

ХАРАКТЕРИСТИКИ ДЕФЕКТОВ И ЭНТРОПИЯ СМЕШЕНИЯ В ВЫСОКОЭНТРОПИЙНЫХ СПЛАВАХ СИСТЕМЫ FeNiCrCoCu

Р. А. Кончаков^{а*}, А. С. Макаров^а, Н. П. Кобелев^б, В. А. Хоник^а

^а Воронежский государственный педагогический университет
394043, Воронеж, Россия

^б Институт физики твердого тела им. Ю. А. Осипьяна Российской академии наук
142432, Черноголовка, Московская обл., Россия

Поступила в редакцию 17 июля 2023 г.,
после переработки 3 октября 2023 г.
Принята к публикации 6 ноября 2023 г.

Моделирование методами классической молекулярной динамики и статики для ряда монокристаллов системы FeNiCrCoCu показало, что с ростом энтропии смешения монотонно убывают средняя энтальпия формирования межузельных дефектов и их сдвиговая восприимчивость. Для межузельных дефектов в кристаллах и подсистем дефектов стекол того же состава установлено, что средние девиаторные компоненты дипольных тензоров убывают с ростом энтропии смешения, при этом убывание происходит сильнее в высокоэнтропийной области. Все это может свидетельствовать о наличии корреляции между энтропией смешения и свойствами подсистемы дефектов кристаллического и стеклообразного состояний.

DOI: 10.31857/S0044451024030064

1. ВВЕДЕНИЕ

Важнейшим термодинамическим потенциалом, характеризующим стеклообразное состояние, является энтропия. В первую очередь это связано с поиском сплавов с высокой стеклообразующей способностью [1–5]. Интерес к энтропии стекол значительно усилился в последние два десятилетия в связи с интенсивными исследованиями высокоэнтропийных сплавов (ВЭС) [6–10]. Широко распространенное определение понятия «высокоэнтропийный сплав» основано на вычислении энтропии смешения

$$S_{mix} = -R \sum c_i \ln(c_i),$$

где c_i — атомные концентрации компонентов сплава, R — газовая постоянная [7, 10]. Высокоэнтропийными считаются сплавы, для которых $S_{mix} > 1.5$.

Кристаллические ВЭС обычно имеют гранецентрированную кубическую, гексагональную или объемноцентрированную кубическую решетку [11–14]. ВЭС имеют специфические механические, транс-

портные, электрические и магнитные свойства [11, 15–17], их тепловые свойства чрезвычайно чувствительны к малым изменениям энтропии смешения [18]. Например, изменение S_{mix} на величину $0.02R$ приводит к существенному (в 1.5–2 раза) изменению ширины области переохлажденной жидкости и интервала плавления [18]. Магнитные и магнитокалорические свойства высокоэнтропийных стекол системы GdScCoNiAl также очень чувствительны к изменению энтропии смешения. В частности, малое изменение S_{mix} приводит к значительному изменению намагниченности, температуры Кюри, магнитной энтропии [18]. Таким образом, важной задачей является выяснение роли энтропии в формировании свойств ВЭС в кристаллическом и стеклообразном состояниях.

Основным структурным свойством стеклообразного состояния является наличие локальной икозаэдрической симметрии [19–23]. При этом в стекле имеются наноразмерные области, отличающиеся, в сравнении с окружающей аморфной матрицей, избыточной энергией, пониженным сопротивлением сдвиговым перестройкам и низкочастотными особенностями спектра колебательной плотности состояний. Такие области называют дефектами стеклообразного состояния. Современные представления о структуре и происхождении дефектов

* E-mail: konchakov.roman@gmail.com

в стеклах чрезвычайно разнообразны и широко обсуждаются. Например, дефектами в стекле называют свободный объем [24], зоны сдвиговой трансформации [25], дефекты течения [26], жидкоподобные области [27], динамические неоднородности [28], области неаффинных смещений [29], струноподобные солитоны [30], квазиточечные дефекты [31], упругие диполи [32].

Модель упругих диполей представляется нам привлекательной, так как позволяет сопоставить характеристики дефектов в стекле и соответствующем материнском кристалле, где таковыми являются межузельные дефекты в гантельной конфигурации [33], а также построить гипотезу о происхождении дефектов в стекле. Например, в работе [34] был предложен механизм формирования аморфной матрицы и дефектов в аморфном алюминии на основе кластеризации межузельных гантелей, возникающих в процессе плавления кристалла. Как показал модельный расчет энтропии формирования межузельных дефектов в алюминии, более половины избыточной энтропии стеклообразного состояния (разность энтропии стекла и соответствующего материнского кристалла) может формироваться уже на этапе плавления за счет генерации межузельных гантелей [35].

