

УДК 544.022.341, 544.022.382

**ДИФФУЗИОННЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ СОБСТВЕННЫХ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ В МЕДИ:
МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ***А.Б. Сивак, Д.Н. Демидов, П.А. Сивак**НИИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия*

Методами молекулярной статики (МС) и молекулярной динамики (МД) получены энергетические, кристаллографические и диффузионные характеристики вакансий и собственных межузельных атомов (СМА) в гранецентрированном кубическом (ГЦК) кристалле меди. Температурные зависимости коэффициентов диффузии и самодиффузии в расчёте на один собственный точечный дефект (СТД) вычислены в температурных диапазонах 750—1300 и 300—1300 К для вакансий и СМА соответственно. Температурные зависимости коэффициентов диффузии вакансий во всём рассмотренном температурном диапазоне хорошо описываются зависимостью Аррениуса с энергией активации миграции 0,73 эВ, а соответствующие зависимости для СМА в температурном диапазоне 300—800 К — с энергией активации миграции 0,08 эВ. Диффузия СТД имеет существенно трёхмерный характер при всех температурах. Полученные МД-результаты хорошо согласуются с известными экспериментальными данными.

Ключевые слова: медь, молекулярная динамика, потенциал межатомного взаимодействия, объёмные свойства кристалла, радиационные дефекты, диффузия.

**DIFFUSION CHARACTERISTICS OF SELF-POINT DEFECTS IN COPPER:
MOLECULAR DYNAMICS STUDY***A.B. Sivak, D.N. Demidov, P.A. Sivak**NRC «Kurchatov Institute», Moscow, Russia*

The energetic, crystallographic and diffusion characteristics of vacancies and self-interstitial atoms (SIAs) in fcc copper crystal have been obtained by molecular statics (MS) and molecular dynamics (MD). The temperature dependences of the diffusion and self-diffusion coefficients per a self-point defect (SPD) have been calculated in the temperature ranges 750—1300 and 300—1300 K for vacancies and SIAs, respectively. Arrhenius-type dependences describe well the temperature dependences of the vacancy diffusivities in the considered temperature range with migration activation energy of 0.73 eV and the corresponding dependences for SIAs in the temperature range 300—800 K with migration activation energy of 0.08 eV. Diffusion of SPDs has an essentially three-dimensional character at all the temperatures. The obtained MD results are in good agreement with the known experimental data.

Key words: copper, molecular dynamics, interatomic interaction potential, crystal bulk properties, radiation defects, diffusion.

DOI: 10.21517/0202-3822-2021-44-1-106-118

ВВЕДЕНИЕ

Медь и сплавы на её основе (например, хромциркониевая бронза) планируются к использованию в качестве функциональных материалов термоядерных реакторов [1—3], так как эти материалы обладают прекрасными тепло- и электропроводящими свойствами. В процессе работы перспективных термоядерных установок материалы активной зоны будут подвергаться значительным радиационным нагрузкам [3, 4]. Полностью воспроизвести рабочие условия материалов (температура, нейтронный спектр, повреждающая доза, др.) не всегда возможно в радиационных экспериментах, проводимых в реакторах деления, что вносит неопределённость в определение эксплуатационного ресурса материалов. Одним из путей, направленных на уменьшение разрыва между имеющимися и необходимыми знаниями о радиационных свойствах материалов, является использование физически обоснованных моделей изменения свойств материалов под повреждающим облучением (например, радиационное вакансионное распухание, радиационная ползучесть). Их предсказательная способность зависит от надёжности знания характеристик радиационных дефектов — собственных точечных дефектов (СТД) и их кластеров, которые являются параметрами таких моделей. В связи со значительными трудностями в определении характеристик радиационных дефектов экспериментальными методами существует востребованность методов компьютерного моделирования на основе атомистических моделей.

Достоверность результатов атомистических моделей определяется точностью описания межатомных взаимодействий. Поэтому используемый потенциал межатомного взаимодействия (ПМВ) в моделирующих исследованиях обязательно должен быть подвергнут критическому анализу на

предмет воспроизведения известных из экспериментов свойств кристалла и его дефектов. В [5, 6] проводились проверка точности опубликованного в [7] потенциала EAM1 и разработка новых потенциалов (потенциал Cu1, разработанный в [5], его несколько модифицированный в [6] вариант Cu2, разработанный в [8] и модифицированный в [5] потенциал ABCNM) для исследования кинетики кристаллизации из глубоко переохлаждённых расплавов меди [5] и взаимодействий собственных межузельных атомов (СМА) с двойниковыми границами [6]. Потенциалы, разработанные в [5, 6], лучше описывают свойства жидкой фазы, но потенциал EAM1 лучше согласуется с экспериментальными данными относительно свойств дефектов кристаллической решётки (например, в отношении энергии миграции вакансии). В [9] имеются данные о температурных зависимостях диффузионных характеристик СМА в меди, рассчитанных методом молекулярной динамики (МД) с помощью ПМВ [10, 11], менее точно описывающих экспериментальные данные о свойствах кристалла меди и его дефектов по сравнению с ПМВ EAM1. МД-данных по диффузии вакансий в меди в публикациях обнаружить не удалось. В настоящей работе для моделирования СТД в меди используется ПМВ EAM1, разработанный в [7]. Его параметризация проводилась так, чтобы некоторый набор модельных свойств кристалла и его дефектов максимально хорошо воспроизводил соответствующий набор экспериментальных данных. Затем этот ПМВ был протестирован в отношении описания известных свойств кристалла, которые не использовались при его параметризации, при этом вновь было получено хорошее согласие в отношении описания таких свойств. В настоящей работе проводится дополнительное тестирование данного ПМВ на предмет сравнения с рядом иных экспериментальных данных и с его помощью исследуются диффузионные характеристики СТД-методом МД в температурных диапазонах 750—1300 и 250—1300 К для вакансий и СМА соответственно.

ПОТЕНЦИАЛ МЕЖАТОМНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

ПМВ EAM1 для Cu [7] разработан в рамках метода погружённого атома (МПА) [12], в котором полная потенциальная энергия системы частиц записывается как $E_{\text{tot}} = \frac{1}{2} \sum_{ij} U(r_{ij}) + \sum_i F(\bar{\rho}_i)$, где $U(r_{ij})$ — парный потенциал как функция расстояния r_{ij} между атомами i и j , F — энергия погружения как функция электронной плотности, создаваемой в положении i всеми остальными атомами системы. Последняя записывается как $\bar{\rho}_i = \sum_{j \neq i} \rho(r_{ij})$, где $\rho(r)$ — функция электронной плотности.

При создании ПМВ EAM1 его параметры оптимизировались путём минимизации взвешенного среднеквадратического отклонения выбранных свойств меди от их целевых величин, взятых из эксперимента или полученных расчётами в рамках теории функционала электронной плотности (ТФП). Помимо параметра решётки при 0 К a_0 , энергии когезии E_0 и объёмного модуля B , экспериментальная часть базы данных, к которой подгонялись параметры ПМВ, содержала упругие постоянные второго порядка (УПВП) c_{ij} , фононные частоты в точке X на границе зоны Бриллюэна, энергию образования E^F и энергию миграции E^M вакансии и энергию дефекта упаковки вычитания. Также с небольшим весом учитывались значения температурного расширения при некоторых температурах и равновесная энергия связи димера (двух атомов) меди. Дополнительно требовалось, чтобы энергия идеального кристалла с ГЦК-решёткой следовала уравнению состояния Розе [13] так точно, как возможно. ТФП-часть подгоночной базы данных содержала избыточную энергию ГПУ- и ОЦК-структур относительно ГЦК-структуры. Короткодействующая часть потенциала оптимизировалась отдельно, чтобы воспроизвести ТФП-значения энергий ГЦК-структуры и димера при сильных сжатиях. Чтобы убедиться в надёжности используемого ПМВ, необходимо протестировать его в отношении описания свойств решётки и её дефектов, которые не использовались при разработке потенциала, а также убедиться в том, что в области малых r парный потенциал $U(r)$ близок к универсальному экранированному потенциалу ZBL [14] для Cu, что позволяет обоснованно использовать ПМВ для моделирования каскадов атомных столкновений.

