

На правах рукописи

Валикова Ирина Валентиновна

**МОДЕЛИРОВАНИЕ АТОМАРНОЙ СТРУКТУРЫ И ДИФФУЗИОННЫХ
СВОЙСТВ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ В КУБИЧЕСКИХ СИСТЕМАХ**

01.04.07 – Физика конденсированного состояния

АВТОРЕФЕРАТ

**диссертации на соискание ученой степени кандидата
физико-математических наук**

Автор

Москва, 2010

Работа выполнена в Национальном исследовательском ядерном университете
«МИФИ»

Научный руководитель: кандидат физико-математических наук,
доцент Назаров Андрей Васильевич,
НИЯУ «МИФИ», г. Москва

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,
профессор Чернов Вячеслав Михайлович,
ВНИИНМ им. А.А. Бочвара, г. Москва

доктор физико-математических наук,
Виноградов Владимир Васильевич,
ФГУП «ЦНИИчермет им. И.П. Бардина», г. Москва

Ведущая организация: Институт теоретической и экспериментальной
физики имени А.И. Алиханова, г. Москва

Защита состоится «24» февраля 2010 г. в 15 час. 00 мин.
на заседании диссертационного совета Д 212.130.04 НИЯУ «МИФИ»
по адресу: 115409, Москва, Каширское шоссе, 31.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке НИЯУ «МИФИ».

Автореферат разослан « » января 2010 г.

Просим принять участие в работе совета или прислать отзыв в одном экземпляре,
заверенном печатью организации, по адресу НИЯУ «МИФИ».

Ученый секретарь диссертационного совета

НИЯУ «МИФИ», д.ф.-м.н., профессор

И.И. Чернов

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность работы

Точечные дефекты определяют кинетику формирования структуры в металлах и сплавах, особенно при внешних воздействиях. В свою очередь упругие поля, создаваемые дефектами различного типа, такими как дислокации, границы зерен, включения фаз, поры, влияют на частоты скачков атомов и, следовательно, на кинетику изменения структуры материалов в процессе их эксплуатации. Таким образом, для прогнозирования поведения конструкционных материалов в реальных (реакторных) условиях необходимо уметь рассчитывать характеристики точечных дефектов в этих материалах с учетом влияния температуры, внешних нагрузок, упругих полей, создаваемых различными внутренними дефектами и т.п.

Одной из возможностей проверки теорий, описывающих влияние упругих полей напряжений на диффузионные потоки точечных дефектов, является применение этих подходов к описанию диффузии при высоких давлениях, т.к. диффузия в условиях всестороннего сжатия – простейший вариант процесса, в котором проявляется подобное влияние, определяющееся такими характеристиками как объемы образования и миграции дефектов.

При теоретических рассмотрениях и моделировании свойств дефектов, как правило, удается получить удовлетворительные оценки для энергетических характеристик точечных дефектов. В то же время величины активационных объемов, рассчитанные разными авторами, редко согласуются между собой и с немногочисленными экспериментальными данными. На сегодняшний день не существует общепринятого подхода, позволяющего с единых позиций определить атомарную структуру в локальной окрестности дефекта (в том числе для активированного состояния системы) и установить связь структуры и упомянутых характеристик для различных механизмов диффузии. К сожалению, число экспериментальных работ по изучению влияния давления на диффузию весьма невелико. Поэтому, такая важная проблема остается малоизученной.

Кроме того, из недавно полученных уравнений для диффузионных потоков в упругом поле общего вида для металлов с ГЦК и ОЦК структурами, диффузия в которых осуществляется посредством вакансионного механизма, следует, что основной характеристикой влияния упругих полей на диффузию являются SID (“strain influence on diffusion”) коэффициенты, величины которых очень чувствительны к атомарной структуре в окрестности седловой точки при скачке атома в вакансию.

В связи с вышеизложенным, актуальной является задача получения энергий и объемов образования и миграции точечных дефектов и SID коэффициентов, что необходимо для прогнозирования изменения свойств конструкционных материалов, в том числе материалов ядерной энергетики, в частности для моделирования процессов порообразования и радиационного распухания. Для реализации данной задачи требуется построение модели, позволяющей более точно по сравнению с существующими на сегодняшний день подходами рассчитывать атомарную структуру в окрестности дефекта и, особенно, структуру, когда атом находится в активированном состоянии.

Цель работы: разработка нового теоретического подхода для моделирования атомарной структуры в окрестности дефекта как в основном, так и в активированном состояниях, позволяющего рассчитывать как энергии образования и миграции, так и активационные объемы и SID коэффициенты, описывающие влияние упругих полей на диффузионные потоки вакансий.

Научная новизна работы

В процессе выполнения работы впервые получены следующие результаты.

1. Разработана модель, имеющая ряд преимуществ, позволяющая точнее описывать атомарную структуру в окрестности дефекта и рассчитывать объем релаксации через асимптотику смещений атомов, погруженных в упругую среду, окружающую расчетную ячейку.
2. Показано, что величины вкладов в объемы образования и миграции, связанные с разным влиянием давления на энергии идеальной системы и систем с дефектом в основном и активированном состояниях, значимы и сравнимы с величиной объема релаксации.
3. Показано, что вклад в объем миграции дает только слагаемое, связанное с влиянием давления на энергии систем с перескакивающим атомом в основной и седловой позициях, т.к. скачок атома в вакансию происходит за время 1-2 периодов колебаний атома в узле решетки, волна смещений за время скачка не успевает дойти до границ кристалла, и объем системы не изменяется.
4. Установлено, что геометрическое подобие атомарной структуры в окрестности вакансии при изменении температуры сохраняется, что позволяет на основе разработанной модели проводить расчеты температурных зависимостей характеристик точечных дефектов.
5. Показано, что диффузионные характеристики точечных дефектов и их температурные зависимости качественно различаются для ОЦК и ГЦК металлов, что должно сказываться на кинетике диффузионных процессов в них.

6. Рассчитаны SID коэффициенты с учетом искажения атомарной структуры в окрестности вакансии и седловой позиции при скачке атома, что дает возможность получать более точные зависимости компонент матрицы коэффициентов диффузии от упругих полей, создаваемых порами, включениями вторых фаз, дислокациями и другими дефектами.

Научная и практическая значимость работы

Полученные данные применимы для прогнозирования кинетики диффузионных процессов в металлах с кубической структурой при различных температурах, приложении внешнего давления и в упругих полях, создаваемых различными дефектами. Результаты диссертационной работы представляют не только научный, но и практический интерес, т.к. могут быть использованы для прогнозирования изменения свойств материалов ядерной энергетики под облучением и другими воздействиями, в частности для моделирования процессов порообразования и радиационного набухания материалов.

Основные положения, выносимые на защиту

1. Разработанный новый теоретический подход и компьютерная модель для расчета атомарной структуры в окрестности дефектов как в основном, так и в активированном состояниях, и определенные диффузионные характеристики точечных дефектов.
2. Результаты моделирования изменения атомарной структуры в окрестности вакансии с температурой, подтверждающие сохранение геометрического подобия этой структуры с ростом температуры.
3. Рассчитанные температурные зависимости объемов и энергий образования и миграции вакансий для ряда ОЦК и ГЦК металлов, позволяющие выявить качественные различия для ОЦК и ГЦК структур.
4. Рассчитанные объемы и энергии образования и миграции дивакансий в ОЦК и ГЦК металлах, а также их температурные зависимости.
5. Результаты расчетов объемов и энергий образования различных конфигурации собственных межузельных атомов в ОЦК и ГЦК металлах, а также их температурные зависимости.
6. Рассчитанные температурные зависимости SID коэффициентов, определяющих влияния упругих полей на компоненты матрицы коэффициентов диффузии вакансий.
7. Рассчитанные координатные зависимости компонентов матрицы коэффициентов диффузии вакансий в окрестности поры для ОЦК и ГЦК металлов.

Достоверность научных положений, результатов и выводов

Достоверность научных результатов обоснована применением общепризнанных методов моделирования, хорошо зарекомендовавших себя многочастичных потенциалов и всесторонним тестированием разработанных программ, а также корреляцией полученных результатов с известными экспериментальными данными и совпадением с результатами моделирования других авторов.

Личный вклад соискателя

Соискатель принимал непосредственное участие в обсуждении и постановке задачи по созданию новой модели для исследования влияния давления и упругих полей на концентрацию и диффузионную подвижность точечных дефектов в металлах с кубической структурой. Разработка алгоритмов и программного обеспечения, весь набор компьютерных экспериментов проведены соискателем. Анализ полученных результатов и подготовка публикаций выполнена с соавторами.

Объем и структура работы

Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения и библиографии. Диссертация изложена на 147 страницах, содержит 51 рисунок, 27 таблиц, два приложения и список цитируемой литературы по главам (суммарно 224 пункта).

