

Диффузионные характеристики собственных точечных дефектов в ОЦК-железе

А. Б. Сивак, В. А. Романов, В. М. Чернов

Методами молекулярной статики (МС) и молекулярной динамики (МД) получены энергетические, кристаллографические и диффузионные характеристики собственных точечных дефектов (СТД) (вакансии, междоузельные атомы (СМА)) в ОЦК-кристалле железа. Температурные зависимости коэффициентов диффузии и самодиффузии в расчете на один СТД вычислены в температурных диапазонах 1000 – 1800 и 250 – 1800 К для вакансии и СМА, соответственно. Температурные зависимости коэффициентов диффузии вакансии хорошо описываются зависимостью Аррениуса с эффективной энергией миграции $\approx 0,735$ эВ. Температурные зависимости коэффициентов диффузии СМА существенно отличаются от аррениусовской. Эффективные энергии миграции СМА составляют $\approx 0,22 - 0,23$ эВ при температурах ниже 300 К. Эффективная энергия миграции СМА уменьшается с ростом температуры, достигая значения 0,09 эВ при 1000 К. СМА обладает смешанным 1D/3D механизмом диффузии. Полученные МД-методом значения энергии миграции для вакансии и СМА хорошо согласуются с экспериментальными данными.

Ключевые слова: ОЦК-железо, собственные точечные дефекты, коэффициенты диффузии, механизмы диффузии, энергия активации.

Energetic, crystallographic and diffusion characteristics of self-point defects (SPDs: vacancies, self-interstitial atoms — SIAs) have been obtained using molecular statics (MS) and molecular dynamics (MD) simulations in bcc iron. Temperature dependences of SPDs diffusivities and self diffusivities per one SPD have been calculated in temperature ranges 1000 – 1800 and 250 – 1800 K for vacancy and SIA, respectively. The temperature dependences of vacancy diffusivities are described well by Arrhenius equation with the effective migration energy ≈ 0.735 eV. The temperature dependences of SIA diffusivities sufficiently differ from Arrhenius type. The SIA effective migration energies are $\approx 0.22 - 0.23$ eV at temperatures below 300 K. The effective migration energy decreases with the temperature reaching the value 0.09 eV at 1000 K. The SIA has a complex 1D/3D migration mechanism. The values of migration energy for SPDs obtained by MD simulation agree well with the experimental data.

Keywords: BCC iron, self-point defects, diffusivity, diffusion mechanisms, activation energies.

Введение

Предсказательная способность феноменологических моделей изменения макросвойств материалов (как научной основы разработки перспективных материалов) критически зависит от надежности знания характеристик СТД (вакансий, СМА) и их кластеров. Существуют значительные трудности в определении характеристик СТД экспериментальными методами. Поэтому задача разработки и улучшения теоретических методов исследования поведения СТД и их взаимодействия с другими дефектами кристаллической решетки (дислокации и пр.) является актуальной.

В настоящей работе исследованы характеристики СТД МС- и МД-методами в температурных диапазонах 1000 – 1800 и 250 – 1800 К для вакансии и СМА, соответственно, в ОЦК железе на основе полуэмпирической модели переходного металла и многочастичного полуфеноменологического потенциала взаимодействия [1]. Результаты этой модели и потенциала хорошо описывают равновесные упругие модули и согласуются с экспериментальными измерениями уравнения состояния, дисперсионных кривых, частоты Дебая, постоянной Грюнайсена и температурных зависимостей термофизических свойств (постоянная кристаллической решетки, температурный коэффициент линейного расширения,

амплитуда тепловых колебаний атомов) ОЦК-кристалла железа [1].

Методы расчета характеристик СТД

Исследование диффузии дефектов проводили МД-методом с использованием модельного кристаллита с периодическими граничными условиями. Модельный кристаллит представлял собой микроканонический ансамбль (постоянные — число атомов N , объем V и энергия E). Постоянную кристаллической решетки a выбирали таким образом, чтобы при заданной температуре T давление P в кристаллите было равно нулю с точностью до $0,1$ эВ/нм³. Интегрирование уравнений движения выполняли методом Верле [2]. Величину временного шага выбирали таким образом, чтобы смещение самого быстрого атома за одну итерацию было меньше $\sim 0,007a$. Используемые кристаллиты содержали $(4394 + 1)$ и $(2000 - 1)$ атомов при исследовании диффузии СМА и вакансий, соответственно. Определение положения СТД проводили путем анализа числа атомов в ячейках Вигнера – Зейтца по всему кристаллиту. После каждого скачка дефекта периодическая граница переопределялась таким образом, чтобы дефект вновь оказывался в центре кристаллита [3]. Время моделирования составляло $\sim 2 - 600$ нс, в зависимости от температуры и типа дефекта. При каждой рассматриваемой температуре число скачков дефекта составляло 10^4 (вакансия) и $2 \cdot 10^4$ (СМА).