Исходя из изложенного, можно предположить, что более подробное изучение подсистемы дефектов окажется полезным для понимания особенностей стекол, в том числе высокоэнтропийных. Задача настоящей работы заключалась в расчете ряда характеристик дефектов в кристаллическом и стеклообразном состояниях и установлении корреляции этих характеристик с энтропией смешения S_{mix} . Какие-либо аналогичные исследования нам не известны.

2. МЕТОДИКА МОДЕЛИРОВАНИЯ

Для исследования были выбраны сплавы системы FeNiCrCoCu, так как в области высокоэнтропийных состояний (т.е. при $S_{mix} > 1.5$) кристаллы этой системы имеют устойчивую однофазную структуру в виде деформированной ГЦК-решетки, что облегчает вычисление модулей упругости. Расчеты методами классической молекулярной динамики и статики выполнялись в пакете LAMMPS [36] с межатомным потенциалом из работы [37]. Этот потенциал уже был нами ранее использован для расчета характеристик дефектов в кристалле Fe₂₀Ni₂₀Cr₂₀Co₂₀Cu₂₀ [38] и идентификации дефектов в стекле того же состава [33].

Состав модельной системы варьировался следующим образом. Содержание железа увеличивалось с шагом в 4 ат.%, начиная с наиболее высокоэнтропийного состояния с равным содержанием компонентов, а содержание всех остальных компонентов уменьшалось соответственно на 1 ат.%.

Исходные кристаллические состояния получались путем генерации ГЦК-решеток размером 4000 атомов (т.е. $10 \times 10 \times 10$ трансляций) со случайным расположением атомов разных элементов в соответствующих пропорциях. Стеклообразные состояния создавались путем закалки расплава от $T = 3000$ К до нулевой температуры со скоростью охлаждения $5 \cdot 10^{13}$ К/с.

Энтальпия формирования H_f межузельных дефектов рассчитывалась по формуле

$$H_f = H_{rel} - H_{ini} \frac{N \pm 1}{N},$$

где H_{ini} — энтальпия идеальной решетки, H_{rel} — энтальпия системы после внедрения дефекта и релаксации структуры. Межузельные дефекты в гантельной конфигурации вносились в систему при $T = 0$ К с последующей релаксацией структуры методом сопряженных градиентов.

Модули сдвига вычислялись при нулевой температуре как отношение изменения механических напряжений к соответствующим малым деформациям модельной системы. Сдвиговая восприимчивость межузельных гантелей β рассчитывалась по формуле Гранато [39]

$$G/G_{perf} = \exp(-\beta c),$$

где G_{perf} и G — модули сдвига бездефектного кристалла и кристалла, содержащего межузельные дефекты гантельной конфигурации в концентрации c соответственно.

Спектры колебательной плотности состояний (vibrational density of states, VDOS) вычислялись как квадрат модуля преобразования Фурье автокорреляционной функции скорости. При этом для каждой конфигурации модельной системы проводилось усреднение 100 колебательных спектров VDOS.

Дипольный тензор P_{ij} упругих диполей (межузельных дефектов) определяется как производная тензора механических напряжений σ_{ij} по числу n дефектов в единице объема при постоянной величине деформации ε [40]:

$$P_{ij} = \left. \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial n} \right|_{\varepsilon}. \quad (1)$$

В компьютерной модели дипольные тензоры дефектов можно вычислять по приближенной формуле [32,33]

$$P_{ij} \approx V_0 \left(\sigma_{ij}^{N+n_i} - \sigma_{ij}^N \right) / n^{int}, \quad (2)$$

где N — число атомов в идеальной кристаллической решетке, n^{int} — число межузельных дефектов, V_0 — объем модельной системы.

В случае стекла, для которого не существует общепринятого корректного определения бездефектного состояния, каждому атому модельной системы ставился в соответствие дипольный тензор

$$P_{ij} = V_0 \left(\sigma_{ij}^N - \sigma_{ij}^{N-1} \right), \quad (3)$$

где σ_{ij}^N и σ_{ij}^{N-1} — тензоры напряжений до и после удаления этого атома [33]. Перед удалением осуществлялась оптимизация структуры с изменением объема модельной системы. После удаления проводилась оптимизация структуры без изменения объема, сохраняя $\varepsilon = \text{const}$, как этого требует формула (1).

