

УДК 544.022.344.2, 544.022.382

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ СОБСТВЕННЫХ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ С МАЛОУГЛОВЫМИ ГРАНИЦАМИ НАКЛОНА В ЖЕЛЕЗЕ И ВАНАДИИ

А.Б. Сивак^{1,2}, П.А. Сивак¹, В.А. Романов^{2,3}, В.М. Чернов^{2,4,5}

¹НИИ «Курчатовский институт», Москва, Россия

²Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск, Россия

³ФГУП ГНЦ РФ «Физико-энергетический институт имени А.И. Лейпунского», Обнинск, Россия

⁴АО «Высокотехнологический НИИ неорганических материалов имени академика А.А. Бочвара», Москва, Россия

⁵Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, Россия

Поля напряжений дислокационных скоплений (границ разных типов) оказывают значительное влияние на образование и кинетику собственных точечных дефектов (СТД: вакансий и межузельных атомов), определяя особенности образования и распада твёрдых растворов СТД. В связи с этим представляется важным исследовать влияние полей напряжений от дислокационных скоплений (границ) на энергетику образования и миграции СТД в кристаллах с разными степенями упругой анизотропии. В рамках анизотропной теории упругости рассчитана пространственная зависимость энергии взаимодействия СТД с малоугловыми границами наклона (бесконечные дислокационные стенки, состоящие из краевых дислокаций в системах скольжения $\langle 111 \rangle \{110\}$ и $\langle 111 \rangle \{112\}$) в ОЦК-кристаллах железа и ванадия. Определены расстояния до малоугловых границ, на которых это взаимодействие существенно влияет на поведение СТД, в зависимости от температуры и угла разориентировки границ. При однородной генерации СТД по всему объёму кристалла их потоки слева и справа на малоугловую границу наклона могут быть разными.

Ключевые слова: железо, ванадий, дислокационные стенки, малоугловые границы, поля напряжений, вакансии, собственные межузельные атомы, анизотропная теория упругости, взаимодействие, энергия образования и миграция собственных точечных дефектов.

INTERACTION OF SELF-POINT DEFECTS WITH LOW-ANGLE TILT BOUNDARIES IN BCC IRON AND VANADIUM CRYSTALS

A.B. Sivak^{1,2}, P.A. Sivak¹, V.A. Romanov^{2,3}, V.M. Chernov^{2,4,5}

¹NRC «Kurchatov Institute», Moscow, Russia

²Tomsk State University, Tomsk, Russia

³A.I. Leypunsky Institute of Physics and Power Engineering, Obninsk, Russia

⁴JSC «A.A. Bochvar High-technology Research Institute of Inorganic Materials», Moscow, Russia

⁵National Research Nuclear University «MEPhI», Moscow, Russia

Stress fields of dislocation agglomerations (boundaries of different types) significantly affect the formation and kinetics of self-point defects (SPDs: vacancies and self-interstitial atoms) determining additional features of formation and decomposition of SPD solid solutions. Therefore it is important to study the influence of the dislocation agglomerations (boundaries) stress fields on the SPD formation and migration energies in crystals with different elastic anisotropy. Spatial dependence of the interaction energy of SPDs with low-angle tilt boundaries (infinite dislocation walls consisting of edge dislocations in slip systems $\langle 111 \rangle \{110\}$ and $\langle 111 \rangle \{112\}$) in bcc iron and vanadium crystals has been calculated within the anisotropic theory of elasticity. Distances to the boundaries, at which this interaction appreciably affects the behaviour of SPDs against the temperature and the boundary misorientation angle have been determined. At spatially homogeneous generation of SPDs throughout the whole crystal volume, their fluxes from the left and the right onto a low-angle tilt boundary can differ.

Key words: iron, vanadium, dislocation walls, low-angle tilt boundaries, stress fields, vacancies, self-interstitial atoms, anisotropic theory of elasticity, interaction, self-point defects formation and migration energies.

ВВЕДЕНИЕ

Дислокации и их скопления разных типов являются основными источниками внутренних напряжений в металлических кристаллах и основанных на них конструкционных сталей и сплавов. Их поля напряжений оказывают значительное влияние на образование и кинетику собственных точечных дефектов (СТД: вакансий и межузельных атомов — СМА), определяя дополнительные (по сравнению с их отсутствием) особенности образования и распада твёрдых растворов СТД. В системе «дислокации—дислокационные скопления—СТД» формируются процессы, влияющие на основные радиационные свойства материалов (распухание, упрочнение, ползучесть, разрушение). Эти процессы зависят от симметрии кристаллических решёток, степени упругой анизотропии кристаллов и типов образующихся и

имеющихся в кристалле дефектов [1, 2]. В связи с этим представляется важным исследовать влияние полей напряжений от дислокаций дислокационных скоплений (границ) на энергетику образования и миграции СТД в кристаллах с разными степенями упругой анизотропии. Наибольший интерес представляют объёмно-центрированные кубические (ОЦК) металлические кристаллы Fe и V, являющихся основой для разработки конструкционных сталей и сплавов для ядерных и термоядерных энергетических реакторов. Разработка моделей, моделирование и полученные результаты являются основой для дальнейшего построения и развития моделей формирования и изменения микроструктуры (образование и переползание дислокаций) и свойств (жаропрочность, распухание, ползучесть, др.) металлов при внешних воздействиях разной природы (радиационных, термических, механических).

Для отдельных дислокаций разных типов и ориентаций соответствующие расчёты были сделаны ранее [3—7], где было исследовано влияние дислокационных полей напряжений на энергетические и кинетические характеристики СТД.