Апробация работы

Основные положения работы представлены и обсуждены на следующих научных семинарах, совещаниях и конференциях: научные сессии МИФИ-2005 (Москва, 2005 г.), МИФИ-2006 (Москва, 2006 г.), МИФИ-2009 (Москва, 2009 г.); Международная конференция «DISO-05: Diffusion in solids: past, present and future» (Москва, 2005 г.); Международная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых по фундаментальным наукам «Ломоносов – 2005» (Москва, 2005 г.); Международная конференция «Diffusion Fundamentals I» (Лейпциг, Германия, 2005 г.); 10-ая Московская Международная школа физики ИТЭФ «Фундаментальные основы ядерных энерготехнологий нового поколения» (Московская обл., Отрадное, 2007 г.); Международная конференция «Diffusion and Diffusional Phase Transformations in Alloys» DIFTRANS-2007 (Умань, Украина, 2007 г.); 11-ая Московская Международная школа физики ИТЭФ «Фундаментальные основы ядерных энерготехнологий нового поколения» (Московская обл., Отрадное, 2008 г.); Международная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых «Ломоносов – 2008» (Москва, 2008 г.); Всероссийский семинар «Теория и многоуровневое моделирование дефектов, явлений и свойств материалов ядерной техники» ТММ – 2008

(Москва, 2008 г.); Всероссийская конференция-конкурс научных работ по различным разделам физики для студентов и аспирантов (Москва, 2009 г.); Международная конференция «Thermodynamics and Transport Kinetics of Nanostructured Materials (TTk)» (Мюнстер, Германия, 2009 г.); Международная конференция «Diffusion Fundamentals III» (Афины, Греция, 2009 г.).

Публикации

По теме диссертации опубликовано 29 работ в научных журналах и сборниках трудов Международных и Российских конференций и семинаров, в том числе 2 статьи в журналах, рекомендованных ВАК. Список наиболее значимых работ приведен в конце автореферата.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснована актуальность разработки нового теоретического подхода для моделирования атомарной структуры в окрестности дефекта, позволяющего рассчитывать объемы и энергии образования и миграции точечных дефектов и SID коэффициенты, описывающие влияние упругих полей на диффузионные потоки вакансий, что полезно для прогнозирования изменения свойств материалов ядерной энергетики под облучением и другими воздействиями. Сформулирована цель работы, указаны ее новизна и практическая значимость, изложены основные положения, выносимые на защиту.

В главе 1 приведен обзор подходов и моделей для расчета диффузионных характеристик точечных дефектов, в частности характеристик, описывающих влияние давления на процесс диффузии в металлах. Представлены основные результаты, полученные с помощью этих моделей и из экспериментов. Обоснована необходимость создания нового подхода, позволяющего получать не только энергетические характеристики точечных дефектов, но и активационные объемы.

В главе 2 описан разработанный новый теоретический подход для моделирования атомарной структуры в окрестности дефекта как в основном, так и в активированном состояниях, для расчета объемов образования и миграции дефектов, определяющих влияние давления на процесс диффузии, SID коэффициентов, определяющих влияние упругих полей на диффузию, а также их температурной зависимости.

Известно, что основными характеристиками, определяющими температурную зависимость коэффициента диффузии, являются энергии образования E_d^f и миграции E_d^m дефекта:

$$D = D_0 \exp \left(- \frac{E_d^f + E_d^m + p(V_d^f + V_d^m)}{kT} \right), \quad (1)$$

где D_0 – предэкспоненциальный множитель, k – постоянная Больцмана, T – абсолютная температура. Влияние давления, в свою очередь, зависит от величины активационного объема, являющегося суммой двух составляющих: объемов образования V^f и миграции V^m дефекта:

$$V^f = \left. \frac{\partial((E^d - E^0) + p(V^d - V^0) - TS_v)}{\partial p} \right|_{T=const} = V_E^f + \Delta V^f, \quad (2)$$

$$V^m = \left. \frac{\partial((E^w - E^d) + p(V^w - V^d))}{\partial p} \right|_{T=const} = V_E^m + \Delta V^m, \quad (3)$$

где S_v – конфигурационная часть энтропии (этим слагаемым обычно пренебрегают, т.к. его вклад незначителен), E^0, V^0 – потенциальная энергия и объем системы соответственно. Здесь и далее верхний индекс 0 обозначает идеальную систему, d – систему с дефектом, а w – систему с дефектом, когда перескакивающим атомом находится в седловой позиции. Таким образом, полный объем образования дефекта представляет собой сумму двух частей: первая часть связана с влиянием давления на энергию основного состояния системы, вторая – с выходом атома из объема системы на поверхность и с релаксацией атомарной структуры. Объем миграции так же представляет собой сумму двух частей. Первая часть обусловлена разным влиянием давления на энергию усредненного по ансамблю скачков состояния системы с атомом в седловой позиции и энергию основного состояния системы с дефектом, вторая связана с изменением объема системы как целого при переходе атома из основной в седловую позицию. Следует отметить, что большинство авторов, рассчитывая объемы образования и миграции, не принимают в расчет первые слагаемые в уравнениях (2) и (3), не обоснованно считая их пренебрежимо малыми. Однако, предварительные результаты расчетов показали, что первое слагаемое для объема образования сравнимо по величине со вторым, а в случае объема миграции даже является определяющим. Полученные нами выражения позволяют рассчитать эти слагаемые, связанные с влиянием давления на энергию системы:

$$V_E^f = - \frac{1}{6K_0} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \left(R_{ij}^d \frac{\partial E^d}{\partial R_{ij}} \Big|_{R_{ij}^d} - R_{ij}^0 \frac{\partial E^0}{\partial R_{ij}} \Big|_{R_{ij}^0} \right), \quad (4)$$

$$V_E^m = - \frac{1}{6K_0} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \left(R_{ij}^w \frac{\partial E^w}{\partial R_{ij}} \Big|_{R_{ij}^w} - R_{ij}^d \frac{\partial E^d}{\partial R_{ij}} \Big|_{R_{ij}^d} \right), \quad (5)$$

где K_0 – модуль всестороннего сжатия, N – число атомов в расчетной ячейке, R_{ij} – расстояние между атомами i и j .

Второе слагаемое в выражении (2) для объема образования вакансии, связанное с выходом атома на поверхность и релаксацией решетки, может быть записано:

$$\Delta V^f = (N^d - N^0)\Omega + \Delta V^r, \quad (6)$$

где Ω – объем, приходящийся на атом; ΔV^r – объем релаксации; N^0 – число атомов в идеальной системе; N^d – число атомов в системе с дефектом. Из классической теории упругости изменение объема, ограниченного замкнутой поверхностью S , связанное с образованием дефекта внутри этой поверхности, изменяется на величину $\Delta V = \int_S \mathbf{u} \mathbf{n} dS$, где $\mathbf{u}$ – решение уравнения статической изотропной теории упругости, которое может быть представлено в виде бесконечного ряда в разложении по сферическим функциям. Так, например, первые два слагаемых ряда, обладающие сферической и кубической симметрией, имеют вид:

$$\mathbf{u}_1 = C_1 \mathbf{r} / r^3, \quad (7)$$

$$\mathbf{u}_2 = C_2 \nabla \left[\frac{1}{r^5} \left(\frac{x^4 + y^4 + z^4}{r^4} - \frac{3}{5} \right) \right], \quad (8)$$

где $r = (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}$ – расстояние до дефекта; C_1, C_2 – константы.

Изменение объема определяется только сферически-симметричным слагаемым решения уравнения статической изотропной упругости $\mathbf{u}_1$: $\Delta V = 4\pi C_1$, т.к. остальные слагаемые (в том числе и $\mathbf{u}_2$) убывают быстрее с расстоянием от дефекта и дают нулевой вклад в изменение объема.

Второе слагаемое в уравнении (3) обычно рассматривают как разность между объемом системы, когда мигрирующий атом находится в седловой позиции, и объемом системы, когда мигрирующий атом находится в основной позиции: $\Delta V = 4\pi(C_1^w - C_1)$. Однако перескок атома в вакансию происходит за время 1-2 колебаний атома в узле решетки. Эти времена очень малы и, следовательно, не все атомы системы успеют отреагировать на возникшие возмущения, и волна смещений не успеет дойти до границ кристалла, а значит за время скачка изменения объема кристалла как целого не произойдет. Поэтому обычный вклад в свободную энергию, связанный с работой, совершаемой над системой давлением, будет нулевым. Следовательно, вклад в объем миграции дефекта будет давать только слагаемое, обусловленное разным влиянием давления на энергии систем (5).

