

01,08

Стоковые силы и предпочтения пор в ОЦК-металлах Fe и V

© А.Б. Сивак¹, В.М. Чернов²

¹ Национальный исследовательский центр „Курчатовский институт“, Москва, Россия

² Акционерное общество „Высокотехнологический научно-исследовательский институт неорганических материалов имени академика А.А. Бочвара“, Москва, Россия

E-mail: Sivak_AB@nrcki.ru, nrcki@nrcki.ru

Поступила в Редакцию 16 января 2025 г.

В окончательной редакции 28 января 2025 г.

Принята к публикации 29 января 2025 г.

Для ОЦК металлов Fe и V определена наиболее энергетически выгодная огранка пор. Рассчитаны их стоковые силы для собственных точечных дефектов (вакансий, межузельных атомов) и предпочтения (относительные разности стоковых сил для межузельных атомов и вакансий). Расчеты проведены объектным кинетическим методом Монте-Карло в диапазоне температур 293–1000 К и размеров пор 2.4–99 a (a — параметр кристаллической решетки). Упругое взаимодействие собственных точечных дефектов в стабильных и седловых конфигурациях (упругих диполей) с упругими полями пор рассчитано в рамках анизотропной теории упругости. Упругие поля пор рассчитаны из атомных смещений из положений узлов идеальной кристаллической решетки, определенных с помощью метода молекулярной статистики. Предпочтения пор зависят от их размера и температуры и для малых пор (размер меньше нескольких десятков a) может принимать значения, сравнимые по величине с предпочтением винтовых дислокаций. Полученные результаты объясняют экспериментально наблюдаемые особенности радиационного распухания чистых железа и ванадия, облученных нейтронами в быстрых реакторах.

Ключевые слова: железо, ванадий, поры, стоковые силы, предпочтения.

DOI: 10.61011/FTT.2025.03.60251.12-25

1. Введение

В традиционной теории радиационного распухания металлов [1–3] рост вакансионных пор в металлах под облучением объясняется дислокационным предпочтением (относительные разности стоковых сил для межузельных атомов и вакансий) к собственным межузельным атомам (СМА), который приводит к переползанию дислокаций за счет преимущественного притока к ним СМА и, как следствие, к росту пор за счет преимущественного притока к ним вакансий. У пор, как и у дислокаций, также может быть предпочтение, который обычно считается малым по сравнению с дислокационным для достаточно крупных пор. В связи с этим предпочтением пор либо пренебрегают, либо включают его влияние в дислокационный предпочтение. В работе [4] показано, что такой подход приводит к сильной недооценке роли предпочтения пор в эволюции ансамбля пор под облучением, которая определяется предпочтением пор в той же мере, что и дислокационным предпочтением. В связи с этим для моделирования эволюции радиационной микроструктуры важно знать зависимости предпочтения пор от их размера, концентрации и температуры. Вопрос определения предпочтений различных элементов микроструктуры до сих пор актуален, т.к. определить их достаточно точно теоретическими или экспериментальными методами непросто [5]. В связи с этим для решения этой задачи

используют многоуровневый моделирующий подход, используя различные комбинации методов компьютерного моделирования и теоретических методов. Точность и обоснованность получаемых результатов определяется физической обоснованностью выбираемых подходов.

Взаимодействие пор с собственными точечными дефектами (СТД — вакансии, СМА) вдали от поверхности пор (больше параметра кристаллической решетки a) происходит за счет создаваемого порами упругого поля, с которым точечные дефекты взаимодействуют как упругие диполи, что приводит к их анизотропной диффузии в окрестности пор. Анизотропия диффузии определяется только взаимодействием упругого поля с седловыми конфигурациями точечных дефектов [6,7] и этот тип взаимодействий вносит определяющий вклад в величину предпочтения пор [7].

В работах [7–10] рассчитываются стоковые силы и предпочтения сферических пор, при этом учитываются эффекты анизотропной диффузии точечных дефектов в упругих полях, возникающие из-за отличия симметрии седловой конфигурации точечных дефектов от сферической. Стоковые силы пор в [7] определяются путем решения диффузионных уравнений, в [8] — с помощью объектного кинетического метода Монте-Карло (ОКМК), в [9] — с помощью нестохастического метода, основанного на теории поглощающих цепей Маркова, в [10] — с помощью метода фазового поля. В рабо-

тах [7–10] упругие поля пор определяются с помощью решения Эшелби [11,12] для сферических включений в упругоизотропной [7–9] и упругоанизотропной [10] среде, которое отличается не только количественно, но и качественно от решения, получаемого с помощью молекулярной статики (МС), учитывающего атомистическую конфигурацию поверхности пор [13,14]. В работах [15–17] преференс сферических пор определяется через разность эффективных размеров пор для вакансий и СМА на основе критерия превышения некоторого произвольно выбранного порога для энергии связи пор с вакансиями и СМА. Энергия взаимодействия между порами и точечными дефектами определяется с помощью МС-метода, что обеспечивает ее наиболее корректное доступное определение в настоящее время. Однако взаимодействие рассчитывается только для точечных дефектов (и их небольших кластеров в работе [17]) в стабильных конфигурациях. Таким образом, в работах [15–17] важнейший эффект (взаимодействие с седловыми конфигурациями точечных дефектов), определяющий преференс, не учитывается. Некоторые из перечисленных оценок дают большие значения для преференса пор малого размера (десятки процентов), и во всех перечисленных работах отмечается, что преференс уменьшается с увеличением размера пор.

В настоящей работе на основе МС-расчетов определяется наиболее энергетически выгодная огранка пор в объемно-центрированных кубических (ОЦК) металлических кристаллах Fe и V. Эти металлы представляют важный научный и практический интерес, т.к. являются основой для разработки конструкционных сталей и сплавов для ядерных и термоядерных энергетических реакторов [18]. Затем для пор с наиболее энергетически выгодной огранкой рассчитываются их стоковые силы для СТД и преференс (диапазоны размеров пор 2–99a, температур 293–1200 К) с использованием многоуровневого подхода. В рамках него анизотропная диффузия СТД в упругих полях пор, определенных МС-методом, моделируется ОКМК-методом [19]. Взаимодействие между упругими полями пор и СТД, рассматриваемыми как упругие диполи, рассчитывается в рамках анизотропной теории упругости.

2. Модели и методы расчетов

2.1. Атомистические модели рассматриваемых типов пор

Энергию образования E^F пор, имеющих огранку, в первом приближении можно рассчитать как сумму произведений площадей граней на соответствующие поверхностные энергии γ . Если бы γ не зависела от ориентации поверхности, то поры сферической формы обладали бы наименьшей E^F , т.к. такие поры обладают наименьшей площадью поверхности при фиксированном объеме. Однако γ в металлах является величиной анизотропной вследствие их кристаллической структуры. Как

следствие, E^F у пор с огранкой теоретически может быть меньше, чем у сферических. Оценка γ для ОЦК металлов с помощью модели разорванных связей [20] (учитывались связи между 1-ми и 2-ми ближайшими соседями) показала, что наименьшими значениями γ в порядке увеличения обладают поверхности $\{110\}$, $\{100\}$, $\{211\}$, $\{111\}$. Поэтому для определения наиболее энергетически выгодной огранки в работе рассчитываются размерные зависимости энергии образования следующих типов пор:

- сферические поры (S);
- куб с гранями $\{100\}$ (C_{100});
- октаэдр и ромбододекаэдр с гранями $\{110\}$ (O_{110} и R_{110});
- правильный октаэдр с гранями $\{111\}$ (O_{111});
- дельтоидальный икоситетраэдр с гранями $\{211\}$ (D_{211}).

На рис. 1 изображены поры, представляющие каждый из рассмотренных типов. Поры визуализированы путем изображения атомов, находящихся на их поверхности (атомы с координационным числом меньше 14 — сумма восьми первых и шести вторых ближайших соседей в ОЦК-решетке). При этом разные цвета атомов отражают разные значения координационного числа: голубой для 7, желтый для 8, красный для 9, оранжевый для 10, фиолетовый для 11, синий для 12, зеленый для 13. При таком способе визуализации пор каждый тип грани имеет свой характерный узор. Грани пор типа $\{100\}$ состоят из двух плоскостей атомов красного и зеленого цветов (рис. 1, a), $\{110\}$ — из одной плоскости атомов оранжевого цвета (рис. 1, b, c), $\{111\}$ — из трех плоскостей атомов голубого, оранжевого и зеленого цветов (рис. 1, d), $\{211\}$ — из двух плоскостей атомов желтого и синего цвета (рис. 1, e). Сферические поры фактически состоят из набора плоскостей $\{100\}$, $\{110\}$, $\{111\}$ и $\{211\}$ — на рис. 1, f хороши видны их характерные узоры.

В табл. 1 сведены полезные для дальнейшего изложения геометрические соотношения для рассматриваемых типов пор, связывающие их объем V , площадь поверхности S , длину ребер граней b и количество вакантных узлов кристаллической решетки n в порах. Всюду в работе принимается, что объем пор равен $V = n\Omega = na^3/2$.