Короткодействующая часть $U(r)$. Функция $U(r)$ для $r < 200$ пм показана на рис. 1 вместе с универсальным экранированным кулоновским потенциалом ZBL для Cu. Видно, что с уменьшением r потенциал

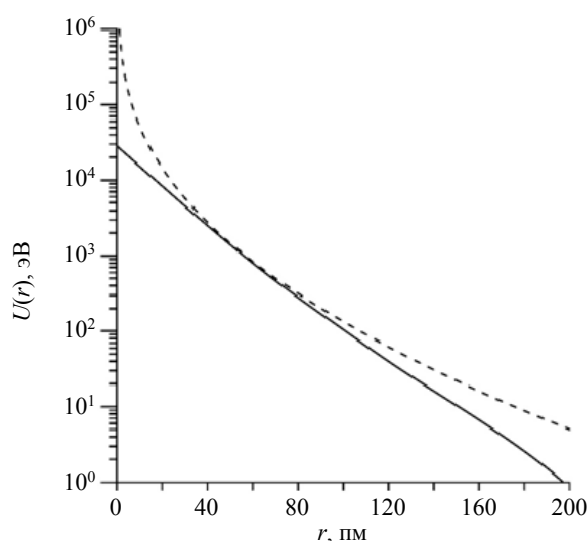


Рис. 1. Отталкивательная ветвь парной части потенциала взаимодействий EAM1 [7] (—) и универсальный экранированный кулоновский потенциал ZBL [14] (---)

EAM1 стремится к потенциалу ZBL, практически соприкасаясь с ним при $r \approx 50$ пм. При дальнейшем уменьшении r потенциалы быстро расходятся. Короткодействующая часть $U(r)$ важна при моделировании каскадов атомных столкновений. На рис. 1 видно, что потенциал EAM1 пригоден для моделирования каскадов с повреждающей энергией до ~ 1 кэВ, так как при данной энергии потенциалы EAM1 и ZBL близки. Для более высокоэнергетических каскадов необходимо модифицировать функцию $U(r)$, чтобы она плавно переходила в потенциал ZBL, что несложно сделать, так как значения этих потенциалов и их первых производных близки при $r \approx 50$ пм, как уже было сказано.

Равновесный параметр решётки и упругие постоянные при 0 К. В табл. 1 сведены объёмные свойства ГЦК-кристалла меди, рассчитанные с использованием ПМВ EAM1 при 0 К в [5] и в настоящей

работе, а также результаты экспериментальных измерений этих же свойств (температуры, при которых проводились измерения, указаны в примечании к таблице). Погрешность экспериментального определения упругих постоянных c_{11} , c_{12} , c_{44} не превышает 0,5%, а их производных по давлению — нескольких процентов.

Т а б л и ц а 1. Объёмные свойства меди, рассчитанные с использованием ПМВ EAM1 [5], для 0 К в сравнении с экспериментальными данными

Параметр	Мишин Ю. и др. [7]	Настоящая работа	Эксперимент
a_0 , пм	361,5	361,493	$361,491 \pm 0,002^a$
E_0 , эВ/атом	-3,54	-3,54022	-3,54 ^б
B , ГПа	138,3	138,35	$142,0^a$, $133,2^r$, $141,1^d$
c_{11} , ГПа	169,9	169,88	$176,2^b$, $164,5^r$
c_{12} , ГПа	122,6	122,59	$124,9^b$, $117,5^r$
c' , ГПа	23,65	23,65	$25,6^b$, $23,5^r$, $25,9^d$
c_{44} , ГПа	76,2	76,21	$81,8^b$, $75,4^r$, $82,6^d$
$\partial B / \partial P$	—	3,345	$5,280^a$, $5,137^e$, $3,910^*$, $5,590^z$, $5,80^u$, $3,040^k$
$\partial c_{11} / \partial P$	—	4,249	$5,993^a$, $5,733^e$, $4,660^*$, $6,363^z$, $6,40^u$
$\partial c_{12} / \partial P$	—	2,894	$4,923^a$, $4,839^e$, $3,530^*$, $5,203^z$, $5,50^u$
$\partial c_{44} / \partial P$	—	1,937	$2,344^a$, $2,664^e$, $0,830^*$, $2,350^z$, $2,50^u$
$\partial c' / \partial P$	—	0,677	$0,535^a$, $0,447^e$, $0,566^*$, $0,580^z$, $0,45^u$

Примечание: ^a 298 К, [15]; ^б [16]; ^в экстраполированные к 0 К экспериментальные значения (10—300 К) [17]; ^г 300 К, [17]; ^д 79 К, [18]; ^е 300 К, [19], пояснения в тексте; ^ж 300 К, [20]; ^з 300 К, [21]; ^и 300 К, [22]; ^к 300 К, [23], пояснения в тексте.

Параметры решётки a_0 , указанный в [7] и рассчитанный в настоящей работе (см. табл. 1), различаются на 0,002%, но это различие обусловлено использованием округления в [7]. Это подтверждается согласием упругих постоянных второго порядка (УПВП), рассчитанных в [7] и настоящей работе (см. табл. 1). При разработке потенциала EAM1 в [7] использовались экспериментальные значения параметра решётки и УПВП для параметризации потенциала, поэтому расчётные и экспериментальные значения практически совпадают между собой. Отметим, что в [7] были взяты экспериментальные значения параметра решётки и УПВП для комнатной температуры, так как при более низкой температуре начинают сказываться квантовые эффекты, которые классическая МД-модель не в состоянии воспроизвести. Поскольку используются значения УПВП при отличной от абсолютного нуля температуре, необходимо проводить различие между адиабатическими и изотермическими УПВП. В [7] были взяты экспериментальные адиабатические значения УПВП, а не изотермические (что было бы идеологически правильнее при разработке потенциала). С одной стороны, это привело к отклонению в 4% расчётного значения объёмного модуля B от экспериментального значения изотермического объёмного модуля для 300 К, с

другой, приблизило расчётное значение к экспериментальным для 0 и 79 К (см. табл. 1). В целом имеет хорошее согласие расчётных значений УПВП с экспериментальными.

Прежде чем сравнивать вычисленные производные УПВП по давлению с соответствующими экспериментальными данными, необходимо сделать несколько ремарок относительно последних:

— из результатов [18] видно, что производные по давлению УПВП слабо зависят от температуры в диапазоне от 79 до 298 К (различие не более 1%) и что их адиабатические и изотермические значения также различаются не более, чем на 1%. Поэтому далее в обсуждении экспериментальных работ [18—23] не будет акцентироваться внимание на температуру проведения экспериментов и на том, адиабатические или изотермические эти величины (значение температуры указано в примечании к табл. 1);

— в [19] были определены упругие постоянные третьего порядка (УПТП) для 300 К: $c_{111} = -1271 \pm 22$ ГПа, $c_{112} = -814 \pm 9$ ГПа, $c_{123} = -50 \pm 18$ ГПа, $c_{144} = -3 \pm 9$ ГПа, $c_{166} = -780 \pm 5$ ГПа, $c_{456} = -95 \pm 87$ ГПа. Используя эти значения, в [19] рассчитаны значения производных по давлению УПВП: $\partial B/\partial P = 5,44$, $\partial c_{44}/\partial P = 2,63$, $\partial c'/\partial P = 0,375$. При этом в [19] не приведены формулы, использованные для пересчёта. Связь между УПТП и производными по давлению УПВП определяется соотношениями [24]

$$\begin{aligned}\frac{\partial B}{\partial p} &= -\frac{c_{111} + 6c_{112} + 2c_{123}}{9B}, \\ \frac{\partial c'}{\partial p} &= -\frac{3c_{11} + 3c_{12} + c_{111} - c_{123}}{6B}, \\ \frac{\partial c_{44}}{\partial p} &= -\frac{c_{11} + 2c_{12} + c_{44} + c_{144} + 2c_{166}}{3B}.\end{aligned}\quad (1)$$

Проведённый нами пересчёт по формулам (1) с использованием значений УПТП [19] дал отличающиеся значения для производных по давлению УПВП от приведённых в [19]. При этом новые значения, полученные нами, заметно лучше согласуются с данными [18] (см. табл. 1);

— значение величины $\partial B/\partial P$, приведённое в [23], основано на экспериментальных результатах [19], но без указания в явном виде соотношений, по которым производился пересчёт.