В данной работе рассмотрены дислокационные скопления в виде малоугловых границ наклона (МГН — бесконечные дислокационные стенки, состоящие из краевых дислокаций в основных системах скольжения $\langle 111 \rangle \{110\}$ и $\langle 111 \rangle \{112\}$) и исследовано влияние их полей напряжений на образование и направление миграции СТД в ОЦК-кристаллах Fe и V. Кристаллы Fe и V обладают различными факторами упругой анизотропии $A = 2C_{44}/(C_{11} - C_{12})$, равными 2,32 и 0,81 для Fe и V (при температурах, близких к 0 К) соответственно (C_{11} , C_{12} и C_{44} — упругие постоянные [2, 8, 9]).

Результаты получены в рамках единого комплекса разработанных моделей, методов и программ, включающих:

- полуэмпирическую модель переходного металла [10], использованную для компьютерного моделирования дефектов в ОЦК-кристаллах Fe и V, описывающую взаимодействия между ионными остовами металла посредством разработанных многочастичных полуфеноменологических потенциалов межатомного взаимодействия [10, 11];

- расчёт методом молекулярной статики (МС) характеристик (энергии образования и миграции, релаксационный объём, дипольный тензор) СТД, находящихся в стабильных, метастабильных и седловых конфигурациях;

- проведение расчётов методами [1, 2] анизотропной линейной теории упругости (АЛТУ) упругих полей напряжений дислокаций, образующих МГН, и определение энергии взаимодействия таких полей с СТД (упругими диполями) в зависимости от пространственного расположения СТД и типа МГН.

ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ И КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ СТД

Рассчитанные МС-методом энергетические и кристаллографические характеристики СТД (упругих диполей, определяемых дипольным тензором P_{ij}) в стабильных и метастабильных конфигурациях в кристаллических решётках Fe и V без напряжений приведены в [3, 5, 6, 11].

Наиболее устойчивой конфигурацией СМА является гантель $\langle 110 \rangle$ (в отсутствие полей напряжений). Миграция гантели $\langle 110 \rangle$ происходит путём скачка гантели в один из ближайших узлов решётки с поворотом оси гантели на 60° и характеризуется энергией миграции 0,25 эВ и 0,17 эВ для Fe и V соответственно. Упругий диполь, соответствующий седловой конфигурации гантели $\langle 110 \rangle$, обладает 12 возможными эквивалентными ориентациями (моноклинная симметрия) [4, 5].

Миграция вакансии происходит путём термоактивированного скачка одного из ближайших к вакансии атомов кристалла в вакантный узел и характеризуется энергией миграции 0,73 эВ и 0,42 эВ в Fe и V соответственно. Упругий диполь, соответствующий седловой конфигурации вакансии, имеет четыре возможные эквивалентные ориентации (тригональная симметрия) [4].

УПРУГИЕ ПОЛЯ МГН

Рассмотрим возникающие в кристалле поля напряжений от МГН. МГН можно рассматривать как дислокационную стенку, состоящую из краевых дислокаций, находящихся в одной системе скольжения [2, 12]. Поле напряжений от единичной дислокации в рамках анизотропной теории упругости описывается соотношением [4]

$$\sigma_{ij}^d(x, y) = \operatorname{Re} \left(-\frac{1}{2\pi i} \sum_{n=1}^3 \frac{c_{ijn}}{x + p_n y} \right), \quad (1)$$

где c_{ijn} , p_n — постоянные для данной дислокации, зависящие от упругих постоянных материала и от типа дислокации; Re — действительная часть аргумента; i — мнимая единица. Дислокации параллельны оси z , вектор Бюргера параллелен оси x и перпендикулярен плоскости МГН.

Суммарное напряжение, создаваемое всеми дислокациями в точке (x, y) , определяется суммой

$$\sigma_{ij}(x, y) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sigma_{ij}^d(x, y - nh), \quad (2)$$

где h — расстояние между дислокациями в стенке. Используя формулу суммирования Пуассона [12]

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} f(n) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \exp(2\pi i k x) dx \quad (3)$$

и выражение (1), для поля напряжений от МГН получим

$$\sigma_{ij}(x, y) = -\frac{1}{h} \frac{|x|}{x} \sum_{n=1}^3 \sum_{k=1}^{\infty} \operatorname{Re} \left(\frac{c_{ijn}}{p_n} \exp \left(-\frac{2\pi i k |x|}{h} \left(y + \frac{x}{p_n} \right) \right) \right) \quad (4)$$

или эквивалентное выражение

$$\sigma_{ij}(x, y) = -\frac{1}{h} \frac{|x|}{x} \sum_{n=1}^3 \sum_{k=1}^{\infty} \operatorname{Re} \left(\frac{c_{ijn}}{p_n} \exp \left(-\frac{2\pi i k |x|}{h} \left(y + x \frac{\operatorname{Re} p_n}{|p_n|^2} \right) \right) \right) \exp \left(-\frac{2\pi k}{h} \frac{\operatorname{Im} p_n}{|p_n|^2} |x| \right), \quad (5)$$

где Im — мнимая часть аргумента.

Из (5) видно, что при достаточно больших x скорость спада $\sigma_{ij}(x, y)$ зависит от величины $\alpha = \min_{n=1...3} (\operatorname{Im} p_n / |p_n|^2)$. В изотропном приближении $\alpha = 1$, в анизотропных материалах $\alpha < 1$. В кристалле Fe $\alpha \approx 0,5$, что обуславливает более медленный спад полей напряжений с расстоянием от МГН в анизотропной теории по сравнению с изотропной. В кристалле V, который является менее упруго анизотропным материалом по сравнению с кристаллом Fe, параметр $\alpha \approx 0,9$.

