

# САМОДИФФУЗИЯ В ЖИДКИХ И ТВЕРДЫХ СПЛАВАХ СИСТЕМЫ Ti–Al: МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

*Г. М. Полемаев\**

*Алтайский государственный технический университет им. И. И. Ползунова  
656038, Барнаул, Россия*

Поступила в редакцию 4 мая 2021 г.,

после переработки 4 мая 2021 г.

Принята к публикации 14 мая 2021 г.

С помощью метода молекулярной динамики проведено исследование самодиффузии в жидких и твердых сплавах системы Ti–Al, включая чистые металлы Ti и Al. Помимо интерметаллидов  $Ti_3Al$ ,  $TiAl$ ,  $TiAl_3$ , рассматривались разупорядоченные сплавы с аналогичным соотношением компонентов. Для рассмотренных систем получены характеристики самодиффузии отдельно для атомов Ti и Al. Согласно полученным данным, как в жидких, так и в твердых сплавах системы Ti–Al энергия активации диффузии существенно зависит от концентрации компонентов, приблизительно повторяя фазовую диаграмму. При этом для разупорядоченных сплавов энергия активации оказалась почти в полтора раза меньше, чем для упорядоченных. При изучении самодиффузии в расплавах и в твердых разупорядоченных сплавах не было замечено существенного различия диффузионной подвижности атомов разного сорта. Однако в случае упорядоченных сплавов, особенно интерметаллидов  $Ti_3Al$  и  $TiAl$ , это различие было ярко выражено: атомы Al диффундировали значительно медленнее атомов Ti. В интерметаллиде  $TiAl_3$  диффузия имеет анизотропный характер: основные перемещения атомов происходили вдоль атомных плоскостей с чередующимися атомами Ti и Al в сверхструктурной упаковке  $D0_{22}$ .

DOI: 10.31857/S0044451021100096

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Интерметаллические соединения системы Ti–Al и сплавы на их основе, благодаря сочетанию таких свойств, как низкая плотность, высокий предел текучести при повышенных температурах, хорошая стойкость к окислению и коррозии, имеют высокий потенциал применения в качестве высокотемпературных конструкционных материалов, в частности, для аэрокосмической и автомобильной отраслей [1–5]. Основой технологии получения интерметаллидов и сплавов является диффузия, процесс которой в подобных системах имеет сложный и многофакторный характер. В диффузионной зоне на границе Ti и Al, например в процессе высокотемпературного синтеза, могут присутствовать одновременно как твердые упорядоченные и разупорядоченные

фазы, так и жидкие смеси с различным содержанием компонентов [6–9]. При этом диффузионные характеристики, такие как, например, энергия активации диффузии, значительно различаются не только в указанных фазах, но зависят и от концентрации компонентов в простой смеси [8–11]. Знание характеристик и механизмов диффузии отдельно в разных фазах системы Ti–Al необходимо для более детального понимания процессов, происходящих при высокотемпературном синтезе, а также имеет большое значение для всей области исследования и создания сплавов Ti–Al.

К настоящему времени накоплены экспериментальные данные о самодиффузии атомов Al и Ti преимущественно в интерметаллидах  $TiAl$  и  $Ti_3Al$  [11–13]. При этом остается слабоизученной самодиффузия в разупорядоченных сплавах (ввиду их очень высокой тенденции к упорядочению), в интерметаллиде  $TiAl_3$ , в соответствующих расплавах. Последнее обусловлено рядом сложностей, связанных с проведением подобных исследований: высокая температура, химическая реакционная способность,

\* E-mail: gmpoletaev@mail.ru

кристаллизация, вызванная стенками контейнера, отсутствие подходящих изотопов в случае Al [14–16].

Иной концептуальный подход к созданию баз данных о транспортных и термодинамических свойствах сплавов может быть основан на моделировании методом молекулярной динамики. Такой подход полностью лишен ограничений, присущих экспериментальным исследованиям. В отличие от эксперимента, молекулярно-динамическое моделирование напрямую позволяет изучать состав и температурные зависимости соотношений между различными транспортными и термодинамическими свойствами сплавов.