Как видно из табл. 1, экспериментальные значения $\partial B/\partial P$ [18—23] имеют значительный разброс от 3,04 [23] до 5,8 [22] со средним значением 4,793. Расчётное значение 3,345 лежит внутри диапазона экспериментальных значений, отклоняясь на 30% от среднего значения. Экспериментальные значения $\partial c_{44}/\partial P$ [18—22] также имеют значительный разброс от 0,83 [20] до 2,66 [19] со средним значением 2,138. Расчётное значение 1,937 лежит внутри диапазона экспериментальных значений, отклонение от среднего значения составляет 9%. Экспериментальные значения $\partial c'/\partial P$ [18—22] имеют заметно меньший разброс от 0,45 [22] до 0,58 [21] со средним значением 0,516. Расчётное значение 0,677 лежит внутри диапазона экспериментальных значений, отклоняясь на 31% от среднего значения. Таким образом, отклонение расчётных значений $\partial B/\partial P$, $\partial c_{44}/\partial P$, $\partial c'/\partial P$ от средних экспериментальных составляет 30, 31, 9% соответственно. С учётом значительного разброса экспериментальных значений согласие расчётных значений с экспериментальными можно считать хорошим.

Температурные зависимости параметра решётки и объёмного модуля. Рассчитанная в настоящей работе МД-методом температурная зависимость параметра решётки меди в диапазоне 0—1300 К показана на рис. 2. Там же для сравнения приведены МК-данные, полученные для потенциала ЕАМ1 в [7]. Наблюдается полное согласие МД- и МК-данных. На этом же рисунке показаны экспериментальные данные

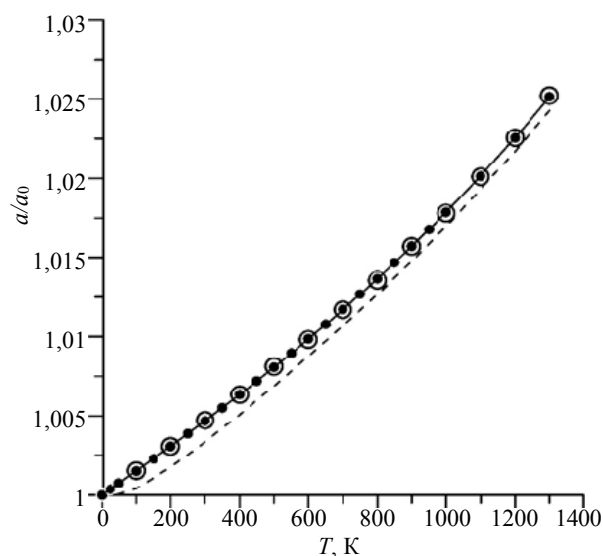


Рис. 2. Сравнение температурных зависимостей параметра решётки меди, определённых МД-методом в настоящей работе (•; — — аппроксимация (2)), с результатами МК-метода, полученными в [7] (○), и с экспериментальными данными [26] (- - -)

[26]. Наблюдается хорошее согласие расчётных и экспериментальных результатов. МД-данные температурной зависимости параметра решётки с высокой точностью аппроксимируются зависимостью

$$\frac{a(T)}{a_0} = 1 + 1,51907 \cdot 10^{-5} T + 1,06004 \cdot 10^{-9} T^2 + 1,6276 \cdot 10^{-12} T^3 \quad (2)$$

где a_0 — параметр решётки при 0 К.

На рис. 3 показано сравнение зависимостей температурного коэффициента линейного расширения решётки α , полученных из эксперимента [26] и с помощью (2). Видно, что при температуре выше дебаевской (344,5 К), при которой отсутствует влияние квантовых эффектов, наблюдается замечательное согласие расчётных и экспериментальных данных.

Температурная зависимость изотермического объёмного модуля B^T меди в диапазоне 0—1300 К, определённая МД-методом, показана на рис. 4. Полученные МД-данные хорошо аппроксимируются зависимостью

$$B^T(T) = B_0 - 5,85839 \cdot 10^{-5} T^2 + 4,48192 \cdot 10^{-8} T^3 - 1,63227 \cdot 10^{-11} T^4, \quad (3)$$

где $B_0 = 138,34944$ ГПа — объёмный модуль, определённый молекулярным методом (МС), для 0 К. На рис. 4 также показаны для сравнения экспериментальные данные по зависимости объёмного модуля от температуры. Расчётные данные хорошо согласуются с экспериментальными [17, 18, 27].

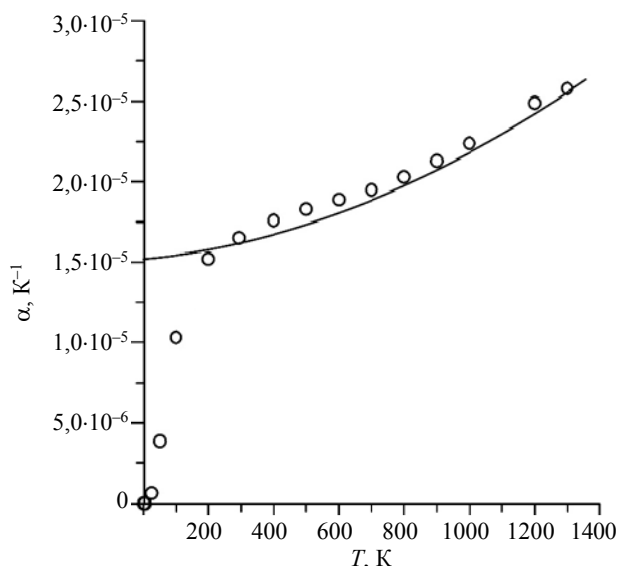


Рис. 3. Сравнение зависимости температурного коэффициента линейного расширения решётки меди, определённого с помощью аппроксимации МД-данных соотношением (2) (—), с экспериментальными данными [26] (○)

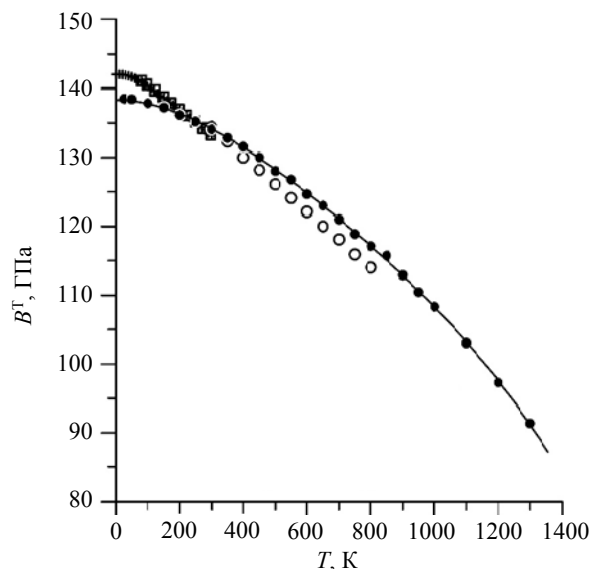


Рис. 4. Сравнение температурной зависимости изотермического объёмного модуля, определённой с помощью МД-метода (●; — — аппроксимация (3)), с экспериментальными данными [17] (□), [18] (+), [27] (○)

Свойства собственных точечных дефектов. Компиляция оцененных экспериментальных данных о свойствах СТД в меди содержится в [28]. В табл. 2 сведены для сравнения полученные МС-методом в [7] и в настоящей работе модельные результаты и соответствующие экспериментальные результаты [28] для энергий образования E^F , энергий миграции E^M , релаксационного объёма V^R , объёма миграции V^M , дипольного тензора P_{ij} . С учётом имеющихся значительных экспериментальных погрешностей (особенно для энергии образования пар Френкеля, релаксационного объёма СМА и, как следствие, компонент дипольного тензора СМА) для всех представленных в таблице свойств наблюдается согласие между модельными и экспериментальными результатами. Заметим, что при параметризации используемого в настоящей работе потенциала из свойств СТД использовались только экспериментальные данные об энергии образования и энергии миграции вакансии. Поэтому совпадение прочих расчётных значений характеристик СТД с экспериментальными данными свидетельствует о надёжности используемого потенциала межатомных взаимодействий.