Из всего вышеизложенного ясно, что для расчета диффузионных характеристик точечных дефектов необходимо определить атомарную структуру в окрестно-

сти дефекта для основного состояния системы с дефектом и для состояния системы с атомом в седловой позиции, усредненного по ансамблю скачков.

Одной из отличительных черт нашей модели является учет смещений атомов во второй зоне, окружающей расчетную ячейку (рис. 1).

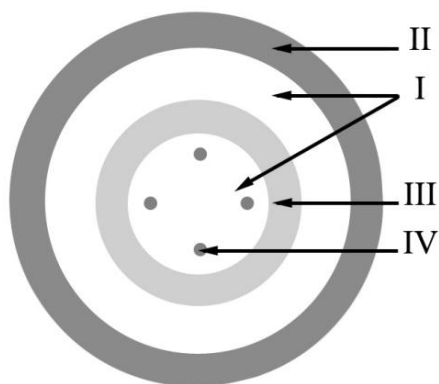


Рис. 1. Схема расчетной ячейки:

I – расчетная ячейка;

II – атомы, погруженные в упругую среду;

III – атомы сферического слоя, по смещениям которых рассчитывается константа C_1 ;

IV – атомы, по смещениям которых рассчитывается константа C_2

Равновесные позиции атомов расчетной ячейки моделируются с помощью вариационной процедуры, аналогичной обычно используемой в методе молекулярной статистики. Смещения атомов упругой среды, окружающей расчетную ячейку, находятся на основании первых двух слагаемых решения уравнения равновесия теории статической изотропной упругости (7) и (8), т.к. остальные слагаемые слишком быстро убывают с расстоянием, и их вклады пренебрежимо малы на расстояниях, соответствующих II зоне.

В модели реализуется самосогласованная итерационная процедура расчета констант C_1 и C_2 , определяющих смещения атомов в упругой среде, и последовательной оптимизации атомарной структуры в кристалле. Константа C_1 рассчитывается на основании результатов моделирования смещений атомов в расчетной ячейке для координационных сфер, находящихся в шаровом слое III. Константа C_2 находится из уравнения (8) на основании разности между смещениями атомов IV, полученными при релаксации, и смещениями, рассчитанными из уравнения (7) с использованием найденной константы C_1 . Полученные результаты моделирования подтверждают устойчивую сходимость итерационной процедуры, связанной с последовательной оптимизацией атомарной структуры в окрестности дефекта и параметров, определяющих смещения атомов в упругой среде, причем конечные величины констант C_1 и C_2 не зависят от первоначально заданных значений.

Было проведено моделирование для систем различного размера и изучено влияние размера расчетной ячейки на рассчитываемые характеристики. Важно подчеркнуть, что существует размер расчетной ячейки (как минимум несколько тысяч атомов), начиная с которого как атомарная структура, так и упомянутые параметры перестают заметным образом зависеть от размера расчетной ячейки. Вклад кубически-

симметричного слагаемого является значимым для рассчитываемых характеристик так же только до определенного размера расчетной ячейки.

Для расчета объема миграции вакансии один из атомов ближайшего окружения вакансии на каждом шаге смещается в направлении вакансии на несколько процентов от первоначального расстояния до вакансии, причем состояние системы, полученное при моделировании образования точечного дефекта (т.е. полностью отрелаксированная система с дефектом), принимается за начальное состояние. Как уже упоминалось выше, при миграции дефекта в реальных системах скачок атома в вакансию происходит за время порядка нескольких колебаний атомов в узлах кристаллической решетки, не все атомы системы успевают отреагировать на возникшие возмущения и волна смещений не успевает дойти до границ кристалла. Результаты, полученные методом молекулярной динамики (рис. 2), показали, как идет волна смещений и, что за время скачка успевают сместиться только атомы, расположенные на расстоянии менее чем 5 параметров решетки от вакансии. Поэтому, при моделировании миграции атома в вакансию на каждом шаге проводилась релаксация только таких атомов (расположенных на расстоянии менее чем 5 параметров решетки от дефекта). Обычно принимаемая в расчет часть объема миграции, связанная с разностью объемов систем с мигрирующим атомом в седловой и основной позициях, при этом не рассчитывалась.

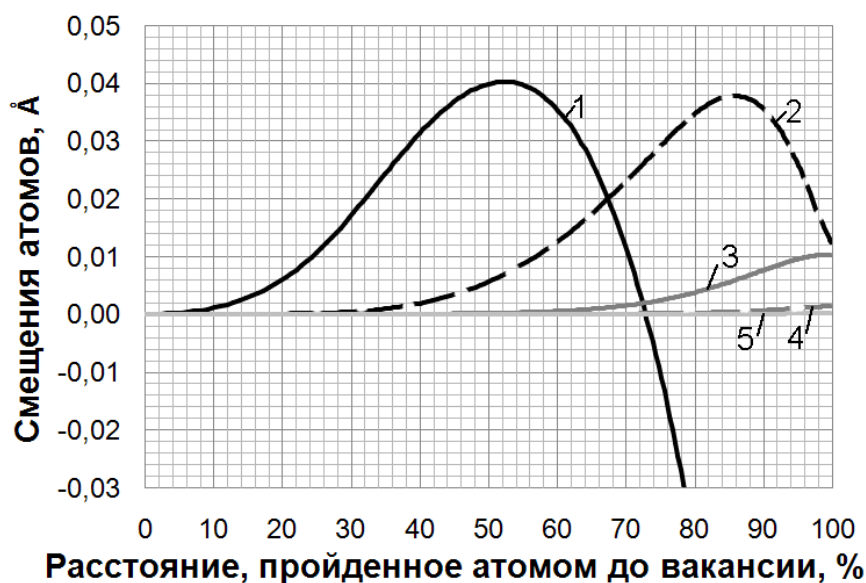


Рис. 2. Смещения атомов ОЦК железа, расположенных по направлению $[-100]$ от вакансии, за время перескока атома (первоначальная позиция $[-1-1-1]$) в вакансию $[[000]]$. Цифры у кривых — расстояния от смещающихся атомов до вакансии в параметрах решетки

На следующем этапе решена задача о температурной зависимости структуры и характеристик дефектов. Для этого с помощью метода молекулярной динамики получена температурная зависимость отношений расстояний между дефектом и атомами первых четырех координационных сфер к параметру решетки (рис. 3). На основании этих данных можно сделать вывод о том, что подобие атомарной структуры в окрестности дефекта сохраняется с изменением температуры, т.е. все расстояния между атомами системы изменяются пропорционально линейному коэффициенту термического расширения α .

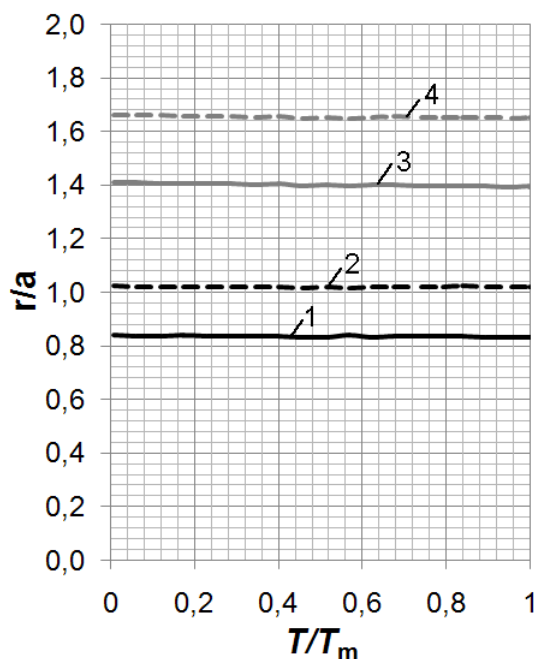


Рис. 3. Отношение расстояния от вакансии до атомов первых четырех координационных сфер к параметру решетки в зависимости от температуры для ОЦК металлов.

Цифры у кривых – номер координационной сферы

Далее производился расчет нового взаимного расположения атомов (атомарной структуры в окрестности дефекта) и константы C_1 (по уравнению (7)), соответствующих заданной температуре, а также расчет характеристик, связанных с атомарной структурой. Аналогично производился перерасчет атомарной структуры на каждом шаге атома в вакансию, строился потенциальный рельеф, соответствующий заданной температуре, и определялась конфигурация системы с перескакивающим атомом в седловой точке. При этом положение седловой точки может изменяться с изменением температуры.

В главах 3 и 4 представлены и обсуждены полученные результаты, а именно энергии и объемы образования и миграции вакансий, дивакансий и собственных межузельных атомов для ряда ОЦК и ГЦК металлов, а также их температурные зависимости.

Вакансии. Расчеты диффузионных характеристик вакансий и их температурных зависимостей для ряда ОЦК и ГЦК металлов проводились с использованием парных и многочастичных потенциалов, взятых из опубликованных работ (табл. 1).