Коэффициент диффузии дефекта D^d рассчитывался по алгоритму [3, 4]:

$$D^d = \frac{1}{N_S} \sum_{i=1}^{N_S} D_i = \frac{1}{N_S} \sum_{i=1}^{N_S} \frac{1}{n_i} \sum_{j=1}^{n_i} \frac{R_{i,j}^2}{6\tau_i}, \quad (1)$$

где N_S — полное число серий разбиений траектории на изохронные отрезки длительностью τ_i , n_i — число отрезков в i -ой серии, $R_{i,j}$ — модуль вектора смещения дефекта на j -ом отрезке в i -ой серии. Анализ сходимости коэффициента диффузии и его статистической погрешности в зависимости от числа отрезков показал, что оптимальными диапазонами для числа отрезков являются $n_i \in [950, 1050]$ для СМА и $n_i \in [1950, 2050]$ для вакансий.

Коэффициент диффузии меченых атомов D^* (коэффициент самодиффузии в расчете на один дефект) рассчитывали с использованием соотношения Эйнштейна для случая трехмерной диффузии:

$$D^* = \frac{1}{c_d} \frac{\langle R^2(t) \rangle}{6t}, \quad (2)$$

где $\langle R^2(t) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [\vec{r}_i(t) - \vec{r}_i(0)]^2$ — среднеква-

ратичное смещение меченых атомов, N — число атомов в модельном кристаллите (все атомы кристаллита рассматривали как меченые), $\vec{r}_i(0)$ и $\vec{r}_i(t)$ — начальные и текущие позиции атома i , $c_d = 1/N$ — концентрация дефектов (один дефект на модельный кристаллит). Время t выбрано равным полному времени моделирования.

Корреляционный фактор дефекта f^d определяли как отношение его коэффициентов диффузии D^d (1) и D^{RW} , рассчитываемому в приближении случайных блужданий дефекта [5]:

$$D^{RW} = \sum_i \frac{v_i \lambda_i^2}{6}, \quad (3)$$

где v_i — частота скачков дефекта с длиной скачка λ_i .

Корреляционный фактор меченых атомов f^{tr} определяли как отношение коэффициентов D^* и D^d (в случае одномерной диффузии дефекта $f^{tr} = 0$).

Характеристики СТД

Энергия образования, релаксационный объем, дипольный тензор

Рассчитанные МС-методом энергетические и кристаллографические характеристики СТД (упругих диполей, определяемых дипольным тензором P_{ij} и его собственными значениями $P^{(s)}$, $s = 1, 2, 3$, и собственными векторами $\mathbf{e}^{(s)}$) в стабильных и метастабильных конфигурациях приведены в таблице [1, 6].

Миграция вакансий происходит путем термоактивированного скачка одного из ближайших к вакансии атомов кристалла в вакантный узел и характеризуется энергией миграции $0,735$ эВ (таблица). Упругий диполь, соответствующий седловой конфигурации вакансии, имеет 4 возможные эквивалентные ориентации (тригональная симметрия). Направление миграции вакансии совпадает с ориентацией упругого диполя, соответствующего седловой конфигурации вакансии. Расчетные значения энергий образования и миграции вакансии (таблица) хорошо согласуются с экспериментальными измерениями (энергия образования $2,0 \pm 0,2$ эВ [7]; энергия миграции $0,73 \pm 0,03$ эВ [1]) и результатами *ab initio* расчетов (энергия образования $1,93 - 2,02$ эВ [8], $2,07$ эВ [9]; энергия миграции $0,65$ эВ [8], $0,67$ эВ [9]).