Расчитанные тензоры P_{ij} приводились к диагональному виду и представлялись как сумма шаровой и девиаторной компонент:

$$P_{ij} = \frac{1}{3} \delta_{ij} P_{ll} + \left(P_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} P_{ll} \right). \quad (4)$$

Концентрации дефектов в стеклах оценивались двумя способами. Концентрация c_g вычислялась на основе межузельной теории [39] по формуле

$$c_g = -\frac{1}{\beta} \ln \frac{G_{glass}}{G_{cryst}},$$

где G_{glass} и G_{cryst} — модули сдвига стекла и соответствующего материнского кристалла. Концентрация c_d вычислялась на основе анализа распределения максимальных девиаторных компонент дипольных тензоров всех атомов стекла (более подробно описано в следующем разделе).

3. РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ И ОБСУЖДЕНИЕ

На рис. 1 показана зависимость модулей сдвига G кристаллов и стекол от концентрации железа в сплаве. На этом же рисунке показано изменение энтропии смешения S_{mix} при варьировании химического состава. Видно, что с изменением химического состава модуль сдвига кристаллов монотонно меняется, при этом большие значения модуля сдвига

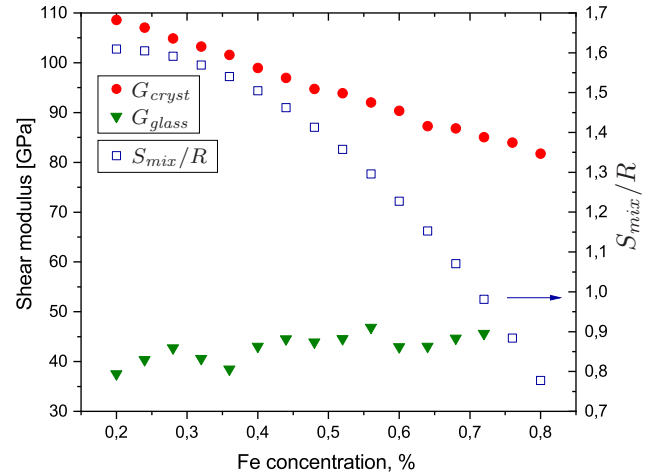


Рис. 1. Модули сдвига монокристаллов и стекол системы FeNiCrCoCu (левая шкала) и энтропия смешения (правая шкала) в зависимости от концентрации железа в сплаве

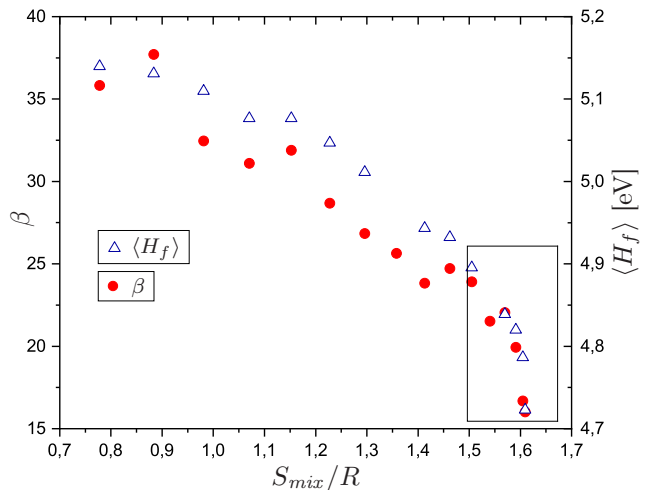


Рис. 2. Сдвиговая восприимчивость межузельных дефектов в монокристаллах системы FeNiCrCoCu (левая шкала) и средняя энтальпия формирования межузельных дефектов (правая шкала) в зависимости от энтропии смешения

наблюдаются в области более высоких значений энтропии смешения. Модуль сдвига стекла меняется не так сильно, но в среднем монотонно растет с ростом концентрации железа.

В рамках рассматриваемой схемы варьирования составов каждому сплаву однозначно соответствует определенное значение энтропии смешения S_{mix} . Поэтому можно рассматривать зависимость различных характеристик дефектов от энтропии смешения как от независимого параметра.