Т а б л и ц а 2. Экспериментально измеренные и рассчитанные характеристики СТД в меди

Параметр	Мишин Ю. и др. [7]	Настоящая работа	Эксперимент
Пары Френкеля			
E^F , эВ	4,335	4,346	4,1—5,4
Вакансии			
V^R , Ω	–0,299	–0,299	–0,25
E^F , эВ	1,272	1,272	$1,28 \pm 0,05$
E^M , эВ	0,689	0,690	$0,70 \pm 0,02$
V^M , Ω	0,107	0,109	0,145*
СМА			
Структура	$\langle 100 \rangle$ гантель	$\langle 100 \rangle$ гантель	$\langle 100 \rangle$ гантель
P_{ij} , эВ	—	$\begin{pmatrix} 18,49 & 0 & 0 \\ 0 & 18,94 & 0 \\ 0 & 0 & 18,94 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 15,0 & 0 & 0 \\ 0 & 16,5 & 0 \\ 0 & 0 & 16,5 \end{pmatrix}$
V^R , Ω	1,834	1,843	$1,55 \pm 0,2$
E^M , эВ	0,098	0,098	0,117

*Рассчитано как $V^{SD} - V^R - \Omega_0$, где $V^{SD} = 0,895 \Omega_0$ [29] и $V^R = -0,25 \Omega_0$ [28] — экспериментальные значения объёма активации самодиффузии и релаксационного объёма вакансии.

МЕТОДИКА МОДЕЛИРОВАНИЯ ДИФФУЗИИ СТД

Для МД-моделирования диффузии СТД использовался кубический модельный кристаллит с периодическими граничными условиями, представляющий собой микроканонический ансамбль. Значение a задавалось в соответствии с (2). Длина стороны кристаллита выбиралась так, чтобы размер кристаллита оказался достаточен для исключения влияния граничных условий на определяемые величины.

Интегрирование уравнений движения выполняли методом Верле [30]. Величину временного шага выбирали таким образом, чтобы атомы с наиболее вероятной скоростью (распределение Максвелла) за одну итерацию перемещались на расстояние $0,01a$. Такой временной шаг в 3—4 раза больше обычно выбираемых для расчётов такого типа. Поэтому осуществлялся контроль текущей температуры в модельном кристаллите, чтобы вычислительные погрешности не приводили к его разогреву. Нужная температура T поддерживалась с помощью следующей процедуры. Текущая температура T_c определялась как средняя кинетическая температура за 5000 предыдущих итераций (под кинетической температурой T_k понимается мгновенное значение температуры, определяемое по скоростям атомов). Через каждые 5000 итераций проводилась перенормировка скоростей атомов так, чтобы кинетическая температура T_k стала равной поддерживаемой температуре T . Для этого мгновенные значения скоростей умножались на корень отношения T/T_c . Такая процедура позволила значительно снизить временные затраты на МД-вычисления без внесения систематической погрешности в вычисляемые диффузионные характеристики СТД. Для того чтобы в этом убедиться, были проделаны тестовые расчёты для указанного значения временного шага интегрирования и для значения, уменьшенного в 10 раз. Сравнение результатов таких расчётов показало, что рассчитываемые значения диффузионных характеристик имеют разбросы в пределах случайных погрешностей.

Положение СТД определялось путём анализа заселённости атомами ячеек Вигнера—Зейтца (ЯВЗ) модельного кристаллита. Если в ЯВЗ находится 0 атомов, считалось, что в этой ЯВЗ расположена вакансия, если два атома — то СМА, если три — то два СМА, и т.д. При расчётах диффузии СТД в модельном кристаллите создавался всегда один дефект — вакансия или СМА. Однако в процессе моделирования при высоких температурах иногда возникают ситуации, когда в кристаллите обнаруживаются дополнительные пары «вакансия—СМА», так как из-за больших амплитуд тепловых колебаний атомов один из атомов может случайно пересечь поверхность ЯВЗ и спустя несколь-

ко шагов интегрирования траектории вернуться обратно в свою ЯВЗ. Такие дополнительные «виртуальные» пары дефектов быстро исчезают после возникновения (время жизни, как правило, много меньше пс), но их возникновение осложняет отслеживание траектории «реального» дефекта, так как возникает необходимость отличать «реальный» дефект от «виртуального». В случае возникновения виртуальных дефектов в качестве реального дефекта принимался тот, который находился ближе всего к положению реального дефекта на предыдущем шаге интегрирования траектории, все остальные полагались виртуальными.

Для определения диффузионных характеристик вакансий для каждой рассмотренной температуры моделировалась одна траектория вакансии. Коэффициент диффузии дефекта D^d рассчитывался по алгоритму [9, 31]

$$D^d = \frac{1}{N_s} \sum_{i=1}^{N_s} D_i = \frac{1}{N_s} \sum_{i=1}^{N_s} \frac{1}{n_i} \sum_{j=1}^{n_i} \frac{R_{i,j}^2}{6\tau_i}, \quad (4)$$

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

Коэффициент диффузии меченых атомов D^{tr} (коэффициент самодиффузии в расчёте на один дефект) рассчитывался с использованием соотношения Эйнштейна для случая диффузии в трёхмерном пространстве

$$D^{tr} = \frac{1}{c_d} \frac{\langle R^2(t) \rangle}{6t}, \quad (5)$$

где $\langle R^2(t) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [\mathbf{r}_i(t) - \mathbf{r}_i(0)]^2$ — среднеквадратичное смещение меченых атомов; N — число атомов в модельном кристаллите (все атомы кристаллита рассматривались как меченые); $\mathbf{r}_i(0)$ и $\mathbf{r}_i(t)$ — начальные и текущие позиции атома i ; $c_d = 1/N$ — концентрация дефектов (один дефект на модельный кристаллит); t — длительность траектории.

Корреляционный фактор дефекта f^d определялся как отношение его коэффициентов диффузии D^d и D^{RW} , рассчитанный в приближении случайных блужданий дефекта:

$$f^d = \frac{D^d}{D^{RW}}, \quad (6)$$

где

$$D^{RW} = \sum_i \frac{v_i \lambda_i^2}{6}, \quad (7)$$

где v_i — частота скачков дефекта с длиной скачка λ_i .

Корреляционный фактор меченых атомов f^{tr} определялся как отношение коэффициентов D^{tr} и D^d :

$$f^{tr} = \frac{D^{tr}}{D^d}. \quad (8)$$

Для определения диффузионных характеристик СМА для каждой рассмотренной температуры моделировалось 100 траекторий СМА. Для каждой траектории СМА рассчитывались диффузионные характеристики как для вакансий по соотношениям (4)–(8), которые затем усреднялись.

В табл. 3 сведены данные о суммарной длительности всех траекторий, рассчитанных для вакансий и СМА при каждой из рассмотренных температур.

Таблица 3. Суммарная длительность всех рассчитанных траекторий дефектов (t_V для вакансий и t_{SIA} для СМА) при каждой из рассмотренных температур

T , К	t_V , МКС	t_{SIA} , МКС
300	—	65
400	—	36
500	—	26
600	—	20
700	—	17
750	3	—
800	2	15
850	1	—
900	0,5	13
1000	0,2	12
1100	0,08	10
1200	0,04	—
1300	0,02	10

Для получения статистически надёжных данных о диффузии СТД желательно моделировать как можно более длительные отрезки времени. В рамках классической молекулярной динамики зависимость скорости расчётов от числа атомов в расчётной ячейке близка к линейной. В связи с этим возникает необходимость в нахождении минимального размера модельного кристаллита, для которого влияние граничных условий на результаты расчётов было бы пренебрежимо мало. Для поиска такого минимального размера были рассчитаны зависимости коэффициентов диффузии D^d и D^r для вакансий и СМА от линейного размера кристаллита L . Для вакансий данные для кристаллитов с линейным размером от $6a$ до $9a$ оказались в пределах статистической погрешности, поэтому дальнейшие расчёты для вакансий проводились для кристаллитов с $L = 6a$. Рассмотрение аналогичных зависимостей для СМА выявило наличие связи расчётных данных с размером расчётной ячейки при $L < 8a$, поэтому дальнейшие расчёты для СМА проводились для $L = 8a$.