Целью настоящей работы являлось получение с помощью метода молекулярной динамики характеристик самодиффузии для жидких и твердых сплавов системы Ti–Al. Рассматривались упорядоченные и разупорядоченные сплавы с составом  $Ti_{75}Al_{25}$ ,  $Ti_{50}Al_{50}$ ,  $Ti_{25}Al_{75}$ , а также чистые металлы Ti и Al.

## 2. ОПИСАНИЕ МОДЕЛИ

Для описания межатомных взаимодействий в системе Ti–Al использовались потенциалы модели погруженного атома (embedded atom model, EAM) из работы [17], где они были получены на основе сопоставления с результатами экспериментов и с данными расчетов методом *ab initio* для различных свойств и структур металлов Ti, Al и интерметаллидов  $Ti_3Al$  и  $TiAl$ . Они хорошо зарекомендовали себя при проведении различных исследований и прошли успешную апробацию по широкому спектру механических и структурно-энергетических свойств сплавов системы Ti–Al [17–19].

Расчетные ячейки содержали от 30 до 50 тысяч атомов и имели вид прямоугольных параллелепипедов (рис. 1). По всем осям использовались периодические граничные условия. В случае моделирования диффузии в жидких металлах вдоль одной из осей дополнительно создавалось свободное пространство (сверху и снизу на рис. 1а) для того, чтобы расплав мог свободно менять объем при изменении температуры и первоначальном плавлении исходного кристалла. Структура расплава в модели создавалась путем задания температуры расчетной ячейки выше температуры плавления и выдерживания в течение времени, достаточного для полного плавления всей ячейки. Коэффициент диффузии в этом случае определялся по смещению атомов только в затемненной зоне на рис. 1а, чтобы исключить влияние свободной поверхности.

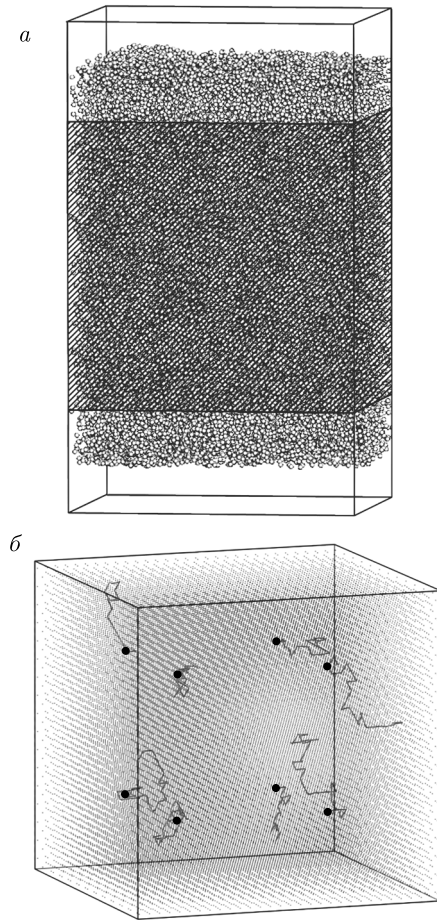


Рис. 1. Модели для исследования самодиффузии: а — в расплаве (диффузия оценивалась по смещению атомов в затемненной области); б — в кристалле (жирными точками показаны начальные позиции восьми вакансий и примеры смещений атомов в результате самодиффузии)

В случае моделирования твердых сплавов при задании той или иной температуры учитывалось тепловое расширение на основе данных из работы [17]. Температура в модели задавалась через начальные скорости атомов согласно распределению Максвелла. Для сохранения температуры постоянной в процессе моделирования использовался термостат Нозе–Гувера [20, 21].