Наиболее устойчивой конфигурацией СМА является $\langle 110 \rangle$ гантель (в отсутствие полей напряжений). Миграция $\langle 110 \rangle$ гантели происходит путем

Таблица

Энергия образования E^F , эВ, релаксационный объем V^R (в атомных объемах), собственные значения $P^{(s)}$, эВ и собственные векторы $\mathbf{e}^{(s)}$ дипольного тензора P_{ij} точечных дефектов в ОЦК-железе

Конфигурация *	E^F	V^R	$P^{(1)}$	$P^{(2)}$	$P^{(3)}$	$\mathbf{e}^{(1)}$	$\mathbf{e}^{(2)}$	$\mathbf{e}^{(3)}$
$\langle 110 \rangle$ гантель	4,384	1,480	23,04	13,05	20,39	(1 1 0)	(1 -1 0)	(0 0 1)
СТ миграции $\langle 110 \rangle$ гантели	4,630	1,476	27,87	15,62	12,84	(1 1,11 1)	(1 0 -1)	(1 -1,80 1)
СТ реориентации $\langle 110 \rangle \rightarrow \langle 111 \rangle$	4,634	1,457	30,20	13,10	12,32	(1 1 1,23)	(1 1 -1,62)	(1 -1 0)
СТ реориентации $\langle 111 \rangle \rightarrow \langle 110 \rangle$	4,633	1,451	30,80	12,30	12,27	(1 1 1,23)	(1 1 -1,62)	(1 -1 0)
$\langle 111 \rangle$ гантель	4,627	1,436	31,00	11,90	11,90	(1 1 1)	(1 -1 0)	(1 1 -2)
Краудион	4,635	1,442	30,99	12,02	12,02	(1 1 1)	(1 -1 0)	(1 1 -2)
Тетраэдрическая	5,149	1,286	15,60	16,74	16,74	(1 0 0)	(0 1 0)	(0 0 1)
Октаэдрическая	5,464	1,174	21,02	11,89	11,89	(1 0 0)	(0 1 0)	(0 0 1)
$\langle 100 \rangle$ гантель	5,618	1,171	19,86	12,41	12,41	(1 0 0)	(0 1 0)	(0 0 1)
Вакансия	1,920	-0,140	-1,776	-1,776	-1,776	(1 0 0)	(0 1 0)	(0 0 1)
СТ вакансии	2,655	-0,112	-4,797	0,256	0,256	(1 1 1)	(1 -1 0)	(1 1 -2)

*СТ — седловые точки процессов миграции и реориентации.

скачка гантели в один из ближайших узлов решетки с поворотом оси гантели на 60° и характеризуется энергией миграции 0,246 эВ, что согласуется с экспериментальными данными [10, 11] и *ab initio* расчетами [8, 9]. Упругий диполь, соответствующий седловой конфигурации $\langle 110 \rangle$ гантели, обладает 12 возможными эквивалентными ориентациями (моноклинная симметрия).

Коэффициенты диффузии

Температурные зависимости коэффициентов диффузии вакансии D_V^{RW} , D_V^d и коэффициента самодиффузии D_V^* в расчете на одну вакансию, рассчитанные МД-методом в температурном диа-

пазоне $1000 < T < 1800$ К (рис. 1), хорошо описываются выражениями аррениусовского типа:

$$D_V^{RW}(T) = 13,71 \cdot 10^{-3} \exp(-(0,743 \text{ эВ})\beta) \text{ см}^2/\text{с},$$

$$D_V^d(T) = 8,49 \cdot 10^{-3} \exp(-(0,733 \text{ эВ})\beta) \text{ см}^2/\text{с},$$

$$D_V^*(T) = 5,35 \cdot 10^{-3} \exp(-(0,720 \text{ эВ})\beta) \text{ см}^2/\text{с},$$

где $\beta = (k_B T)^{-1}$; k_B — постоянная Больцмана; T — температура, К.

При высоких температурах (> 1500 К) помимо обычного механизма миграции вакансии в позиции 1-х ближайших соседей (БС) активируются дополнительные механизмы диффузии, при которых вакансия совершает скачок в позиции 3-х и 5-х БС. Эти два дополнительных механизма схематически изображены на рис. 2.

Температурные зависимости частоты скачков, соответствующие трем упомянутым наблюдаемым механизмам миграции вакансии, представлены на рис. 3. Аппроксимация этих зависимостей соотношением Аррениуса дает значения энергий активации: 0,730 эВ, 1,401 эВ и 1,664 эВ для скачков вакансии в позиции 1-х, 5-х и 3-х БС, соответственно. Эти величины согласуются с соответствующими величинами, полученными МС-методом: 0,735 эВ, 1,406 эВ, 1,743 эВ.

Температурные зависимости корреляционных факторов f_V^d и f_V^{tr} , характеризующие движение вакансии, представлены на рис. 4. Рассчитанное значение f_V^{tr} согласуется с теоретическим значением 0,72722 [5] в пределах погрешности вычислений при температурах ниже ~ 1500 К. При более высоких температурах наблюдается некоторое слабое систематическое уменьшение, связанное с активацией двух вышеупомянутых менее энергетически выгодных механизмов миграции.