ДИФФУЗИЯ ВАКАНСИЙ

Анализ траекторий показал, что вакансия, в основном, движется путём скачков в первые ближайшие соседи (БС). Скачки во вторые БС не наблюдались, однако наблюдалось относительно небольшое количество скачков в третьи и четвёртые БС. Механизм скачков в третьи и четвёртые БС нуждается в пояснении, так как у ЯВЗ, в которой находится вакансия, есть общие поверхности только с ЯВЗ, относящимся к узлам кристаллической решётки на 1-й и 2-й координационных сферах (КС), но не с ЯВЗ узлов на 3-й и 4-й КС. Анализ МД-данных показал, что для скачков вакансии в третьи и четвёртые БС реализуется следующий механизм диффузии. Атом, находящийся в ЯВЗ узла 3-й или 4-й КС, заходит в ЯВЗ узла 1-й КС, где уже был свой атом (обозначим его как атом 0). Алгоритм распознавания положений СТД трактует это событие как образование пары виртуальных дефектов (СМА в узле 1-й КС и вакансии в узле 3-й или 4-й КС) в дополнение к реальной вакансии, расположенной в центре кристаллита. Затем атом 0 выходит за пределы своей ЯВЗ, попадая в ЯВЗ, в которой находилась реальная вакансия.

Алгоритм трактует это событие как исчезновение вакансии в центре кристаллита и СМА в ЯВЗ узла 1-й КС. Остаётся только один дефект — вакансия в ЯВЗ узла 3-й или 4-й КС, которую алгоритм считает реальной, так как теперь именно эта вакансия находится ближе всего к центру кристаллита. Таким образом, реальная вакансия совершает скачок в 3-й или 4-е БС.

Температурные зависимости частот скачков вакансии в 1-е, 3-й и 4-е БС показаны на рис. 5. Зависимости в

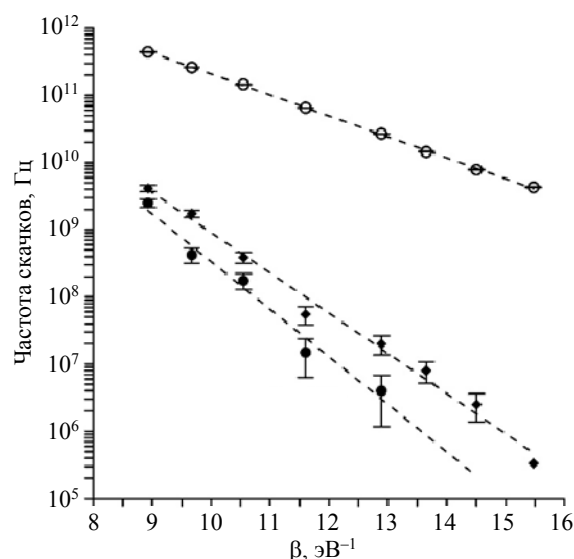


Рис. 5. Частоты скачков вакансии в 1-е (○), 3-й (●), 4-е БС (◆) в аррениусовских координатах в меди

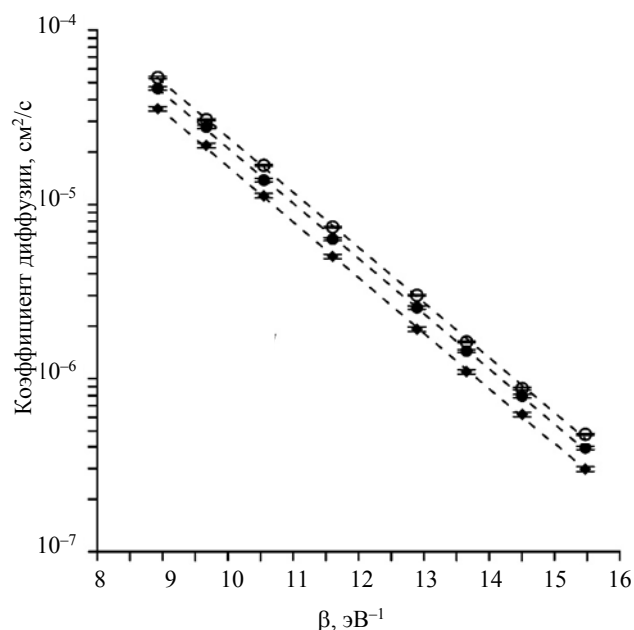


Рис. 6. Коэффициенты диффузии вакансии D^{RW} (○), D^d (●) и коэффициент самодиффузии в расчёте на одну вакансию D^{tr} (◆) в меди

$3,51 \cdot 10^{-2}$, $3,10 \cdot 10^{-2}$, $2,56 \cdot 10^{-2}$ см²/с соответственно. Указанные три энергии активации практически совпадают между собой и слегка отличаются от энергии активации 0,717 эВ, полученной из температурной зависимости частоты скачков вакансии, так как коэффициенты диффузии зависят не только от частоты скачков дефекта, но и от длины его скачков, а последние сами обладают температурной зависимостью (2), хоть и небольшой по сравнению с аррениусовской.

Температурные зависимости корреляционных множителей f^d и f^{tr} показаны на рис. 7. Величина f^{tr} практически не зависит от температуры и в пределах погрешности совпадает с теоретическим значением для механизма диффузии вакансии в 1-е БС в ГЦК-кристаллах 0,78145 [32]. Величина f^d также практически не зависит от температуры. Неизменность корреляционных факторов показывает, что во всём рассмотренном диапазоне температур преимущественно действует один и тот же механизм диффузии — скачки в 1-е БС и этому механизму диффузии соответствует всего один энергетический барьер величиной ~0,7 эВ, как следует из МС-данных [7] и МД-данных настоящей работы.

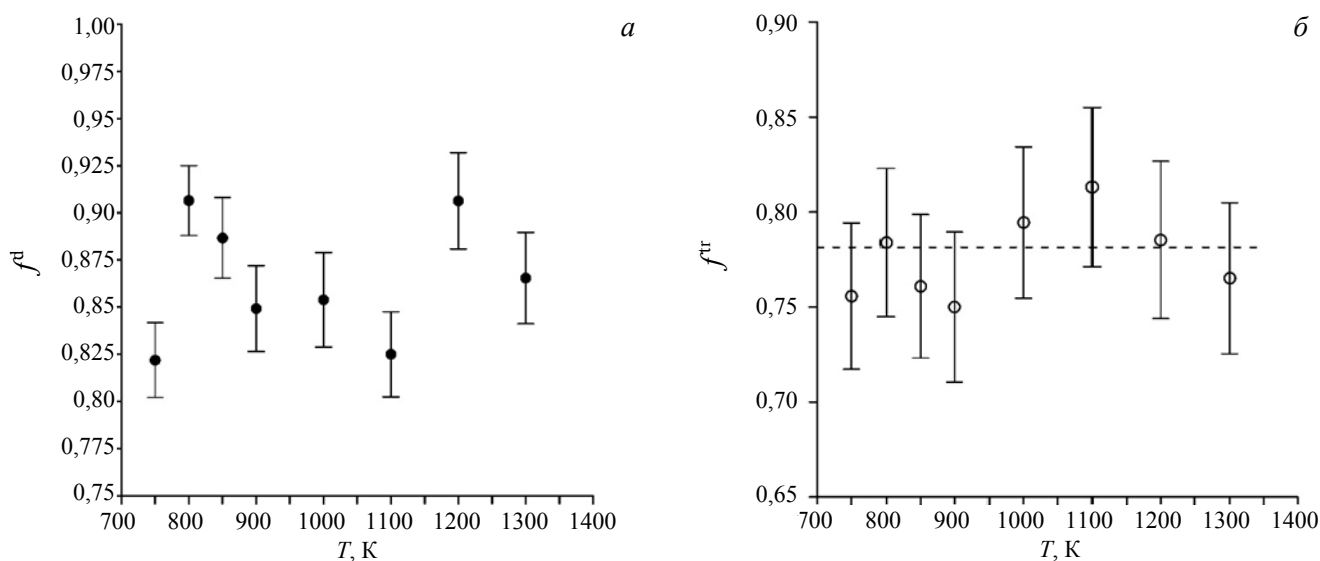


Рис. 7. Корреляционные факторы для вакансии в меди: а — f^d ; б — f^{tr} ; --- — теоретическое значение 0,78145 [32] для вакансионного механизма диффузии в ГЦК-решётке

аррениусовских координатах имеют линейный вид с разным наклоном, соответствующим энергиям активации скачков в 1-е, 3-и и 4-е БС 0,717, 1,63 и 1,38 эВ соответственно. Предэкспоненциальные множители этих аррениусовских зависимостей имеют значения 270,7, 4021 и 878,7 ТГц. Видно, что частота скачков в 3-и и 4-е БС не превышает 1% от частоты скачков в 1-е БС при самой высокой рассмотренной температуре (1300 К). При самых низких рассмотренных температурах (750 К) различие частот достигает четырёх порядков величины.