Диффузия в кристаллах в условиях термодинамического равновесия, как известно, осуществляется преимущественно по вакансионному механизму. Существуют, конечно, сравнительно более «подвижные» дефекты, например межузельные атомы, бивакансии. Но их равновесная концентрация значительно ниже концентрации вакансий, и их вклад на фоне вклада вакансионного механизма очень мал [22]. Энергия активации вакансионной диффузии складывается из энергии образования вакансии,  $E_v^f$ ,

и энергии активации ее миграции,  $E_v^m$ . Обе эти энергии в методе молекулярной динамики, как правило, определяют отдельно. При этом для нахождения энергии миграции используют два метода, которые условно можно назвать статическим и кинематическим [22]. Статическим методом, при знании траектории миграции дефекта, определяется величина энергетического барьера на пути миграции. Этот метод обладает более высокой точностью, но имеет и два недостатка: невозможность получения другой важной диффузионной характеристики — предэкспоненциального множителя  $D_0$  в соответствующем уравнении Аррениуса, а также необходимость рассмотрения и сложность учета отдельного вклада всех возможных вариантов миграции рассматриваемого дефекта (особенно в многокомпонентных системах с низкосимметричной структурой).

Другой метод, кинематический, менее точен, чем статический, но позволяет определить эффективные значения энергии миграции и предэкспоненциального множителя. Он заключается в нахождении зависимости коэффициента диффузии от температуры,  $D'(T)$ , при введении в расчетную ячейку заданного количества дефектов рассматриваемого типа. Вероятность диффузионного акта в моделируемом объеме кристалла в этом случае существенно выше, чем в условиях термодинамического равновесия. Для пересчета коэффициента диффузии для условия равновесия используют данные по энергии образования вакансий.

Для нахождения диффузионных характеристик в настоящей работе использовался кинематический метод. При изучении диффузии в твердых металлах и сплавах в расчетные ячейки изначально вводились восемь вакансий с учетом стехиометрического соотношения компонентов (рис. 1б). В случае моделирования диффузии в жидкой фазе во введении дополнительных дефектов необходимости не было. В этом случае также не нужно было делать пересчет коэффициентов диффузии для равновесной концентрации, как для твердых сплавов.

Коэффициент самодиффузии рассчитывался с помощью соотношения Эйнштейна

$$D = \frac{\langle \Delta r^2 \rangle}{6t}, \quad (1)$$

где  $\langle \Delta r^2 \rangle$  — среднеквадратическое смещение атомов относительно начальных позиций,  $t$  — время. Молекулярно-динамические эксперименты для определения коэффициента диффузии имели продолжительность от 0.5 до 2 нс. Шаг интегрирова-

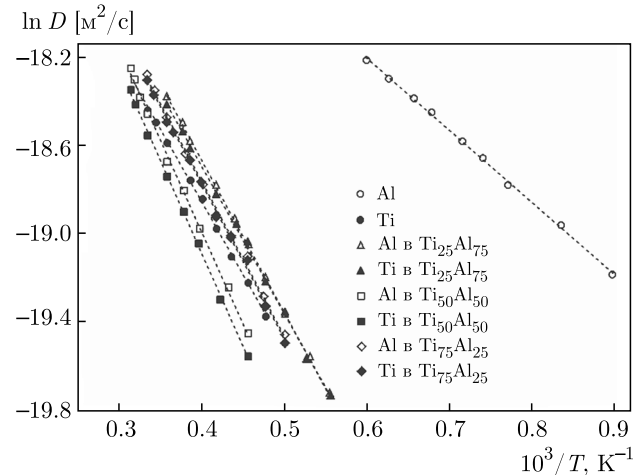


Рис. 2. Зависимости  $\ln D$  от  $10^3/T$  для жидких смесей Ti-Al и чистых металлов Ti и Al

ния по времени в методе молекулярной динамики был равен 2 фс.

### 3. САМОДИФФУЗИЯ В ЖИДКИХ СМЕСЯХ СИСТЕМЫ Ti-Al

На рис. 2 изображены полученные в модели зависимости  $\ln D$  от  $10^3/T$  для жидких смесей Ti-Al, а также для чистых металлов Ti и Al. Все найденные коэффициенты диффузии имели значения в пределах  $10^{-8}$ – $10^{-9}$  м<sup>2</sup>/с, что для рассматриваемых температур хорошо согласуется с экспериментальными работами и данными других авторов [14, 16, 23–27]. Все полученные зависимости строго линейные, что говорит о том, что на рассматриваемом температурном интервале действует один и тот же механизм диффузии с одной и той же энергией активации.