При расчётах полей напряжений МГН по соотношению (5) производилось суммирование k_{\max} членов ряда по k . Величина k_{\max} определялась из эмпирически полученного соотношения, которое обеспечивает высокую точность расчётов:

$$k_{\max} = 1 + \operatorname{int}(2h/|x|), \quad (6)$$

где $\operatorname{int}(a)$ — наибольшее целое, не превосходящее величину a .

Из (5) следует общее для рассматриваемых дислокационных стенок соотношение

$$\sigma_{ij}(x, y) = -\sigma_{ij}(-x, -y). \quad (7)$$

Дислокации в системе скольжения $\langle 111 \rangle \{112\}$ лежат вдоль оси симметрии 2-го порядка, поэтому для МГН $\langle 111 \rangle \{112\}$ добавляется соотношение

$$\sigma_{13}(x, y) = \sigma_{23}(x, y) \equiv 0. \quad (8)$$

Нормаль к плоскости скольжения краевых дислокаций в системе скольжения $\langle 111 \rangle \{110\}$ является осью симметрии 2-го порядка, поэтому для МГН $\langle 111 \rangle \{110\}$ дополнительно к (7) выполняются соотношения

$$\sigma_{ij}(x, y) = \sigma_{ij}(-x, y), \quad ij = 11, 13, 22, 33; \quad (9)$$

$$\sigma_{ij}(x, y) = -\sigma_{ij}(-x, y), \quad ij = 12, 23. \quad (10)$$

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ СТД С УПРУГИМИ ПОЛЯМИ МГН

Рассмотрим миграцию вакансий и СМА в полях напряжений МГН. Анизотропия миграции СТД в поле механических напряжений определяется взаимодействием СТД в седловой конфигурации с упругим полем [3—7]. Энергию взаимодействия E^{int} упругих полей МГН с СТД (упругими диполями) в рамках АЛТУ можно представить в виде [1, 13, 14]

$$E^{\text{int}}(x, y) = -P_{ij} \varepsilon_{ij}(x, y) = -P_{ij} S_{ijkl} \sigma_{kl}(x, y), \quad (11)$$

где ε_{ij} — тензор упругой деформации, создаваемый МГН; S_{ijkl} — тензор упругих податливостей кристалла.

На рис. 1, 2 представлены рассчитанные пространственные зависимости направлений миграции СМА и вакансии с наименьшей энергией миграции (наиболее вероятные направления миграции) в полях напряжений МГН, состоящих из краевых дислокаций $\langle 111 \rangle \{110\}$ и $\langle 111 \rangle \{112\}$ в Fe и V соответственно. Вид рис. 1, 2 не зависит от величины h , так как из (4) видно, что все компоненты тензора напряжений МГН при изменении h изменяются единообразно обратно пропорционально величине h для точки с координатами $x/h, y/h$.

