

Эффективность дислокационных стоков для собственных точечных дефектов в кристаллах железа и ванадия

А. Б. Сивак, П. А. Сивак, В. А. Романов, В. М. Чернов

Исследовано влияние полей напряжений дислокаций на их стоковую эффективность для собственных точечных дефектов (межузельные атомы, вакансии) в температурном диапазоне 293 – 1000 К и интервале значений дислокационной плотности $1 \cdot 10^{12}$ – $3 \cdot 10^{14}$ м⁻² в объемно-центрированных кубических (ОЦК) кристаллах железа и ванадия. Рассмотрены прямолинейные полные винтовые и краевые дислокации в системах скольжения $\langle 111 \rangle \{110\}$, $\langle 111 \rangle \{112\}$, $\langle 100 \rangle \{100\}$, $\langle 100 \rangle \{110\}$. Методом кинетического Монте – Карло проведено моделирование диффузии дефектов. Рассчитаны энергии взаимодействия дефектов с дислокациями методом анизотропной линейной теории упругости. Предложены аналитические выражения для эффективности дислокационных стоков в зависимости от температуры и дислокационной плотности.

Ключевые слова: железо, ванадий, вакансии, собственные межузельные атомы, диффузия, эффективности дислокационных стоков, кинетический Монте – Карло.

Введение

Основные радиационные микроструктурные изменения в металлах определяются образованием и диффузией в них точечных дефектов и реакциями этих дефектов между собой и с дислокациями [1 – 4]. Кинетика таких процессов существенно зависит от полей упругих напряжений (внешних и внутренних). Дислокации являются основными источниками внутренних напряжений в кристаллах, и поля таких напряжений значительно влияют на кинетическое поведение собственных точечных дефектов (СТД – собственный межузельный атом (СМА) и вакансия), включая их диффузию и поглощение ядрами дислокаций как стоками СТД. Такие процессы зависят от кристаллической симметрии и упругой анизотропии кристаллов и типов дефектов [1 – 7] и определяют поведение микроструктуры и свойств кристаллов при внешних воздействиях разной природы (механических, термических, радиационных).

Эффективность дислокационных стоков (ДС) определяется величиной $\xi = k^2/\rho_d$, где k^2 — сила стоков (k^{-1} — диффузионная длина для СТД до поглощения на стоке), ρ_d — плотность дислокаций [8]. В определении эффективностей ДС в кристаллах важ-

ным является учет взаимодействия между стоками (источниками напряжений) и СТД, так как конфигурации СТД (стабильные и седловые) обладают различной точечной симметрией на диффузионных путях к стокам. Эффективности ДС нельзя рассчитывать (оценивать) с использованием изотропных приближений (изотропная теория упругости, сферическая симметрия всех конфигураций дефектов [2, 9]) или априори задавать их значения [8, 10 – 12], так как такие приближения приводят к исчезновению качественных различий между кристаллами разных кристаллографических классов, типами дислокаций и точечных дефектов (упругих диполей). Металлы являются упругоанизотропными кристаллами с параметром упругой анизотропии (для кубической сингонии)

$$A_{el} = \frac{2C_{44}}{C_{11} - C_{12}},$$

где C_{11} , C_{12} , C_{44} — упругие постоянные. Для ОЦК металлов за редкими исключениями параметр A_{el} отличен от единицы (в изотропном случае $A_{el} = 1$). При комнатной температуре для железа $A_{el} = 2,36$; для ванадия $A_{el} = 0,78$ [13].

Цель настоящей работы — исследование влияния полей напряжений дислокаций на их стоковую

эффективность для СТД в температурном диапазоне 293 – 1000 К и интервале значений дислокационной плотности $1 \cdot 10^{12} - 3 \cdot 10^{14} \text{ м}^{-2}$ в ОЦК кристаллах Fe и V, являющихся основой перспективных сталей и сплавов для ядерных и термоядерных реакторов.

Вычислительные методы и параметры

Рассмотрены прямолинейные полные винтовые (ВД) и краевые (КД) дислокации в системах скольжения $\langle 111 \rangle \{110\}$, $\langle 111 \rangle \{112\}$, $\langle 100 \rangle \{100\}$, $\langle 100 \rangle \{110\}$. Диффузию СТД в упругих полях моделировали методом кинетического Монте-Карло (КМК) [14, 15]. Энергию упругого взаимодействия между СТД (упругими диполями) в стабильных и седловых позициях и дислокациями рассчитывали в рамках анизотропной линейной теории упругости (АЛТУ) [13].

Для сравнения также будут вычислены эффективности линейных стоков для диффундирующих СТД, не взаимодействующих со стоками и поглощаемыми стоками при попадании на ядро такого стока, имеющего некоторый радиус поглощения (не взаимодействующие линейные стоки — НЛС). Направления, плотности и радиусы поглощения НЛС соответствуют взаимодействующим с СТД дислокационным стокам (ДС).

Необходимые для расчетов значения дипольных тензоров СТД были получены в [6, 16 – 18] методом молекулярной статистики. Повсюду в работе будет использована кристаллографическая система координат (правая).

Энергия образования СТД E_d^F в кристаллах с дислокациями определяется выражением:

$$E_d^F = E^F + E^{int}(\mathbf{r}), \quad (1)$$

где E^F — энергия образования СТД в отсутствие дислокации; $E^{int}(\mathbf{r})$ — энергия взаимодействия СТД с дислокацией, \mathbf{r} — радиус-вектор положения СТД по отношению к центру ядра дислокации.

Энергия E^{int} в рамках АЛТУ (размерное взаимодействие) имеет вид [5, 13, 19]:

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

где ε_{ij} — тензор упругой деформации, создаваемый дислокацией, P_{ij} — дипольный тензор СТД, по повторяющимся индексам проводится суммирование ($i, j = 1, 2, 3$).

В ОЦК кристаллах Fe и V наименьшей энергией образования в отсутствие полей напряжений среди различных конфигураций СМА обладает $\langle 110 \rangle$ гантельная конфигурация [16], которая будет рассматриваться далее как исходная. Будут рассмотрены механизмы миграции СТД: скачок $\langle 110 \rangle$ гантельной

конфигурации СМА в ближайший соседний узел решетки с поворотом оси гантели на 60° и скачок вакансии в ближайший соседний узел.

Упругие постоянные C_{11} , C_{12} , C_{44} и параметр решетки a , использованные для расчета упругих полей дислокаций, соответствуют величинам, которые дают потенциалы межатомного взаимодействия [17, 18], и приведены в [6, 16 – 18]. Кристаллографические характеристики и обозначения рассматриваемых дислокаций приведены в табл. 1.