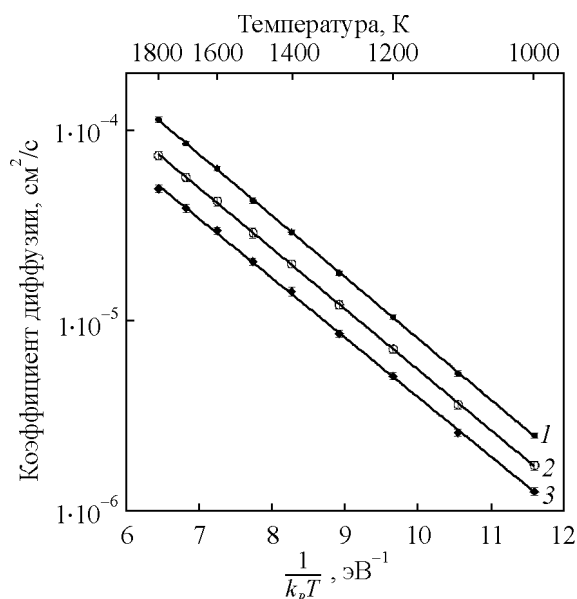


Рис. 1 Коэффициенты диффузии вакансии D_V^{RW} (1), D_V^d (2) и коэффициент самодиффузии D_V^* в расчете на одну вакансию (3) в ОЦК-железе.

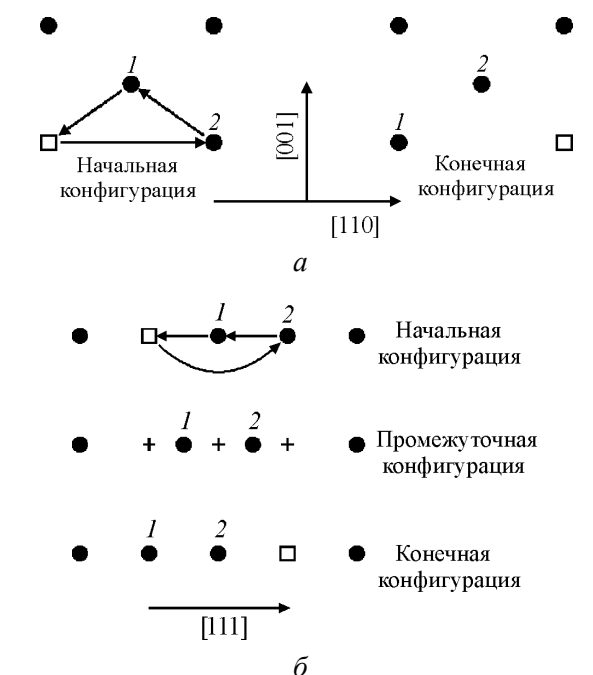


Рис. 2. Механизмы миграции вакансии (● — атомы, □ — вакансии, + — узлы решетки): а — в позицию 3-го БС; б — в позицию 5-го БС.

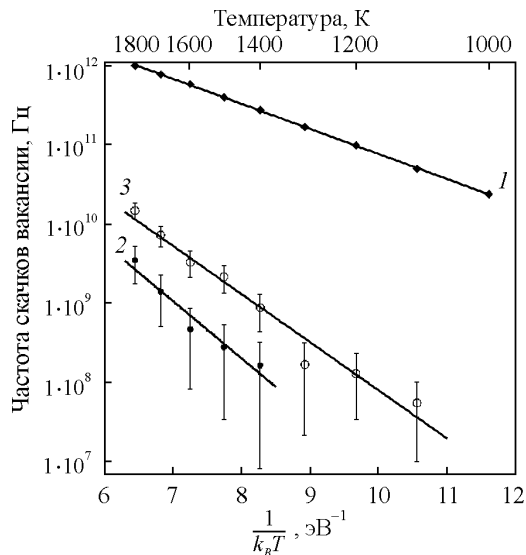


Рис. 3. Частоты скачков вакансии в позиции 1-х БС (1), 3-х БС (2) и 5-х БС (3).