Для удобства сравнения свойств пор разных типов введем величину эффективного диаметра пор:

$$d_{\text{eff}}(n) = (6/\pi)^{1/3} V^{1/3} = (3/\pi)^{1/3} n^{1/3} a. \quad (1)$$

2.2. МС-модель для расчета свойств пор и их упругих полей

Энергетические характеристики сферических вакансионных пор диаметром $d = 2-20a$, а также их упругие поля были определены в работе [14] с помощью МС-метода с использованием потенциалов межатомного

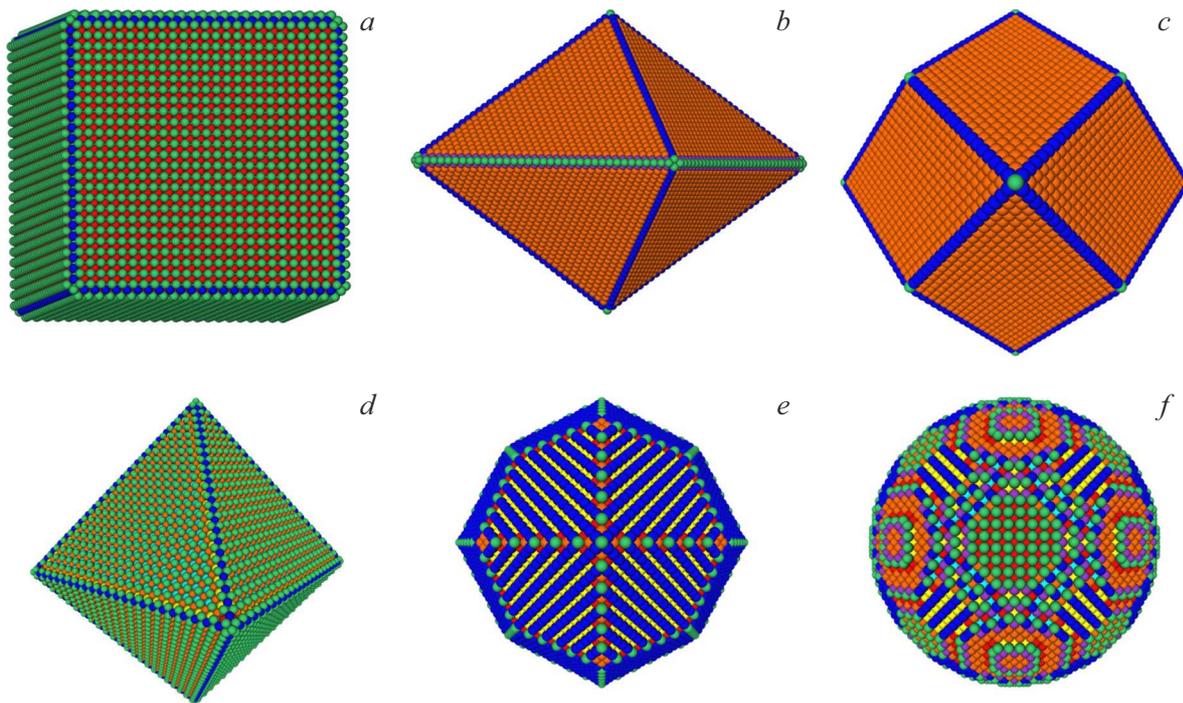


Рис. 1. Вид на поверхностные атомы пор разной формы размером $\sim 30a$: *a* — куб с гранями $\{100\}$ (C_{100}); *b* — октаэдр с гранями $\{110\}$ (O_{110}); *c* — ромбододекаэдр с гранями $\{110\}$ (R_{110}); *d* — октаэдр с гранями $\{111\}$ (O_{111}); *e* — дельтоидальный икоситетраэдр с гранями $\{211\}$ (D_{211}); *f* — сфера (S).

Таблица 1. Геометрические соотношения для рассматриваемых типов пор

Тип поры	$b, V^{1/3}$	S, b^2	$S(n)/n^{2/3}, a^2$
C_{100}	1	6	$2^{1/3}3 \approx 3.77976$
O_{111}	$3^{1/3}/2^{1/6}$	$2 \cdot 3^{1/2}$	$3^{7/6} \approx 3.60281$
O_{110}	$3^{1/3}$	$2^{3/2}$	$2^{5/6}3^{2/3} \approx 3.70629$
R_{110}	$3^{1/2}/2^{4/3}$	$2^{7/2}$	$2^{1/6}3 \approx 3.36739$
D_{211}	$(122 + 71\sqrt{2})^{-1/6}$	$6\sqrt{29-2^{3/2}}$	$\frac{\sqrt{29-2^{3/2}}}{\sqrt[3]{61+71/2^{1/2}}} 3 \approx 3.19150$
S	—	—	$\pi^{1/3}3^{2/3} \approx 3.04647$

взаимодействия (ПМВ) M07 для Fe [21] и для V [22]. Эти ПМВ достаточно точно описывают объемные и поверхностные свойства кристаллов. В настоящей работе проводятся аналогичные расчеты для сферических пор с $d = 30-100a$, а также для ограниченных пор с $d_{\text{эф}} = 3-100a$ с использованием той же методики и тех же ПМВ, что и в работе [14].

Атомистическая конфигурация, соответствующая поре в объеме материала, создается путем убирания атомов, находящихся внутри сферы или многогранника заданного размера, из модельного кристаллита кубической формы размером L (центр поры находится в центре

кристаллита) с жесткими граничными условиями с последующей минимизацией потенциальной энергии кристаллита методом градиентного спуска. Минимизация проводится до тех пор, пока максимальная действующая на атомы сила не становится меньше 10^{-9} eV/nm. В работе [14] использовалось ограничивающее значение 10^{-7} eV/nm, но в настоящей работе из-за гораздо более крупных размеров кристаллитов (максимальное значение L в настоящей работе и работе [14] — $225a$ и $100a$ соответственно) для сохранения того же уровня точности расчетов, что и в [14], это значение уменьшено на два порядка. Размер L выбирался таким, чтобы граничные условия не оказывали заметного влияния на рассчитываемые характеристики (табл. 2).

2.3. ОКМК-модель для расчетов стоковых сил пор

Расчетная ячейка для ОКМК-расчетов представляет собой куб стороной $L^{\text{МК}}$, в центре которой находится пора. На грани расчетной ячейки наложены периодические граничные условия. Таким образом, моделируется равномерно распределенная в пространстве кубическая решетка пор одинакового размера с концентрацией $N_V = (L^{\text{МК}})^{-3}$. Наличие пространственной корреляции расположения пор не оказывает значимого влияния на результаты расчетов стоковых сил при трехмерном механизме миграции поглощаемых дефектов [23].

Таблица 2. Размеры модельных кристаллитов L , используемых в расчетах свойств пор разных типов объемом V . Курсивом выделены значения V для пор, чьи энергии образования и упругие поля рассчитаны ранее в работе [14]

L, a	V, Ω					
	C_{100}	O_{111}	O_{110}	R_{110}	D_{211}	S
30	9, 35, 91	15, 57	19, 85	15, 65, 175	65	27, 59
7	189, 341, 559, 2331	143, 1247	231, 489, 891, 1469, 2255, 3281	369, 671, 1105, 1695, 2465	779	137, 229, 1037, 2277
80	—	—	—	3439	3005	3527, 5065
100	9009	8569	8119	7825	7607	8363
120	—	—	—	—	15449	—
150	29449	27455	28595	29679	27395	28325
170	—	—	—	—	—	130869
190	—	—	—	—	—	359253
225	—	—	—	1024255	—	1047139

Начальные положения дефектов задаются случайно по объему ячейки, за исключением области внутри поры. Стартовые координаты дефектов представляют собой дискретное множество, совпадающее с узлами ОЦК кристаллической решетки. Дефекты совершают скачки в ближайшие соседние узлы в соответствии со своим механизмом диффузии: вакансии могут перемещаться в любой из 8 ближайших соседних узлов, $\langle 110 \rangle$ гантельный СМА — в 4 ближайших узла с двумя различными конечными ориентациями расщепления для каждого узла (механизм миграции Джонсона [24]).

Будем называть поверхностными узлами решетки такие, у которых среди соседних узлов (1-ые и 2-ые ближайшие соседи ОЦК-решетки) есть хотя бы один вакантный. МС-расчеты показали, что СМА спонтанно рекомбинирует с порой, если он попадает в узлы, ближайшие к поверхностным (приповерхностные узлы). МС-расчеты также показали, что вакансии, попавшие в слой приповерхностных узлов, обладают значительно меньшей энергией миграции для движения к поверхностному слою, чем в прочих направлениях. Поэтому в ОКМК-расчетах считается, что СМА и вакансии поглощаются порой, если они в процессе миграции по кристаллической решетке попали в приповерхностный узел.

Для определения вероятностей скачков дефекта в разных направлениях необходимо знать энергии взаимодействия дефекта в соответствующих седловых конфигурациях, а, значит, и упругое поле в положениях седловых точек. Упругое поле, создаваемое порой в объеме материала, рассчитывается из определенных МС-методом координат атомов, сместившихся из узлов недеформированной кристаллической решетки. В рамках используемой методики [14] значения тензора деформаций определяются только для узлов решетки, которые соответствуют положениям дефектов в основных состо-

яниях. Поэтому поле для позиций седловых точек СТД рассчитывается путем линейной интерполяции тензора деформаций по узлам решетки, соответствующим положениям дефекта до и после скачка. Если конечное положение дефекта соответствует приповерхностному (поглощающему) узлу, поле для соответствующей седловой точки определяется путем линейной экстраполяции тензора деформаций по узлам решетки, один из которых соответствует положению дефекта до скачка, а другой является ближайшим соседом первого в направлении, противоположном рассматриваемому направлению скачка.

Энергии взаимодействия СТД с упругими полями пор рассчитываются в рамках анизотропной теории упругости (в работе [14] показано, что расчеты энергии взаимодействия пор с СТД с помощью теории упругости согласуются с прямыми МС-расчетами этой величины), следуя [25,26], как

$$E(\mathbf{r}) = -P_{ij}\varepsilon_{ij}(\mathbf{r}), \quad (2)$$

где P_{ij} — дипольный тензор рассматриваемой конфигурации СТД, ε_{ij} — тензор деформаций упругого поля, создаваемого порой, в положении СТД \mathbf{r} .