Согласно уравнению Аррениуса, энергию активации самодиффузии можно определить по угловому коэффициенту линейной зависимости:

$$Q = -k \frac{d(\ln D)}{d(T^{-1})} = -k \operatorname{tg} \alpha, \quad (2)$$

где  $k$  — постоянная Больцмана. При этом предэкспоненциальный множитель вычисляется по пересечению линии с осью ординат:

$$\ln D(0) = \ln D_0. \quad (3)$$

Найденные значения  $Q$  и  $D_0$  приведены в табл. 1. Энергия активации диффузии в жидких Al и Ti

**Таблица 1.** Характеристики самодиффузии для жидких сплавов системы Ti–Al

Дифф. элемент	$Q$ , эВ	$D_0$ , м <sup>2</sup> /с
Al в Al	0.28	$0.88 \cdot 10^{-7}$
	<i>0.274</i> [25]	<i><math>1.79 \cdot 10^{-7}</math></i> [25]
	<i>0.280</i> [26]	
Ti в Ti	0.57	$0.89 \cdot 10^{-7}$
	<i>0.563</i> [27]	<i><math>1.14 \cdot 10^{-7}</math></i> [27]
Al в Ti <sub>75</sub> Al <sub>25</sub>	0.60	$1.17 \cdot 10^{-7}$
Ti в Ti <sub>75</sub> Al <sub>25</sub>	0.60	$1.15 \cdot 10^{-7}$
Al в Ti <sub>50</sub> Al <sub>50</sub>	0.72	$1.54 \cdot 10^{-7}$
Ti в Ti <sub>50</sub> Al <sub>50</sub>	0.72	$1.47 \cdot 10^{-7}$
Al в Ti <sub>25</sub> Al <sub>75</sub>	0.59	$1.21 \cdot 10^{-7}$
Ti в Ti <sub>25</sub> Al <sub>75</sub>	0.57	$1.08 \cdot 10^{-7}$

почти совпала с данными реальных экспериментов [25–27] (приведены в табл. 1 курсивом), что говорит в пользу реалистичности используемых потенциалов межатомных взаимодействий. Энергия активации в сплавах, как и ожидалось, существенно зависит от концентрации компонентов. Эта зависимость немонотонна и, начинаясь от 0.28 эВ для чистого Al и заканчиваясь 0.57 эВ для чистого Ti, при одинаковом соотношении компонентов имеет максимум 0.72 эВ. Следует заметить, что в жидкой фазе не было замечено существенного преобладания диффузии того или иного компонента для всех рассмотренных составов смесей — диффузионные характеристики для Ti и Al оказались близки при одинаковых условиях. В работе [14] при исследовании методом молекулярной динамики самодиффузии в жидких смесях системы Ni–Al такое отмечалось для равной концентрации компонентов Ni и Al, но при повышенном содержании того или иного компонента в смеси коэффициент диффузии этого элемента преобладал. Возможно, данное различие результатов обусловлено более высокой энергией связи Ni–Al по сравнению с энергией связи Ti–Al.

#### 4. САМОДИФФУЗИЯ В ТВЕРДЫХ СПЛАВАХ СИСТЕМЫ Ti–Al

Самодиффузия в твердых металлах и сплавах системы Ti–Al моделировалась, как уже говорилось выше, путем введения в исходную расчетную ячейку восьми вакансий. Температурные зависимости коэффициента самодиффузии  $D'$  (соответствующего