На рис. 2 показана зависимость средней энтальпии формирования межузельных дефектов $\langle H_f \rangle$ от энтропии смешения. Видно, что во всех случаях величина $\langle H_f \rangle$ достаточно высокая в сравнении с таковой для отдельных компонентов [41], т. е. сплавы

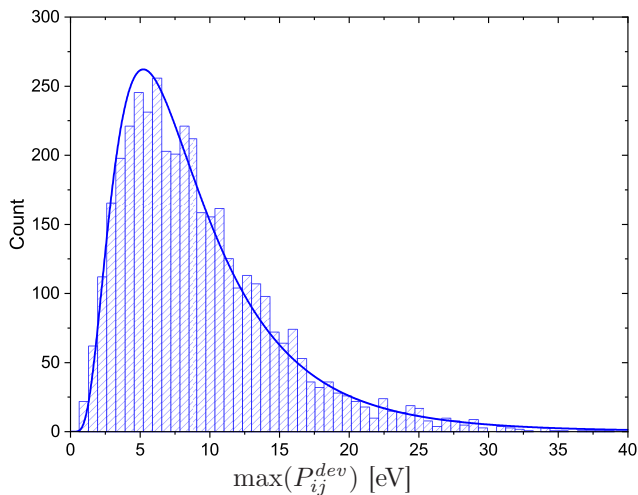


Рис. 3. Распределение максимальных девиаторных компонент дипольных тензоров атомов в стекле $\text{Fe}_{24}\text{Ni}_{19}\text{Cr}_{19}\text{Co}_{19}\text{Cu}_{19}$

системы FeNiCrCoCu могут обладать хорошей радиационной устойчивостью. При этом более интенсивное изменение энтальпии формирования межузельных дефектов происходит в интервале высокоэнтропийных состояний (при $S_{mix} > 1.5$), эта область выделена прямоугольником.

На том же рис. 2 показана зависимость сдвиговой восприимчивости межузельных дефектов β [39] от энтропии смешения. Видно, что рост S_{mix} приводит к монотонному изменению сдвиговой восприимчивости, которая является интегральной характеристикой межузельных дефектов. Как и в случае $\langle H_f \rangle$, более сильное изменение β происходит в высокоэнтропийной области.

Как упоминалось выше, структурные дефекты в стеклообразном и кристаллическом состояниях имеют общую микроскопическую природу — являются упругими диполями. Следовательно, можно предполагать, что величина S_{mix} будет коррелировать и со свойствами подсистемы дефектов в стеклах. Выделение подсистемы дефектов в стеклах делалось по схеме, которая была предложена нами в работе [33]. Согласно этой схеме, подсистему дефектов формируют атомы, у которых девиаторные компоненты дипольных тензоров превышают средние значения в 2.5 раза. На рис. 3 для примера показано распределение максимальных девиаторных компонент дипольных тензоров атомов в стекле $\text{Fe}_{24}\text{Ni}_{19}\text{Cr}_{19}\text{Co}_{19}\text{Cu}_{19}$. Как и в работе [33], это распределение имеет вид, близкий к логнормальному распределению (показано сплошной кривой).

В качестве косвенного подтверждения гипотезы о том, что на основе анализа дипольных тензоров

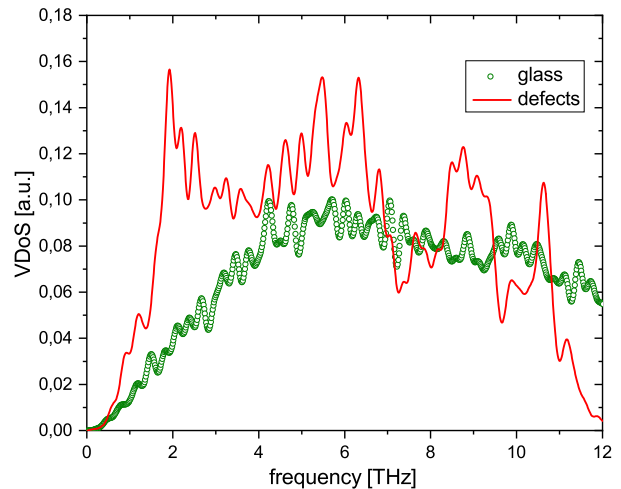


Рис. 4. Спектры колебательной плотности состояний стекла $\text{Fe}_{24}\text{Ni}_{19}\text{Cr}_{19}\text{Co}_{19}\text{Cu}_{19}$ и его подсистемы дефектов

можно идентифицировать подсистему дефектов стеккол, на рис. 4 показаны колебательные плотности состояний стекла $\text{Fe}_{24}\text{Ni}_{19}\text{Cr}_{19}\text{Co}_{19}\text{Cu}_{19}$ и его дефектной подсистемы. Видно, что в области низких частот (около 2 ТГц) наблюдаются пики, характерные для дефектов межузельного типа в кристаллах и дефектов в стеклах [42–44]. На рис. 5 в качестве примера показана визуализация с помощью программы OVITO [45] распределения атомов (и их ближайших соседей), формирующих часть подсистемы дефектов в стекле $\text{Fe}_{20}\text{Ni}_{20}\text{Cr}_{20}\text{Co}_{20}\text{Cu}_{20}$, индексы Вороного которых равны $\langle 0, 1, 10, 2 \rangle$ и $\langle 0, 2, 8, 2 \rangle$. Видно, что конфигурация подсистемы дефектов неоднородна по атомному окружению.