Необходимые для расчетов энергии взаимодействия характеристики СМА и вакансий (дипольные тензоры основных и седловых конфигураций) рассчитаны МС-методом в [27] для Fe и в [19] для V. Обоснование применимости используемых для расчета их характеристик ПМВ R01 в Fe и V приведено в работе [28]. Для ускорения ОКМК-расчетов упругое взаимодействие между порой и дефектом рассчитывается только в ограниченном объеме кубической формы, в центре которого находилась пора. Размер этого объема (сторона куба L^{int}) подбирается таким образом, чтобы вносимое этим упрощением отклонение в рассчитываемые стоковые силы

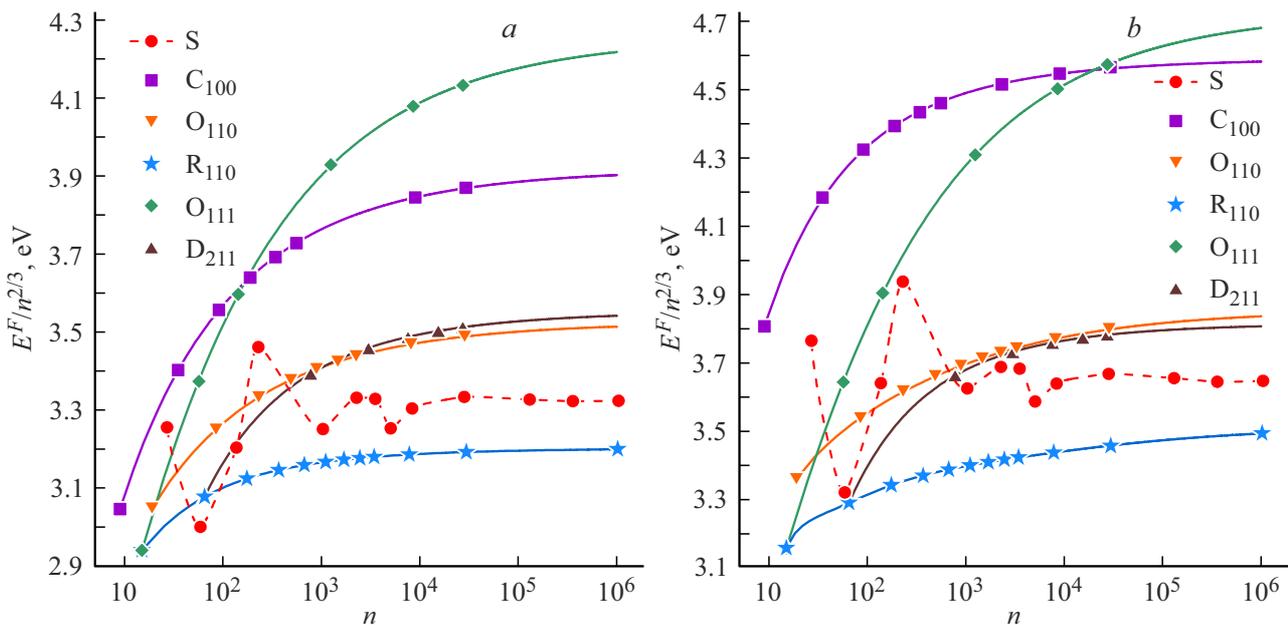


Рис. 2. Размерные зависимости нормированной энергии образования пор разных типов $E^F(n)/n^{2/3}$ (n — количество вакантных узлов решетки в поре): a — Fe; b — V. Сплошные линии — аппроксимация (5).

Таблица 3. Используемые в расчетах значения L^{int} (в a) для пор размером d_{eff} (в a)

d_{eff}	2–3	3–6	6–8	8–14	14–17	17–25	25–40	40–60	60–90	> 90
L^{int}	10	24	50	64	74	94	144	160	180	200

было меньше статистической погрешности расчета. Используемые L^{int} сведены в табл. 3.

В процессе моделирования в расчетной ячейке всегда находится только один дефект. Как только он поглощается порой, вводится следующий. Расчет оканчивается, когда набирается достаточное количество траекторий для заданного уровня статистической точности. Стоковая сила определяется соотношением (см., например, [29])

$$k^2 = 6\lambda^{-2}\langle N \rangle^{-1}, \quad (3)$$

где λ — длина скачка дефекта (при рассматриваемых механизмах диффузии дефект может совершать скачки только одной длины $3^{1/2}a/2$ в разных направлениях), $\langle N \rangle$ — среднее число скачков дефекта, совершенных до поглощения стоком.

Преференс пор в настоящей работе определяется как

$$D = (k_+^2 - k_-^2)/(k_+^2 + k_-^2), \quad (4)$$

где используются индексы + и – для СМА и вакансий соответственно.

Для расчетов стоковых сил пор без учета упругого взаимодействия между порами и дефектами ($k_{0,\pm}^2$) рассчитывается 10^7 траекторий, с учетом (k_{\pm}^2) — 10^5 траекторий. Это обеспечивает уровень статистической погрешности расчетов 0.1% и 1% соответственно при

доверительной вероятности 99%. Столь значительное число траекторий для расчета $k_{0,\pm}^2$ удается промоделировать благодаря использованию ускоренного метода Монте-Карло [30] (алгоритм 3S). Этот метод используется также для ускорения расчетов k_{\pm}^2 , т.к. на больших расстояниях дефектов от пор упругое взаимодействие между ними отсутствует (область вне куба со стороны L^{int} , табл. 3).

3. Результаты

3.1. Энергии образования пор и поверхностные энергии

На рис. 2 изображены размерные зависимости нормированной энергии образования пор разных типов $E^F(n)/n^{2/3}$ в Fe и V. Расчетные данные (точки на графиках) для пор с огранкой хорошо аппроксимируются полиномиальной зависимостью

$$E^F(n)/n^{2/3} = \gamma_{hkl} S(n)/n^{2/3} + \sum_{i=1}^m a_i n^{-i/3}, \quad (5)$$

Здесь $S(n)/n^{2/3}$ — геометрический множитель для заданной огранки (значения для разных типов пор приведены в табл. 1); γ_{hkl} — поверхностная энергия бесконечной

Таблица 4. Поверхностные энергии (в J/m^2) для плоскостей $\{hkl\}$ в Fe и V

Материал	γ_{100}	γ_{110}	γ_{111}	γ_{211}	γ_{sph}
Fe	2.037	1.869	2.319	2.188	2.144
V	2.120	1.821	2.290	2.087	2.090

плоской поверхности $\{hkl\}$; параметры γ_{hkl} и a_i — подгоночные; $m = 2$ для всех рассмотренных типов огранок пор в Fe и V за исключением огранок O_{110} ($m = 3$) и R_{110} ($m = 5$) в V. Энергии образования R_{110} - и O_{111} -пор при $n = 15$ и R_{110} - и D_{211} -пор при $n = 65$ одинаковы, т.к. это одни и те же поры с точки зрения атомистического рассмотрения. Эти поры можно отнести как к одному, так и к другому классу огранок из-за приближений, используемых при переходе от реальной дискретной атомистической поверхности поры к ее континуальной интерпретации.

Полученные значения γ_{hkl} для Fe и V сведены в табл. 4. Значения γ_{hkl} ($\{hkl\} = \{100\}$, $\{110\}$ и $\{111\}$) для Fe практически совпадают с аналогичными значениями, полученными в работе [21] прямым MC-расчетом энергии образования плоских свободных поверхностей с использованием того же потенциала межатомных взаимодействий, что и в настоящей работе. Это согласие верифицирует расчеты настоящей работы. Также в табл. 4 добавлено значение γ_{sph} , рассчитанное как отношение энергии образования самой крупной рассмотренной сферической поры к площади ее поверхности. Наименьшими значениями γ_{hkl} обладают плоскости $\{110\}$. Зависимости $E^F(n)/n^{2/3}$ для S-пор не являются гладкими, однако разброс значений при переходе по размеру от одной поры к другой уменьшается с ростом n и становится несущественным при $n \gtrsim 10^4$ ($d_{eff} \gtrsim 20a$).

Прямое экспериментальное определение поверхностной энергии металлов при температурах много ниже температуры плавления является сложной задачей. В работе [31] на основе представлений теории сильной связи предложено соотношение, связывающее когезионную энергию E_{coh} с γ для переходных металлов. Для поверхности $\{110\}$ ОЦК металлов это соотношение принимает вид

$$\gamma_{110} = 0.134c\sqrt{2}a^{-2}E_{coh}, \quad (6)$$

где c равно 1 и 1.2 для немагнитных и магнитных переходных металлов соответственно. Экспериментальные значения E_{coh} составляют 4.28 и 5.31 eV в Fe и V соответственно [32], откуда, используя (6), получим для γ_{110} значения 1.91 и 1.77 J/m^2 соответственно. Эти значения хорошо согласуются с полученными в настоящей работе (табл. 4).

Из (5) видно, что при $n \rightarrow \infty$ основной вклад в E^F дает слагаемое $\gamma_{hkl}S$. Отсюда, а также из данных табл. 1 и 4

следует, что для крупных пор одинакового объема наиболее энергетически выгодной является огранка типа R_{110} как в Fe, так и в V. Следующими по выгодности являются S-поры. Их энергия образования в пределе больших n на 4% выше, чем у R_{110} -пор. При малых n вплоть до $n = 15$ огранка R_{110} также наиболее энергетически выгодна. Единственное исключение составляет S-пора с $n = 59$ в Fe, чья энергия образования на 2% меньше, чем величина, рассчитываемая для R_{110} -поры по (5).

Под облучением (в ускорительных и реакторных установках) в металлах часто формируются поры с гранями, соответствующим низкоиндексным кристаллографическим плоскостям, в том числе для ОЦК металлов в виде додекаэдров с гранями $\{110\}$ и кубов с гранями $\{100\}$ [33]. Поры в виде додекаэдров с гранями $\{110\}$ наблюдались в облученных в быстрых реакторах ванадии (доза $3 \cdot 10^{22}$ н/см² при 650°C [34], доза $3.6 \cdot 10^{22}$ н/см² при 550 и 600°C [35]) и железе (доза $3 \cdot 10^{21}$ н/см² при 450°C [36]). В связи с этим, свойства R_{110} -пор в Fe и V представляют большой интерес при изучении вопросов радиационного распухания в условиях реакторного нейтронного облучения.