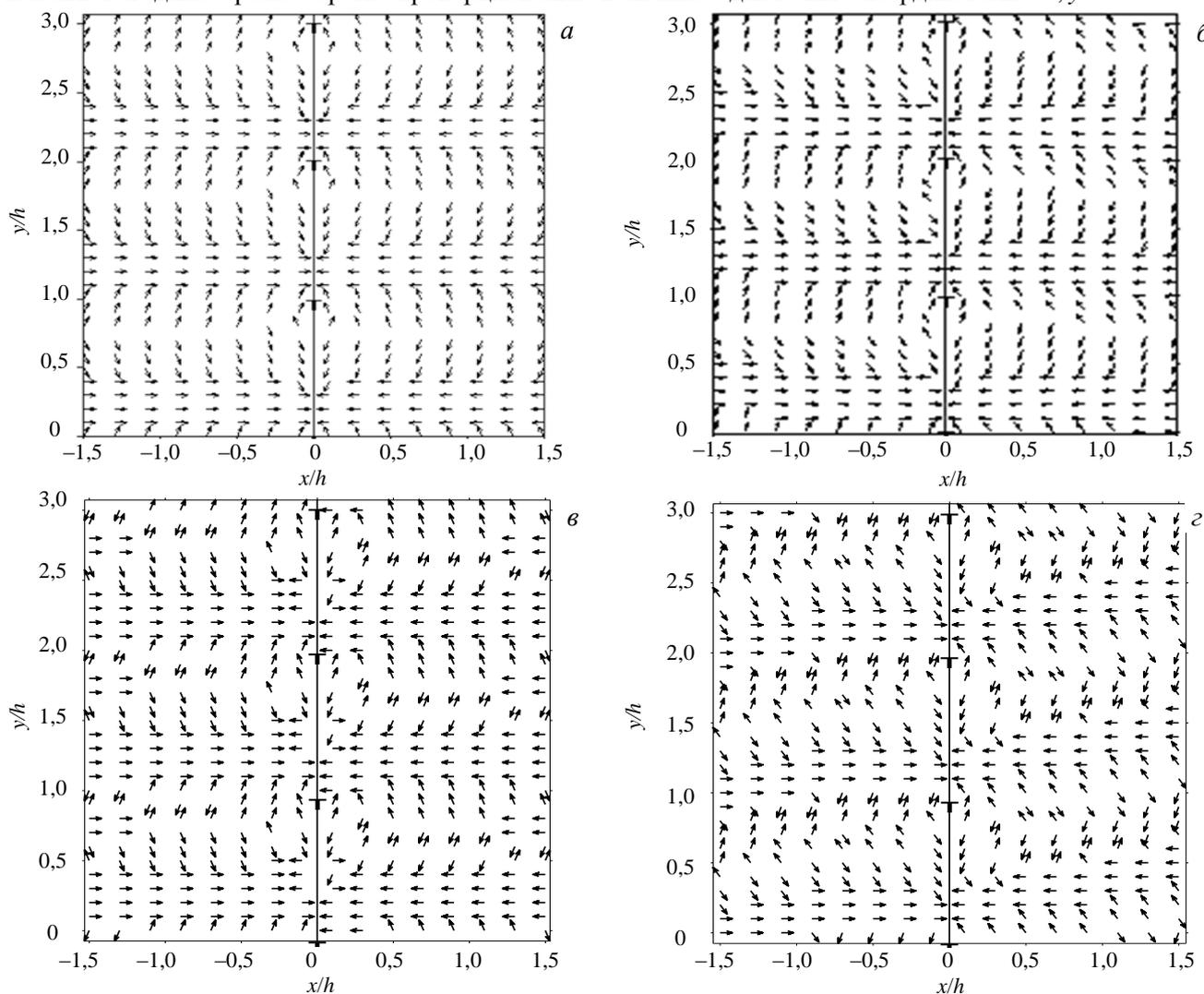


Рис. 1. Пространственная зависимость направлений миграции СМА с наименьшей энергией миграции в упругом поле малоугловых границ наклона в Fe и V: *a* — кристалл Fe, граница $\langle 111 \rangle \{110\}$; *б* — кристалл Fe, граница $\langle 111 \rangle \{112\}$; *в* — кристалл V, граница $\langle 111 \rangle \{110\}$; *г* — кристалл V, граница $\langle 111 \rangle \{112\}$

На рис. 1 видно, что для всех рассмотренных случаев в области ординат $0,1h < y < 0,4h$ наиболее вероятным направлением миграции СМА является ведущее к плоскости МГН направление $\langle 111 \rangle$, совпадающее с вектором Бюргерса дислокаций стенки.

В поле напряжений рассмотренных МГН в кристалле Fe движение СМА по траектории с наименьшей энергией миграции ведёт к плоскости МГН вне зависимости от начального положения СМА. В поле МГН в кристалле V движение СМА по такой траектории не ведёт к плоскости МГН, если начальное положение СМА находится в области ординат $0,5h < y < h$ (см. рис. 1, *в, г*).

На рис. 2 видно, что для всех рассмотренных случаев в области ординат $0,6h < y < 0,9h$ наиболее вероятным направлением миграции вакансии является ведущее к плоскости МГН направление $\langle 111 \rangle$, совпадающее с вектором Бюргерса дислокаций стенки. На рис. 2 также видно, что в поле МГН движение вакансии по траектории с наименьшей энергией миграции не ведёт к плоскости МГН, если начальное положение вакансии находится в области ординат $0 < y < 0,5h$ (см. рис. 2, *в, г*). В этой области поле МГН «тормозит» продвижение вакансии к МГН, делая выгодными направления миграции вакансии вперёд-назад.