Температурные зависимости коэффициентов D^{RW} , D^d и D^{tr} показаны на рис. 6. Зависимости для коэффициентов диффузии в аррениусовских координатах являются линейными, как и аналогичные зависимости для частот скачков. Значения энергии активации, определённые по зависимостям для D^{RW} , D^d и D^{tr} , составляют 0,728, 0,730, 0,734 эВ соответственно, а значения предэкспоненциальных множителей —

ДИФФУЗИЯ СМА

Анализ траекторий СМА показал, что наблюдаются скачки не только в 1-е БС, но и в следующие координационные сферы, вплоть до 7-х БС. Температурные зависимости частот таких событий (ν_k , $k = 1—7$) показаны на рис. 8. Подавляющее количество скачков происходит в 1-е БС: при температуре ниже 1000 К различие частоты скачков в 1-е БС от суммарной частоты всех прочих типов скачков составляет три порядка и более. Величина ν_1 имеет аррениусовский характер во всём рассмотренном температурном диапазоне: ν_1 (Гц) = $12,55 \exp(-80,0716 \text{ эВ})$. Энергия активации близка к величине энергетического барьера, определённого МС-методом (0,098 эВ). Скачки с большей длиной связаны с возникновением виртуальных пар дефектов, полностью аналогично тому, как это было описано в предыдущем разделе для вакансий.

Температурные зависимости коэффициентов D^{RW} , D^{d} и D^{tr} показаны на рис. 9. Зависимости для коэффициентов диффузии в аррениусовских координатах имеют линейный характер при $T \leq 800$ К. Значения энергии активации, определённые по зависимостям для D^{RW} , D^{d} и D^{tr} , составляют 0,0753, 0,0832, 0,0818 эВ соответственно, а значения предэкспоненциальных множителей — $1,387 \cdot 10^{-3}$, $7,927 \cdot 10^{-4}$, $3,669 \cdot 10^{-4} \text{ см}^2/\text{с}$ соответственно. В [33] приведена оценка величины предэкспоненциального множителя, полученная из анализа кинетики стадии I отжига облучённых электронами образцов: $2 \cdot 10^{-4}—2 \cdot 10^{-2} \text{ см}^2/\text{с}$. Полученное в настоящей работе значение $7,927 \cdot 10^{-4} \text{ м}^2/\text{с}$ согласуется с этой оценкой. Энергия активации, определённая по температурной зависимости D^{RW} , почти совпадает с энергией активации 0,0716 эВ, полученной из температурной зависимости частоты скачков СМА, небольшое различие обусловлено температурной зависимостью длины скачков (2). Энергии активации, определённые по температурным зависимостям D^{d} и D^{RW} , несколько выше значения, определённого по температурной зависимости D^{RW} . Это различие связано с зависимостью корреляционных множителей f^{d} и f^{tr} от температуры (рис. 10).

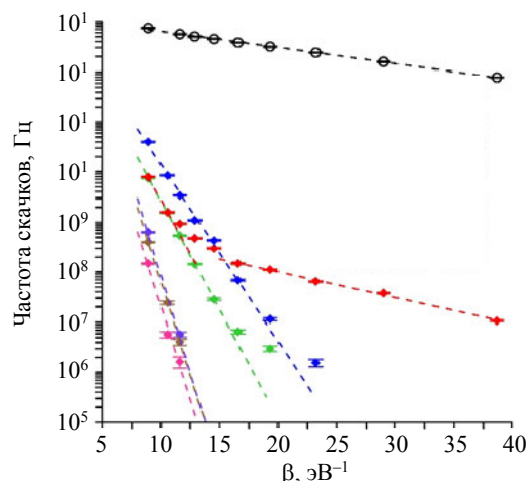


Рис. 8. Частоты скачков СМА в k -е БС в аррениусовских координатах в меди: $k = 1$ (○), 2 (●), 3 (◆), 4 (◆), 5 (◆), 6 (◆), 7 (◆)

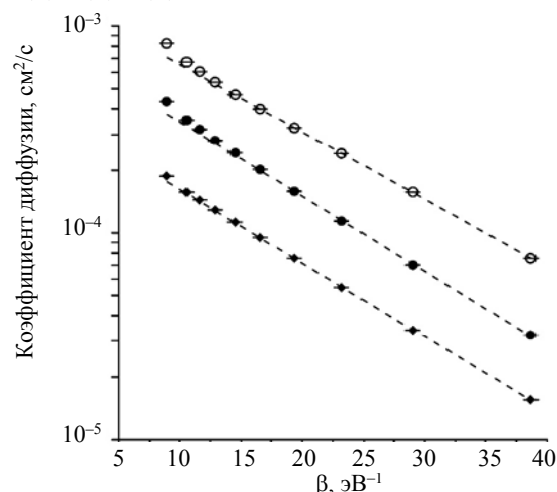


Рис. 9. Коэффициенты диффузии СМА D^{RW} (○), D^{d} (●) и коэффициент самодиффузии в расчёте на один СМА D^{tr} (◆) в меди: - - - аррениусовские аппроксимации по данным для температур ниже 800 К

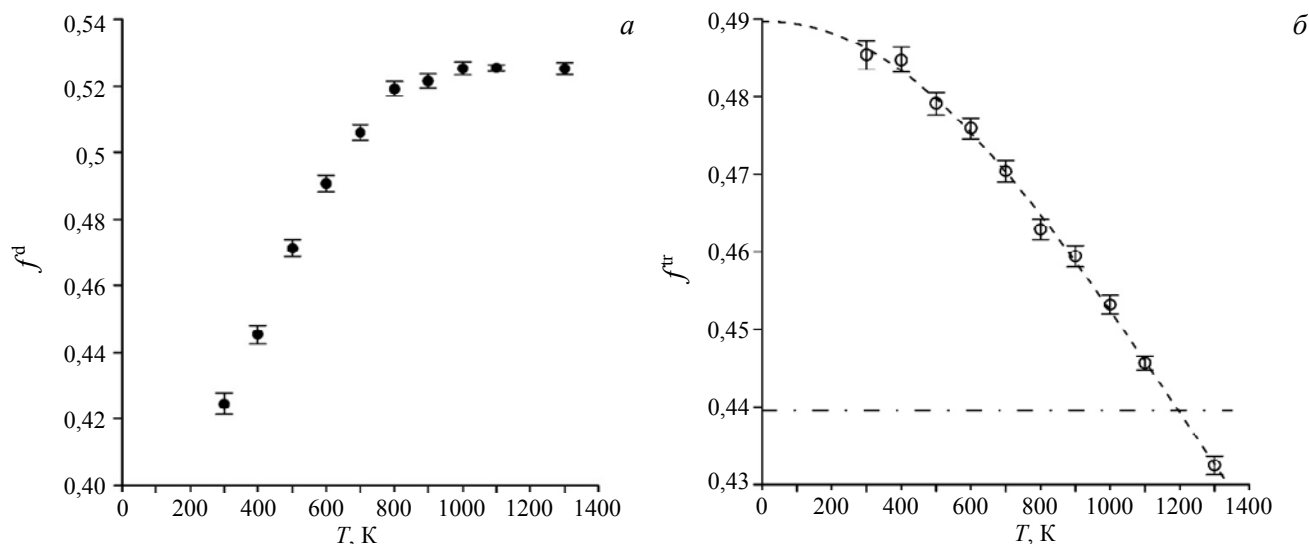


Рис. 10. Корреляционные факторы для СМА в меди: а — f^{d} ; б — f^{tr} ; - - - аппроксимация (4); - · - · - теоретическое значение 0,43945 [32] для джонсоновского механизма диффузии $\langle 100 \rangle$ ганти в ГЦК-решётке [35]