3.2. Стоковые силы и предпочтения R_{110} -пор

Стоковые силы пор для СМА и вакансий удобно представить в виде произведения двух величин: стоковой эффективности ξ^\pm и стоковой силы поры, не взаимодействующей с точечным дефектом: $k_\pm^2 = \xi^\pm k_{0,\pm}^2$. Стоковые эффективности использовать удобнее, чем стоковые силы, т.к. тестовые расчеты показали, что первые, в отличие от последних, слабо зависят от концентрации пор (размер расчетной ячейки L^{MC} варьировался от 200 до 600a). Величины $k_{0,\pm}^2$ не зависят от материала, температуры, а только от геометрии задачи и механизма диффузии точечного дефекта. Значения $k_{0,\pm}^2$, нормированные на величину $2\pi N_V d_{eff}$, для рассматриваемых в ОЦК кристаллах R_{110} -пор размером d_{eff} и концентрацией $N_V = (400a)^{-3}$ сведены в табл. 5.

Зависимости $\xi^\pm(T)$ для R_{110} -пор в Fe и V представлены на рис. 3. Приведены зависимости не для

Таблица 5. Стоковые силы R_{110} -пор $l_{0,\pm}^2$, нормированные на величину $2\pi N_V d_{eff}$

V, Ω	d_{eff}, a	$\frac{k_{0,+}^2}{2\pi N_V d_{eff}}$	$\frac{k_{0,-}^2}{2\pi N_V d_{eff}}$	V, Ω	d_{eff}, a	$\frac{k_{0,+}^2}{2\pi N_V d_{eff}}$	$\frac{k_{0,-}^2}{2\pi N_V d_{eff}}$
15	2.4	2.048	2.075	1695	12	1.297	1.300
65	4.0	1.675	1.687	2465	13	1.281	1.281
175	5.5	1.508	1.516	3439	15	1.265	1.270
369	7.1	1.416	1.420	7825	20	1.247	1.251
671	8.6	1.361	1.366	29679	30	1.253	1.253
1105	10	1.324	1.326	1024255	99	1.621	1.623

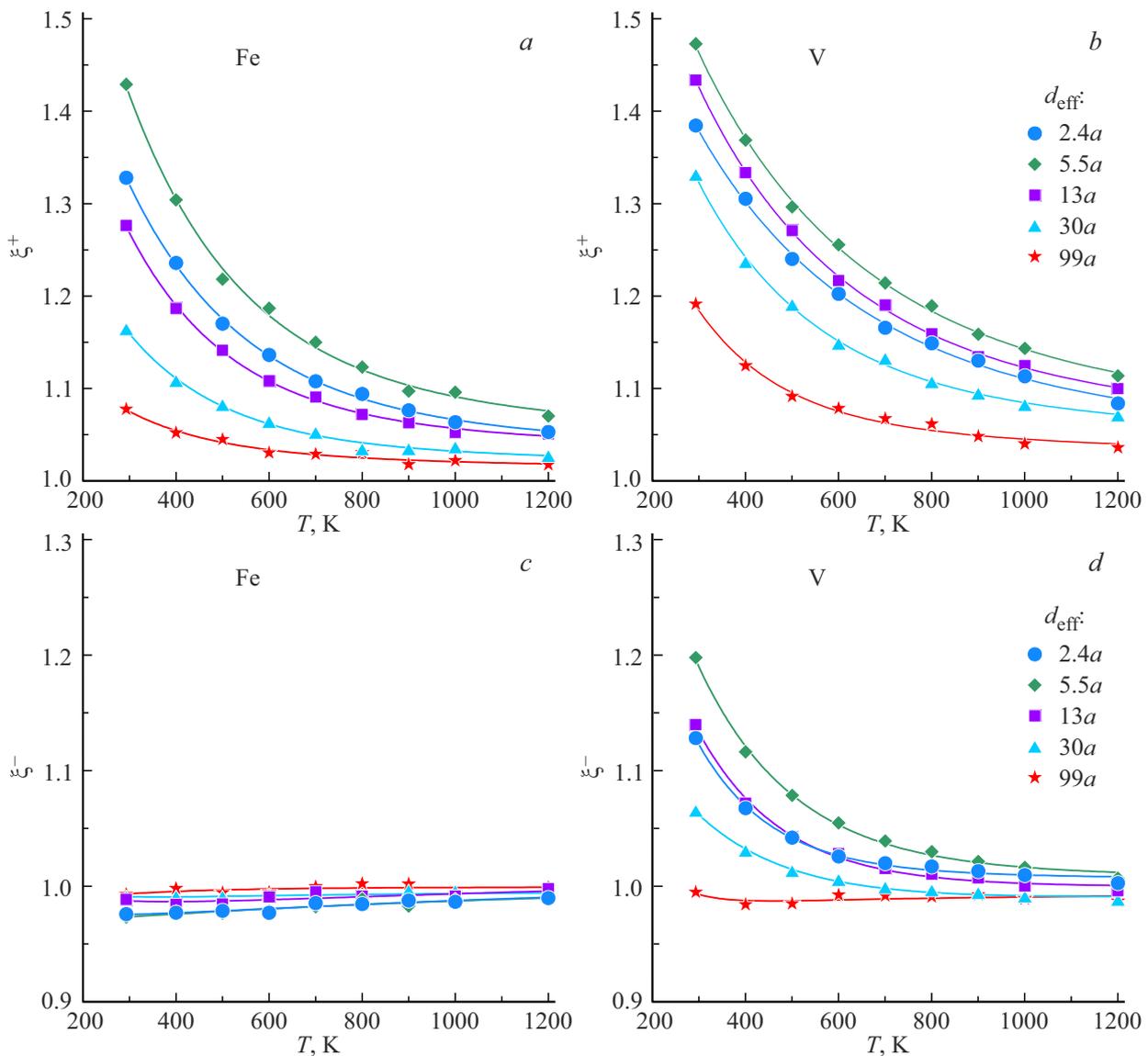


Рис. 3. Зависимости стоковых эффективностей R_{110} -пор с $d_{\text{eff}} = 2.4, 5.5, 13, 30, 99a$ для СМА (a, b) и вакансий (c, d) в Fe (a, c) и V (b, d). Сплошные линии — аппроксимация (7).

всех рассмотренных размеров пор, а лишь некоторые характерные, т.к. многие зависимости идут близко друг к другу и затрудняют восприятие. Эти зависимости имеют разный характер, обуславливаемый особенностями взаимодействия упругого поля, создаваемого порой, с подвижным дефектом (упругим диполем).

Для зависимостей $\xi^+(T)$ в Fe и V для всех рассмотренных размеров R_{110} -пор характерен монотонный спад с ростом температуры величины ξ^+ от значений больших единицы к асимптотическому значению $\xi^\pm = 1$ (рис. 3, a, b). Максимальное значение ξ^+ принимает для пор размером $5.5a$ при $T = 293$ К и составляет 1.43 и 1.47 в Fe и V соответственно.

Сходный вид имеют зависимости $\xi^-(T)$ в V для R_{110} -пор с $d_{\text{eff}} < 10a$ (рис. 3, d). Максимальное значение ξ^- принимает для пор размером $7.1a$ при $T = 293$ К и

составляет 1.21. Зависимости $\xi^-(T)$ в V для R_{110} -пор с $d_{\text{eff}} > 10a$ с ростом температуры становятся несколько ниже единицы (рис. 3, d).

Зависимости $\xi^-(T)$ в Fe для всех рассмотренных размеров пор меньше единицы при всех температурах, плавно стремясь к единице с ростом температуры. Минимальное значение ξ^- при $T = 293$ К составляет 0.97 (рис. 3, c).

Все зависимости на рис. 3 хорошо описываются выражением

$$\xi(T) = 1 + AT^{-1/2} + B \exp(-CT), \quad (7)$$

где A, B, C ($C > 0$) — подгоночные параметры.

Зависимости $\xi^\pm(d_{\text{eff}})$ для R_{110} -пор в Fe и V представлены на рис. 4. За исключением зависимостей $\xi^-(d_{\text{eff}})$ в Fe, все остальные зависимости сначала растут с d_{eff} ,