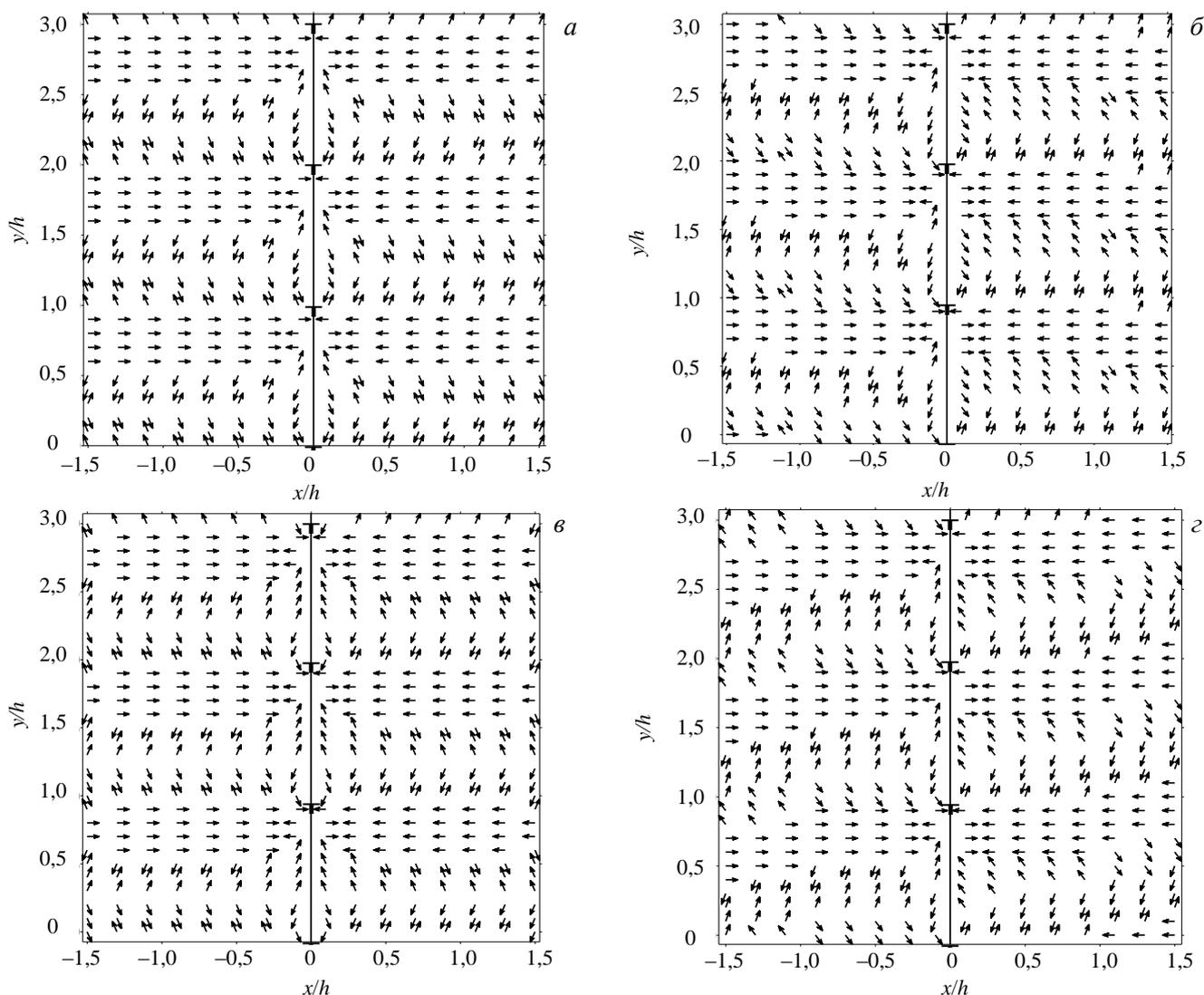


Рис. 2. Пространственная зависимость направлений миграции вакансии с наименьшей энергией миграции в упругом поле малоугловых границ наклона в Fe и V: *a* — кристалл Fe, граница $\langle 111 \rangle \{110\}$; *б* — кристалл Fe, граница $\langle 111 \rangle \{112\}$; *в* — кристалл V, граница $\langle 111 \rangle \{110\}$; *г* — кристалл V, граница $\langle 111 \rangle \{112\}$

В целом по результатам анализа рис. 1, 2 можно сделать вывод, что поля напряжений МГН ускоряют диффузию СТД к плоскости МГН. Энергетический ландшафт напоминает периодически чередующиеся хребты и долины, тянущиеся к МГН. Причём уровень долин понижается по мере приближения к МГН, а высота хребтов растёт. СТД быстро «скатываются» с хребтов в долины и далее двигаются вниз по уклону к МГН. Долины расположены в области ординат $0,1h < y < 0,4h$ для СМА (см. рис. 1) и $0,6h < y < 0,9h$ для вакансий (см. рис. 2).

Для того чтобы потоки СТД на МГН слева и справа совпадали при однородной генерации СТД по всему кристаллу, необходимо, чтобы энергии миграции в произвольной точке (x, y) совпадали с энергиями миграции в точке $(-x, y)$ для направлений, симметричных относительно поворота вокруг оси y на угол π . Рассмотрим выполнимость этого условия для рассматриваемых типов МГН и СТД.

Для потока вакансий к МГН $\langle 111 \rangle \{110\}$ вследствие (9), (10) и тригональной симметрии дипольного тензора седловой конфигурации вакансии это условие выполняется. Симметрия наиболее вероятных направлений миграции вакансии относительно поворота вокруг оси y на угол π хорошо видна на рис. 2, *a, в*.

Для гантели $\langle 110 \rangle$ это условие не выполняется, так как её седловая конфигурация обладает более низкой моноклинной симметрией. При моноклинной симметрии дипольный тензор обладает четырьмя независимыми компонентами. Например, в кристаллографической системе координат в качестве независимых могут быть выбраны компоненты $P_{11}, P_{22}, P_{12}, P_{13}$. Остальные компоненты можно выразить через значения указанных компонентов: $P_{33} = P_{11}, P_{23} = P_{12}$. Тригональная симметрия накладывает следующие соотношения на компоненты дипольного тензора: $P_{22} = P_{33} = P_{11}, P_{13} = P_{23} = P_{12}$. О степени отклонения

дипольного тензора с моноклинной симметрией от тригональной симметрии можно судить по разностям $P_{11} - P_{22}$ и $P_{23} - P_{12}$, которые равны 0 в случае тригональной симметрии. Для дипольного тензора седловой конфигурации гантели $\langle 110 \rangle$ эти разности равны 0,31 и 1,90 эВ для кристалла Fe и 1,73 и 2,82 эВ для кристалла V. Из приведённых значений видно, что дипольный тензор седловой конфигурации гантели $\langle 110 \rangle$ в кристалле Fe значительно ближе к тригональной симметрии, чем в кристалле V. Поэтому на рис. 1, а для кристалла Fe наблюдается заметно меньшее количество нарушений симметрии относительно поворота вокруг оси y на угол π по сравнению с рис. 1, в для кристалла V.

В случае МГН $\langle 111 \rangle \{112\}$ симметрия для направлений миграций СТД относительно поворота вокруг оси y на угол π отсутствует (ось y лежит вдоль оси симметрии 1-го порядка), а (9), (10) не выполняются. Поэтому потоки СТД к МГН $\langle 111 \rangle \{112\}$ слева и справа будут различны как для вакансий, так и для СМА. Отсутствие симметрии наиболее вероятных направлений миграции СТД относительно поворота вокруг оси y на угол π видно на рис. 1, б, г и рис. 2, б, г.