Температурные зависимости коэффициентов диффузии СМА D_{SLA}^{RW} , D_{SLA}^d и коэффициента самодиффузии D_{SLA}^* в расчете на один СМА, рассчитанные МД-методом в температурном интервале $250 < T < 1800$ К, представлены на рис. 5а. Полученные

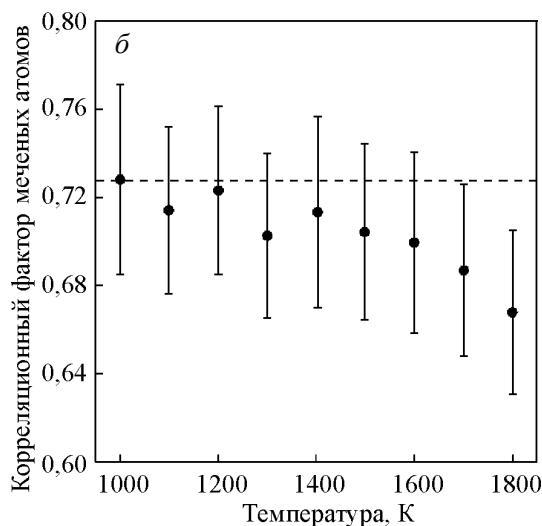
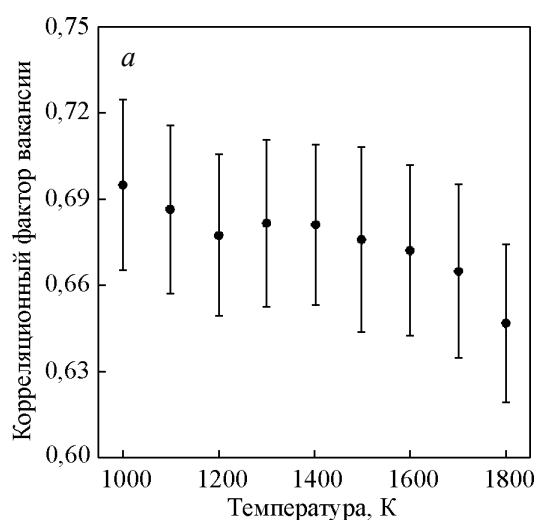


Рис. 4. Корреляционные факторы для вакансии в железе: а — f_V^d , б — f_V^{tr} (пунктирная линия отмечает теоретическое значение $f_V^{tr} = 0,72722$ [5] для ОЦК-решетки).

зависимости отличаются от аррениусовских. Расчитанные эффективные энергии миграции составляют $\sim 0,22 - 0,23$ эВ при $T < 300$ К. Эти величины близки к рассчитанным значениям статических энергетических барьеров процессов миграции $\langle 110 \rangle$ гантели и реориентации из $\langle 110 \rangle$ в $\langle 111 \rangle$ гантель (0,246 и 0,250 эВ, соответственно) и находятся в согласии с экспериментально измеренной величиной $\sim 0,25 - 0,3$ эВ для процессов миграции и реориентации $\langle 110 \rangle$ СМА при температуре стадии отжига I_E облученных образцов железа [10, 11]. Эффективная энергия миграции СМА уменьшается до величины $\sim 0,10$ эВ с увеличением температуры (рис. 5а).