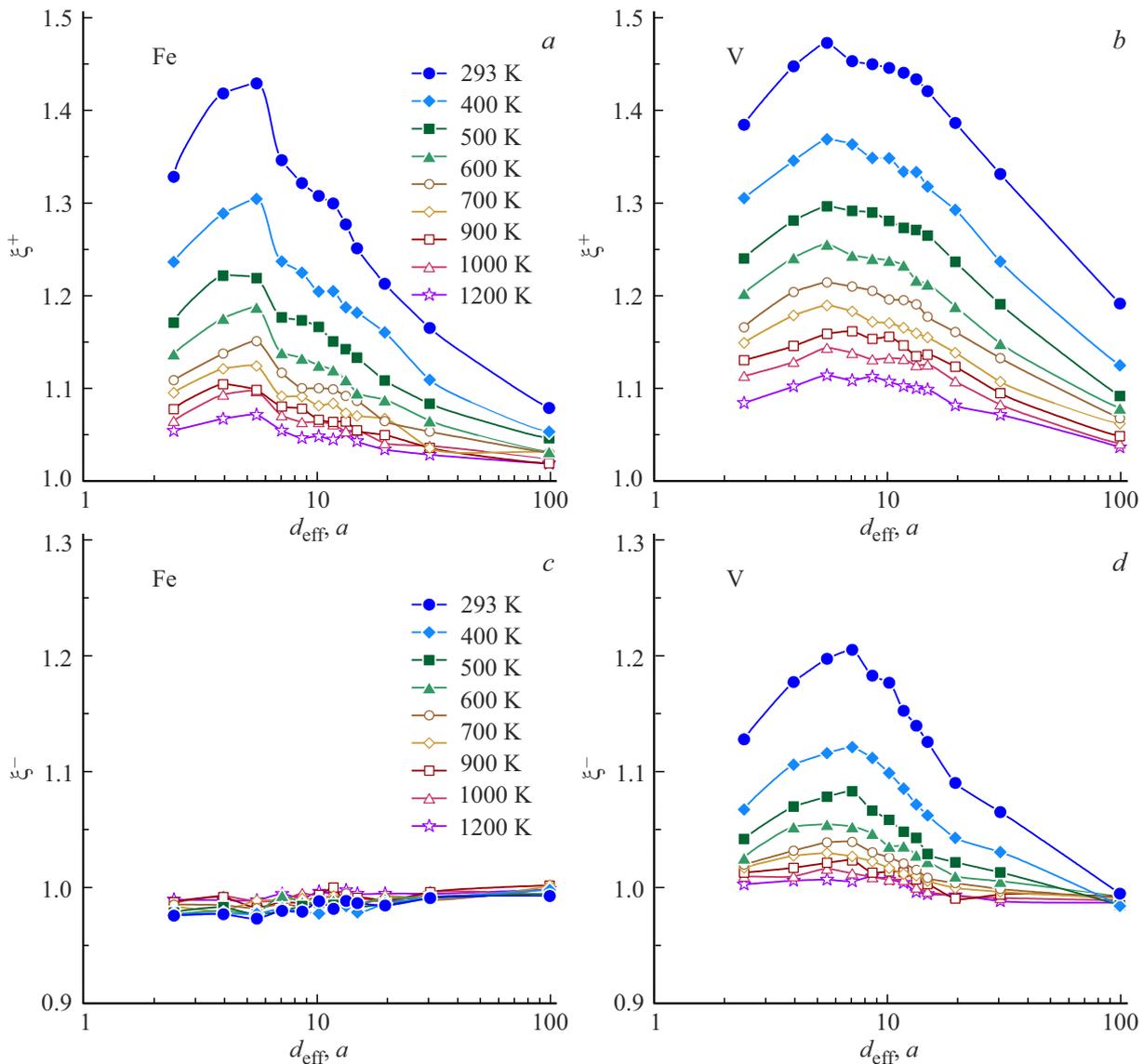


Рис. 4. Размерные зависимости стоковых эффективностей R_{110} -пор для СМА (a, b) и вакансий (c, d) в Fe (a, c) и V (b, d).

достигая максимума при $d_{\text{eff}} \sim 5.5-7.1a$, а затем снижаются, приближаясь к единице (рис. 4, a, b, d). Зависимости $\xi^-(d_{\text{eff}})$ в Fe слабо зависят от размера пор, стремясь асимптотически к единице в пределе больших размеров (рис. 4, c).

Стоковые эффективности пор полностью определяются пространственной зависимостью энергии взаимодействия СТД (упругих диполей) с упругим полем пор, описываемой формулой (2). Дипольные тензоры вакансий и СМА в седловых конфигурациях обладают тригональной и моноклинной симметриями соответственно. Для вакансии каждому направлению скачка соответствует одна седловая точка, для СМА — три. Если усреднить три дипольных тензора, соответствующих этим трем седловым точкам, получится тензор, обладающий тригональной симметрией. В диффузионных задачах использование такого усреднения оправдано [6,7]. В случае тригональной

симметрии тензора P_{ij} , в кристаллографической системе координат с осями вдоль направлений $\langle 100 \rangle$ справедливы соотношения $P_{11} = P_{22} = P_{33} = \text{Tr } P/3$ ($\text{Tr } P$ — след тензора P_{ij}) и $|P_{23}| = |P_{13}| = |P_{12}| = P_n$. Тогда формулу (2) можно преобразовать к виду

$$E(\mathbf{r}) = -\frac{1}{3} \text{Tr } P \text{Tr } \varepsilon(\mathbf{r}) - 2P_n \sum_{k=1}^3 \varepsilon_k \text{sgn } P_k, \quad (8)$$

где $\text{Tr } \varepsilon$ — след тензора ε_{ij} , sgn — сигнум-функция ($\text{sgn } x = x/|x|$ при $x \neq 0$, $\text{sgn } x = 0$ при $x = 0$), а индекс $k = 1, 2, 3$ соответствует паре индексов $ij = 23, 13, 12$. Первый и второй члены справа в (8) описывают части взаимодействия, определяемые объемными и сдвиговыми деформациями соответственно. Решение Эшелби [11,12] для сферического включения в изотропной среде, используемое в [7–10] для расчета стоковых сил

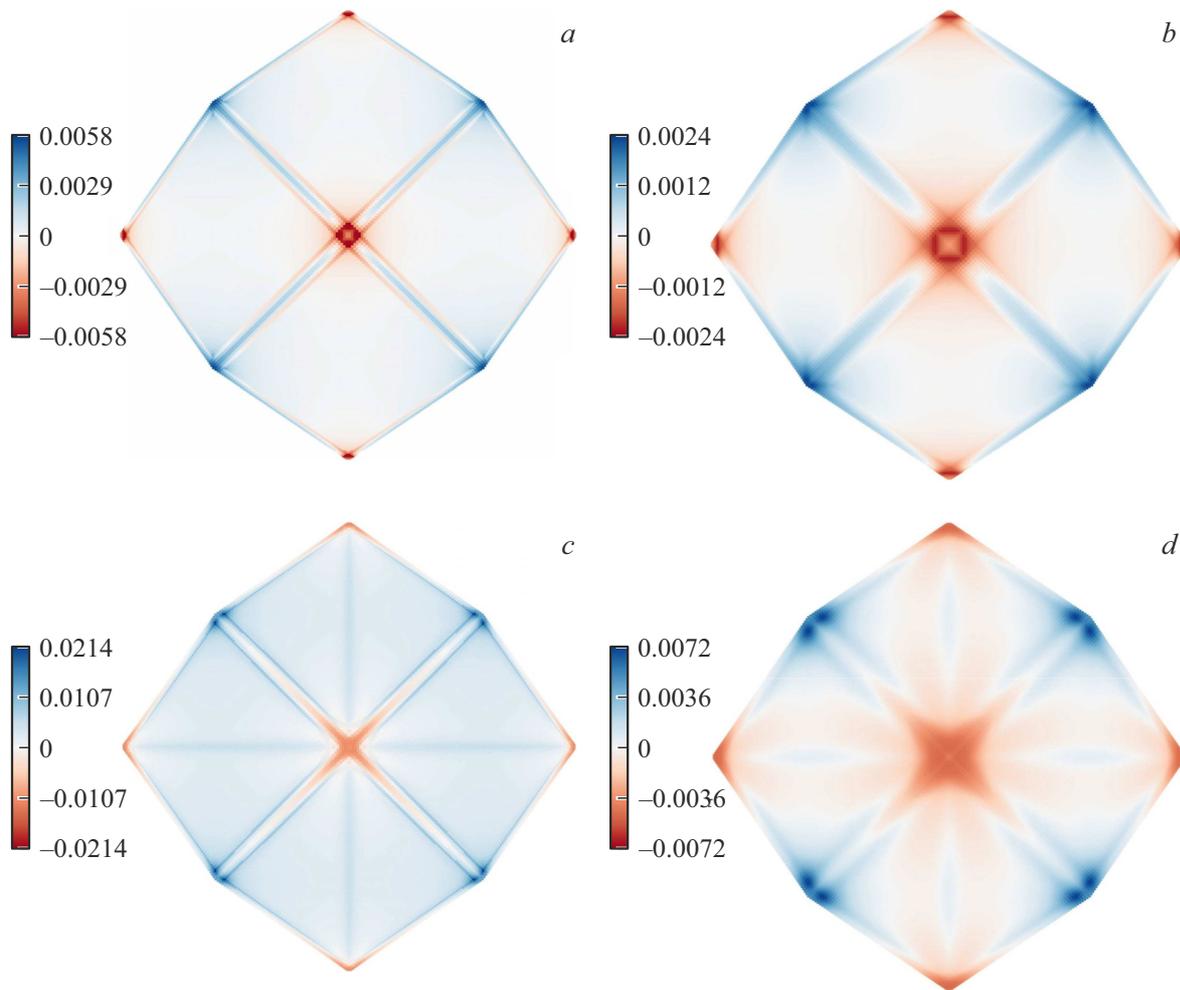


Рис. 5. Распределение объемных деформаций во 2-м (*a, c*) и 5-м (*b, d*) моноатомных приповерхностных слоях около R_{110} -пору с $d_{\text{eff}} = 99a$ в Fe (*a, b*) и V (*c, d*)

пор, дает $\text{Tr} \varepsilon = 0$. Как следствие, в таком приближении упругое взаимодействие определяется только вторым членом в (8). В настоящей работе упругие поля, создаваемые порами, рассчитаны МС-методом, т.е. без использования приближений сплошной изотропной среды. По результатам расчетов след тензора деформаций вблизи пор не равен нулю, достигая по модулю значений 0.6% и 2% в Fe и V соответственно вблизи поверхности пор (рис. 5). Это может приводить в некоторых случаях к преобладающей величине вклада в энергию взаимодействия первого члена в (8) и, как следствие, к доминирующей роли объемных деформаций, создаваемых порами, в формировании их стоковых сил и предпоченсов.

Для количественного определения влияния первого и второго слагаемых в (8) на эффективность пор в Fe и V были проведены дополнительные расчеты эффективностей пор для СТД при 293 К, в которых было задано, что $\text{Tr} P = 0$ для седловых конфигураций СТД, т.е. обнулен вклад первого слагаемого (8) в энергию взаимодействия. Сравнение этих значений с соответствующими значениями, полученными при учете обоих слагаемых (8),

позволило выяснить, что учет первого слагаемого (8) дает вклад в отклонение ξ от единицы, равный:

- 40–50% и 75–80% для СМА в Fe и V соответственно;
- 40–50% для вакансий в V;
- $\lesssim 10\%$ для вакансий в Fe (точнее определить трудно, т.к. отклонение ξ^- от единицы мало даже при учете всех членов E).