Из проведённого анализа следует, что потоки СТД слева и справа на МГН в общем случае не равны. Равенство потоков может возникнуть лишь в частных случаях симметрии полей напряжений МГН и седловых конфигураций СТД.

Рассмотрим вопрос о том, насколько далекодействующим является взаимодействие МГН с СТД. В качестве величины, характеризующей это взаимодействие, возьмём максимальную разность между энергиями миграции СТД в различных направлениях ΔE .

На рис. 3 представлена зависимость ΔE от расстояния x до МГН $\langle 111 \rangle \{110\}$ с различными периодами h в кристаллах Fe и V. Аналогичные зависимости для МГН $\langle 111 \rangle \{112\}$ практически совпадают с

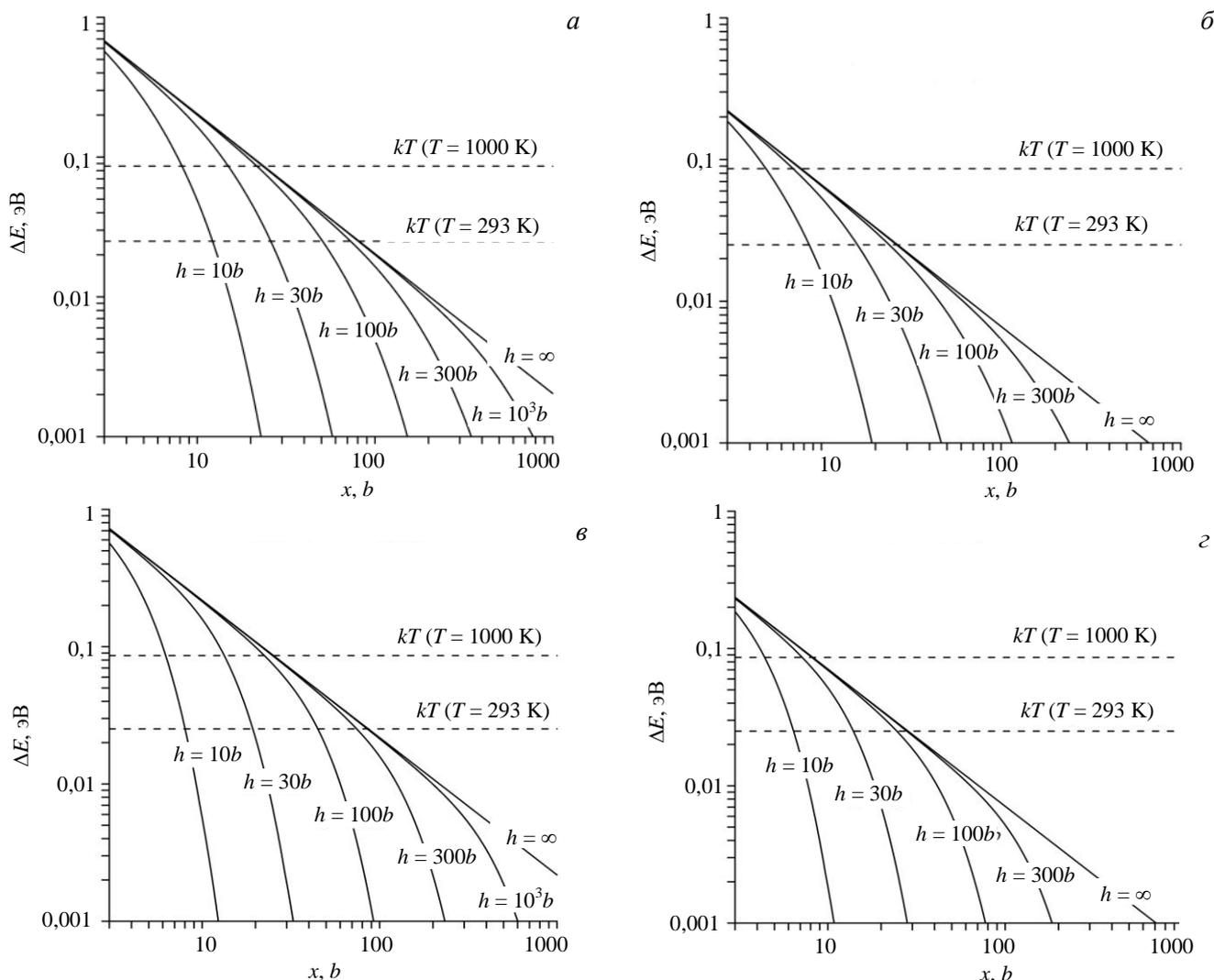


Рис. 3. Зависимость максимальной разности между энергиями миграции СТД в различных направлениях от расстояния x до малоугловой границы наклона $\langle 111 \rangle \{110\}$: - - - — величины kT при температурах $T = 293$ К и $T = 1000$ К; а — кристалл Fe, СМА; б — кристалл Fe, вакансия; в — кристалл V, СМА; г — кристалл V, вакансия

представленными на рис. 3 зависимостями. Величина ΔE уменьшается с ростом x в кристалле V (см. рис. 3, в, з) гораздо быстрее, чем в кристалле Fe (см. рис. 3, а, б), из-за большего отклонения величины показателя упругой анизотропии A в Fe от единицы ($A = 1$ в изотропном случае). Пунктирными прямыми на рис. 3 представлены значения величин тепловой энергии kT (здесь k — постоянная Больцмана, T — температура, К) при температурах $T = 293$ К и $T = 1000$ К, характеризующие уровень энергии, на котором взаимодействие МГН с СТД становится сравнимым по порядку с величиной тепловых флуктуаций. На рис. 4 представлены зависимости расстояния x_{kT} , на котором $\Delta E = kT$, от величины h для МГН $\langle 111 \rangle \{110\}$ при $T = 293$ К и $T = 1000$ К в кристаллах Fe и V. Для $T = 293$ К зависимости $x_{kT}(h)$ для