Из многочастичных потенциалов выбирались те, в которых учитывается неоднородное распределение электронной плотности в окрестности ионов. При этом преимущество отдавалось потенциалам, которые лучше описывают взаимодействие между атомами на малых расстояниях, что особенно важно для моделирования процесса миграции.

Таблица 1.

Рассчитанные характеристики вакансий в ОЦК и ГЦК металлах

Металл	E^f , эВ	$\Delta V/\Omega$	V_E^f/Ω	V_S^f/Ω	E^m , эВ	V_E^m/Ω	V^{act}/Ω
Fe-I	1,37	-0,039	-0,021	0,940	0,68	-0,040	0,900
Fe-II	1,70	-0,126	-0,172	0,703	0,77	-0,076	0,627
Fe эксп.	1,4; 1,5; 1,79	-	-	0,95	0,55; 1,1-1,4	-	-
Mo	2,95	-0,057	-0,049	0,894	1,66	-0,118	0,776
Mo эксп.	2,8-3,2	-	-	-	1,35; 1,62	-	-
W-I	3,55	-0,062	-0,048	0,890	2,07	-0,030	0,860
W-II	3,95	-0,133	-0,110	0,756	1,998	-0,126	0,496
W эксп.	3,1; 3,6-4,1	-	-	-	1,6; 1,7; 2,02	-	-
V	2,50	-0,092	-0,030	0,877	0,96	-0,195	0,682
V эксп.	2,1; 2,2-2,6	-	-	-	0,5; 1,1-1,2	-	-
Ni	1,54	-0,020	-0,018	0,962	1,20	0,648	1,610
Ni эксп.	1,4-1,7; 1,8	-0,2	-	0,7	0,9-1,3; 1,04	-	-
Al-I	0,83	-0,339	-0,133	0,528	0,63	0,131	0,659
Al-II	0,74	-0,300	-0,098	0,601	0,62	0,238	0,839
Al эксп.	0,62-0,70	-0,05; -0,38	-	0,54-0,64	0,57-0,66	0,15-0,20	1,23-1,35; 0,62-0,97
Cu-I	1,18	-0,175	-0,153	0,671	0,98	0,845	1,516
Cu-II	1,29	-0,331	-0,007	0,662	0,59	0,174	0,836
Cu эксп.	1,04-1,29	-0,25	-	0,75-0,85	0,67-0,76	0,12	0,93-1,09
Au	0,99	-0,330	-0,024	0,645	0,61	0,177	0,822
Au эксп.	0,89-0,97	-0,15; -0,35	-	0,42-0,68	0,62-0,72; 0,69-0,81	0,15	0,60-0,75; 0,67-0,81

Примечание: I и II – результаты расчета с использованием разных потенциалов; эксп. – экспериментальные результаты по данным разных авторов.

Рассчитанные энергии образования вакансий по механизму Шоттки хорошо согласуются со значениями, полученными на основе аппроксимации экспериментальных данных по зависимости логарифма концентрации вакансий от обратной температуры, слабо зависят от температуры и температурная зависимость близка к линейной как для ОЦК, так и для ГЦК металлов

Полученные для ОЦК и ГЦК металлов результаты показывают, что величина отношения V_E^f/Ω существенно зависит от температуры, в то время как $\Delta V/\Omega$ от

температуры не зависит. Этого и следовало ожидать, т.к. на основании уравнения (7) и вывода о сохранении геометрического подобия, не трудно показать, что изменение объема релаксации пропорционально $(1+\alpha T)^3$, также как и изменение объема, приходящегося на атом:

$$C_1(T) = u(T)r^2(T) = u(0)(1 + \alpha T)r^2(0)(1 + \alpha T)^2. \quad (9)$$

На основании вышеизложенного можно сделать важный вывод о том, что температурная зависимость объема образования вакансии в единицах Ω целиком определяется зависимостью слагаемого V_E^f , вклад которого, как отмечалось, в большинстве работ не учитывается. Кроме того следует подчеркнуть, что величина этого слагаемого сравнима с величиной объема релаксации.

На рис. 4 представлены полученные температурные зависимости высот потенциальных барьеров перехода атома в вакансию для ОЦК и ГЦК металлов.

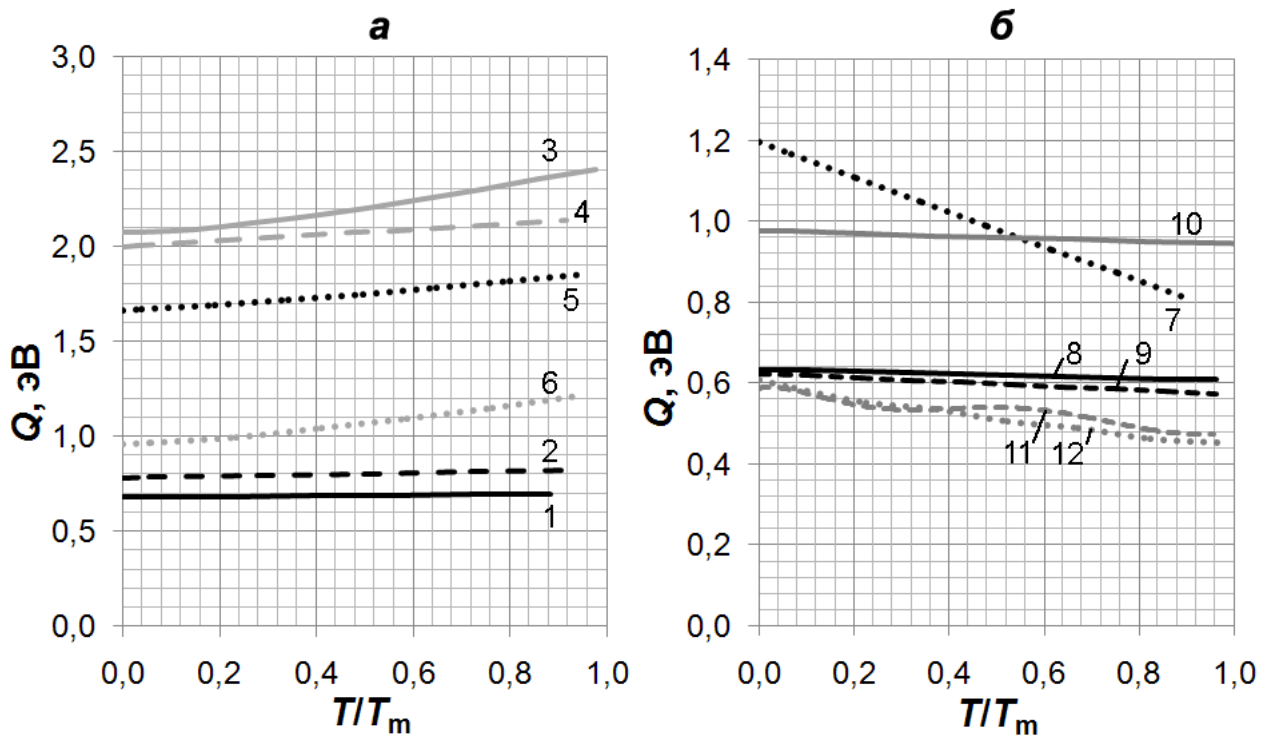


Рис. 4. Температурные зависимости высот потенциальных барьеров переходов атомов в вакансии в ОЦК (а) и ГЦК (б) металлах: 1 – Fe-I, 2 – Fe-II, 3 – W-I, 4 – W-II, 5 – Mo, 6 – V, 7 – Ni, 8 – Al-I, 9 – Al-II, 10 – Cu-I, 11 – Cu-II, 12 – Au

Все температурные зависимости высот потенциальных барьеров в интервале температур $\frac{1}{2}T_m \div T_m$, при которых реализуется объемная диффузия, в первом приближении можно представить как линейные функции температуры (впервые о такой возможности упомянул Глайд): $Q=Q_0+AT$. Тогда выражение для коэффициента диффузии вакансии можно записать следующим образом:

$$D = D_0 \exp\left(-\frac{A}{k}\right) \exp\left(-\frac{Q_0}{kT}\right). \quad (10)$$

Видно, что в этом случае в предэкспоненциальном множителе появляется дополнительный сомножитель $\exp\left(-\frac{A}{k}\right)$, который будет изменять величину D_0 .

Из приведенных результатов, следует, что для ОЦК металлов коэффициент A – положителен, и предэкспоненциальный множитель будет уменьшаться. В ГЦК металлах A – отрицателен, значит здесь предэкспоненциальный множитель будет увеличиваться. Причем этот дополнительный множитель по величине сравним, а в ряде случаев превосходит множитель, учитывающий корреляционные эффекты при вакансионном механизме диффузии. Таким образом, эффект от полученного сомножителя значим и различен для разных структур.