В [34] полученные с помощью МД температурные зависимости f^{tr} для различных материалов и ПМВ хорошо аппроксимировались зависимостью

$$f^{\text{tr}}(T) = f^{\text{tr}}(0) - b[1 + (T'/T)^m]^{-1}, \quad (9)$$

где $f^{\text{tr}}(0)$, b , T' и m (величине m разрешалось принимать только целочисленные значения) — подгоночные параметры. МД-данные настоящей работы также были аппроксимированы выражением (4). Подгонка дала следующие значения для параметров $f^{\text{tr}}(0) = 0,49$, $b = 0,2673$, $T' = 2479$ К и $m = 2$. При максимальной рассмотренной температуре 1300 К $f^{\text{tr}} = 0,432$, с уменьшением температуры f^{tr} растёт, стремясь к величине 0,49. Теоретическое значение корреляционного множителя для миграции $\langle 100 \rangle$ гантели по механизму Джонсона [35] в ГЦК-решётке (скачок в соседний узел с поворотом оси гантели на 90°) составляет 0,43945 [32]. В настоящей работе не отслеживалась смена ориентаций $\langle 100 \rangle$ гантелей в процессе диффузии, поэтому нельзя сказать однозначно, чем обусловлено различие в значениях f^{tr} , полученных в настоящей работе и [32]. Наиболее простое объяснение состоит в том, что при низкой температуре, помимо миграции СМА по механизму Джонсона, дополнительно происходят изменения ориентации СМА без перемещения в соседний узел решётки. Таким образом, диффузия СМА становится более трёхмерной, что приводит к более высокому значению f^{tr} по сравнению с теоретическим значением. С ростом температуры к механизму Джонсона подключается краудинный механизм, что несколько снижает трёхмерность диффузии, приводя к уменьшению корреляционного множителя до величины 0,432 при 1300 К.

Значения корреляционного множителя f^{d} зависят от температуры, увеличиваясь от 0,424 при 300 К до 0,525 при 1000 К. При более высоких температурах f^{d} перестаёт зависеть от температуры. Отличие f^{d} от единицы в меньшую сторону служит показателем того, что существует повышенная вероятность возвращения прыгнувшего дефекта обратно в исходный узел решётки, откуда был совершён скачок. Понижение f^{d} с понижением температуры, возможно, связано с тем, что атомы в среднем двигаются медленнее при низкой температуре и, как следствие, решётка при низких температурах медленней релаксирует в ответ на изменение СМА своей позиции, что приводит к более сильной её реакции — не успевшая подстроиться решётка стремится вытеснить СМА обратно в тот узел, из которого он совершил скачок в соседний.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Для моделирования радиационных дефектов в ГЦК-кристалле меди из имеющихся в литературе потенциалов межатомного взаимодействия выбран потенциал EAM1 [7], наилучшим образом описывающий набор известных экспериментальных данных в отношении объёмных свойств кристалла меди и его дефектов. Проведено тестирование данного потенциала на предмет сравнения расчётных свойств кристалла (производные упругих постоянных по давлению, температурная зависимость объёмного модуля сжатия), которые не использовались ранее при его валидации, с экспериментальными данными. Показано, что в отношении этих свойств потенциал EAM1 также обеспечивает хорошее согласие с экспериментальными данными.

Коэффициенты диффузии собственных точечных дефектов в температурных диапазонах 750—1300 К (вакансия) и 300—1300 К (СМА) рассчитаны МД-методом с использованием потенциала EAM1. Получены аналитические выражения, аппроксимирующие расчётные значения коэффициентов диффузии СТД. Рассчитанные характеристики для вакансий и СМА хорошо согласуются с имеющимися экспериментальными данными, что свидетельствует о надёжности используемого потенциала межатомных взаимодействий.

Рассчитанная МД-методом энергия активации диффузии вакансии 0,73 эВ близка к энергии миграции 0,69 эВ, рассчитанной методом молекулярной статики. Рассчитанные значения корреляционного множителя меченых атомов для вакансионного механизма диффузии не зависят от температуры. Их среднее значение $0,78 \pm 0,02$ согласуется с теоретической величиной для ГЦК-решётки 0,78145 [32].

Стабильной конфигурацией СМА является $\langle 100 \rangle$ гантель, что согласуется с экспериментом [28]. Механизм диффузии СМА является трёхмерным во всём рассмотренном температурном диапазоне с значе-

ниями корреляционного множителя меченых атомов несколько выше теоретического значения 0,43945 [32] для механизма Джонсона (миграция $\langle 100 \rangle$ гантели в ближайшие соседние узлы с поворотом оси гантели на 90°). Рассчитанная МД-методом энергия активации миграции СМА (0,083 эВ) согласуется с энергией миграции 0,099 эВ, полученной МС-методом, и с экспериментальным значением 0,117 эВ [28].

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-08-01205 и с использованием оборудования Центра коллективного пользования «Комплекс моделирования и обработки данных исследовательских установок мега-класса» НИЦ «Курчатовский институт».