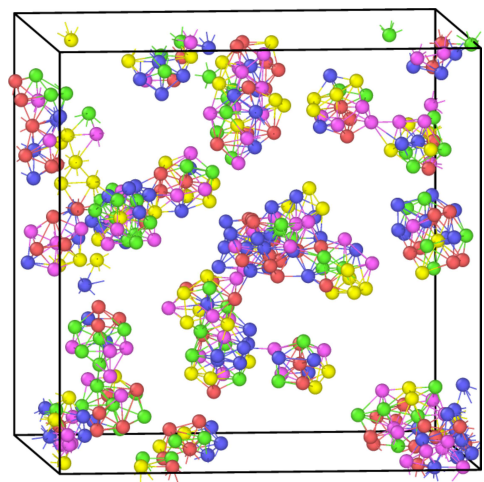


Рис. 5. Визуализация части подсистемы дефектов с индексами Вороного $\langle 0, 1, 10, 2 \rangle$ и $\langle 0, 2, 8, 2 \rangle$ и их ближайшего окружения в стекле $\text{Fe}_{20}\text{Ni}_{20}\text{Cr}_{20}\text{Co}_{20}\text{Cu}_{20}$

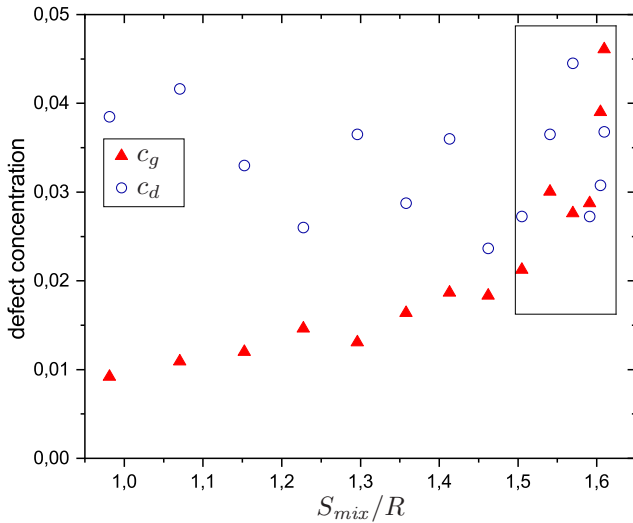


Рис. 6. Концентрации дефектов в стеклах системы FeNiCrCoCu, рассчитанные на основе анализа девиаторных компонент дипольных тензоров [33], а также на основе межузельной теории [39]

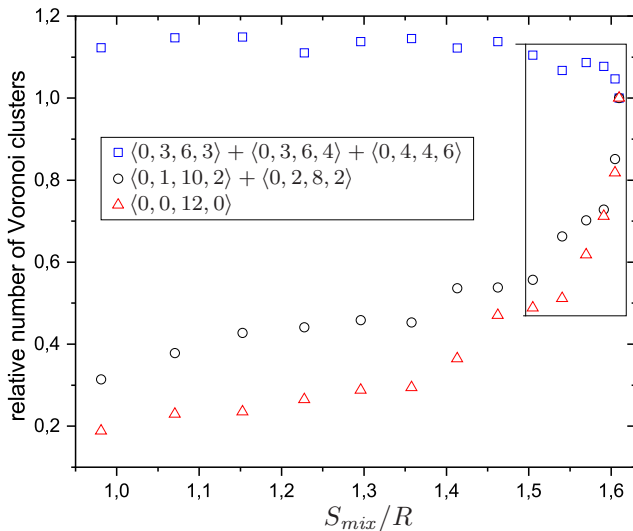


Рис. 7. Относительное число многогранников Вороного в стеклах системы FeNiCrCoCu в зависимости от энтропии смешения

На рис. 6 показано сравнение оценок концентрации дефектов c_g и c_d в стеклах, рассчитанных на основе межузельной теории и из анализа распределений девиаторных компонент дипольных тензоров соответственно. Видно, что значения концентрации дефектов в обоих случаях достаточно разумные и качественно согласуются, особенно в высокоэнтропийной области (выделена прямоугольником).