На рис. 5 представлены температурные зависимости объемов миграции, рассчитанные в модели с ограниченной релаксацией.

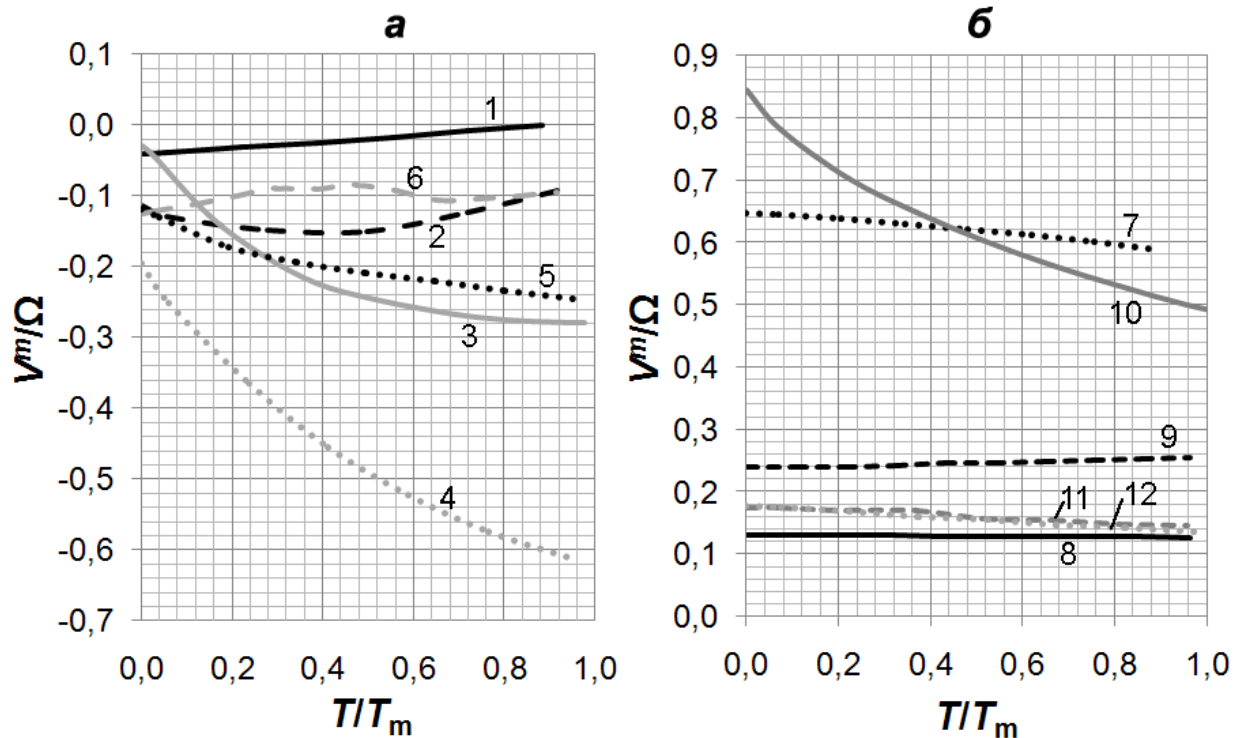


Рис. 5. Температурные зависимости объемов миграции вакансий в ОЦК (а) и ГЦК (б) металлах. Обозначения как на рис. 4

Из графиков видно, что во всем температурном интервале объемы миграции в ОЦК металлах отрицательны, в то время как в ГЦК металлах – положительны. Из этого следует, что внешнее давление будет замедлять диффузию вакансий в ГЦК металлах, и это соответствует данным экспериментов, и ускорять ее в ОЦК металлах. К сожалению, прямых измерений объемов миграций для ОЦК металлов не существует. Такое качественное различие этих характеристик для ОЦК и ГЦК струк-

тур позволяет сформулировать вопрос: является ли это различие принципиальным или характерно только для изученных нами металлов и выбранных при этом потенциалов?

На рис. 6 представлены температурные зависимости объемов активации самодиффузии.

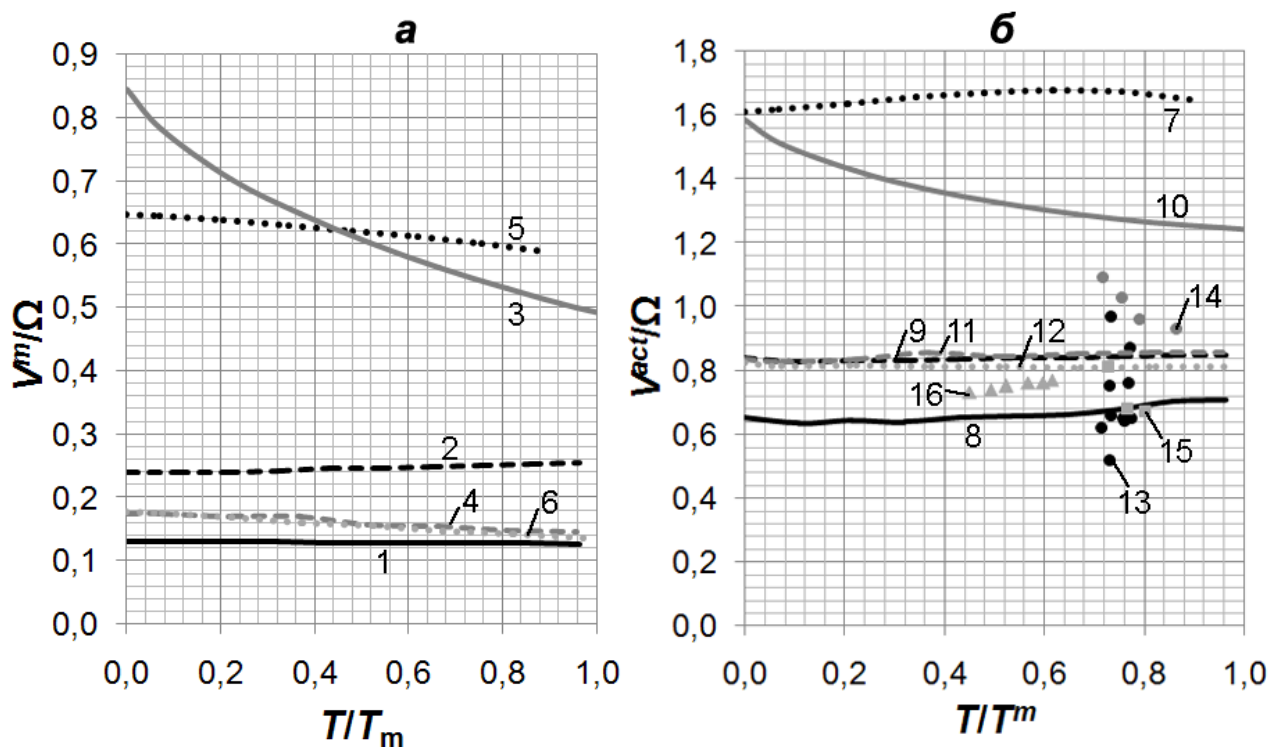


Рис. 6. Температурные зависимости объемов активации самодиффузии в ОЦК (а) и ГЦК (б) металлах. 1–12 – результаты расчета, обозначения как на рис. 4; 13–16 – экспериментальные данные: 13 – Al (Engardt), 14 – Cu (Beyeler), 15 – Au (Mehrer), 16 – Au (Beyeler)

Из анализа представленных выше рисунков, видно, что рассчитанные объемы самодиффузии для алюминия, меди и золота очень хорошо согласуются с экспериментальными данными. К сожалению экспериментальные данные для объемов активации самодиффузии в рассмотренных ОЦК металлах отсутствуют.

Дивакансии. При моделировании дивакансии рассматривались два вакантных узла, расположенные в первой (1nn) или второй (2nn) координационных сферах относительно друг друга. Поэтому в модели для расчета характеристик дивакансий используются два центра дилатации, каждый из которых связан со своей вакансией. Поле смещения в этом случае имеет две составляющие.

Рассчитанные величины энергий связи вакансий в дивакансиях ($E^b = 2E_v^f - E_{2v}^f$) для различных ОЦК и ГЦК металлов показывают, что энергия связи вакансий в дивакансии для ОЦК железа и ванадия больше в случае 2nn дива-

кансии, т.е. такая дивакансия является более устойчивой. Для молибдена и вольфрама в свою очередь более устойчивой является $1nn$ дивакансия. В ГЦК металлах в большинстве случаев устойчива $1nn$ конфигурация дивакансий. С ростом температуры устойчивая конфигурация дивакансии меняется только в ОЦК ванадии.

