930 (1994).
- [8] N. Sandberg, G. Grimvall. Phys. Rev. B **63**, 184109 (2001).

- [9] К.А. Путилов. Термодинамика. Наука, М. (1971). 375 с.
- [10] Н. Ашкрофт, Н. Мермин. Физика твердого тела. Т. 2. Мир, М. (1979). 424 с.
- [11] А.Г. Липницкий, С.Д. Борисова, И.П. Чернов, Л.Ю. Загорская. Физ. мезомех. **6**, 93 (2003).
- [12] M.S. Daw, M.I. Baskes. Phys. Rev. Lett. **50**, 1285 (1983).
- [13] M.S. Daw, M.I. Baskes. Phys. Rev. B **29**, 6443 (1984).
- [14] Y. Mishin. Phys. Rev. B **63**, 224 106 (2001).
- [15] A.C. Damask, G.J. Dienes, V.G. Weizer. Phys. Rev. **113**, 781 (1959).
- [16] J.-E. Kluin. Phil. Mag. A **65**, 1263 (1992).
- [17] T. Hoshino, N. Papanikolaou, R. Zeller et al. Comp. Mater. Sci. **14**, 56 (1999).
- [18] B.-J. Lee, J.-H. Shim, M.I. Baskes. Phys. Rev. B **68**, 144 112 (2003).
- [19] С.В. Еремеев, А.Г. Липницкий, А.И. Потекаев, Е.В. Чулков. Изв. вузов. Физика **3**, 62 (1997).
- [20] T. Korhonen, M.J. Puska, R.M. Nieminen. Phys. Rev. B **51**, 9526 (1995).
- [21] H.M. Polatoglou, M. Methfesseel, M. Scheffler. Phys. Rev. B **48**, 1877 (1993).
- [22] B. Drittler, M. Weinert, R. Zeller, P.H. Dederichs. Solid State Commun. **79**, 31 (1991).
- [23] G.J. Ackland, G. Tichy, V. Vitek, M.W. Finnis. Phil. Mag. A **56**, 735 (1987).
- [24] P. Ehrhart, P. Jung, H. Schultz, H. Ullmaier. Landolt-Börnstein. New Series. Group III. Springer, Berlin (1991).
- [25] R.W. Balluffi. J. Nucl. Mater. **69–70**, 240 (1978).
- [26] W. Schule. Z. Metallkd. **89**, 672 (1998).
- [27] С.В. Еремеев, А.Г. Липницкий, А.И. Потекаев, Е.В. Чулков. Изв. вузов. Физика **6**, 83 (1997).
- [28] L. Zhao, R. Najafabadi, D.J. Srolovitz. Modelling. Simul. Mater. Sci. Eng. **1**, 539 (1993).
- [29] W. Wycisk, M. Feller-Kniepmeier. J. Nucl. Mater. **69–70**, 616 (1978).
- [30] O. Bender, P. Ehrhart. Point defects and defect interactions in metals. North-Holland, Amsterdam (1982). P. 639.
- [31] H.-E. Schaefer. Phys. Stat. Sol. (a) **102**, 47 (1987).
- [32] И.М. Новиков. Дефекты кристаллического строения металлов. Металлургия, М. (1983). 232 с.
- [33] Yu.N. Osetsky, D.J. Bacon. Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B **202**, 31 (2003).
- [34] Yu.N. Osetsky, D.J. Bacon. Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B **180**, 85 (2001).