Таблица 1

Вектор Бюргерса \mathbf{b} , нормаль к плоскости скольжения \mathbf{n} и направление \mathbf{t} рассмотренных прямолинейных краевых (КД) и винтовых (ВД) дислокаций

Дислокации	\mathbf{b}	\mathbf{n}	\mathbf{t}
КД $\langle 111 \rangle \{110\}$	$1/2[111]$	$[\bar{1}10]$	$[\bar{1}1\bar{2}]$
КД $\langle 111 \rangle \{112\}$	$1/2[111]$	$[11\bar{2}]$	$[\bar{1}10]$
КД $\langle 100 \rangle \{100\}$	$[100]$	$[001]$	$[010]$
КД $\langle 100 \rangle \{110\}$	$[100]$	$[011]$	$[01\bar{1}]$
ВД $\langle 111 \rangle$	$1/2[111]$	$[\bar{1}10]$	$[111]$
ВД $\langle 100 \rangle$	$[100]$	$[001]$	$[100]$

Расчет эффективностей ДС осуществляли КМК-методом, следуя [7, 16]. Рассматривается ситуация, когда в модельном кристаллите присутствует только один СТД и один тип стока (дислокация заданного типа). Стартовые позиции СТД задавали случайным образом в кристаллите. Модельный кристаллит представлял собой прямую призму неограниченной длины, в основании которой лежал квадрат с длиной стороны L . Дислокация располагалась в центре призмы. На боковые грани призмы накладывались периодические граничные условия: в случае, если СТД покидал кристаллит, его возвращали обратно с противоположной стороны кристаллита. Таким образом, моделировался кристалл, содержащий квадратную сетку параллельных дислокаций с расстояниями между ближайшими дислокациями L ($\rho_d = L^{-2}$). Траекторию СТД рассчитывали до тех пор, пока СТД не поглощался дислокацией (приближался к дислокации на расстояние, меньшее некоторого критического расстояния r_0). После этого в модельный кристаллит вводился новый СТД того же типа. Эффективность стока определяется выражением:

$$\xi = \frac{k^2}{\rho_d} = \frac{2dL^2}{l^2 \langle N \rangle}, \quad (3)$$

где $l = 3^{1/2}a/2$ — длина скачка СТД в ОЦК-решетке, $\langle N \rangle$ — среднее число скачков, совершенных СТД до поглощения на стоке, $d = 3$ — размерность движения. Для получения статистически надежных данных

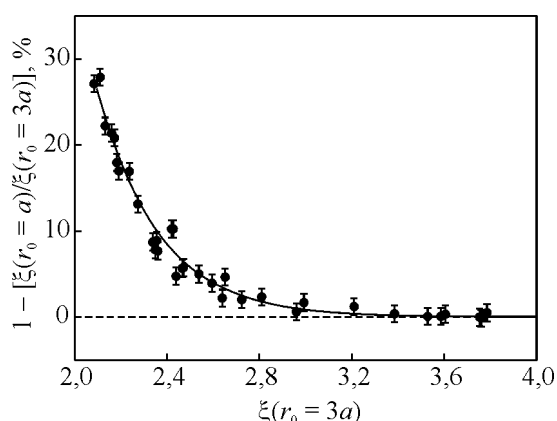


Рис. 1. Различия в эффективностях ДС ξ с радиусами поглощения $r_0 = 3a$ и $r_0 = a$ при дислокационной плотности $3 \cdot 10^{14} \text{ м}^{-2}$ для разных материалов (Fe, V), типов дислокаций, СТД и температур. Точки — КМК-данные с указанием статистической погрешности. Сплошная линия — аппроксимация (4) КМК-данных.

моделировали, по меньшей мере, 10^5 траекторий для каждого типа дислокации и СТД, что обеспечивало величину погрешности результатов расчета величины ξ на уровне менее 1 % (доверительная вероятность принята равной 99%). В ряде случаев рассчитывали до 10^7 траекторий, что на порядок увеличивало точность расчета (погрешность менее 0,1 %).

В настоящей работе для ОЦК кристаллов Fe и V радиус поглощения выбран равным $r_0 = 3a$. Некоторая неопределенность критерия выбора величины r_0 не оказывает существенного влияния на рассчитанные величины эффективностей ДС, так как полевое взаимодействие между СТД и дислокациями вносит определяющий вклад в величину ξ . На рис. 1 приведена зависимость различия в эффективностях ДС с радиусами поглощения $r_0 = 3a$ и $r_0 = a$ от величины эффективности ДС с радиусами поглощения $r_0 = 3a$ в Fe и V при $\rho_d = 3 \cdot 10^{14} \text{ м}^{-2}$ для разных типов дислокаций, СТД и температур. Это различие экспоненциально уменьшается с ростом эффективности ДС (аппроксимация расчетных данных):

$$1 - \left[\frac{\xi(r_0 = a)}{\xi(r_0 = 3a)} \right] = 10^3 \exp[-4\xi(r_0 = 3a)]. \quad (4)$$

Результаты расчетов эффективностей ДС для $r_0 = 3a$ и $r_0 = a$ становятся неразличимы в пределах статистической неопределенности расчетов при $\xi(r_0 = 3a) > 3$ (рис. 1). Использование АЛТУ для расчета размерного взаимодействия между дислокацией и СТД при расстоянии между ними меньшем $3a$ приводит к заметной недооценке полной энергии взаимодействия [7], так как не учитываются другие

типы взаимодействия (короткодействующие, типа модульного взаимодействия, др. [20]), учет которых сделал бы различие в величине ξ для $r_0 = 3a$ и $r_0 = a$ еще меньше. В предельном случае отсутствия взаимодействия между СТД и дислокацией (НЛС) уменьшение величины r_0 в 3 раза приводит к уменьшению величины эффективности НЛС ξ_0 на 28 % при максимальной рассмотренной в настоящей работе дислокационной плотности $3 \cdot 10^{14} \text{ м}^{-2}$ — при меньших дислокационных плотностях изменение величины ξ_0 будет меньше.

Энергия взаимодействия E^{int} (2) зависит от температуры, так как от температуры зависят величины компонент тензоров P_{ij} и ϵ_{ij} .

Изменение компонент P_{ij} с температурой можно оценить с помощью метода молекулярной динамики (МД). Релаксационный объем V^R и след дипольного тензора $\text{Tr}P_{ij}$ СТД связаны между собой соотношением [21]:

$$V^R = \frac{\text{Tr} P_{ij}}{3K}, \quad (5)$$

где $K = (C_{11} + 2C_{12})/3$ — объемный модуль. Из определения объемного модуля ($K = -V dp/dV$, где p — давление, V — объем) следует, что если в равновесном модельном кристаллите с постоянным объемом V (периодические граничные условия) дополнительно создать СТД, в кристаллите возникнет давление

$$p = \frac{KV^R}{V} = \frac{\text{Tr} P_{ij}}{3V}. \quad (6)$$

МД-расчеты показали, что с увеличением температуры от комнатной до 1000 К изменение давления в кристаллите, а значит, в соответствии с (6), и следа дипольного тензора, составляет не более 15% для $\langle 110 \rangle$ гантельной конфигурации СМА и вакансии. Согласно КМК-расчетам изменение величин ξ для различных типов дислокаций в кристаллах Fe и V при 1000 К составляет не более 10 % при пропорциональном уменьшении всех компонент дипольного тензора на 15 %.

Поле упругих деформаций дислокации ϵ_{ij} зависит не от самих значений упругих постоянных, а от их некоторых комбинаций [13]. Например, в качестве такого набора комбинаций можно выбрать параметры A_{el} и $B_{el} = C_{44}/K$. В кристалле V при увеличении температуры от 0 до 1000 К величина A_{el} меняется на 8 % (от 0,81 до 0,75), а величина B_{el} — на 16% (от 0,29 до 0,25) [22]. В кристалле Fe при увеличении температуры от 0 до 1000 К величина A_{el} меняется на 96 % (от 2,3 до 4,5), а величина B_{el} — на 9 % (от 0,70 до 0,77) [22]. КМК-расчеты показали, что изменение величин ξ для различных типов дислокаций в Fe при

1000 К составляет не более 10% при изменении величин упругих постоянных в интервале температур от 0 до 1000 К.

Поскольку изменение величин P_{ij} и ϵ_{ij} с температурой слабо влияет на величины ξ в рассматриваемом температурном диапазоне 293 – 1000 К, далее при расчете величины $E_{sp,i}^{int}$ не учитывали влияние температуры на величины P_{ij} и ϵ_{ij} .