В качестве структурной характеристики исследуемых систем мы использовали распределение многогранников Вороного, которые однозначно определяются набором четырех индексов $\langle n_3, n_4, n_5, n_6 \rangle$. На рис. 7 показано относительное число наиболее встречающихся многогранников

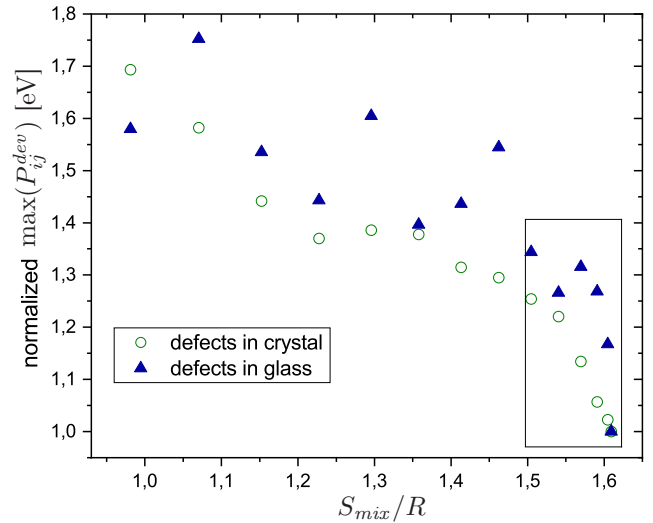


Рис. 8. Нормированные средние значения девиаторных компонент дипольных тензоров дефектов в монокристаллах и стеклах системы FeNiCrCoCu в зависимости от энтропии смешения

Вороного в зависимости от энтропии смешения. За единицу принято количество соответствующих многогранников в системе $Fe_{20}Ni_{20}Cr_{20}Co_{20}Cu_{20}$, имеющей наибольшую энтропию смешения. На том же рисунке отдельно показано относительное количество икосаэдрических кластеров с индексами Вороного $\langle 0, 0, 12, 0 \rangle$, которые представляют особый интерес [20, 46].

Многогранники Вороного с индексами $\langle 0, 1, 10, 2 \rangle$ и $\langle 0, 2, 8, 2 \rangle$ являются наиболее распространенными среди дефектов, их суммарная концентрация в стекле $Fe_{20}Ni_{20}Cr_{20}Co_{20}Cu_{20}$ около 0.6%. В свою очередь, многогранники с индексами $\langle 0, 3, 6, 3 \rangle$, $\langle 0, 3, 6, 4 \rangle$ и $\langle 0, 4, 4, 6 \rangle$ можно отнести к аморфной матрице, так как их суммарная концентрация в наиболее высокоэнтропийном стекле около 32%.

Концентрация икосаэдрических кластеров в том же стекле около 0.5%. При этом ядро икосаэдрического кластера составляют 13 атомов. Если к ним прибавить атомы, находящиеся в первой координационной сфере атомов ядра, то объем икосаэдрического кластера составляет около 45 атомных объемов. Далее можно оценить объемную долю этих кластеров (исходя из 5% концентрации междоузлий, см. рис. 6), она получается около 35%, что выглядит вполне разумно.

На рис. 7 видно, что, как и в случае сдвиговой восприимчивости, более резкое изменение количества многогранников Вороного, соответствующих дефектам и икосаэдрическим кластерам, происходит в высокоэнтропийной области, выделенной прямоугольником.

Дефекты межузельного типа представляют собой упругие диполи, а величина девиаторных компонент дипольных тензоров упругих диполей непосредственно определяет степень их взаимодействия с полем сдвиговых напряжений. Как было ранее показано в работе [33] для стекла $\text{Fe}_{20}\text{Ni}_{20}\text{Cr}_{20}\text{Co}_{20}\text{Cu}_{20}$, при сдвиговой деформации модельной системы происходит поворот осей упругих диполей. При этом наибольшие углы поворота наблюдаются именно в области подсистемы дефектов.

На рис. 8 приведены зависимости нормированных средних девиаторных компонент дипольных тензоров от энтропии смешения для дефектов в монокристаллах и стеклах. Нормировка делалась на значения соответствующих величин в состоянии с наибольшей энтропией смешения (т.е. при равенстве концентраций всех компонентов). Видно, что с ростом S_{mix} обе величины убывают. Как и для предыдущих характеристик дефектов, более интенсивное снижение происходит в высокоэнтропийной области, выделенной прямоугольником.