Эти результаты хорошо коррелируют со значениями отношения $\text{Tr} P / (3P_n)$ приведенного в табл. 6 (чем выше значение этого отношения, тем больше влияние первого слагаемого в (8) на эффективность пор), т.к. из (8) видно, что отношение первого слагаемого ко второму пропорционально $\text{Tr} P / (3P_n)$.

На рис. 6 и 7 представлены расчетные зависимости предпоченса пор от температуры и размера пор при $N_V = (400a)^{-3}$ (преференс пор практически не зависит от их концентрации). Статистические погрешности результатов примерно соответствуют размеру точек на графиках. Преференс пор при всех T и d_{eff} положителен и снижается с ростом температуры, стремясь к нулю

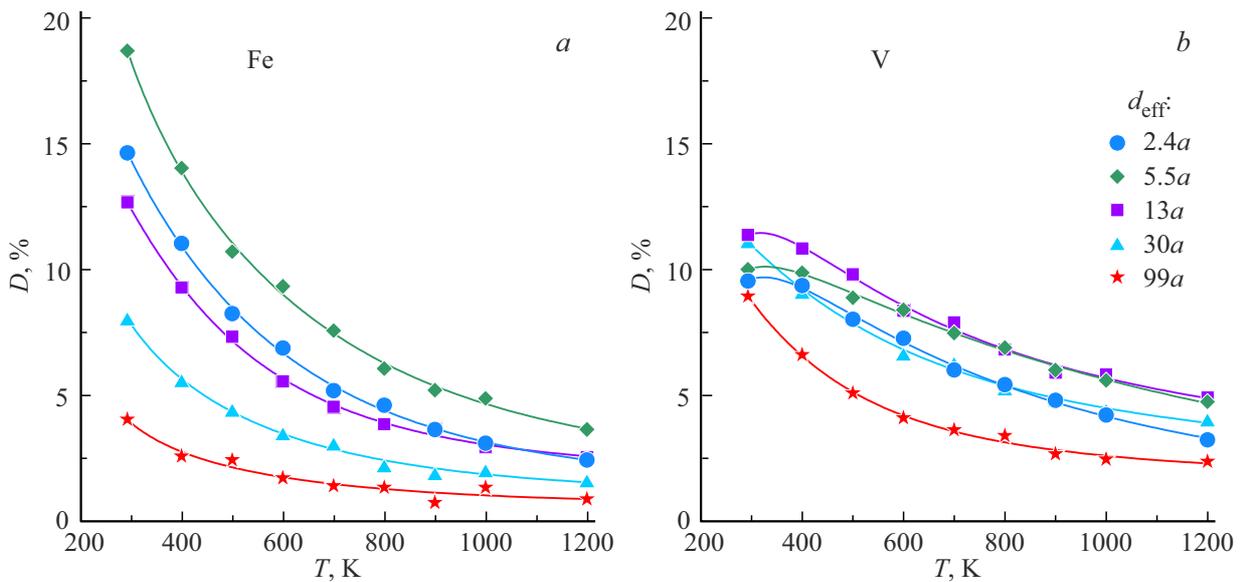


Рис. 6. Температурная зависимость предпочтения R_{110} -пор в Fe (a) и V (b). Сплошные линии — аппроксимации на основе выражений (4), (7).

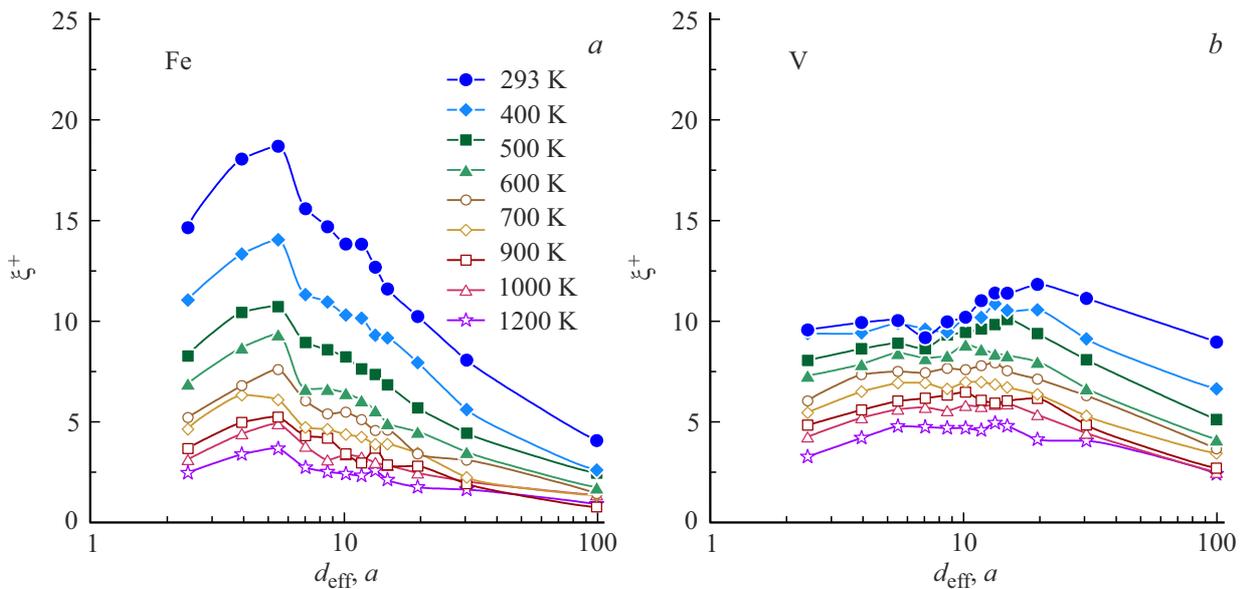


Рис. 7. Размерная зависимость предпочтения R_{110} -пор в Fe (a) и V (b).

(рис. 6). Зависимости $D(d_{\text{eff}})$ сначала растут с d_{eff} , достигая максимума при $d_{\text{eff}} = 5.5a$ в Fe и $d_{\text{eff}} = 10-20a$ в V (разброс значений обусловлен температурой), а затем снижаются, стремясь к нулю (рис. 7). Для самой малой рассмотренной поры ($d_{\text{eff}} = 2.4a$) величина D изменяется с T в пределах от 15 до 2% в Fe и от 10 до 3% в V.

4. Обсуждение

Необходимое условие для роста пор в традиционной теории радиационного распухания металлов [1–3] —

преференс пор должен быть меньше дислокационного ($D_d > D_V$). Обычно до облучения большинство дислокаций в материале — винтовые. D_d зависит от дислокационной плотности ρ_d (D_d растет с ρ_d [37]) в отличие от D_V , не зависящего от N_V (следствие слабой зависимости стоковой эффективности пор от N_V , упомянутой в начале п. 3.2). На рис. 8 представлены $D_d(T)$ для винтовых дислокаций при различных ρ_d (от 10^{11} до 10^{15} m^{-2}) в Fe и V, рассчитанные по соотношениям, предложенным в работе [37]. На этом же рисунке приведены $D_V(T)$ для пор наименьшего рассмотренного размера ($2.4a$) и пор размером $5.5a$ в Fe и $10-20a$

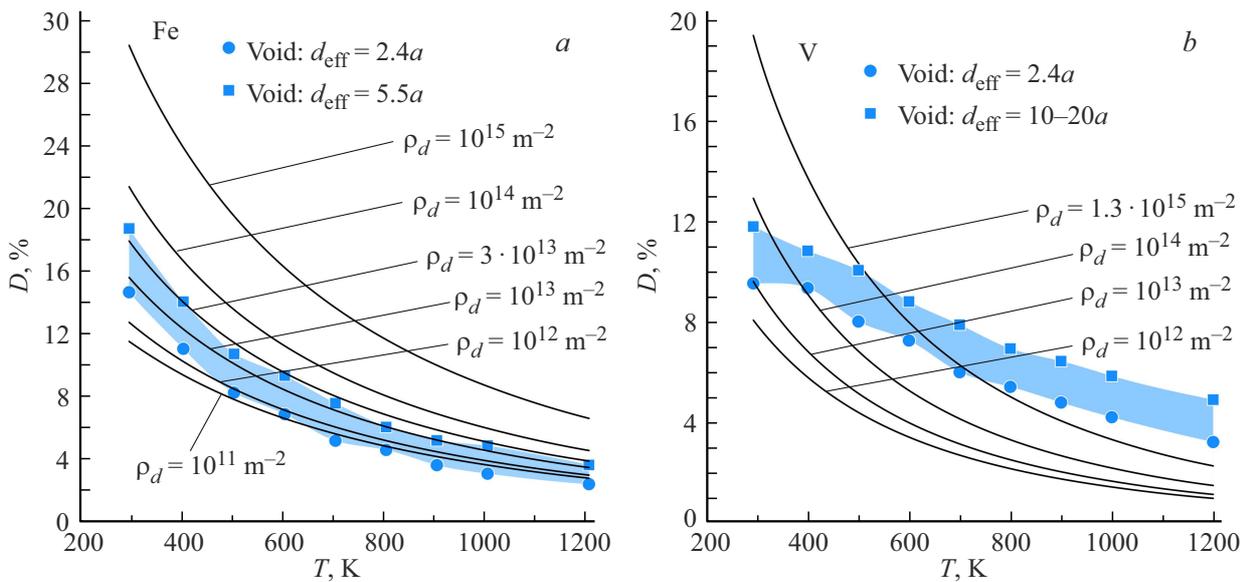


Рис. 8. Температурные зависимости предпочтенов винтовых дислокаций и пор наименьшего рассмотренного размера ($2.4a$) и максимального предпочтенов пор (размер пор $5.5a$ для Fe и $10-20a$ для V) в Fe (a) и V (b). Синим цветом закрашена область значений, которые принимает предпочтенов пор в процессе их роста от размера $2.4a$ до указанных выше размеров, соответствующим максимальным значениям предпочтенов.

в V, которые обладают максимальным предпочтеном (см. рис. 7).