Результаты и обсуждение

Невзаимодействующие линейные стоки (НЛС)

Эффективность НЛС зависит от многих факторов: от их плотности, радиуса поглощения, пространственного распределения и типа СТД. Однако влиянием некоторых из этих факторов можно пренебречь в силу относительной слабости этого влияния, а именно, далее будем полагать, что эффективность НЛС не зависит от пространственного распределения НЛС и типа СТД. Кроме того, поскольку радиус поглощения в настоящей работе был принят равным $3a$, далее нет необходимости учитывать влияние его величины на эффективность НЛС. Расчет влияния перечисленных факторов содержится в Приложении А.

В настоящей работе понадобится функциональная зависимость эффективности НЛС от дислокационной плотности. Решение уравнения диффузии дает для эффективности НЛС выражение [23, 24]

$$\xi_{0,th}(\rho) = \frac{2\pi}{\ln\left(\frac{1}{\rho}\right) - \frac{3}{4}}, \quad (7)$$

где $\rho = r_0(\pi r_d)^{1/2}$, члены порядка ρ^2 и ρ^4 не приведены, поскольку максимальная используемая в настоящей работе величина ρ принимает значение $0,015\pi^{1/2}$.

Выражение (7) не учитывает, что СТД совершают скачки конечной длины, что приводит к зависимости эффективности НЛС не только от величины ρ , но и от величины r_0 [16]. Анализ проведенных КМК-расчетов эффективности НЛС для СТД при различных значениях величин ρ и $r_0 = 3a$ позволил уточнить выражение (7):

$$\xi_0(\rho) = \xi_{0,th}(\rho)(1 - 0,016\xi_{0,th}(\rho)). \quad (8)$$

Влияние типа дислокаций на эффективность дислокационных стоков

Рассчитанные эффективности ДС СМА и вакансий (ξ^+ и ξ^- , соответственно) для дислокаций в различных системах скольжения при температуре

Таблица 2

Эффективности ДС ξ^\pm (“+” для СМА, “-” для вакансий) при 293 К и дислокационной плотности $3 \cdot 10^{14} \text{ м}^{-2}$ в ОЦК кристаллах Fe и V. Погрешность менее 0,1%

Дислокации	ξ^+ (Fe; V)	ξ^- (Fe; V)
КД<111>{110}	8,545; 5,734	2,951; 3,605
КД<111>{112}	8,730; 5,714	2,978; 3,587
КД<100>{100}	8,501; 5,959	2,652; 3,528
КД<100>{110}	9,674; 6,081	2,992; 3,695
ВД<111>	3,761; 2,891	2,237; 2,085
ВД<100>	4,491; 3,443	2,811; 2,540

$T = 293 \text{ К}$ и $\rho_d = 3 \cdot 10^{14} \text{ м}^{-2}$ ($L = 200a$) в ОЦК кристаллах Fe и V представлены в табл. 2.

Из анализа соотношения (2) следует, что в ОЦК кристаллах:

1) взаимодействие между ВД и седловыми конфигурациями вакансий и СМА практически целиком определяется недиагональными компонентами P_{ij} ;

2) взаимодействие между КД и седловыми конфигурациями вакансий и СМА определяется как недиагональными, так и диагональными компонентами P_{ij} .

Величины ξ^+ в Fe выше, чем в V, из-за более высоких значений компонент P_{ij} седловой конфигурации СМА в Fe, чем в V. Величины ξ^+ значительно выше для КД, чем для ВД, так как значения диагональных компонент P_{ij} седловой конфигурации СМА много больше значений недиагональных компонент.

Для КД величины ξ^- в Fe ниже, чем в V, так как значения диагональных компонент P_{ij} вакансий в Fe в разы меньше, чем соответствующие значения в V. Для ВД определяющую роль во взаимодействии с вакансиями играют недиагональные компоненты P_{ij} седловых конфигураций вакансий. Вследствие того, что значения указанных компонент больше в Fe, чем в V, величины ξ^- в Fe больше, чем в V.

В V величины ξ^- значительно выше для КД, чем для ВД, так как значения диагональных компонент P_{ij} седловых конфигураций вакансий много больше значений недиагональных компонент. В Fe значения диагональных и недиагональных компонент P_{ij} седловых конфигураций вакансий примерно равны, поэтому величины ξ^- для КД и ВД близки.

Для всех рассмотренных дислокаций выполняется соотношение $\xi^+ > \xi^-$, так как компоненты P_{ij} седловой конфигурации СМА имеют более высокие абсолютные значения, чем соответствующие величины для вакансий.

Разброс значений ξ^\pm для КД относительно среднего значения по всем рассмотренным КД не превышает 9% и 4% для Fe и V, соответственно (табл. 2). Аналогичный разброс для ВД не превышает 12% и 10% для Fe и V, соответственно (табл. 2).

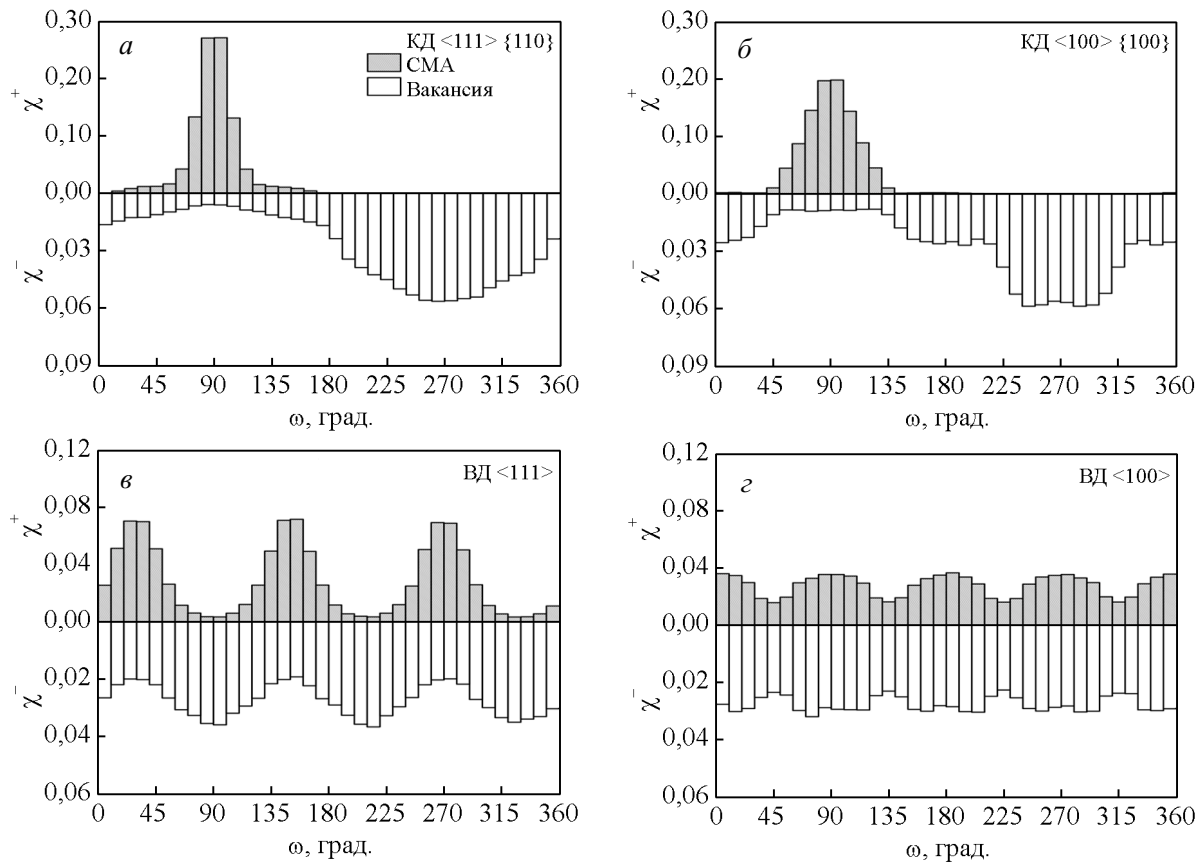


Рис. 2. Угловые распределения доли СМА (χ^+) и вакансий (χ^-), поглощенных дислокациями: а — КД<111><110>, б — КД<100><100>, в — ВД<111>, г — ВД<100> при 600 К и дислокационной плотности $3 \cdot 10^{14} \text{ м}^{-2}$ в ОЦК кристалле Fe. Угол ω отсчитывается против часовой стрелки от плоскости скольжения дислокации в плоскости, перпендикулярной дислокационной линии.