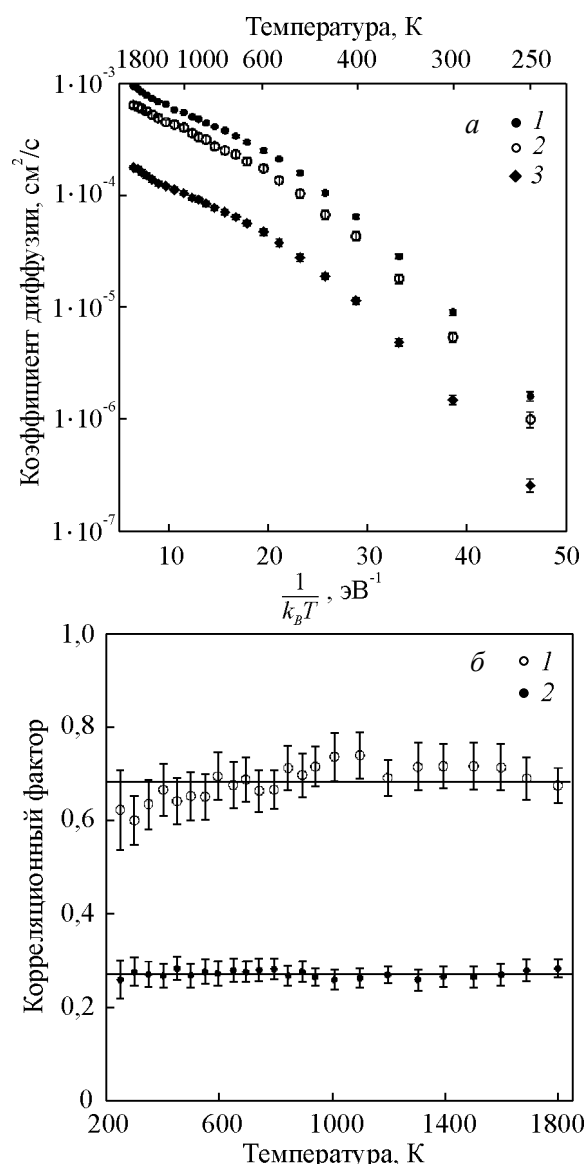


Рис. 5. *a* — Коэффициенты диффузии СМА D_{SLA}^{RW} (1), D_{SLA}^d (2) и коэффициент самодиффузии D_{SLA}^* в расчете на один СМА (3) в ОЦК-железе; *б* — корреляционные факторы для СМА в железе f_{SLA}^d (1) и f_{SLA}^{tr} (2), сплошные линии показывают усредненные значения по всему температурному интервалу

Анализ пространственных ориентаций СМА во время процесса диффузии показал, что СМА обладает смешанным механизмом диффузии при низких температурах. Изначально СМА находится в $\langle 110 \rangle$ гантельной конфигурации. Затем СМА мигрирует в другую $\langle 110 \rangle$ гантельную конфигурацию или имеет место реориентация СМА в $\langle 111 \rangle$ гантельную конфигурацию, за которой следует несколько быстрых скачков по краудионному механизму, после которых СМА снова возвращается в $\langle 110 \rangle$ гантельную конфигурацию. При низких температурах ($T < 300$ К)

большую часть времени СМА проводит в $\langle 110 \rangle$ гантельной конфигурации. Несмотря на вклад краудионного механизма в диффузию, эффективная энергия миграции при низких температурах определяется энергетическим барьером реориентации из $\langle 110 \rangle$ в $\langle 111 \rangle$ гантельную конфигурацию.

Корреляционный фактор меченых атомов при миграции СМА f_{SLA}^{tr} чувствителен к особенностям механизма миграции СМА. Для трехмерного $\langle 110 \rangle$ гантельного механизма миграции $f_{SLA}^{tr} = 0,42$ [12]. Величина f_{SLA}^{tr} , рассчитанная МД-методом (рис. 5б), постоянна в пределах погрешности во всем рассмотренном температурном диапазоне. Средняя величина f_{SLA}^{tr} равна 0,27, что свидетельствует о смешанном механизме диффузии, слабо меняющемся с температурой.

В случае реализации описанных выше четырех типов событий, включающих реориентацию и перемещение центра тяжести СМА, частота скачков v определяется частотами миграции по $\langle 110 \rangle$ гантельному ($v_{\langle 110 \rangle}^M$) и краудионному ($v_{\langle 111 \rangle}^M$) механизмам, а также частотами реориентаций из $\langle 110 \rangle$ в $\langle 111 \rangle$ гантельную конфигурацию ($v_{\langle 110 \rangle}^R$) и обратно ($v_{\langle 111 \rangle}^R$).

За достаточно большое время наблюдения t дефект совершит $N = vt$ скачков. В рамках рассматриваемой модели диффузионного движения СМА полное число скачков можно разложить на сумму скачков по $\langle 110 \rangle$ гантельному механизму $N_{\langle 110 \rangle}^M$ и краудионному механизму $N_{\langle 111 \rangle}^M$:

$$N = N_{\langle 110 \rangle}^M + N_{\langle 111 \rangle}^M = v_{\langle 110 \rangle}^M t_{\langle 110 \rangle} + v_{\langle 111 \rangle}^M t_{\langle 111 \rangle}, \quad (4)$$

где $t_{\langle 110 \rangle}$ и $t_{\langle 111 \rangle}$ — времена, в течение которых СМА находится в $\langle 110 \rangle$ гантельной и $\langle 111 \rangle$ гантельной конфигурациях за время наблюдения t , соответственно.

Принимая во внимание, что число реориентаций $N_{\langle 110 \rangle}^R$ из $\langle 110 \rangle$ в $\langle 111 \rangle$ гантельную конфигурацию равно числу обратных реориентаций $N_{\langle 111 \rangle}^R$, время $t_{\langle 111 \rangle}$ равно

$$t_{\langle 111 \rangle} = \frac{v_{\langle 110 \rangle}^R t_{\langle 110 \rangle}}{v_{\langle 111 \rangle}^R}. \quad (5)$$