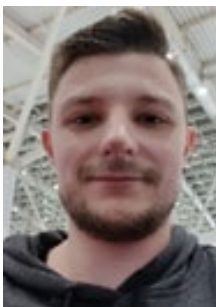
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Merola M., Loesser D., Martin A., Chappuis P., Mitteau R., Komarov V., Pitts R.A., Gicquel S., Barabash V., Giancarli L., Palmer J., Nakahira M., Loarte A., Campbell D., Eaton R., Kukushkin A., Sugihara M., Zhang F., Kim C.S., Raffray R., Ferrand L., Yao D., Sadakov S., Furmanek A., Rozov V., Hirai T., Escourbiac F., Jokinen T., Calcagno B., Mori S. ITER plasma-facing components. — *Fusion Eng. Des.*, 2010, vol. 85, p. 2312—2322; <https://doi.org/10.1016/j.fusengdes.2010.09.013>.
2. Norajitra P., Giniyatulin R., Ihli T., Janeschitz G., Krauss W., Kruessmann R., Kuznetsov V., Mazul I., Widak V., Ovchinnikov I., Ruprecht R., Zeep B. He-cooled divertor development for DEMO. — *Fusion Eng. Des.*, 2007, vol. 82, p. 2740—2744; <https://doi.org/10.1016/j.fusengdes.2007.05.027>.
3. Shpanskiy Yu.S. and the DEMO-FNS Project Team. Progress in the design of the DEMO-FNS hybrid facility. — *Nucl. Fusion*, 2019, vol. 59, p. 076014; <https://doi.org/10.1088/1741-4326/ab14a8>.
4. Stork D., Agostini P., Boutard J.L., Buckthorpe D., Diegele E., Dudarev S.L., English C., Federici G., Gilbert M.R., Gonzalez S., Ibarra A., Linsmeier Ch., Li Puma A., Marbach G., Morris P.F., Packer L.W., Raj B., Rieth M., Tran M.Q., Ward D.J., Zinkle S.J. Developing structural, high-heat flux and plasma facing materials for a near-term DEMO fusion power plant: the EU assessment. — *J. Nucl. Mater.*, 2014, vol. 455, p. 277—291; <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2014.06.014>.
5. Mendelev M.I., Kramer M.J., Becker C.A., Asta M. Analysis of semi-empirical interatomic potentials appropriate for simulation of crystalline and liquid Al and Cu. — *Philos. Mag.*, 2008, vol. 88, p. 1723—1750; <https://doi.org/10.1080/14786430802206482>.
6. Mendelev M.I., King A.H. The interactions of self-interstitials with twin boundaries. — *Philos. Mag.*, 2013, vol. 93, p. 1268—1278; <https://doi.org/10.1080/14786435.2012.747012>.
7. Mishin Y., Mehl M.J., Papaconstantopoulos D.A., Voter A.F., Kress J.D. Structural stability and lattice defects in copper: Ab initio, tight-binding, and embedded-atom calculations. — *Phys. Rev. B*, 2001, vol. 63, p. 224106; <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.63.224106>.
8. Ackland G.J., Bacon D.J., Calder A.F., Harry T. Computer simulation of point defect properties in dilute Fe—Cu alloy using a many-body interatomic potential. — *Philos. Mag. A*, 1997, vol. 75, p. 713—732; <https://doi.org/10.1080/01418619708207198>.
9. Osetsky Yu.N. Atomistic study of diffusional mass transport in metals. — *Defect and Diffusion Forum*, 2001, vol. 188—190, p. 71—92; <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/DDF.188-190.71>.
10. Ackland G.J., Tichy G., Vitek V., Finnis M.W. Simple N-body potentials for the noble metals and nickel. — *Philos. Mag. A*, 1987, vol. 56, p. 735—756; <https://doi.org/10.1080/01418618708204485>.
11. Osetsky Yu.N., Mikhlin A.G., Serra A. Study of copper precipitates in α -iron by computer simulation I. Interatomic potentials and properties of Fe and Cu. — *Philos. Mag. A*, 1995, vol. 72, p. 361—381; <https://doi.org/10.1080/01418619508239930>.
12. Daw M.S., Baskes M.I. Embedded-atom method: derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals. — *Phys. Rev. B*, 1984, vol. 29, p. 6443—6453; <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.29.6443>.
13. Rose J.H., Smith J.R., Guinea F., Ferrante J. Universal features of the equation of state of metals. — *Phys. Rev. B*, 1984, vol. 29, p. 2963—2969; <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.29.2963>.
14. Ziegler J.F., Biersack J.P., Littmark U. The Stopping and Range of Ions in Matter. — New York: Pergamon, 1985.
15. Straumanis M.E., Yu L.S. Lattice parameters, densities, expansion coefficients and perfection of structure of Cu and of Cu—In α phase. — *Acta Cryst. A*, 1969, vol. 25, p. 676—682; <https://doi.org/10.1107/S0567739469001549>.
16. Kittel C. Introduction to Solid State Physics. — New York: Wiley-Interscience, 1986.
17. Overton W.C. Jr., Gaffney J. Temperature variation of the elastic constants of cubic elements. I. Copper. — *Phys. Rev.*, 1955, vol. 98, p. 969—977; <https://doi.org/10.1103/PhysRev.98.969>.
18. Van't Klooster P., Trappeniers N.J., Biswas S.N. Effect of pressure on the elastic constants of noble metals from -196 to $+25^\circ\text{C}$ and up to 2500 bar. I. Copper. — *Physica B*, 1979, vol. 97, p. 65—75; [https://doi.org/10.1016/0378-4363\(79\)90008-1](https://doi.org/10.1016/0378-4363(79)90008-1).
19. Hiki Y., Granato A.V. Anharmonicity in noble metals; higher order elastic constants. — *Phys. Rev.*, 1966, vol. 144, p. 411—419; <https://doi.org/10.1103/PhysRev.144.411>.
20. Lazarus D. The variation of the adiabatic elastic constants of KCl, NaCl, CuZn, Cu, and Al with pressure to 10,000 bars. — *Phys. Rev.*, 1949, vol. 76, p. 545—553; <https://doi.org/10.1103/PhysRev.76.545>.
21. Daniels W.B., Smith C.S. Pressure derivatives of the elastic constants of copper, silver, and gold to 10 000 bars. — *Phys. Rev.*, 1958, vol. 111, p. 713—721; <https://doi.org/10.1103/PhysRev.111.713>.
22. Salama K., Alers G.A. Third-order elastic constants of copper at low temperature. — *Phys. Rev.*, 1967, vol. 161, p. 673—680; <https://doi.org/10.1103/PhysRev.161.673>.

23. **Hofmeister A.M.** Pressure derivatives of the bulk modulus. — *J. Geophys. Res.*, 1991, vol. 96, p. 21893—21907; <https://doi.org/10.1029/91jb02157>.
24. **Ghate P.B.** Third-order elastic constants of alkali halide crystals. — *Phys. Rev.*, 1965, vol. 139, p. A1666—A1674; <https://doi.org/10.1103/PhysRev.139.A1666>.
25. **Gerlich D., Kennedy G.C.** Second pressure derivatives of the elastic moduli of copper. — *J. Appl. Phys.*, 1979, vol. 50, p. 5038—5039; <https://doi.org/10.1063/1.325601>.
26. **Touloukian Y.S., Kirby R.K., Taylor R.E., Desai P.D.** Thermal—expansion: metallic elements and alloys. — In: *Thermophysical Properties of Matter*, Plenum. New York—Washington, 1975, vol. 12.
27. **Chang Y.A., Himmel L.** Temperature dependence of the elastic constants of Cu, Ag, and Au above room temperature. — *J. Appl. Phys.*, 1966, vol. 37, p. 3567—3572; <https://doi.org/10.1063/1.1708903>.
28. **Ehrhart P.** Atomic defects in metals Cu. — In: Ullmaier H. (ed.). *Atomic Defects in Metals*. Landolt-Börnstein — Group III Condensed Matter. Berlin: Springer-Verlag; 1991, vol. 25, p. 231—241; https://doi.org/10.1007/10011948_61.
29. **Wolfer W.G.** 1.01 — Fundamental properties of defects in metals. — In: Konings R.J.M. (ed.). *Comprehensive Nuclear Materials*, Elsevier, 2012, vol. 1, p. 1—45; <https://doi.org/10.1016/B978-0-08-056033-5.00001-X>.
30. **Verlet L.** Computer «experiments» on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard—Jones molecules. — *Phys. Rev.*, 1967, vol. 159, p. 98—103; <https://doi.org/10.1103/PhysRev.159.98>.
31. **Guinan M.W., Stuart R.N., Borg R.J.** Fully dynamic computer simulation of self-interstitial diffusion in tungsten. — *Phys. Rev. B*, 1977, vol. 15, p. 699—710; <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.15.699>.
32. **Benoist P., Bocquet J.-L., Lafore P.** La correlation entre sauts atomiques: une nouvelle methode de calcul. — *Acta Metallurgica*, 1977, vol. 25, p. 265—275; [https://doi.org/10.1016/0001-6160\(77\)90145-6](https://doi.org/10.1016/0001-6160(77)90145-6).
33. **Young F.W. Jr.** Interstitial mobility and interactions. — *J. Nucl. Mater.*, 1978, vol. 69—70, p. 310—330; [https://doi.org/10.1016/0022-3115\(78\)90250-7](https://doi.org/10.1016/0022-3115(78)90250-7).
34. **Сивак А.Б., Демидов Д.Н., Зольников К.П., Корчуганов А.В., Сивак П.А., Романов В.А., Чернов В.М.** Первичная радиационная повреждаемость в ОЦК-металлах Fe и V: анализ молекулярно-динамических данных. — *ВАНТ. Сер. Материаловедение и новые материалы*, 2019, т. 4(100), с. 25—57; <https://www.elibrary.ru/item.asp?id=44630371>.
35. **Johnson R.A.** Point-defect calculations for an fcc lattice. — *Phys. Rev.*, 1966, vol. 145, p. 423—433; <https://doi.org/10.1103/physrev.145.423>.



Александр Борисович Сивак, к.ф.-м.н., начальник лаборатории; НИЦ «Курчатовский институт», 123182 Москва, пл. Академика Курчатова 1, Россия
Sivak_AB@nrcki.ru



Дмитрий Николаевич Демидов, очный аспирант, инженер-исследователь, лауреат премии им. И.В. Курчатова; НИЦ «Курчатовский институт», 123182 Москва, пл. Академика Курчатова 1, Россия
Demidov_DN@nrcki.ru



Полина Александровна Сивак, инженер; НИЦ «Курчатовский институт», 123182, Москва, пл. Академика Курчатова 1, Россия
Sivak_PA@nrcki.ru

Статья поступила в редакцию 22 декабря 2020 г.
После доработки 12 января 2021 г.
Принята к публикации 14 января 2021 г.
Вопросы атомной науки и техники.
Сер. Термоядерный синтез, 2021, т. 44, вып. 1, с. 106—118.