Поле дислокаций имеет сильную угловую зависимость [13], что приводит к пространственной неоднородности распределения траекторий СТД. В качестве примера на рис. 2 представлены угловые распределения доли поглощенных СТД дислокациями КД<111><110>, КД<100><100>, ВД<111>, ВД<100> при $T = 600 \text{ К}$ и $\rho_d = 3 \cdot 10^{14} \text{ м}^{-2}$ в Fe (углы отсчитываются против часовой стрелки от плоскости скольжения дислокации (табл. 1) в плоскости, перпендикулярной дислокационной линии). Изменение величины ρ_d практически не влияет на картину углового распределения поглощения.

Подавляющая часть СМА поглощается краевыми дислокациями в области углов от 0° до 180° ; для вакансий — от 180° до 360° (рис. 2а, б). Указанные особенности поглощения СТД краевыми дислокациями КД<111><110> и КД<100><100> сохраняются и для дислокаций КД<111><112> и КД<100><110>.

Максимальные доли поглощенных дислокациями ВД<111> СМА приходятся на области углов вблизи

$30^\circ, 150^\circ, 270^\circ$; для вакансий — $90^\circ, 210^\circ, 330^\circ$ (рис. 2в). Максимальные доли поглощенных дислокациями ВД<100> СМА и вакансий приходятся на области углов вблизи $0^\circ, 90^\circ, 180^\circ, 270^\circ$ (рис. 2г).

Влияние температуры на эффективность дислокационных стоков

Чтобы выяснить характер температурной зависимости эффективности ДС $\xi(T)$, были проведены расчеты для краевых и винтовых дислокаций в системах скольжения <111><110>, <111><112>, <100><100>, <100><110> при температурах 293, 400, 600, 800 и 1000 К и $\rho_d = 3 \cdot 10^{14} \text{ м}^{-2}$ ($L = 200a$) в Fe и V кристаллах (рис. 3).

Рассчитанные зависимости $\xi(T)$ хорошо описываются выражением

$$\xi(T) = \xi_0 \left[1 + AT^{-1} \exp\left(-\frac{T}{B}\right) \right], \quad (9)$$

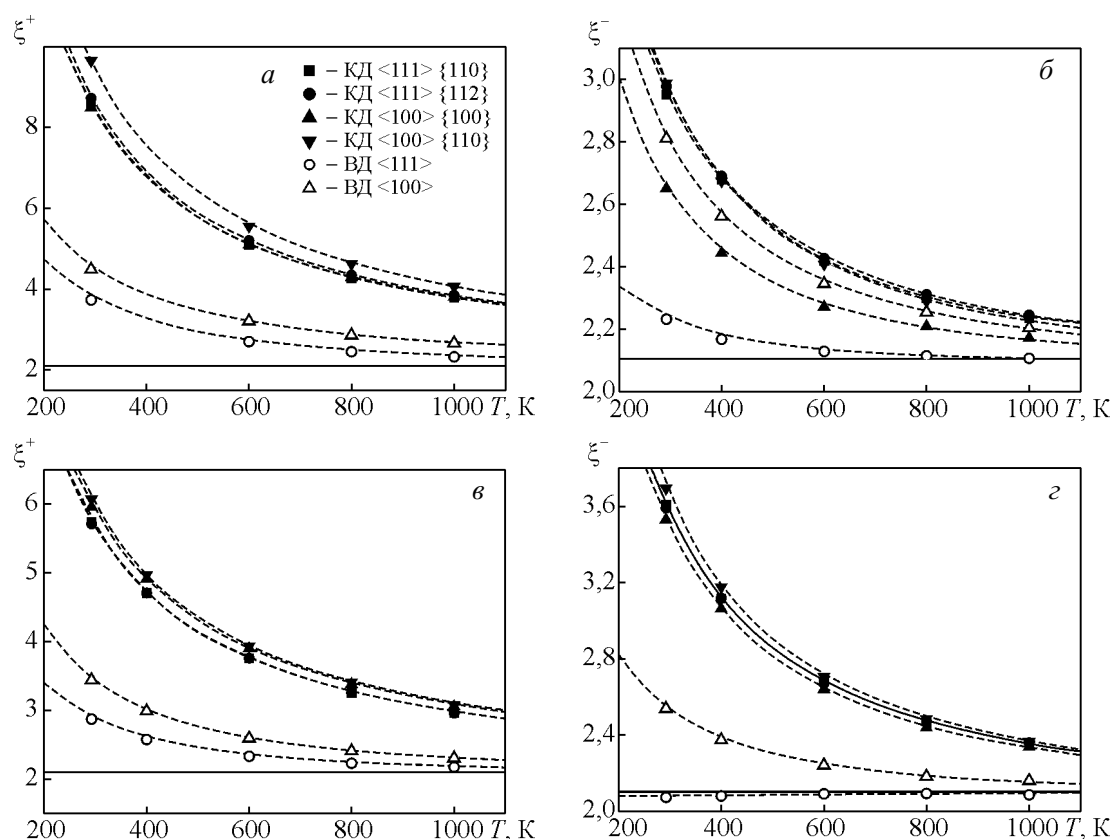


Рис. 3. Температурные зависимости эффективности дислокационных стоков в ОЦК кристаллах Fe и V с дислокационной плотностью $3 \cdot 10^{14} \text{ м}^{-2}$ для различных типов дислокаций (указаны на рисунке) для: а – Fe, СМА; б – Fe, вакансия; в – V, СМА; г – V, вакансия. Сплошные линии – эффективность НЛС. Пунктирные кривые – зависимость (9) со значениями параметрами A, B из табл. 3.

где A, B — подгоночные параметры (табл. 3), ξ_0 — эффективность НЛС (8). Из рис. 3 видно, что эти зависимости хорошо описывают КМК-данные во всем рассмотренном температурном диапазоне. Штриховыми линиями на рис. 3 показаны значения для НЛС. Значения параметров A и B коррелируют между собой, обсуждение их взаимосвязи приведено в приложении Б.

Эффективность ДС уменьшается с ростом температуры и в пределе стремится к ξ_0 . Как

следствие, различие в значениях ξ^+ и ξ^- уменьшается с ростом температуры. Это различие может быть охарактеризовано величиной “дислокационного предпочтения”: $D = 1 - \xi^-/\xi^+$. На рис. 4 представлены зависимости $D(T)$ для тех же дислокаций, что и на рис. 3.

Из рис. 4 видно, что, как уже отмечалось ранее, для всех рассмотренных дислокаций выполняется соотношение $\xi^+ > \xi^-$ ($D > 0$). При температурах выше $600 \text{ }^\circ\text{C}$ дислокационный предпочтительный преференс в разы больше для краевых дислокаций, чем для винтовых.