заданной концентрации вакансий), так же как и для расплавов, строго подчинялись закону Аррениуса. На рис. 3 приведены зависимости  $\ln D'$  от  $10^3/T$  для упорядоченных и разупорядоченных сплавов с составом Ti<sub>75</sub>Al<sub>25</sub>, Ti<sub>50</sub>Al<sub>50</sub>, Ti<sub>25</sub>Al<sub>75</sub>, а также для чистых металлов Ti и Al. Рассматривались интерметаллиды Ti<sub>3</sub>Al (сверхструктура  $D0_{19}$ ), TiAl (сверхструктура  $L1_0$ ) и TiAl<sub>3</sub> (сверхструктура  $D0_{22}$ ). Для изучения диффузии в разупорядоченных сплавах для каждого соотношения компонентов создавалось по три расчетных ячейки с различными случайными распределениями атомов Ti и Al. При создании разупорядоченных сплавов использовался тот же тип кристаллической решетки, что и для упорядоченного сплава с тем же соотношением компонентов, но с проведением дополнительной релаксации структуры для снятия напряжений, вызванных случайным распределением атомов разного сорта.

Для коэффициента самодиффузии в условиях термодинамического равновесия можно записать

$$D = \frac{c_v}{c'_v} D' = \frac{N}{n} D'_0 \exp\left(\frac{\Delta S_v^f}{k}\right) \times \exp\left(-\frac{E_v^f + E_v^m}{kT}\right) = D_0 \exp\left(-\frac{Q}{kT}\right). \quad (4)$$

Здесь  $c_v$  и  $c'_v$  — соответственно равновесная для температуры  $T$  и заданная в модели концентрации вакансий,  $N$  — количество атомов в расчетной ячейке,  $D'_0$  — предэкспоненциальный множитель, полученный при введении  $n$  вакансий в расчетную ячейку,  $\Delta S_v^f$  — энтропия образования вакансии,  $E_v^f$  и  $E_v^m$  — соответственно энергии образования и миграции вакансии. Правая часть в выражении (4) — это классический закон Аррениуса.

Следовательно, предэкспоненциальный множитель в условиях равновесия имеет вид

$$D_0 = \frac{N}{n} D'_0 \exp\left(\frac{\Delta S_v^f}{k}\right). \quad (5)$$

Колебательная составляющая энтропии образования вакансии определялась по методике, описанной в работе [22]. Для всех рассматриваемых материалов в настоящей работе она оказалась в интервале от  $0.3k$  до  $0.4k$ .

В двухкомпонентном упорядоченном сплаве энергии образования вакансии при удалении атомов A и B обычно различаются, но для расчета энергии активации диффузии имеет смысл использовать

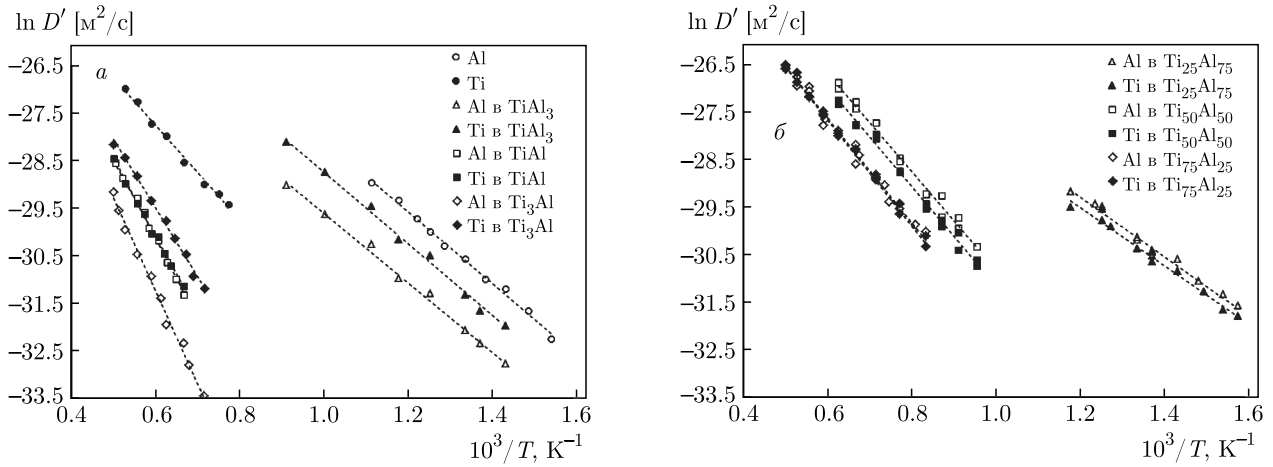


Рис. 3. Зависимости  $\ln D'$  от  $10^3/T$  для упорядоченных (а) и разупорядоченных (б) сплавов системы Ti–Al, а также для чистых металлов Ti и Al (а)