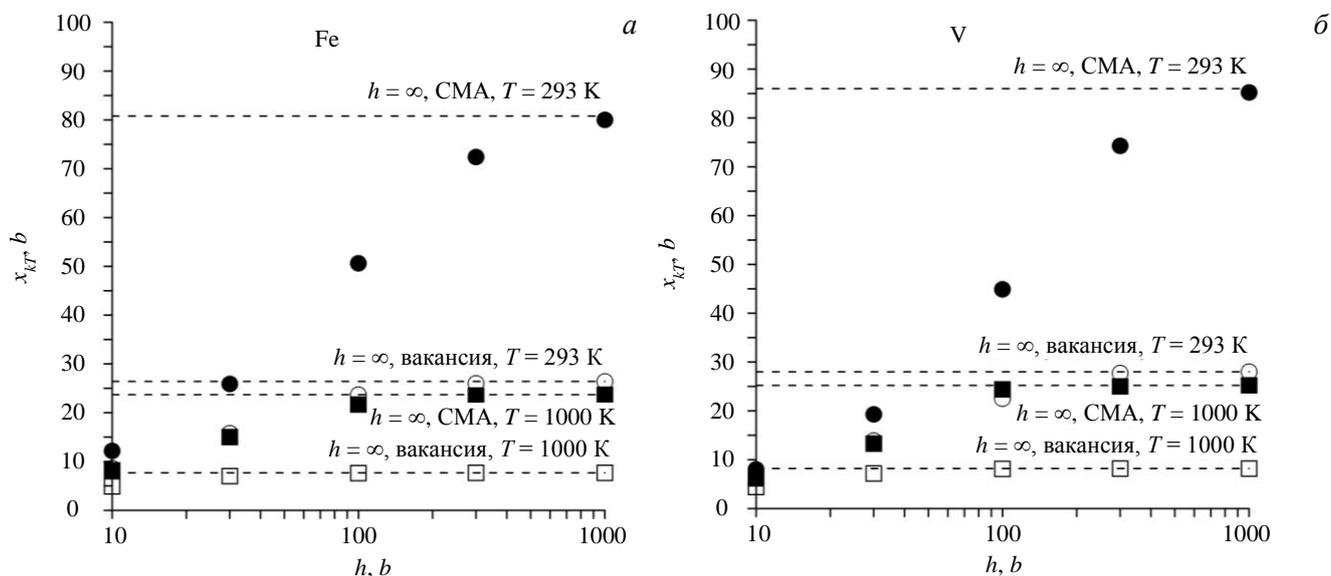


Рис. 4. Зависимость расстояния x_{kT} до малоугловой границы наклона $\langle 111 \rangle \{110\}$, на котором максимальная разность между энергиями миграции СТД в различных направлениях равна величине kT , от величины периода h между дислокациями в границе при температурах $T = 293$ К и $T = 1000$ К: - - - — асимптотические значения x_{kT} при $h \rightarrow \infty$; а — кристалл Fe; б — кристалл V; ● — СМА, $T = 293$ К; ○ — вакансия, $T = 293$ К; ■ — СМА, $T = 1000$ К; □ — вакансия, $T = 1000$ К

СМА и вакансии практически выходят на асимптотические значения $x_{kBT}(\infty)$ для одиночной дислокации при $h \geq 1000b$ и $h \geq 300b$ соответственно. Для $T = 1000$ К соответствующие зависимости $x_{kBT}(h)$ выходят на асимптотические значения при $h \geq 100b$ и $h \geq 30b$ соответственно. Следовательно, при величинах h больше указанных при расчёте энергий взаимодействий МГН с СТД на расстояниях меньше x_{kT} эффекты суперпозиции дислокационных полей незначительны.

Отношение величин x_{kT} для СМА и вакансии составляет $\sim 1,4$ при $h = 10b$ в кристаллах Fe и V. Данное отношение увеличивается до ~ 3 с ростом h .

ВЫВОДЫ

В рамках анизотропной линейной теории упругости (АЛТУ) рассчитаны упругие поля напряжений малоугловых границ наклона (МГН — дислокационные стенки из краевых дислокаций типа $\langle 111 \rangle \{110\}$ и $\langle 111 \rangle \{112\}$ с периодическим расстоянием между ними $h = (10\text{—}1000)b$, где b — модуль вектора Бюргера дислокаций стенки) в ОЦК-кристаллах Fe и V. Учёт упругой анизотропии материалов приводит к более медленному спаду величины полей напряжений с расстоянием от МГН по сравнению с изотропным приближением (уменьшается показатель экспоненциального множителя в выражении для компонентов тензора напряжения).

В рамках АЛТУ рассчитаны энергии взаимодействия собственных точечных дефектов (СТД — упругих диполей) в основных и седловых конфигурациях с упругими полями МГН в ОЦК-кристаллах Fe и V. Упругие поля МГН ускоряют диффузию СТД к плоскости МГН. Энергетический ландшафт (поверхность миграции СТД) напоминает периодически чередующиеся хребты и долины, тянущиеся к МГН. Причём уровень долин понижается по мере приближения к МГН, а высота хребтов растёт. СТД быстро «скатываются» с хребтов в долины и далее двигаются вниз по уклону к МГН. Долины для СМА про-

странственно примерно расположены на месте хребтов для вакансий, а долины для вакансий примерно пространственно совпадают с хребтами для СМА.