Таблица 3

Значения параметров A^\pm и B^\pm (в К, “+” для СМА, “-” для вакансий) в (9) для различных типов дислокаций в ОЦК кристаллах Fe и V с дислокационной плотностью $3 \cdot 10^{14} \text{ м}^{-2}$

Дислокации	A^+ (Fe; V)	B^+ (Fe; V)	A^- (Fe; V)	B^- (Fe; V)
КД<111>{110}	942; 551	6148; 3680	154; 265	1116; 1232
КД<111>{112}	966; 548	6508; 3719	157; 260	1133; 1275
КД<100>{100}	927; 573	7311; 4828	113; 254	719; 1169
КД<100>{110}	1105; 593	5949; 4689	168; 281	932; 1230
ВД<111>	300; 162	1185; 774	34; -11	504; 170
ВД<100>	366; 245	3521; 1082	135; 89	900; 727

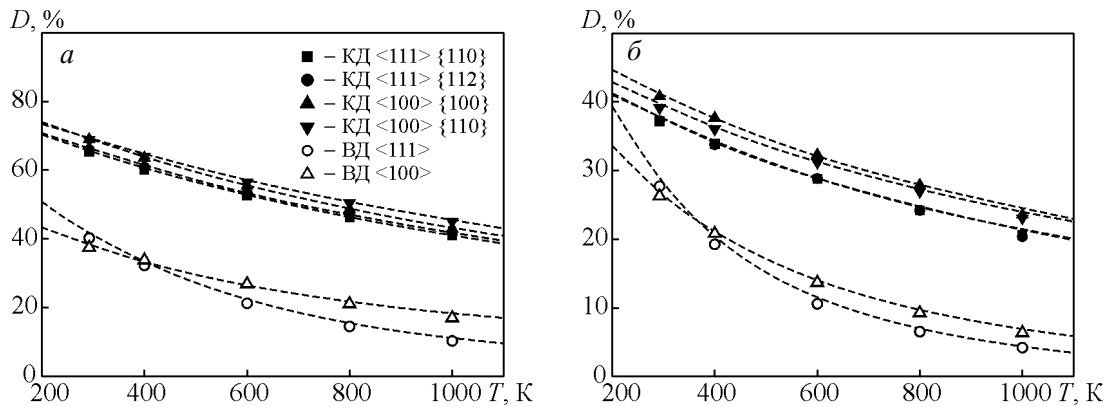


Рис. 4. Температурные зависимости величины дислокационного предпочтения D в ОЦК кристаллах Fe и V с дислокационной плотностью $3 \cdot 10^{14} \text{ м}^{-2}$ для различных типов дислокаций (указаны на рисунке): а – Fe; б – V. Пунктирные кривые построены с использованием (9) и данных табл. 3.

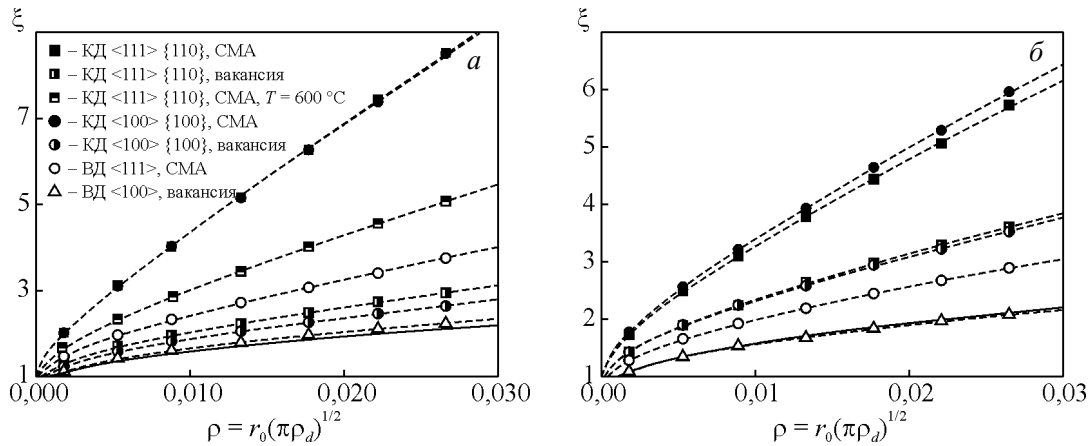


Рис. 5. Зависимость эффективности ДС ξ от параметра $\rho = r_0 (\pi \rho_d)^{1/2}$ при 293 К (если на рисунке не указана иная температура) в ОЦК кристаллах: а – Fe, б – V. Сплошные линии – зависимости (8) для эффективности НЛС. Пунктирные линии – аппроксимация (10) расчетных данных.

Влияние дислокационной плотности на эффективность дислокационных стоков

Для построения кинетических моделей необходимо знать зависимости эффективности ДС от величины ρ_d . С этой целью были рассчитаны значения ξ для дислокаций КД<110>{110}, КД<100>{100} и ВД<111> при $T = 293 \text{ К}$ в модельных кристаллитах с размерами L (в параметрах решетки a) 200, 240, 300, 400, 600, 1000 и 3000, что соответствует значениям ρ_d

(в 10^{13} м^{-2}) 30, 21, 14, 7,6, 3,4, 1,2, 0,14 в Fe и 27, 19, 12, 6,9, 3,0, 1,1, 0,12 в V.

Полученные КМК-данные (рис. 5) во всем рассмотренном диапазоне дислокационных плотностей хорошо описываются зависимостью

$$\xi(\rho) = s\xi_0(\rho) + t\rho, \tag{10}$$

где $\rho = r_0 (\pi \rho_d)^{1/2}$, $\xi_0(\rho)$ определяется с помощью (8), s и t — подгоночные параметры (табл. 4).

Таблица 4

Значения параметров s^\pm и t^\pm (“+” для СМА, “-” для вакансий) в (10) для различных типов дислокаций в ОЦК кристаллах Fe и V с дислокационной плотностью $3 \cdot 10^{14} \text{ м}^{-2}$

Дислокации	$T, \text{ К}$	$s^+ (\text{Fe}; \text{V})$	$t^+ (\text{Fe}; \text{V})$	$s^- (\text{Fe}; \text{V})$	$t^- (\text{Fe}; \text{V})$
КД<111>{110}	293	1,458; 1,429	204,0; 101,2	1,163; 1,255	18,44; 35,71
КД<111>{110}	600	1,383; —	81,31; —	—; —	—; —
КД<100>{100}	293	1,477; 1,458	200,8; 108,3	1,113; 1,254	11,33; 33,13
ВД<111>	293	1,273; 1,149	40,18; 17,45	1,027; 0,9965	2,586; -0,902

Результаты анализа взаимосвязи значений подгоночных параметров s и t приведены в приложении В.

Из полученных данных видно (рис. 5), что учет взаимодействия СТД с ДС существенно усиливает влияние дислокационной плотности на эффективность ДС.

Заключение

1. В ОЦК кристаллах Fe и V методом кинетического Монте – Карло рассчитаны эффективности ДС для СТД (СМА, вакансий) в температурном диапазоне 293 – 1000 К со значениями дислокационной плотности в интервале $1 \cdot 10^{12} - 3 \cdot 10^{14} \text{ м}^{-2}$. Рассмотрены винтовые и краевые дислокации с векторами Бюргера $1/2\langle 111 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$ в системах скольжения $\langle 111 \rangle\{110\}$, $\langle 111 \rangle\{112\}$, $\langle 100 \rangle\{100\}$, $\langle 100 \rangle\{110\}$. Энергии упругого взаимодействия СТД с дислокациями рассчитаны в рамках анизотропной линейной теории упругости, использованы характеристики точечных дефектов (параметры упругих диполей) в стабильных и метастабильных положениях, рассчитанных методом молекулярной статистики [6, 16 – 18]. Также рассмотрены невзаимодействующие с СТД линейные стоки с некоторым радиусом поглощения СТД при их диффузионном перемещении в кристалле. Направления, плотности и радиусы поглощения НЛС соответствуют ДС.