эффективную энергию образования вакансии в сплаве:

$$\overline{E}_v^f = -kT \ln \left[ \frac{N_A}{N} \exp \left( -\frac{E_{vA}^f}{kT} \right) + \frac{N_B}{N} \exp \left( -\frac{E_{vB}^f}{kT} \right) \right]. \quad (6)$$

Здесь использовано допущение, что энтропии образования вакансий А и В равны. Тогда для энергий активации диффузии атомов компонентов А и В имеем

$$Q_A = \overline{E}_v^f + \overline{E}_{vA}^m, \quad Q_B = \overline{E}_v^f + \overline{E}_{vB}^m. \quad (7)$$

Эффективная энергия активации скачка атома сорта А или В на место вакансии определялась по формуле (2) аналогично описанному в разд. 3 методу.

Полученные значения  $\overline{E}_v^f$ ,  $\overline{E}_{vA}^m$ ,  $Q$  и  $D_0$  приведены в табл. 2, в которой также представлены данные из других работ, полученные как экспериментально [11–13, 17, 28, 29], так и с помощью расчетов методом *ab initio* [30, 31]. Для эффективной энергии образования вакансии в табл. 2 указаны значения для температуры  $0.7T_m$ , где  $T_m$  — температура плавления.

Анализируя приведенные в табл. 2 данные, в первую очередь следует отметить значительное (почти в полтора раза) различие энергий активации самодиффузии в упорядоченных и разупорядоченных сплавах. В связи с этим самодиффузия в разупорядоченных сплавах протекала гораздо быстрее, чем в упорядоченных. В разупорядоченных

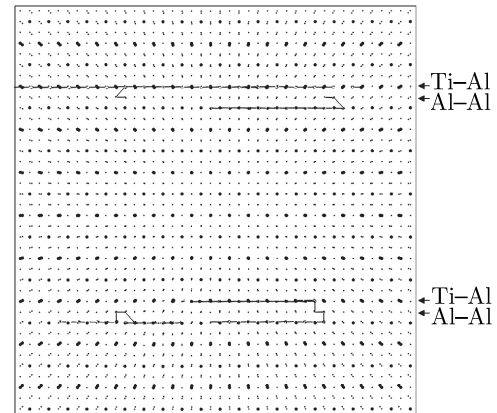


Рис. 4. Анизотропия диффузии в интерметаллиде TiAl<sub>3</sub> со сверхструктурой D0<sub>22</sub>

сплавах, как и в расплавах, не было замечено существенного различия диффузионной подвижности атомов разного сорта. Однако в интерметаллидах Ti<sub>3</sub>Al и TiAl это различие было ярко выраженным: атомы Al в этом случае диффундировали значительно медленнее атомов Ti, что хорошо согласуется с экспериментальными данными работ [12, 13].

При исследовании самодиффузии в интерметаллиде TiAl<sub>3</sub> было обнаружено, что она имеет ярко выраженный анизотропный характер: основные перемещения атомов происходили в атомных плоскостях с чередующимися атомами Ti и Al в сверхструктурной упаковке D0<sub>22</sub> (рис. 4).