Поскольку $t = t_{\langle 110 \rangle} + t_{\langle 111 \rangle}$, с учетом (3) – (5) для коэффициента D_{SLA}^{RW} , получим:

$$D^{RW} = \frac{a^2}{8} \frac{v_{\langle 110 \rangle}^M v_{\langle 111 \rangle}^R + v_{\langle 111 \rangle}^M v_{\langle 110 \rangle}^R}{v_{\langle 110 \rangle}^R + v_{\langle 111 \rangle}^R}. \quad (6)$$

С учётом того, что $E_{\langle 110 \rangle}^M$ и $E_{\langle 110 \rangle}^R$ (0,246 и 0,250 эВ, соответственно) больше величины $k_B T$ (~0,15 эВ при температуре плавления), зависимости Аррениусовского типа подходят для описания температурных зависимостей $v_{\langle 110 \rangle}^M$ и $v_{\langle 110 \rangle}^R$:

$$v_{\langle 110 \rangle}^M = v_{\langle 110 \rangle,0}^M \exp(-\beta E_{\langle 110 \rangle}^M);$$

$$v_{\langle 110 \rangle}^R = v_{\langle 110 \rangle,0}^R \exp(-\beta E_{\langle 110 \rangle}^R). \quad (7)$$

Значения $E_{\langle 111 \rangle}^M$ и $E_{\langle 111 \rangle}^R$ (0,008 и 0,015 эВ, соответственно) много меньше величины $k_B T$ при температурах выше ~200 К, поэтому температурные зависимости $v_{\langle 111 \rangle}^M$ и $v_{\langle 111 \rangle}^R$ должны быть линейными [13]:

$$v_{\langle 111 \rangle}^M = \left(\frac{A^M}{\beta} \right) + B^M;$$

$$v_{\langle 111 \rangle}^R = \left(\frac{A^R}{\beta} \right) + B^R. \quad (8)$$

Полагая $E_{\langle 110 \rangle}^M = E_{\langle 110 \rangle}^R = E$, соотношение (6) с компонентами (7), (8) можно записать в форме, удобной для аппроксимации расчетных данных:

$$D_{SLA}^{RW} = c_1 \exp(-\beta E) \frac{1 + c_2/\beta}{1 + c_3/\beta + c_4 \exp(-\beta E)}, \quad (9)$$

где c_1, c_2, c_3, c_4 и E — подгоночные параметры. Выражение (9) описывает расчетные данные с большой точностью во всем рассмотренном температурном интервале (рис. 6) при значениях подгоночных параметров $c_1 = 1,994 \text{ см}^2/\text{с}$, $c_2 = 41,46 \text{ эВ}^{-1}$,

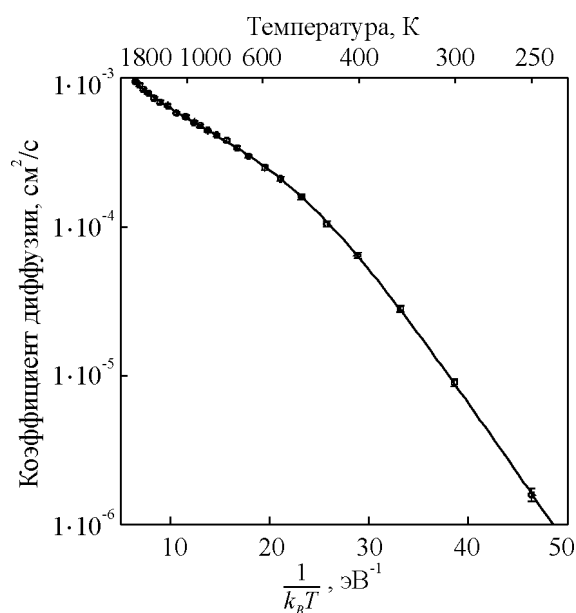


Рис. 6. Коэффициент диффузии СМА D_{SLA}^{RW} (точки) и его аппроксимация аналитическим выражением (9) (сплошная линия) в ОЦК-железе.

$c_3 = 2111 \text{ эВ}^{-1}$, $c_4 = 14140$ и $E = 0,2330 \text{ эВ}$. Поскольку корреляционные факторы не сильно зависят от температуры (рис. 5б), то температурные зависимости для коэффициентов D_{SLA}^d и D_{SLA}^* можно получить, умножив (9) на f_{SLA}^d и $f_{SLA}^d \cdot f_{SLA}^{tr}$, соответственно.

Заключение

В ОЦК-кристалле железа:

1. МД-методом рассчитаны коэффициенты диффузии СТД в температурных диапазонах 1000 – 1800 К (вакансия) и 250 – 1800 К (СМА). Получены аналитические выражения, аппроксимирующие расчетные значения коэффициентов диффузии СТД.