Каскады атомных столкновений, возникающие в результате передачи энергии от нейтронов атомам кристаллической решетки, непосредственно формируют зародыши пор. По результатам МД-моделирования каскадов в Fe и V с повреждающей энергией до 50 кэВ в работе [38] показано, что в области прохождения каскадов после термализации (времена меньше $\sim 0.1 \text{ ns}$) остаются вакансионные кластеры, содержащие менее 18 вакансий. Такое количество вакансий в кластере примерно соответствует наименьшей рассмотренной в настоящей работе R_{110} -поре размером $2.4a$.

Как видно из рис. 8, достаточно высокая ρ_d на старте облучения может обеспечить выполнение условия $D_d > D_v$, необходимого для роста зародышей пор, образующихся в каскадах атомных столкновений. В этом случае, после того, как значение предпочтенов растущих пор достигнет максимального значения $D_{v,max}$ при d_{eff} равном $5.5a$ для Fe и $10-20a$ (в зависимости от T) для V соответственно (рис. 8), значение D_v будет постепенно уменьшаться до нуля. Поэтому обычно имеющее место в процессе облучения снижение ρ_d от исходного высокого значения не изменит выполнения условия $D_d > D_v$ для уже успешных вырасти пор, и распухание продолжится неограниченно. Инкубационный период для распухания в таком случае отсутствует.

Если ρ_d достаточно мала (отожженный материал), чтобы для зародышей пор выполнялось условие $D_d < D_v$, то образующиеся в каскадах атомных столкновений зародыши пор будут растворяться за счет преобладающего потока СМА на них. Таким образом, если в

Таблица 6. Значения $\text{Tr}P/3$, P_n и $\text{Tr}P/(3P_n)$ для СТД в Fe и V [19,27]

Металл	СТД	$\text{Tr}P/3, \text{ eV}$	$P_n, \text{ eV}$	$\text{Tr}P/(3P_n)$
Fe	Вакансия	-1.43	-1.68	0.85
	СМА	18.67	4.53	4.1
V	Вакансия	-6.11	-1.20	5.1
	СМА	17.11	1.29	13.3

процессе облучения не увеличится дислокационный предпочтенов (за счет изменения ρ_d и/или типа дислокаций), материал не будет распухать. В данном случае будет присутствовать инкубационный период для распухания, чья длительность обусловлена стабильностью исходной дислокационной микроструктуры.

Если ρ_d такова, что дислокационный предпочтенов больше предпочтенов зародышей пор, но меньше максимального предпочтенов пор $D_{v,max}$, то образующиеся в каскадах зародыши пор будут подрастать до тех пор, пока не выполнится условие $D_d = D_v$, после чего эти поры перестанут расти, т.к. поток на них вакансий и СМА будет равен друг другу. При этом материал может продолжать распухать за счет продолжения образования новых зародышей пор и их роста до предельно возможного размера. В таком случае после облучения в материале должна наблюдаться высокая концентрация пор относительно небольшого размера, инкубационный период отсутствует.

Отметим, что данные выводы сделаны на основе приближений, используемых в традиционной теории радиационного набухания металлов [1–3] (однородная эффективная среда, содержащая равномерно распределенные стоки [23]), и не учитывают возможных эффектов пространственных корреляций, которые могут приводить к тому, что локально может иметь место вариация значений преференсов, и, как следствие, локально эволюция микроструктуры может отличаться от общей тенденции. Тем не менее, если где-то локально в материале будут образовываться поры, в то время как в основном объеме их не будет, то общая концентрация пор будет малой, и как следствие, макроскопическое изменение объема материала будет малым.

Сравним экспериментальные данные об эволюции под нейтронным облучением в быстрых реакторах микроструктуры металлов Fe и V с разной исходной микроструктурой (облучаемые образцы до облучения подвергались либо отжигу, либо холодной деформации). Сравнить желательно при этом результаты облучения при схожих (в идеале — одинаковых) температурах и скоростях набора повреждающей дозы.

4.1. Железо

В работе [39] проведено облучение холоднодеформированного (ХД) и отожженного образцов в реакторе БР-10 до дозы 25.8 дпа при 400°C и скорости набора дозы $4 \cdot 10^{-7}$ дпа/с. Исходная ρ_d образцов составляла $1-2 \cdot 10^{15}$ и $< 10^{13} \text{ м}^{-2}$ соответственно. После облучения эти образцы набухли на 4.5% ($\langle d \rangle \sim 400a$) и 1.7% ($\langle d \rangle \sim 200a$) соответственно, вопреки распространенному представлению, что холодное деформирование материала приводит к подавлению набухания.

Аналогичное сравнение данных из работ [40,41], в которых облучались ХД образец (реактор БР-10, 400°C, 10^{-7} дпа/с, 6.2 дпа, $\rho_d = 2.2 \cdot 10^{14} \text{ м}^{-2}$) и отожженный образец (реактор БОР-60, 345°C, $1.8 \cdot 10^{-7}$ дпа/с, 58 дпа, исходная ρ_d не приведена), показывает, что набухание также быстрее происходит в ХД материале: 3% за 6.2 дпа ($\langle d \rangle \sim 150a$) в ХД образце и 3.2% за 58 дпа в отожженном образце.

Перечисленные экспериментальные свидетельства для железа укладываются в картину, рисуемую на основе модельных данных (рис. 8, а). В ХД образцах с высокой исходной ρ_d реализуется описанный выше случай, когда $D_d > D_V$: набухание начинается без инкубационного периода. В отожженных образцах, судя по всему, в начале облучения реализуется случай $D_d < D_V$, что приводит к длительному инкубационному периоду, в течение которого материал не набухает. В процессе облучения отожженного образца по данным [39] ρ_d вырастает от $< 10^{13}$ до $3 \cdot 10^{13} \text{ м}^{-2}$, что приводит к выполнению $D_d > D_{V,\max}$ и, как следствие, к последующему набуханию.

4.2. Ванадий

Для ванадия в работах [42,43] показано, что отожженные образцы (исходная $\rho_d < 10^{12} \text{ м}^{-2}$), облученные в реакторах JOYO и FFTF до доз 13.7 и 34.2 дпа либо не набухают вовсе, либо до малых значений в интервале температур 400–600°C. При облучении до дозы 13.7 дпа в реакторе JOYO при 400 и 500°C поры отсутствуют совсем, при 600°C наблюдается их ограниченное число (набухание $\sim 1.4\%$). При облучении в реакторе FFTF наблюдается набухание до $\sim 1\%$: при 410°C и дозе 31.5 дпа $\langle d \rangle \sim 14a$; при 520°C и дозе 31.9 дпа $\langle d \rangle \sim 70a$; при 600°C и 34.2 дпа $\langle d \rangle \sim 160a$ ($\langle d \rangle$ — средний размер пор).

В работе [44] показано, что ванадий, облученный в реакторе БР-10 при 370°C и скорости набора дозы $2.5 \cdot 10^{-7}$ дпа/с до 1.3 дпа, набухает до 0.63% ($\langle d \rangle \sim 15a$). Исходная ρ_d в [44] не измерялась, поэтому, т.к. доза не слишком высокая, будем ориентироваться на значение ρ_d после облучения: $\sim 1.3 \cdot 10^{15} \text{ м}^{-2}$.

Перечисленные экспериментальные данные для ванадия также укладываются в модельные представления (рис. 8, б). В отожженных образцах в начале облучения реализуется случай $D_d < D_V$ за счет низких значений ρ_d , что приводит к длительному инкубационному периоду, в течение которого материал не набухает. В работе [44], по-видимому, реализуется случай, когда D_d больше преференса малых пор за счет высокого значения ρ_d , но меньше максимального преференса пор $D_{V,\max}$, что приводит к началу набухания без инкубационного периода и к высокой концентрации пор относительно небольшого размера.

5. Заключение

Для ОЦК металлов Fe и V определена наиболее энергетически выгодная огранка пор. Рассчитаны их стоковые силы для собственных точечных дефектов (вакансий, межузельных атомов) и преференсы (относительные разности стоковых сил для межузельных атомов и вакансий).

1. Энергии образования пор размером 2–100a с разной огранкой (кубы с гранями {100}, октаэдры с гранями {110}, ромбододекаэдры с гранями {110}, правильные октаэдры с гранями {111}, дельтоидальные икоситетраэдры с гранями {211}, сферы) рассчитаны методом молекулярной статистики для ОЦК-металлов Fe и V. Поверхностные энергии свободных поверхностей {100}, {110}, {111}, {211} определены как асимптоты размерных зависимостей энергии образования пор в пределе их больших размеров. Наименьшей поверхностной энергией обладает поверхность {110}. При размере пор больше 2.4a наиболее энергетически выгодным типом огранки пор является ромбододекаэдр с гранями {110} — R₁₁₀.

2. Для R₁₁₀-пор в Fe и V рассчитаны их стоковые силы для STD и преференс (диапазоны размеров пор

2.4–99а, температур 293–1200 К) с использованием многоуровневого подхода. В рамках него анизотропная диффузия СТД в упругих полях пор, определенных МС-методом, моделируется ОКМК-методом.

2.1. Объемные и сдвиговые упругие деформации, создаваемые порами, сравнимы между собой по величине, в отличие от часто используемого при определении преференса пор решения Эшелби для сферического включения в изотропной среде, в котором объемные деформации отсутствуют. Объемные деформации вносят заметный, а иногда и основной вклад в формирование стоковых сил и преференсов пор в Fe и V.

2.2. Преференс пор снижается с ростом температуры. Размерная зависимость преференса пор немонотонна. В области малых размеров пор (от 2.4а) преференс растет с увеличением размера пор, достигая максимальных значений при размере 5.5а в Fe и 10–20а в V (для V указан диапазон значений, т.к. этот размер меняется от температуры к температуре). Затем его значения снижаются, стремясь к нулю. Преференс пор может принимать значения, сравнимые по величине с преференсом винтовых дислокаций, для пор с размерами меньшими нескольких десятков а.