Для ГЦК металлов объемы образования $1nn$ и $2nn$ конфигураций дивакансий близки между собой и слабо изменяются с температурой. Другая ситуация наблюдается для ОЦК металлов. Здесь различия в объемах образования $1nn$ и $2nn$ конфигураций дивакансий значительней, и объемы образования изменяются с температурой в большинстве случаев заметным образом.

Миграцию дивакансии можно рассматривать как переход одной из вакансий, образующих дивакансию, в другой узел. Мы рассмотрели несколько вариантов таких переходов (рис. 7).

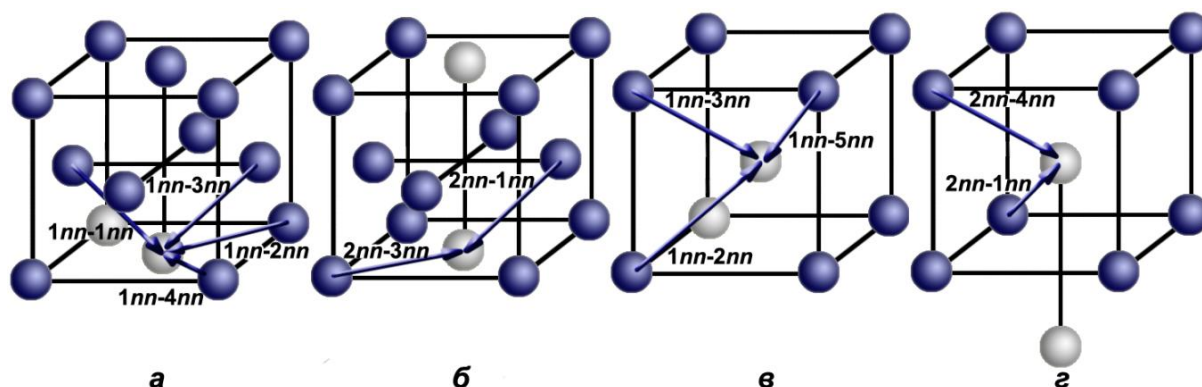


Рис. 7. Схема переходов вакансий в дивакансиях: а — для $1nn$ дивакансий в ГЦК металлах, б — для $2nn$ дивакансий в ГЦК металлах, в — для $1nn$ дивакансий в ОЦК металлах, г — для $2nn$ дивакансий в ОЦК металлах

Для $1nn$ конфигурации дивакансий в ОЦК металлах при нуле температур наиболее вероятны два типа переходов: ($1nn-2nn$) и ($1nn-5nn$) (см. рис. 7). Однако с температурой высота барьера для перехода типа ($1nn-2nn$) растет быстрее (рис. 8) и, следовательно, переход ($1nn-5nn$), т.е. частичное разделение дивакансии на две отдельные вакансии, становится более вероятным при высоких температурах. Для $2nn$ конфигурации дивакансий в ОЦК металлах при любой температуре наиболее вероятен переход типа ($2nn-4nn$), т.е. опять же частичное разделение дивакансии. Наименьшей высотой барьера в ГЦК металлах обладает переход типа ($1nn-1nn$). Для $2nn$ конфигурации дивакансий в ГЦК металлах, которая является менее устойчивой, чем $1nn$ конфигурация, наиболее вероятен переход типа ($2nn-3nn$).

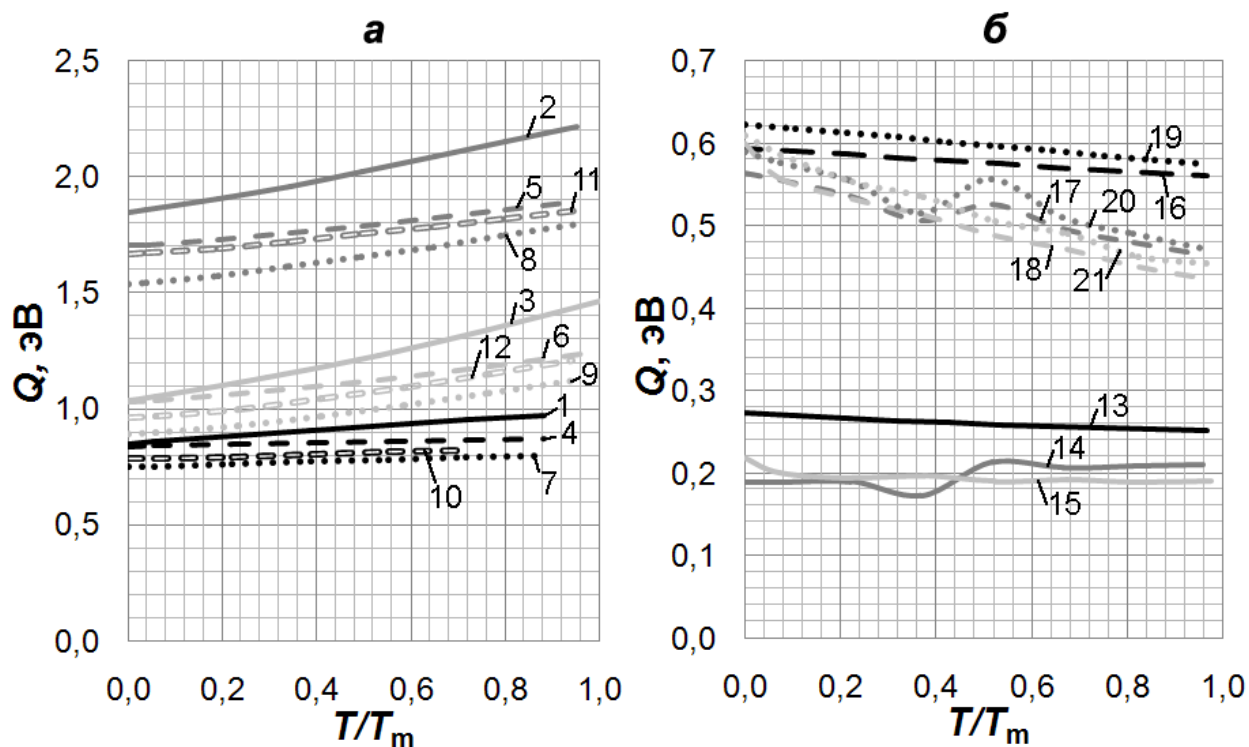


Рис. 8. Температурные зависимости высот потенциальных барьеров для переходов атомов, связанных с дивакансиями и моновакансией в ОЦК (а) и ГЦК (б) металлах:

(1nn-2nn):	(1nn-5nn):	(2nn-4nn):	моновак.:	(1nn-1nn):	(2nn-3nn):	моновак.:
1 – Fe-II	4 – Fe-II	7 – Fe-II	10 – Fe-II	13 – Al-II	16 – Al-II	19 – Al-II
2 – Mo	5 – Mo	8 – Mo	11 – Mo	14 – Cu-II	17 – Cu-II	20 – Cu-II
3 – V	6 – V	9 – V	12 – V	15 – Au	18 – Au	21 – Au

Следует также отметить, что высоты потенциальных барьеров для всех рассмотренных типов переходов в ОЦК металлах увеличиваются с ростом температуры, в то время как в ГЦК металлах в большинстве случаев они - уменьшаются.

Из рис. 8 видно, что в ОЦК металлах высота барьера перехода атома в моновакансию меньше, чем любая из высот барьеров для переходов, связанных с дивакансией. Следовательно, при высоких температурах, когда доля дивакансий уже значима, здесь преобладающим должен оставаться моновакансионный механизм миграции. В тоже время в ГЦК металлах высота барьера перехода атома в моновакансию больше, чем высота барьера перехода дивакансии типа (1nn-1nn). Таким образом, в этих металлах при тех же условиях миграция существенной доли атомов будет реализовываться и по дивакансионному механизму. Значительному вкладу дивакансий в диффузию при высоких температурах в ГЦК металлах должно способствовать также то обстоятельство, что 1nn конфигурация дивакансий при скачках сохраняется, в отличие от ОЦК структур.

Объемы миграций для различных переходов, связанных с дивакансией, как и в случае изолированных вакансий, в ГЦК металлах в большинстве случаев положительны (или близки к нулю), а в ОЦК – отрицательны.

Собственные межузельные атомы (СМА). Результаты расчета энергий образования различных конфигураций межузельных атомов в ОЦК металлах показывают, что для ОЦК железа, молибдена и вольфрама наиболее энергетически выгодной конфигурацией является $\langle 110 \rangle$ гантельная конфигурация. Однако, с ростом температуры в этих металлах, как и в ванадии, $\langle 111 \rangle$ конфигурация СМА становится более устойчивой. Для всех ГЦК металлов, наиболее стабильной конфигурацией межузельного атома является $\langle 100 \rangle$ гантельная конфигурация.