Снижение средних значений девиаторных компонент дипольных тензоров может являться следствием снижения средней энтальпии формирования дефектов, что способствует формированию большего количества дефектов и большей степени их кластеризации. При этом кластеризация дефектов межузельного типа приводит к уменьшению девиаторных компонент, которые приближаются к величинам характерным для аморфной матрицы [33].

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Для 16-ти металлических сплавов системы FeNiCrCoCu , различающихся энтропией смешения, были рассчитаны средние энтальпии формирования межузельных дефектов в кристалле, их сдвиговые восприимчивости и девиаторные компоненты дипольных тензоров. Установлено, что с ростом энтропии смешения эти характеристики монотонно убывают, при этом убывание в области высокоэнтропийных состояний происходит быстрее.

Для стекол того же состава были рассчитаны средние девиаторные компоненты дипольных тензоров подсистемы дефектов. Установлено, что с ростом энтропии смешения эти компоненты, как и в кристалле, монотонно убывают. Таким образом, можно сделать вывод, что характеристики дефектов, как в кристаллическом, так и в стеклообразном состояниях, коррелируют с энтропией смешения.

Выполнена оценка концентрации дефектов в стеклах, основанная на анализе распределений девиаторных компонент дипольных тензоров атомов. Показано, что при этом получаются разумные величины концентрации дефектов, согласующиеся с соответствующими оценками на основе межузельной теории.

Полученные результаты могут оказаться полезными для понимания роли энтропии смешения в формировании специфических свойств высокоэнтропийных сплавов в кристаллическом и стеклообразном состояниях.

Финансирование. Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 23-12-00162).

ЛИТЕРАТУРА

1. S. C. Glade, R. Busch, D. S. Lee, and W. L. Johnson, *J. Appl. Phys.* **87**, 7242 (2000).
2. X. Ji and Y. Pan, *J. Non-Cryst. Solids* **353**, 2443 (2007).
3. S. Guo, Q. Hu, C. Ng, and C. T. Liu, *Intermetallics* **41**, 96 (2013).
4. H.-R. Jiang, B. Bochtler, S. S. Riegler, X.-S. Wei, N. Neuber, M. Frey, I. Gallino, R. Busch, and J. Shen, *J. Alloys Compd.* **844**, 156126 (2020).
5. A. S. Makarov, G. V. Afonin, R. A. Konchakov, V. A. Khonik, J. C. Qiao, A. N. Vasiliev, and N. P. Koblelev, *Scripta Mater.* **239**, 115783 (2024).
6. J. W. Yeh, S. K. Chen, S. J. Lin, J. Y. Gan, T. S. Chin, T. T. Shun, C. H. Tsau, and S. Y. Chang, *Adv. Eng. Mater.* **6**, 299 (2004).
7. E. P. George, D. Raabe and R. O. Ritchie, *Nat. Rev. Mater.* **4**, 515 (2019).
8. Y. F. Ye, Q. Wang, J. Lu, C. T. Liu, and Y. Yang, *Materials Today* **19**, 349 (2016).
9. D. Kumar, *Progress in Materials Science* **136**, 101106 (2023).
10. W. Chen, *Nature Commun.* **14**, 2856 (2023).
11. Y. Zhang, T. T. Zuo, Z. Tang, M. C. Gao, K. A. Dahmen, P. K. Liaw, and Z. P. Lu, *Progress in Materials Science* **61**, 1 (2014).
12. R. E. Ryltsev, S. Kh. Estemirova, V. S. Gaviko, D. A. Yagodin, V. A. Bykov, E. V. Sterkhov, L. A. Cherpanova, I. S. Sipatov, I. A. Balyakin, and S. A. Uprov, *Materialia* **21**, 101311 (2022).