2. Рассчитанные для вакансии энергии образования (1,92 эВ) и миграции (0,735 эВ) хорошо согласуются с экспериментальными данными [1, 7] и *ab initio* расчетами [8, 9]. Энергия активации вакансии, рассчитанная МД-методом, практически совпадает с величиной, рассчитанной МС-методом.

3. Стабильной конфигурацией СМА является $\langle 110 \rangle$ гантель. Это подтверждается экспериментальными наблюдениями [10, 11] и *ab initio* расчетами [8, 9]. Механизм диффузии СМА является смешанным и характеризуется наложением одно- и трехмерных механизмов миграции. Эффективная энергия миграции СМА возрастает от 0,10 до 0,23 эВ с уменьшением температуры от точки плавления до 250 К. Указанная тенденция показывает, что энергия миграции СМА должна выходить на значение 0,25 эВ при температуре стадии отжига I_E (~125 К). Эта величина согласуется с величиной энергетического барьера, полученного МС-методом (0,25 эВ), и с экспериментальными измерениями [10, 11].

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект РФФИ 08-08-00478).

Литература

1. Романов В.А., Сивак А.Б., Чернов В.М. Кристаллографические, энергетические и кинетические характеристики собственных точечных дефектов и их кластеров в ОЦК железе. Вопросы атомной науки и техники. Серия “Материаловедение и новые материалы”, 2006, т. 1, вып. 66, с. 129 – 232.
2. Verlet L. Computer “experiments” on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules. Phys. Rev., 1967, v. 159, p. 98 – 103.
3. Ossetsky Yu.N. Atomistic study of diffusional mass transport in metals. Defect and Diffusion Forum, 2001, v. 188 – 190, p. 71 – 92.

4. Guinan M.W., Stuart R.N., Borg R.J. Fully dynamic computer simulation of self-interstitial diffusion in tungsten. Phys. Rev. B, 1977, v. 15, p. 699 – 710.
5. Manning J.R. Diffusion kinetics for atoms in crystals. Toronto, Canada. D. Van Nostrand Company, 1968, 258 p.
6. Sivak A.B., Chernov V.M., Dubasova N.A., Romanov V.A. Anisotropy migration of self-point defects in dislocation stress fields in BCC Fe and FCC Cu. J. Nucl. Mater., 2007, v. 367 – 370, p. 316 – 321.
7. De Schepper L., Segers D., Dorikens-Vanpraet L., Dorikens M., Knuyt G., Stals L.M., Moser P. Positron annihilation on pure and carbon-doped α -iron in thermal equilibrium. Phys. Rev. B, 1983, v. 27, p. 5257 – 5269.
8. Domain C., Becquart C.S. Ab initio calculations of defects in Fe and dilute Fe-Cu alloys. Phys. Rev. B, 2002, v. 65, 024103, p. 1 – 14.
9. Fu C.-C., Willaime F., Ordejon P. Stability and mobility of mono- and di-interstitials in α -Fe. Phys. Rev. Lett., 2004, v. 92, 175503, p. 1 – 4.
10. Hivert V., Pichon R., Bilder H., Bichon P., Verdone J., Dautreppe D., Moser P. Internal friction in low temperature irradiated bcc metals. J. Phys. Chem. Sol., 1970, v. 31, p. 1843 – 1855.
11. Schaffer H.E., Butteweg D., Dander W. Defects in high purity iron after 27 K electron irradiation. Proceeding of International Conference on Fundamental Aspects of Radiation Damage in Metals. Gatlinburg. 1975, 463 p.
12. Allnatt A.R., Lidiard A.B. Atomic transport in solids. Cambridge University Press. 1993, 359 p.
13. Dudarev S.L. The non-Arrhenius migration of interstitial defects in bcc transition metals. C. R. Physique, 2008, v. 9, p. 409 – 417.

Сивак Александр Борисович — ОАО “Высокотехнологический НИИ неорганических материалов имени академика А.А.Бочвара” (г. Москва), кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник. Специалист в области физического радиационного материаловедения.

Романов Владимир Александрович — ФГУП “ГНЦ РФ Физико-Энергетический Институт имени А.И.Лейпунского” (г. Обнинск), кандидат физико-математических наук, научный сотрудник. Специалист в области физического радиационного материаловедения.

Чернов Вячеслав Михайлович — ОАО “Высокотехнологический НИИ неорганических материалов имени академика А.А.Бочвара” (г. Москва), доктор физико-математических наук, профессор, главный научный сотрудник, начальник отдела. Специалист в области физического радиационного материаловедения.