2. Эффективность дислокационных стоков для СТД слабо зависит от системы скольжения дислокаций при заданном угле между дислокациями и вектором Бюргера (в пределах 12% при температуре 293 К).

3. Все рассмотренные дислокации (краевые и винтовые) являются более эффективными стоками для СМА, чем для вакансий. Различия в эффективности дислокационных стоков для СМА и вакансий уменьшаются с ростом температуры.

4. Эффективность дислокационных стоков уменьшается с ростом температуры и определяется выражением

$$\xi(T) = \xi_0 \left[1 + AT^{-1} \exp\left(-\frac{T}{B}\right) \right],$$

где A, B — подгоночные параметры (табл. 3), ξ_0 — эффективность НЛС.

5. Учет упругого (полевого) взаимодействия СТД с их дислокационными стоками существенно усиливает влияние дислокационной плотности на эффективность дислокационных стоков. Эффективность дислокационных стоков при дислокационной плотности $\rho_d < 3 \cdot 10^{14} \text{ м}^{-2}$ определяется выражением

$$\xi(\rho) = s\xi_0(\rho) + t\rho,$$

где $\rho = r_0(\pi\rho_d)^{1/2}$, $\xi_0(\rho)$ определяется с помощью (8), s и t — подгоночные параметры (табл. 4).

Результаты работы были получены с использованием вычислительных ресурсов МВК НИЦ “Курчатовский институт” (<http://computing.kiae.ru/>).

Приложение А

Решение уравнения диффузии дает для эффективности НЛС выражение [23, 24]

$$\xi_{0,th}(\rho) = \frac{2\pi(1-\rho^2)}{\ln\left(\frac{1}{\rho}\right) - \frac{3}{4} + \frac{1}{4}\rho^2(4-\rho^2)}, \quad (\text{A.1})$$

где $\rho = r_0(\pi\rho_d)^{1/2}$.

Выражение (А.1) было получено для НЛС, представляющий собой полый цилиндр. В настоящей работе считается, что внутри цилиндра, являющегося стоком, содержатся атомы кристалла, поэтому при расчетах эффективностей ДС и НЛС полагается, что СТД могут образовываться внутри указанного цилиндра. При этом считается, что СТД поглотился стоком сразу после образования, не совершив ни одного скачка. Учет данного обстоятельства требует модификации правой части выражения (А.1) — умножения на величину $(1 + \rho^2)$. Кроме того, поскольку максимальная используемая в настоящей работе величина ρ принимает значение $0,015\pi^{1/2}$, можно не учитывать члены порядка ρ^4 . С учетом перечисленных обстоятельств, (А.1) записывается как

$$\xi_{0,th}(\rho) = \frac{2\pi}{\ln\left(\frac{1}{\rho}\right) - \frac{3}{4} + \rho^2}. \quad (\text{A.2})$$

Выражения (А.1), (А.2) не учитывают, что СТД совершают скачки конечной длины, что приводит к зависимости эффективности НЛС не только от величины ρ , но и от величины r_0 [16]. Кроме того, поскольку механизмы диффузии СМА и вакансии различаются (вакансия совершает скачок в один из 8 ближайших узлов решетки, а СМА — в один из 4 ближайших узлов), то выражения для вакансии и СМА должны различаться. С целью уточнения выражений, полученных в [16], в настоящей работе проведены расчеты эффективности НЛС, лежащих вдоль направления $\langle 100 \rangle$, для СТД при различных значениях

величин ρ и r_0 КМК-методом с повышенной точностью (10^7 траекторий для каждого случая). Анализ полученных данных позволил выявить следующие зависимости

$$\xi_0^\pm(\rho, r_0) = \xi_a(\rho) \left[1 - F \xi_a(\rho) \frac{l}{r_0} \times \left(1 - G \xi_a(\rho) \frac{l}{r_0} + H^+ \frac{l}{r_0} \right) \right], \quad (\text{A.3})$$

где $F = 0,047$, $G = 0,066$, $H^+ = 0,41$, $H^- = 0,25$, ξ_a — асимптотическое значение эффективности НЛС при стремлении отношения r_0/l к бесконечности.

Величина ξ_a близка к величине $\xi_{0,th}$, определяемой из (A.2), причем с уменьшением величины ρ различие между ними уменьшается. Различие этих величин определяется использованием разных граничных условий в [23, 24] и в настоящей работе. Максимальное различие в данных величинах (при $\rho = 0,015\pi^{1/2}$) составляет $\sim 0,4\%$. Численный анализ данных показал, что величина ξ_a аккуратно описывается выражением

$$\xi_a(\rho) = \xi_{0,th}(\rho) \left\{ 1 - 0,0011 \xi_{0,th}(\rho) \times \left[1 + 0,14 \xi_{0,th}(\rho) (1 + 0,25 \xi_{0,th}(\rho)) \right] \right\}, \quad (\text{A.4})$$

Величина ξ_0^\pm зависит также от направления, вдоль которого лежит НЛС. КМК-расчеты показали, что максимальные значения величина ξ_0^\pm принимает для НЛС, ориентированных вдоль направлений $\langle 100 \rangle$, а минимальная — для направлений $\langle 111 \rangle$. В табл. А.1 приведены рассчитанные КМК-методом значения ξ_0^\pm для НЛС, лежащих в различных кристаллографических направлениях, при $r_0 = 3a$ и $\rho = 0,015\pi^{1/2}$.

Таблица А.1

Эффективности НЛС $\xi_0^\pm(\rho, r_0)$ (“+” для СМА, “-” для вакансий, $\rho = 0,015\pi^{1/2}$, $r_0 = 3a$), лежащих в различных кристаллографических направлениях в ОЦК кристаллах. Относительная погрешность менее 0,05%

$\xi_0^\pm(\rho, r_0)$	Кристаллографическое направление НЛС			
	$\langle 100 \rangle$	$\langle 110 \rangle$	$\langle 111 \rangle$	$\langle 112 \rangle$
ξ_0^+	2,104	2,101	2,094	2,100
ξ_0^-	2,107	2,106	2,098	2,106

Приложение Б

Анализ взаимосвязи значений подгоночных параметров A и B для всех рассмотренных типов дислокаций, СТД и материалов (табл. 3) показал, что между ними наблюдается корреляция:

$$\frac{A}{B} \approx 0,15. \quad (\text{Б.1})$$

Таким образом, параметр B для данного типа ДС можно рассчитать из (9), (Б.1) при известном значении эффективности ДС ξ_1 при $T = T_1$:

$$B = \frac{T_1}{W\left(\frac{0,15\xi_0}{|\xi_1 - \xi_0|}\right)}, \quad (\text{Б.2})$$

где $W(x)$ — W -функция Ламберта (обратная функция к $f(w) = we^w$).

Зависимости, полученные с использованием (9), (Б.1), (Б.2), где в качестве ξ_1 были взяты значения ξ при $T = 293$ К (табл. 2), хорошо описывают КМК-данные во всем рассмотренном температурном диапазоне.