3. В рамках традиционной теории радиационных повреждений с параметрами, определенными в настоящей работе, рассмотрены особенности роста пор под нейтронным повреждающим облучением в Fe и V с разными исходными дислокационными микроструктурами. Расчетно-теоретические результаты работы объясняют экспериментально наблюдаемые особенности радиационного набухания чистых железа и ванадия, облученных нейтронами в быстрых реакторах.

Финансирование работы

Работа проведена в рамках выполнения государственного задания НИЦ „Курчатовский институт“ с использованием оборудования центра коллективного пользования „Комплекс моделирования и обработки данных исследовательских установок мега-класса“ НИЦ „Курчатовский институт“, <http://ckp.nrcki.ru/>.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] H. Wiedersich. *Radiat. Eff.* **12**, 1–2, 111 (1972). <https://doi.org/10.1080/00337577208231128>
- [2] S.I. Golubov, A.V. Barashev, R.E. Stoller. In: *Comprehensive Nuclear Materials* / Eds R.J.M. Konings, R.E. Stoller. 2 Ed. Elsevier, Amsterdam (2020). V. 1. P. 717. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-803581-8.00663-9>
- [3] В.В. Слезов, А.В. Субботин, О.А. Осмаев. *ФТТ* **47**, 3, 463 (2005). <https://journals.ioffe.ru/articles/3758>
- [4] V.I. Dubinko, P.N. Ostapchuk, V.V. Slezov. *J. Nucl. Mater.* **161**, 2, 239 (1989). [https://doi.org/10.1016/0022-3115\(89\)90488-1](https://doi.org/10.1016/0022-3115(89)90488-1)
- [5] П.Н. Остапчук. *ФТТ* **54**, 1, 92 (2012). <https://journals.ioffe.ru/articles/486>
- [6] P.H. Dederichs, K. Schroeder. *Phys. Rev. B* **17**, 6, 2524 (1978). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.17.2524>
- [7] V.A. Borodin, A.I. Ryazanov, C. Abromeit. *J. Nucl. Mater.* **207**, 242 (1993). [https://doi.org/10.1016/0022-3115\(93\)90266-2](https://doi.org/10.1016/0022-3115(93)90266-2)
- [8] D. Carpentier, T. Jourdan, Y. Le Bouar, M.-C. Marinica. *Acta Mater.* **136**, 323 (2017). <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2017.07.013>
- [9] S. Kaur, M. Athenes, J. Creuze. *J. Comp. Phys.* **454**, 110987 (2022). <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2022.110987>
- [10] G.F.B. Moladje, L. Thuinet, C. Domain, C.S. Becquart, A. Legris. *Comput. Mater. Sci.* **183**, 109905 (2020). <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2020.109905>
- [11] J.D. Eshelby. *Proc. R. Soc. A* **241**, 1226, 376 (1957). <https://doi.org/10.1098/rspa.1957.0133>
- [12] J.D. Eshelby. *Proc. R. Soc. A* **252**, 1271, 561 (1959). <https://doi.org/10.1098/rspa.1959.0173>
- [13] A.V. Nazarov, A.A. Mikheev, A.P. Melnikov. *J. Nucl. Mater.* **532**, 152067 (2020). <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2020.152067>
- [14] А.Б. Сивак, П.А. Сивак. *ВАНТ, Сер. Термоядерный синтез* **44**, 1, 119 (2021). <https://doi.org/10.21517/0202-3822-2021-44-1-119-135>
- [15] С.И. Голубов, Е.Н. Каппецкая. *ФММ* **54**, 6, 1061 (1982).
- [16] A.A. Kohnert, M.A. Cusentino, B.D. Wirth. *J. Nucl. Mater.* **499**, 480 (2018). <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2017.12.005>
- [17] Y. Wang, F. Gao, B.D. Wirth. *J. Nucl. Mater.* **568**, 153882 (2022). <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2022.153882>
- [18] V.M. Chernov, M.V. Leonteva-Smirnova, M.M. Potapenko, N.I. Budylnkin, Yu.N. Devyatko, A.G. Ioltoukhovskiy, E.G. Mironova, A.K. Shikov, A.B. Sivak, G.N. Yermolaev. *Nucl. Fusion* **47**, 8, 839 (2007). <https://doi.org/10.1088/0029-5515/47/8/015>
- [19] A.B. Sivak, V.M. Chernov, V.A. Romanov, P.A. Sivak. *J. Nucl. Mater.* **417**, 1–3, 1067 (2011). <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2010.12.176>
- [20] E. Gaudry. In: *Comprehensive Inorganic Chemistry III* / Eds J. Reedijk, K.R. Poeppelmeier. 3 Ed. Elsevier, Amsterdam (2023). V. 3. P. 74. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-823144-9.00134-5>
- [21] L. Malerba, M.C. Marinica, N. Anento, C. Björkas, H. Nguyen, C. Domain, F. Djurabekova, P. Olsson, K. Nordlund, A. Serra, D. Terentyev, F. Willaime, C.S. Becquart. *J. Nucl. Mater.* **406**, 1, 19 (2010). <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2010.05.017>
- [22] M.I. Mendelev, S. Han, W. Son, G.J. Ackland, D.J. Srolovitz. *Phys. Rev. B* **76**, 214105 (2007). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.76.214105>
- [23] A.D. Bailsford, R. Bulloch. *Phil. Trans. R. Soc. A.* **302**, 1465, 87 (1981). <https://doi.org/10.1098/rsta.1981.0158>
- [24] R.A. Johnson. *Phys. Rev.* **134**, 5A, A1329 (1964). <https://doi.org/10.1103/PhysRev.134.A1329>
- [25] E. Kröner. *Arch. Rational Mech. An.* **4**, 273 (1959/60). <https://doi.org/10.1007/BF00281393>
- [26] M.P. Puls, C.H. Woo. *J. Nucl. Mater.* **139**, 1, 48 (1986). [https://doi.org/10.1016/0022-3115\(86\)90163-7](https://doi.org/10.1016/0022-3115(86)90163-7)
- [27] A.B. Sivak, V.M. Chernov, N.A. Dubasova, V.A. Romanov. *J. Nucl. Mater.* **367–370**, 316 (2007). <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2007.03.134>

- [28] А.Б. Сивак, В.А. Романов, Д.Н. Демидов, П.А. Сивак, В.М. Чернов. ВАНТ, Сер. Материаловедение и новые материалы **100**, 4, 5 (2019).
<https://elibrary.ru/item.asp?id=44630370>
- [29] L. Malerba, C.S. Becquart, C. Domain. J. Nucl. Mater. **360**, 2, 159 (2007). <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2006.10.002>
- [30] A.B. Sivak, P.A. Sivak, V.M. Chernov. J. Nucl. Mater. **531**, 152006 (2020). <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2020.152006>
- [31] M. Methfessel, D. Hennig, M. Scheffler. Phys. Rev. B **46**, 8, 4816 (1992). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.46.4816>
- [32] C. Kittel. Introduction to solid state physics. 8 Ed. Wiley, New York (2005). 680 p.
- [33] S.J. Zinkle. In: Comprehensive nuclear materials / Ed R.J.M. Konings. Elsevier, Amsterdam (2012). V. 1. P. 65. <https://doi.org/10.1016/B978-0-08-056033-5.00003-3>
- [34] B.L. Eyre. Proc. Int. Discussion Meeting on „Defects in refractory metals“. Mol, Belgium (1972). P. 311.
- [35] A.F. Bartlett, J.H. Evans, B.L. Eyre, E.H. Terry, T.M. Williams. Proc. Int. Conf. on „Radiation effects and tritium technology for fusion reactors“. Gatlinburg, Tennessee, USA (1975). P. 122.
- [36] G.L. Kulcinski, B. Mastel, J.L. Brimhall. Radiat. Eff. **2**, 1, 57 (1969). <https://doi.org/10.1080/00337576908235581>
- [37] А.Б. Сивак, П.А. Сивак, В.А. Романов, В.М. Чернов. Перспектив. материалы **10**, 5 (2014).
<https://elibrary.ru/item.asp?id=22027294>
- [38] А.Б. Сивак, Д.Н. Демидов, К.П. Зольников, А.В. Корчуганов, П.А. Сивак, В.А. Романов, В.М. Чернов. ВАНТ, Сер. Материаловедение и новые материалы **100**, 4, 25 (2019).
<https://elibrary.ru/item.asp?id=44630371>
- [39] A.M. Dvoriashin, S.I. Porollo, Yu.V. Konobeev, F.A. Garner. J. Nucl. Mater. **283–287**, 157 (2000).
[https://doi.org/10.1016/S0022-3115\(00\)00337-8](https://doi.org/10.1016/S0022-3115(00)00337-8)
- [40] S.I. Porollo, A.M. Dvoriashin, A.N. Vorobyev, Yu.V. Konobeev. J. Nucl. Mater. **256**, 247 (1998).
[https://doi.org/10.1016/S0022-3115\(98\)00043-9](https://doi.org/10.1016/S0022-3115(98)00043-9)
- [41] N.I. Budylnkin, E.G. Mironova, V.M. Chernov, V.A. Krasnoselov, S.I. Porollo, F.A. Garner. J. Nucl. Mater. **375**, 359 (2008). <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2008.01.015>
- [42] H. Matsui, H. Nakajima, S. Yoshida. J. Nucl. Mater. **205**, 452 (1993). [https://doi.org/10.1016/0022-3115\(93\)90109-C](https://doi.org/10.1016/0022-3115(93)90109-C)
- [43] H. Nakajima, S. Yoshida, Y. Kohno, H. Matsui. J. Nucl. Mater., **191–194**, 952 (1992).
[https://doi.org/10.1016/0022-3115\(92\)90614-Q](https://doi.org/10.1016/0022-3115(92)90614-Q)
- [44] С.И. Поролло, А.М. Дворяшин, Ю.В. Конобеев. ФММ, **123**, 8, 837 (2022).
<https://www.elibrary.ru/item.asp?id=49319285>

Редактор А.Н. Смирнов