Таблица 2. Характеристики самодиффузии для твердых сплавов системы Ti–Al

Дифф. элемент	$\overline{E}_v^f$ , эВ	$\overline{E}_v^m$ , эВ	$Q$ , эВ	$D_0$ , м <sup>2</sup> /с
Al в Al	0.71 <i>0.68</i> [28, 29]	0.65	1.36 <i>1.33</i> [17] <i>1.47</i> [11]	$7.2 \cdot 10^{-6}$ <i><math>1.71 \cdot 10^{-4}</math></i> [11]
Ti в Ti	1.83 <i>1.55</i> [17]	0.85	2.68 <i>3.14</i> [11] <i>2.02</i> [30]	$2.0 \cdot 10^{-6}$ <i><math>1.35 \cdot 10^{-3}</math></i> [11]
Al в Ti <sub>3</sub> Al (D0 <sub>19</sub> )	2.13 <i>1.35</i> [11]	1.68	3.81 <i>4.08</i> [12]	$2.0 \cdot 10^{-5}$ <i><math>2.32 \cdot 10^{-1}</math></i> [12]
Ti в Ti <sub>3</sub> Al (D0 <sub>19</sub> )	<i>2.24</i> [31]	1.25	3.38 <i>2.99</i> [12]	$5.4 \cdot 10^{-6}$ <i><math>2.24 \cdot 10^{-5}</math></i> [12]
Al в Ti <sub>75</sub> Al <sub>25</sub> (нет порядка)	1.31	0.96	2.27	$4.5 \cdot 10^{-6}$
Ti в Ti <sub>75</sub> Al <sub>25</sub> (нет порядка)		0.95	2.26	$4.4 \cdot 10^{-6}$
Al в TiAl (L1 <sub>0</sub> )	2.02 <i>1.22</i> [11]	1.46	3.48 <i>3.71</i> [13]	$1.6 \cdot 10^{-5}$ <i><math>2.11 \cdot 10^{-2}</math></i> [13]
Ti в TiAl (L1 <sub>0</sub> )	<i>1.80</i> [31]	1.36	3.38 <i>2.59</i> [13]	$7.9 \cdot 10^{-6}$ <i><math>1.43 \cdot 10^{-6}</math></i> [13]
Al в Ti <sub>50</sub> Al <sub>50</sub> (нет порядка)	1.18	0.89	2.07	$9.4 \cdot 10^{-6}$
Ti в Ti <sub>50</sub> Al <sub>50</sub> (нет порядка)		0.90	2.08	$9.4 \cdot 10^{-6}$
Al в TiAl <sub>3</sub> (D0 <sub>22</sub> )	1.53 <i>1.46</i> [31]	0.63	2.16	$1.4 \cdot 10^{-6}$
Ti в TiAl <sub>3</sub> (D0 <sub>22</sub> )		0.65	2.18	$4.0 \cdot 10^{-6}$
Al в Ti <sub>25</sub> Al <sub>75</sub> (нет порядка)	0.99	0.54	1.53	$2.4 \cdot 10^{-6}$
Ti в Ti <sub>25</sub> Al <sub>75</sub> (нет порядка)		0.53	1.52	$1.7 \cdot 10^{-6}$

## 5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

С помощью метода молекулярной динамики проведено исследование самодиффузии в жидких и твердых сплавах системы Ti–Al, а также в чистых металлах Ti и Al. Помимо интерметаллидов Ti<sub>3</sub>Al, TiAl, TiAl<sub>3</sub>, рассматривались разупорядоченные сплавы с аналогичным соотношением компонентов. Для рассмотренных систем получены характе-

ристики самодиффузии (энергия активации и предэкспоненциальный множитель в соответствующем уравнении Аррениуса) отдельно для атомов Ti и Al.

Согласно полученным данным, как в жидких, так и в твердых сплавах системы Ti–Al энергия активации диффузии существенно зависит от концентрации компонентов, приблизительно повторяя фазовую диаграмму. При этом для разупорядоченных сплавов энергия активации самодиффузии ока-

залась почти в полтора раза меньше, чем для упорядоченных.

При изучении самодиффузии в расплавах и в твердых разупорядоченных сплавах не было замечено существенного различия диффузионной подвижности атомов разного сорта. Однако в случае упорядоченных сплавов, особенно интерметаллидов  $Ti_3Al$  и  $TiAl$ , это различие было ярко выраженным: атомы  $Al$  диффундировали значительно медленнее атомов  $Ti$ . В интерметаллиде  $TiAl_3$  диффузия имеет анизотропный характер: основные перемещения атомов происходили вдоль атомных плоскостей с чередующимися атомами  $Ti$  и  $Al$  в сверхструктурной упаковке  $D0_{22}$ .