Для ГЦК металлов в большинстве случаев объемы образования межузельных атомов положительны. В тоже время увеличение температуры приводит к тому, что для ОЦК молибдена и ванадия объемы образования большинства конфигураций СМА становятся отрицательными. Это согласуется с теоретическими оценками, приведенными в работе Лазаруса.

В главе 5 описаны основные моменты теоретического подхода, позволяющего получить уравнения для потока вакансий в присутствии поля деформации. Так, проекция плотности потока вакансий на ось x может быть записана следующим образом:

$$J_1 = -\frac{1}{\Omega} \left[D_{11} \frac{\partial c}{\partial x} + D_{12} \frac{\partial c}{\partial y} + D_{13} \frac{\partial c}{\partial z} - c \left(\frac{\partial D_{11}}{\partial x} + \frac{\partial D_{12}}{\partial y} + \frac{\partial D_{13}}{\partial z} \right) \right], \quad (11)$$

где $D_{\alpha\beta}$ – компоненты матрицы коэффициентов диффузии ($\alpha, \beta = \{1, 2, 3\}$), c – концентрация вакансий. Аналогично можно записать выражения для проекций плотности потока вакансий на оси y и z . Компоненты матрицы коэффициентов диффузии различны для разных кристаллографических структур. Так для ГЦК структуры:

$$D_{11} = \frac{D}{2} \exp\left(-\frac{K_1 Sp\varepsilon}{kT}\right) \left[\exp\left(-\frac{K_2 \varepsilon_{22}}{kT}\right) \operatorname{ch}\left(\frac{K_3 \varepsilon_{13}}{kT}\right) + \exp\left(-\frac{K_2 \varepsilon_{33}}{kT}\right) \operatorname{ch}\left(\frac{K_3 \varepsilon_{12}}{kT}\right) \right], \quad (12)$$

$$D_{12} = \frac{D}{2} \exp\left(-\frac{K_1 Sp\varepsilon}{kT}\right) \exp\left(-\frac{K_2 \varepsilon_{33}}{kT}\right) \operatorname{sh}\left(\frac{K_3 \varepsilon_{12}}{kT}\right). \quad (13)$$

Для ОЦК структуры:

$$D_{11} = \frac{D}{2} e^{-\frac{K_1 Sp\varepsilon}{kT}} \left[\exp\left(\frac{K_2 \varepsilon_{23}}{kT}\right) \operatorname{ch}\left(\frac{K_2(\varepsilon_{12} + \varepsilon_{13})}{kT}\right) + \exp\left(-\frac{K_2 \varepsilon_{23}}{kT}\right) \operatorname{ch}\left(\frac{K_2(\varepsilon_{12} - \varepsilon_{13})}{kT}\right) \right], \quad (14)$$

$$D_{12} = \frac{D}{2} e^{-\frac{K_1 Sp\varepsilon}{kT}} \left[\exp\left(\frac{K_2 \varepsilon_{12}}{kT}\right) \operatorname{ch}\left(\frac{K_2(\varepsilon_{13} + \varepsilon_{23})}{kT}\right) - \exp\left(-\frac{K_2 \varepsilon_{12}}{kT}\right) \operatorname{ch}\left(\frac{K_2(\varepsilon_{13} - \varepsilon_{23})}{kT}\right) \right]. \quad (15)$$

Здесь D – коэффициент диффузии вакансии в идеальной системе без поры, $Sp\varepsilon = \varepsilon_{11} + \varepsilon_{22} + \varepsilon_{33}$.

Каждый компонент матрицы коэффициентов диффузии нелинейным образом зависит от компонентов тензора деформации. В соответствующих нелинейных уравнениях функциональная зависимость от компонент тензора деформации определяется коэффициентами K_1, K_2 для ОЦК структур и K_1, K_2, K_3 – для ГЦК. Эти

коэффициенты (SID коэффициенты) являются основной характеристикой влияния упругих полей на диффузию и связаны с атомарной структурой в окрестности перескакивающего атома в основной и седловой позициях. Так например:

$$K_1 = \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} \left(\frac{(x_{ij}^w)^2}{R_{ij}^w} \frac{\partial E}{\partial R_{ij}} \bigg|_{R_{ij}^w} - \frac{(x_{ij}^v)^2}{R_{ij}^v} \frac{\partial E}{\partial R_{ij}} \bigg|_{R_{ij}^v} \right); \quad (16)$$

В данной главе обоснована возможность использования разработанной модели для расчета SID коэффициентов и приведена полученная температурная зависимость этих коэффициентов для ОЦК и ГЦК металлов.

Коэффициенты SID сильно различаются для разных металлов и типов используемых потенциалов. Большинство SID коэффициентов заметным образом изменяется при увеличении температуры, что необходимо учитывать при моделировании влияния упругих полей на процесс диффузии.

В качестве иллюстрации возможности использования SID коэффициентов для моделирования влияния упругих полей, создаваемых различными дефектами, на диффузионные потоки и, как следствие, на кинетику протекающих процессов в главе 5 также представлены полученные результаты по влиянию упругого поля, создаваемого порой, на компоненты матрицы коэффициентов диффузии вакансии в окрестности этой поры (рис. 9).

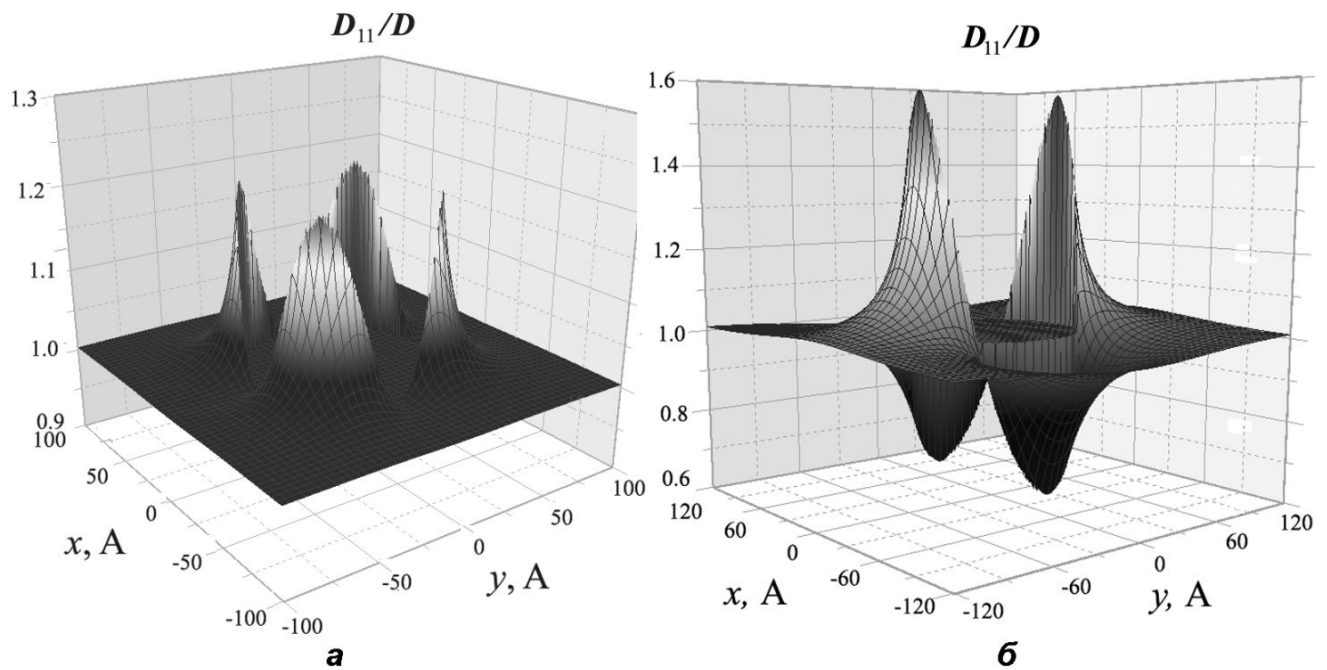


Рис. 9. Координатные зависимости компонент матрицы коэффициентов диффузии вакансии D_{11} , отнесенных к коэффициенту диффузии вакансии в идеальной системе D , в плоскости $z=0$ в окрестности поры для ОЦК железа (а) и ГЦК меди (б); радиус поры 50 Å, температура 500 К

Показано, что координатные зависимости компонентов матрицы коэффициентов диффузии в окрестности поры имеют сложный характер и качественно различный вид для ОЦК и ГЦК структур. Следовательно, влияние упругого поля, создаваемого порой, на поток вакансий в окрестности поры будет различным для этих структур, что сказывается на скорости роста пор и может привести к качественно различному распределению пор по размерам в системах с разными кристаллическими структурами.