13. S. Uporov, S. Kh. Estemirova, V. A. Bykov, D. A. Zamyatin, and R. E. Ryltsev, *Intermetallics* **122**, 106802 (2020).
14. S. A. Uporov, R. E. Ryltsev, S. Kh. Estemirova, E. V. Sterkhov, and N. M. Chtchelkatchev, *Scripta Materialia* **193**, 108 (2021).
15. Z. Li, S. Zhao, R. O. Ritchie, and M. A. Meyers, *Progress in Materials Science* **102**, 296 (2019).
16. S. A. Uporov, R. E. Ryltsev, V. A. Bykov, S. Kh. Estemirova, and D. Zamyatin, *J. Alloys and Compounds* **820**, 153228 (2020).
17. S. A. Uporov, R. E. Ryltsev, V. A. Sidorov, S. Kh. Estemirova, E. V. Sterkhov, I. A. Balyakin, and N. M. Chtchelkatchev, *Intermetallics* **140**, 107394 (2022).
18. S. A. Uporov, R. E. Ryltsev, V. A. Bykov, N. S. Uporova, S. Kh. Estemirova, and N. M. Chtchelkatchev, *J. of Alloys and Compounds* **854**, 157170 (2021).
19. H. W. Sheng, W. K. Luo, F. M. Alamgir, and E. Ma, *Nature* **439**, 419 (2006).
20. Y. Q. Cheng and E. Ma, *Prog. Mater. Sci.* **56**, 379 (2011).
21. W. H. Wang, *Prog. Mater. Sci.* **57**, 487 (2012).
22. A. Hirata, P. Guan, T. Fujita, Y. Hirotsu, A. Inoue, A. R. Yavari, T. Sakurai, and M. Chen, *Nature Materials* **10**, 28 (2011).
23. A. Hirata, L. J. Kang, T. Fujita, B. Klumov, K. Matsue, M. Kotani, A. R. Yavari, and M. W. Chen, *Science* **341**, 376 (2013).
24. F. Spaepen, *Acta Metall.* **25**, 407 (1977).
25. M. L. Falk and J. S. Langer, *Phys. Rev. E* **57**, 7192 (1998).
26. Y. C. Hu, P. F. Guan, M. Z. Li, C. T. Liu, Y. Yang, H. Y. Bai, and W. H. Wang, *Phys. Rev. B* **93**, 214202 (2016).
27. T. Egami, S. J. Poon, Z. Zhang, and V. Keppens, *Phys. Rev. B* **76**, 024203 (2007).
28. M. D. Ediger, *Annu. Rev. Phys. Chem.* **51**, 99128 (2000).
29. H. L. Peng, M. Z. Li, and W. H. Wang, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 135503 (2011).
30. H. Zhang, C. Zhong, J. F. Douglas, X. Wang, Q. Cao, D. Zhang, and J.-Z. Jiang, *J. Chem. Phys.* **142**, 164506 (2015).
31. J. C. Qiao and J. M. Pelletier, *J. Mater. Sci. Technol.* **30**, 523 (2014).
32. P. A. Кончаков, Н. П. Кобелев, В. А. Хоник, А. С. Макаров, *ФТТ* **58(2)**, 209 (2016).
33. P. A. Кончаков, А. С. Макаров, А. С. Аронин, Н. П. Кобелев, В. А. Хоник, *Письма в ЖЭТФ* **115(5)**, 308 (2022).
34. R. A. Konchakov, A. S. Makarov, N. P. Kobelev, A. M. Glezer, G. Wilde, and V. A. Khonik, *J. Phys.: Condens. Matter* **31**, 385703 (2019).
35. P. A. Кончаков, А. С. Макаров, А. С. Аронин, Н. П. Кобелев, В. А. Хоник, *Письма в ЖЭТФ* **113**, 341 (2021).
36. J. Plimpton, *J. Comp. Phys.* **117**, 1 (1995).
37. D. Farkas and A. Caro, *J. Mater. Res.* **33**, 3218 (2018).
38. М. А. Кретьова, Р. А. Кончаков, Н. П. Кобелев, В. А. Хоник, *Письма в ЖЭТФ* **111(12)**, 806 (2020).
39. A. V. Granato, *Eur. Phys. J. B* **87**, 18 (2014).
40. D. A. Freedman, D. Roundy, and T. A. Arias, *Phys. Rev. B* **80**, 064108 (2009).
41. W. G. Wolfer, *Fundamental Properties of Defects in Metals*, Comprehensive Nuclear Materials, ed. by R. J. M. Konings, Elsevier, Amsterdam (2012).
42. Y. Zhang, C. Z. Wang, F. Zhang, M. I. Mendelev, M. J. Kramer, and K. M. Ho, *Appl. Phys. Lett.* **105**, 151910 (2014).
43. T. Brink, L. Koch, and K. Albe, *Phys. Rev. B* **94**, 224203 (2016).
44. Н. П. Кобелев, В. А. Хоник, *УФН* **193**, 717 (2023).
45. A. Stukowski, *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* **18**, 015012 (2010).
46. В. А. Klumov, R. E. Ryltsev, and N. M. Chtchelkatchev, *JETP Letters* **104**, 546 (2016).