Приложение В

Анализ взаимосвязи значений подгоночных параметров s и t для всех рассмотренных типов дислокаций, СТД и материалов (табл. 4) показал, что если $\xi < 6$ при $\rho_d = 3 \cdot 10^{14} \text{ м}^{-2}$, то параметры s и t связаны между собой эмпирическим соотношением

$$t = 18 \left\{ \exp[4,2(s-1)] - 1 \right\}. \quad (\text{В.1})$$

Таким образом, если известно значение эффективности ДС ξ_1 при $\rho = \rho_1$ ($\rho_d = \rho_{d,1}$), то из (10), (В.1) параметр t для данного типа ДС можно рассчитать как

$$t = -\frac{1}{4,2} W \left[4,2 \frac{18\rho}{\xi_{0,1}} \exp \left(4,2 \frac{\xi_1 - \xi_{0,1} + 18\rho}{\xi_{0,1}} \right) \right] + \frac{\xi_1 + 18\rho}{\xi_{0,1}}, \quad (\text{В.2})$$

где $\xi_{0,1} = \xi_0(\rho_1)$.

Величина ξ^+ при $\rho_d = 3 \cdot 10^{14} \text{ м}^{-2}$ больше 8 для краевых дислокаций в Fe при $T = 293$ К. Подгонка их расчетных зависимостей $\xi^+(\rho)$ выражением (10) дает значения параметров s и t 1,47 и 202, соответственно (табл. 4), не удовлетворяющие (В.1). При повышении T до 600 К величина ξ^+ для указанных дислокаций при $\rho_d = 3 \cdot 10^{14} \text{ м}^{-2}$ уменьшается до 5,1, и выражения (10), (В.1), (В.2) успешно описывают КМК-данные.

Полученные соотношения (10), (В.1), (В.2) позволяют рассчитать эффективность ДС при любом значении ρ_d из рассмотренного диапазона при известном значении этой эффективности для любого другого значения ρ_d .

Литература

1. Physics of radiation effects in crystals. Eds. Johnson R.A. and Orlov A.N. Amsterdam: Elsevier, 1986, 723 p.
2. Elastic strain fields and dislocation mobility. Eds. Indenbom V.L. and Lothe J. Amsterdam: Elsevier, 1992, 778 p.
3. Слезов В.В., Субботин А.В., Осмаев О.А. Эволюция микроструктуры в облучаемых материалах. ФТТ, 2005, т. 47, вып. 3, с. 463 – 468.
4. Воеводин В.Н., Неклюдов И.М. Эволюция структурно-фазового состояния и радиационная стойкость конструкционных материалов. Киев: Наукова думка, 2006, 376 с.
5. Kröner E. Allgemeine Kontinuumstheorie der Versetzungen und Eigenspannungen. Arch. Rational Mech. Anal, 1959/60, v. 4, no. 1, p. 273 – 334.
6. Sivak A.B., Chernov V.M., Dubasova N.A., Romanov V.A. Anisotropy migration of self-point defects in dislocation stress fields in BCC Fe and FCC Cu. J. Nucl. Mater, 2007, v. 367 – 370, p. 316 – 321.
7. Sivak A.B., Chernov V.M., Romanov V.A. Diffusion of self-point defects in body-centered cubic iron crystal containing dislocations. Crystallogr. Rep., 2010, v. 55, no. 1, p. 97 – 108.
8. Brailsford A.D., Bullough R., Hayns M.R. Point defect sink strengths and void-swelling. J. Nucl. Mater., 1976, v. 60, no. 3, p. 246 – 256.
9. Wolfer W.G. The dislocation bias. J. Computer-Aided Mater. Des., 2007, v. 14, no. 3, p. 403 – 417.
10. Caturla M.J., Soneda N., Alonso E., Wirth B.D., Diaz de la Rubia T., Perlado J.M. Comparative study of radiation damage accumulation in Cu and Fe. J. Nucl. Mater., 2000, v. 276, no. 1 – 3, p. 13 – 21.
11. Caturla M.J., Soneda N., Diaz de la Rubia T., Fluss M. Kinetic Monte Carlo simulations applied to irradiated materials: The effect of cascade damage in defect nucleation and growth. J. Nucl. Mater., 2006, v. 351, no. 1 – 3, p. 78 – 87.
12. Stoller R.E., Golubov S.I., Domain C., Becquart C.S. Mean field rate theory and object kinetic Monte Carlo: A comparison of kinetic models. J. Nucl. Mater., 2008, v. 382, no. 2 – 3, p. 77 – 90.
13. Hirth J.P., Lothe J. Theory of Dislocations. New York: Wiley, 1982, 857 p.
14. Domain C., Becquart C.S., Malerba L. Simulation of radiation damage in Fe alloys: an object kinetic Monte Carlo approach. J. Nucl. Mater., 2004, v. 335, no. 1, p. 121 – 145.
15. Caturla M.J., Diaz de la Rubia T., Fluss M. Modeling microstructure evolution of f.c.c. metals under irradiation in the presence of He. J. Nucl. Mater., 2003, v. 323, no. 2 – 3, p. 163 – 168.
16. Sivak A.B., Chernov V.M., Romanov V.A., Sivak P.A. Kinetic Monte-Carlo simulation of self-point defect diffusion in dislocation elastic fields in bcc iron and vanadium. J. Nucl. Mater., 2011, v. 417, no. 1 – 3, p. 1067 – 1070.
17. Романов В.А., Сивак А.Б., Чернов В.М. Кристаллографические, энергетические и кинетические свойства собственных точечных дефектов и их кластеров в ОЦК железе. 1. Полуэмпирическая модель ОЦК железа и потенциал межатомного взаимодействия. ВАНТ. Сер. Материаловедение и новые материалы, 2006, т. 66, вып. 1, с. 129 – 150.
18. Романов В.А., Сивак А.Б., Сивак П.А., Чернов В.М. Равновесные и диффузионные характеристики собственных точечных дефектов в ванадии. ВАНТ. Сер. Термоядерный синтез, 2012, т. 35, вып. 2, с. 60 – 80.
19. Indenbom V.L., Chernov V.M. Thermally activated glide of a dislocation in a point defect field. In [2], p. 517 – 570.
20. Teodosiu C. Elastic models of crystal defects. Berlin Heidelberg New York: Springer-Verlag, 1982, 336 p.
21. Leibfried G., Breuer N. Point defects in metals I: introduction to the theory. Berlin Heidelberg New York: Springer-Verlag, 1978, 342 p.
22. Зиновьев В.Е. Теплофизические свойства металлов при высоких температурах. Справочник. М.: Металлургия, 1989, 311 с.
23. Wiedersich W. On the theory of void formation during irradiation. Radiation Effects, 1972, v. 12, no. 1 – 2, p. 111 – 125.
24. Nichols F.A. On the estimation of sink-absorption terms in reaction-rate-theory analysis of radiation damage. J. Nucl. Mater., 1978, v. 75, no. 1, p. 32 – 41.

References

1. Johnson R.A. and Orlov A.N. Physics of radiation effects in crystals. Amsterdam: Elsevier, 1986, 723 p.
2. Indenbom V.L. and Lothe J. Elastic strain fields and dislocation mobility. Amsterdam: Elsevier, 1992, 778 p.
3. Slezov V.V., Subbotin A.V., Osmayev O.A. Evolyutsiya mikrostruktury v obluchayemykh materialakh [Evolution of microstructure in irradiated materials]. *Fizika tverdogo tela — Physics of the solid state*, 2005, vol. 47, iss. 3, pp. 463 – 468.
4. Voevodin V.N., Neklyudov I.M. *Evolyutsiya strukturno-fazovogo sostoyaniya i radiatsionnaya stoykost konstruktivnykh materialov* [Evolution of structure and phase state and radiation stability of structural materials]. Kiev: Naukova dumka Publ., 2006, 376 p.
5. Kröner E. Allgemeine kontinuumstheorie der versetzungen und eigenspannungen. Arch. Rational Mech. Anal, 1959/60, vol. 4, no. 1, pp. 273 – 334.
6. Sivak A.B., Chernov V.M., Dubasova N.A., Romanov V.A. Anisotropy migration of self-point defects in dislocation stress fields in BCC Fe and FCC Cu. J. Nucl. Mater, 2007, vol. 367 – 370, pp. 316 – 321.
7. Sivak A.B., Chernov V.M., Romanov V.A. Diffusion of self-point defects in body-centered cubic iron crystal containing dislocations. Crystallogr. Rep., 2010, vol. 55, no. 1, pp. 97 – 108.
8. Brailsford A.D., Bullough R., Hayns M.R. Point defect sink strengths and void-swelling. J. Nucl. Mater., 1976, vol. 60, no. 3, pp. 246 – 256.