Определены расстояния x_{kT} до МГН, на котором максимальная разность между энергиями миграции СТД в различных направлениях равна величине тепловой энергии kT . Величины x_{kT} для СМА больше в $\sim 1,4$ —3 раза величин x_{kT} для вакансий в зависимости от величины h .

Потоки точечных дефектов слева и справа на МГН при их однородной генерации по всему объёму кристалла не равны в общем случае. Среди рассмотренных типов МГН и СТД только в случае МГН $\langle 111 \rangle \{110\}$ потоки вакансий слева и справа на МГН равны.

Работа выполнена при поддержке Государственной корпорации по атомной энергии «Росатом» в рамках государственного контракта Н.4х.44.90.13.1082 с АО «ВНИИНМ».

REFERENCES

1. **Elastic Strain Fields and Dislocation Mobility.** Eds. V.L. Indenbom and J. Lothe. — North-Holland, Amsterdam: Elsevier Science, 1992. 793 p.
2. **Hirth J.P., Lothe J.** Theory of Dislocations. — New York: Wiley, 1982. 857 p.
3. **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, vol. 367—370, pp. 316—321.
4. **Sivak A.B., Chernov V.M., Romanov V.A.** Migration of self-point defects in dislocation elastic fields in BCC iron crystal. — VANT. Ser. Materialovedenie i novye materialy (Problems of Atomic Science and Technology. Ser. Material authority and new materials), 2008, vol. 2(71), pp. 155—167 (in Russian).
5. **Sivak A.B., Romanov V.A., Chernov V.M.** Diffusion of self-point defects in body-centered cubic iron crystal containing dislocations. — Crystallography Reports, 2010, vol. 55, № 1, pp. 97—108.
6. **Sivak A.B., Chernov V.M., Romanov V.A., Sivak P.A.** Kinetic Monte-Carlo simulation of self-point defect diffusion in dislocation elastic fields in bcc iron and vanadium. — J. Nucl. Mater., 2011, vol. 417, pp. 1067—1070.
7. **Sivak A.B., Sivak P.A., Romanov V.A., Chernov V.M.** The efficiency of dislocation sinks for self-point defects in iron and vanadium crystals. — Perspektivnye materialy (Perspective materials), 2014, № 10, pp. 5—16 (in Russian).
8. **Rayne J.A., Chandrasekhar B.S.** Elastic constants of iron from 4.2 to 300 K — Phys. Rev., 1961, vol. 122, pp. 1714—1716.
9. **Bolef D.I., Smith R.E., Miller J.G.** Elastic properties of vanadium. I. Temperature dependence of the elastic constants and the thermal expansion. — Phys. Rev. B, 1971, vol. 3, pp. 4100—4108.
10. **Romanov V.A., Sivak A.B., Chernov V.M.** Crystallographic, energetic and kinetic characteristics of self-point defects and their clusters in BCC iron. 1. The semi-empirical model of BCC iron and potential of the interatomic interaction. — VANT. Ser. Materialovedenie i novye materialy (Problems of Atomic Science and Technology. Ser. Material authority and new materials), 2006, vol. 1(66), pp. 129—150 (in Russian).
11. **Romanov V.A., Sivak A.B., Sivak P.A., Chernov V.M.** Equilibrium and diffusion characteristics of self-point defects in vanadium. — VANT. Ser. Termoyadernyi sintez (Problems of Atomic Science and Technology. Ser. Thermonuclear Fusion), 2012, issue 2, pp. 60—80 (in Russian).
12. **Kosevich A.M.** Foundations of crystal lattice mechanics. — M.: Nauka (Science), 1972. 280 p. (in Russian).
13. **Eshelby J.D.** Continuum theory of lattice defects. — In: Solid State Physics, Eds. F. Seitz, D. Turnbull. — New York: Academic Press, 1956, vol. 3, pp. 79—144.
14. **Kröner E.** Allgemeine Kontinuumstheorie der Versetzungen und Eigenspannungen. — Arch. Rational Mech. Anal., 1959/60, vol. 4, № 1, pp. 273—334.

AUTHORS

Sivak A.B. NRC «Kurchatov Institute», pl. Kurchatova 1, 123182 Moscow, Russia; Tomsk State University, Lenin Prospect 36, 634050 Tomsk, Russia; Sivak_AB@nrcki.ru

Sivak P.A. NRC «Kurchatov Institute», pl. Kurchatova 1, 123182 Moscow, Russia; Sivak_PA@nrcki.ru

Romanov V.A. Tomsk State University, Lenin Prospect 36, 634050 Tomsk, Russia; A.I. Leipunskij Institute of Physics and Power Engineering, pl. Bondarenko 1, 249030 Obninsk, Kaluga reg., Russia; Romanov-ippe@mail.ru

Chernov V.M. JSC «A.A. Bochvar High-Technology Research Institute of Inorganic Materials», Rogova ul. 5a, 123060 Moscow, Russia; Tomsk State University, Lenin Prospect 36, 634050 Tomsk, Russia; National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute), Kashirskoye shosse 31, 115409 Moscow, Russia; VMChernov@bochvar.ru

Received 7 November 2014
 Problems of Atomic Science and Technology
 Ser. Thermonuclear Fusion, 2015, vol. 38, issue 2, pp. 43—50