**Финансирование.** Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект FZMM-2020-0002).

## ЛИТЕРАТУРА

1. Y.-W. Kim, *J. Metals* **46**, 30 (1994).
2. F. Appel, P. A. Beaven, and R. Wagner, *Acta Metall. Mater.* **41**, 1721 (1993).
3. J. Lapin, *Conf. Proc. Metal-2009*, **19**, 21.5 (2009).
4. T. Tetsui, *Rare Metals* **30**, 294 (2011).
5. T. Voisin, J.-P. Monchoux, and A. Couret, in *Spark Plasma Sintering of Materials*, ed. by P. Cavaliere, Springer, Cham (2019), p. 713.
6. Q. Wu, J. Wang, Y. Gu, Y. Guo, G. Xu, and Y. Cui, *J. Phase Equilib. Diffus.* **39**, 724 (2018).
7. N. Thiyaneshwaran, K. Sivaprasad, and B. Ravikiran, *Sci. Rep.* **8**, 16797 (2018).
8. H. Wu, Sh. Zhang, H. Hu, J. Li, J. Wu, Q. Li, and Zh. Wang, *Intermetallics* **110**, 106483 (2019).
9. J.-G. Luo, *Welding J.* **79**, 239-s (2000).
10. J. Rusing and Ch. Herzig, *Scr. Metall. Mater.* **33**, 561 (1995).
11. Y. Mishin and Ch. Herzig, *Acta Mater.* **48**, 589 (2000).
12. J. Rusing and C. Herzig, *Intermetallics* **4**, 647 (1996).
13. C. Herzig, T. Przeorski, and Y. Mishin, *Intermetallics* **7**, 389 (1998).
14. E. V. Levchenko, T. Ahmed, and A. V. Evteev, *Acta Mater.* **136**, 74 (2017).
15. E. Sondermann, F. Kargl, and A. Meyer, *Phys. Rev. B* **93**, 184201 (2016).
16. N. Jakse and A. Pasturel, *Sci. Rep.* **3**, 3135 (2013).
17. R. R. Zope and Y. Mishin, *Phys. Rev. B* **68**, 024102 (2003).
18. Y.-K. Kim, H.-K. Kim, W.-S. Jung, and B.-J. Lee, *Comput. Mater. Sci.* **119**, 1 (2016).
19. Q.-X. Pei, M. H. Jhon, S. S. Quek, and Z. Wu, *Comput. Mater. Sci.* **188**, 110239 (2021).
20. Г. М. Полетаев, И. В. Зоря, *ЖЭТФ* **158**, 485 (2020).
21. Г. М. Полетаев, Р. Ю. Ракитин, *ФТТ* **63**, 582 (2021).
22. Г. М. Полетаев, М. Д. Старостенков, *ФТТ* **52**, 1075 (2010).
23. A. Mao, J. Zhang, Sh. Yao et al., *Results in Phys.* **16**, 102998 (2020).
24. J. Qin, X. Li, J. Wang, and Sh. Pan, *AIP Adv.* **9**, 035328 (2019).
25. F. Demmel, D. Szubrin, W.-C. Pilgrim, and C. Morchel, *Phys. Rev. B* **84**, 014307 (2011).
26. F. Kargl, H. Weis, T. Unruh, and A. Meyer, *J. Phys.: Conf. Ser.* **340**, 012077 (2012).
27. J. Horbach, R. E. Rozas, T. Unruh, and A. Meyer, *Phys. Rev. B* **80**, 212203 (2009).
28. Г. Й. Волленбергер, в сб. *Физическое металловедение. Т. 3. Физико-механические свойства металлов и сплавов*, под ред. Р. Кана, Мир, Москва (1987), с. 5.
29. А. Н. Орлов, Ю. В. Трушин, *Энергии точечных дефектов в металлах*, Энергоатомиздат, Москва (1983).
30. J. R. Fernandez, A. Monti, and R. Pasianot, *J. Nucl. Mater.* **229**, 1 (1995).
31. А. В. Бакулин, С. Е. Кулькова, *ЖЭТФ* **154**, 1136 (2018).