9. Wolfer W.G. The dislocation bias. *J. Computer-Aided Mater. Des.*, 2007, vol. 14, no. 3, pp. 403 – 417.
10. Caturla M.J., Soneda N., Alonso E., Wirth B.D., Diaz de la Rubia T., Perlado J.M. Comparative study of radiation damage accumulation in Cu and Fe. *J. Nucl. Mater.*, 2000, vol. 276, no. 1 – 3, pp. 13 – 21.
11. Caturla M.J., Soneda N., Diaz de la Rubia T., Fluss M. Kinetic Monte Carlo simulations applied to irradiated materials: The effect of cascade damage in defect nucleation and growth. *J. Nucl. Mater.*, 2006, vol. 351, no. 1 – 3, pp. 78 – 87.
12. Stoller R.E., Golubov S.I., Domain C., Becquart C.S. Mean field rate theory and object kinetic Monte Carlo: A comparison of kinetic models. *J. Nucl. Mater.*, 2008, vol. 382, no. 2 – 3, pp. 77 – 90.
13. Hirth J.P., Lothe J. *Theory of Dislocations*. New York: Wiley, 1982, 857 p.
14. Domain C., Becquart C.S., Malerba L. Simulation of radiation damage in Fe alloys: an object kinetic Monte Carlo approach. *J. Nucl. Mater.*, 2004, vol. 335, no. 1, pp. 121 – 145.
15. Caturla M.J., Diaz de la Rubia T., Fluss M. Modeling microstructure evolution of f.c.c. metals under irradiation in the presence of He. *J. Nucl. Mater.*, 2003, vol. 323, no. 2 – 3, pp. 163 – 168.
16. Sivak A.B., Chernov V.M., Romanov V.A., Sivak P.A. Kinetic Monte-Carlo simulation of self-point defect diffusion in dislocation elastic fields in bcc iron and vanadium. *J. Nucl. Mater.*, 2011, vol. 417, no. 1 – 3, pp. 1067 – 1070.
17. Romanov V.A., Sivak A.B., Chernov V.M. Kristallograficheskiye, energeticheskiye i kineticheskiye svoystva sobstvennykh tochechnykh defektov i ikh klasterov v OTsK zheleze. 1. Poluempiricheskaya model OTsK zheleza i potentsial mezhatomnogo vzaimodeystviya. [Crystallographic, energetic and kinetic properties of self-point defects and their clusters in BCC iron. 1. Semiempirical model of BCC iron and potential of interatomic interaction]. *Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Materialovedeniye i novye materialy — Problems of atomic science and technology. Ser. Material science and new materials*, 2006, vol. 66, iss. 1, pp. 129 – 150.
18. Romanov V.A., Sivak A.B., Sivak P.A., Chernov V.M. Ravnovesnye i diffuzionnye kharakteristiki sobstvennykh tochechnykh defektov v vanadii [Equilibrium and diffusion characteristics of self-point defects in vanadium]. *Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Termoyadernyy sintez — Problems of atomic science and technology. Ser. Theronuclear fusion*, 2012, vol. 35, iss. 2, pp. 60 – 80.
19. Indenbom V.L., Chernov V.M. Thermally activated glide of a dislocation in a point defect field. In [2], p. 517 – 570.
20. Teodosiu C. *Elastic models of crystal defects*. Berlin Heidelberg New York: Springer-Verlag, 1982, 336 p.
21. Leibfried G., Breuer N. *Point defects in metals I: introduction to the theory*. Berlin Heidelberg New York: Springer-Verlag, 1978, 342 p.
22. Zinoviyev V.E. *Teplofizicheskiye svoystva metallov pri vysokikh temperaturakh* [Heat-physical properties of metals under high temperatures]. Moscow, Metallurgiya Publ., 1989, 311 p.
23. Wiedersich W. On the theory of void formation during irradiation. *Radiation Effects*, 1972, vol. 12, no. 1 – 2, pp. 111 – 125.
24. Nichols F.A. On the estimation of sink-absorption terms in reaction-rate-theory analysis of radiation damage. *J. Nucl. Mater.*, 1978, vol. 75, no. 1, pp. 32 – 41.

Статья поступила в редакцию 2.06.2014 г.

Сивак Александр Борисович — НИЦ “Курчатовский институт” (г. Москва), Томский государственный университет (г. Томск), кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник. Специалист в области радиационного материаловедения, теории и моделирования дефектов кристаллов. E-mail: sivak_ab@nrcki.ru.

Сивак Полина Александровна — НИЦ “Курчатовский институт” (г. Москва), инженер. Специалист в области математического моделирования дефектов кристаллов и физических процессов. E-mail: sivak_pa@nrcki.ru.

Романов Владимир Александрович — ФГУП “ГНЦ РФ – ФЭИ” (г. Обнинск), Томский государственный университет (г. Томск), кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник. Специалист в области физического радиационного материаловедения, теории и моделирования дефектов кристаллов. E-mail: romanov-ipp@mail.ru.

Чернов Вячеслав Михайлович — ОАО “ВНИИИМ” (г. Москва), Томский государственный университет (г. Томск), доктор физико-математических наук, профессор, главный научный сотрудник. Специалист в области физического радиационного материаловедения. E-mail: chernovv@bochvar.ru.

Dislocation sinks efficiencies for self-point defects in iron and vanadium crystals

A. B. Sivak, P. A. Sivak, V. A. Romanov, V. M. Chernov

The effect of dislocations stress fields on their sinks efficiencies for self-point defects (interstitial atoms, vacancies) has been studied in temperature range 293 – 1000 K and dislocation density range $1 \cdot 10^{12} - 3 \cdot 10^{14} \text{ m}^{-2}$ in BCC iron and vanadium crystals. Straight full screw and edge dislocations in slip systems $\langle 111 \rangle \{110\}$, $\langle 111 \rangle \{112\}$, $\langle 100 \rangle \{100\}$, $\langle 100 \rangle \{110\}$ have been considered. Diffusion of defects has been simulated by object kinetic Monte Carlo method. Interaction energies of defects with dislocations have been calculated within the anisotropic linear theory of elasticity. Analytical expressions have been proposed for dislocation sinks efficiencies depending on temperature and dislocation density.

Keywords: iron, vanadium, vacancies, self-interstitial atoms, diffusion, dislocation sinks efficiencies, object kinetic Monte Carlo

***Sivak Alexander** — National research center (NRC) “Kurchatov institute”, Moscow and Tomsk State University, PhD, senior researcher. E-mail: sivak_ab@nrcki.ru.*

***Sivak Polina** — NRC “Kurchatov institute”, Moscow, engineer. E-mail: sivak_pa@nrcki.ru.*

***Romanov Vladimir** — State scientific center of the Russian Federation – Leypunsky Institute for physics and power engineering, Obninsk, Russia and Tomsk State University, PhD, senior researcher. E-mail: romanov-ippe@mail.ru.*

***Chernov Viacheslav** — Bochvar national research institute for inorganic materials, Moscow and Tomsk State university, DrSci (Phys-Math), professor, principal researcher. E-mail: chernovv@bochvar.ru*