ОСНОВНЫЕ ВЫВОДЫ

По результатам выполнения работы, посвященной созданию нового теоретического подхода для моделирования атомарной структуры в окрестности дефектов и расчету характеристик вакансий, дивакансий и собственных межузельных атомов, можно сделать следующие выводы.

1. Разработана модель для расчета диффузионных характеристик точечных дефектов, которая имеет ряд преимуществ:
 - учитывает смещения атомов в среде, окружающей расчетную ячейку, т.е. вдали от дефекта;
 - позволяет рассчитывать вклады в объемы образования и миграции дефекта, обусловленные разной зависимостью от внешнего давления энергий идеальной системы и системы с дефектом;
 - учитывает то, что за время скачка атома в вакансию изменения объема системы произойти не успевают;
 - позволяет определять температурные зависимости таких характеристик точечных дефектов, как энергии их образования и миграции, а также объемы образования и миграции.
2. Показано, что вклад в объем образования, обусловленный зависимостью энергии системы от давления, сравним с величиной объема релаксации, и его необходимо учитывать. Этот вклад, в отличие от объема релаксации, существенно зависит от температуры и определяет температурную зависимость объема образования.
3. Обнаружено, что объемы миграции положительны для ГЦК и отрицательны для ОЦК металлов.
4. Установлено, что в интервале температур от $\frac{1}{2}T_m$ до T_m температурная зависимость высот потенциальных барьеров близка к линейной $Q = Q_0 + AT$. При этом коэффициент A отрицателен для ГЦК и положителен для ОЦК металлов, что изменяет величину предэкспоненциального множителя в выражении для коэффициента диффузии.

5. Из результатов моделирования следует, что при высоких температурах вклад дивакансий в самодиффузию в ГЦК металлах должен быть существенен в отличие от ОЦК систем.
6. Показано, что для ряда ОЦК металлов, начиная с некоторой температуры, более устойчивой конфигурацией становится $\langle 111 \rangle$ конфигурация собственного межузельного атома, хотя при низких температурах наиболее устойчивой является $\langle 110 \rangle$ конфигурация. В ГЦК металлах во всем интервале температур наиболее устойчивой является $\langle 100 \rangle$ конфигурация межузельных атомов.
7. Получена отрицательная величина объема образования для некоторых конфигураций собственных межузельных атомов в ОЦК металлах. В ГЦК металлах объемы образования для всех конфигураций межузельных атомов положительны.
8. С использованием многочастичных потенциалов впервые рассчитаны SID коэффициенты, определяющие зависимость компонент матрицы коэффициентов диффузии от компонент тензора деформации, и их температурная зависимость. Показано, что коэффициенты SID, определяющие вклад недиагональных компонент тензора деформации, сравнимы по величине с коэффициентами SID, определяющими вклад диагональных компонент.
9. Установлено, что упругие поля, создаваемые порами, будут существенно влиять на поток вакансий в окрестности поры и, соответственно, на скорость роста пор при низких температурах, что следует из координатных зависимостей компонент матрицы коэффициентов диффузии в окрестности поры.

Основные публикации по теме диссертации

1. И.В. Валикова. Моделирование атомарной структуры и характеристик точечных дефектов в ОЦК – металлах // В сб. науч. трудов конференции “Молодежь и наука”. – 2005. – Т. 15. – С. 158-159.
2. I.V. Valikova, A.V. Nazarov. Simulation of Diffusion under pressure in BCC Metals // Online Journal Diffusion Fundamentals. – 2005. – V. 3. – 11.1 - 11.15, [http://www.uni-leipzig.de/diffusion/journal/pdf/volume3/diff_fund_3\(2005\)11.pdf](http://www.uni-leipzig.de/diffusion/journal/pdf/volume3/diff_fund_3(2005)11.pdf).
3. И.В. Валикова. Моделирование атомарной структуры и диффузионных характеристик вакансий в α -железе // В сб. науч. трудов конференции “Молодежь и наука”. – 2005. – Т. 2. – С. 190-192.
4. I.V. Valikova, A.V. Nazarov, A.A. Mikheev. Calculation of atom configuration and characteristic of vacancy in bcc lattice of α -Fe // Defect and Diffusion Forum. – 2006. – V. 249. – P. 55-60.

5. И.В. Валикова. Модель «Катапульты» для расчета диффузионных характеристик вакансий в металлах // В сб. науч. трудов конференции “Молодежь и наука”. – 2006. – Т. 15. – С. 157-158.
6. И.В. Валикова. Моделирование атомарной структуры и диффузионных характеристик вакансий в α -железе // В сб. тезисов конференции “Ломоносов-2005”. – 2005. – Т. 2. – С. 190-192.
7. И.В. Валикова, А.В. Назаров. Моделирование характеристик, определяющих влияние давления на концентрацию и диффузионную подвижность вакансий в ОЦК металлах // Физика металлов и металловедение. – 2008. – Т. 105. – № 6. – С. 1-9.
8. I.V. Valikova, A. Nazarov. Simulation of Pressure Effects on Self-Diffusion in BCC Metals // Defect and Diffusion Forum. – 2008. – V. 277. – P. 125-133.
9. А.Б. Германов, И.В. Валикова, А.В. Назаров. Моделирование атомарной структуры в окрестности точечных дефектов в ГЦК решетке методом молекулярной динамики // В сб. науч. трудов сессии МИФИ-2008. – 2008. – Т. 4. – С. 79-80.
10. Е.В. Решетникова, И.В. Валикова, А.В. Назаров. Моделирование теплового расширения и изменения с температурой атомарной структуры в окрестности вакансии для ОЦК-Fe // В сб. науч. трудов сессии МИФИ-2008. – 2008. – Т. 4. – С. 89-90.
11. И.В. Валикова. Моделирование диффузионных свойств точечных дефектов и их температурной зависимости для ОЦК и ГЦК структур // В сб. тезисов конференции “Ломоносов-2008”. – 2008. – секция “Физика”. – С. 302-304.
12. И.В. Валикова, А.Б. Германов, М.В. Емельянова, Е.В. Решетникова. Моделирование изменения атомарной структуры в окрестности дефектов и их свойств с температурой // В сб. тезисов конференции “Ломоносов-2008”. – 2008. – секция “Физика”. – С. 305-307.
13. И.В. Валикова, А.В. Назаров. Моделирование температурной зависимости диффузионных свойств точечных дефектов для ОЦК и ГЦК металлов // ВАНТ. – сер. “Материаловедение и новые материалы”. – 2009. – Вып. 1 (74). – С. 128-139.
14. I.V. Valikova, A.V. Nazarov. Simulation of Pressure Effects on Point Defect Concentration and Their Migration in BCC Metals // In proc. of the 10th and 11th International Moscow Schools of Physics (35th and 36th ITEP Winter Schools of Physics) “Fundamental basis of nuclear energo-technologies of the new generation” / Eds. F.S. Dzheparov, D.V. Lvov, S.V. Stepanov. – Moscow: Academprint. – 2009. – P. 17-24.
15. И.В. Валикова, А.В. Назаров. Моделирование характеристик, определяющих влияние упругих полей на диффузионные потоки в ГЦК и ОЦК металлах // В сб. трудов 10 и 11 Международной Московской школы физики ИТЭФ (35 и 36 зимняя

школа физики ИТЭФ) “Фундаментальные основы ядерных энерготехнологий нового поколения” / Под ред. Ф.С. Джепаров, Д.В. Львов, С.В. Степанов. М.: Академпринт. – 2009. – С. 173-182.

16. И.В. Валикова. Моделирование температурной зависимости диффузионных характеристик точечных дефектов в металлах с кубической структурой // Прилож. к журналу “Физическое образование в вузах”. – 2009. – Т. 11. – № 1. – С. 11-12.
17. I.V. Valikova, A.V. Reshetnikava, A.B. Germanov, A.V. Nazarov. Molecular dynamics simulation of atomic structure in the vicinity of point defects in FCC and BCC metals // In proc. Diffusion Fundamentals III. – 2009. – P. 324-325.
18. I.V. Valikova, A.V. Nazarov. Simulation of Pressure- and Temperature Dependence of Impurity Diffusion in BCC Metals // In proc. Diffusion Fundamentals III. – 2009. – P. 326-327.
19. A.B. Germanov, A.V. Reshetnikava, I.V. Valikova, A.V. Nazarov. Molecular dynamics simulation of atomic structure in the vicinity of vacancies, their complexes and nanovoids in FCC and BCC metals // In proc. conference “Thermodynamics and Transport Kinetics of Nanostructured Materials”. – 2009. – P. 98-99.
20. I.V. Valikova, A. Nazarov. Simulation of the features determining strain influence on diffusion fluxes in FCC and BCC metals // In proc. conference “Thermodynamics and Transport Kinetics of Nanostructured Materials”. – 2009. – P. 128-129.