Письма в ЖЭТФ, том 115, вып. 5, с. 308 – 314

Упругие диполи в кристаллических и стеклообразных алюминии и высокоэнтропийном сплаве $Fe_{20}Ni_{20}Cr_{20}Co_{20}Cu_{20}$

Р. А. Кончаков[+1)], А. С. Макаров[+], А. С. Аронин[+], Н. П. Кобелев[*], В. А. Хоник[+]*

[+]*Воронежский государственный педагогический университет, 394043 Воронеж, Россия*

[*]*Институт физики твердого тела РАН, 142432 Черноголовка, Россия*

Поступила в редакцию 12 января 2022 г.
После переработки 26 января 2022 г.
Принята к публикации 26 января 2022 г.

Посредством молекулярно-динамического моделирования показано, что в некристаллических структурах Al и FeNiCrCoCu имеются анизотропные локальные атомные конфигурации, представляющие по существу упругие диполи. Аргументируется утверждение о том, что эти упругие диполи, схожие по своим колебательным характеристикам с межузельными гантелями в соответствующих кристаллах, формируют дефектную подсистему стеклообразного состояния. На этой основе предложен новый подход к решению задачи идентификации дефектов в модельных некристаллических структурах.

DOI: 10.31857/S123456782205007X

Введение. Проблема описания структуры стекол является, пожалуй, одной из наиболее интригующих в физике конденсированного состояния. Часто реализуемый подход заключается в выделении двух подсистем – аморфной матрицы и дефектов. Неоднозначное и порой противоречивое место такого подхода состоит в конкретной геометрической идентификации структурных дефектов в стекле. В литературе можно найти не один десяток различных представлений разной степени эффективности о том, что считать структурными дефектами стекол (см., например, ссылки в работах [1, 2]). Можно утверждать, что проблема идентификации дефектов некристаллического состояния до сих пор не имеет общепринятого решения.

Перспективный, на наш взгляд, подход к решению этой проблемы может дать межузельная теория (МТ) [3, 4], в основе которой лежат специфические представления о микроскопическом механизме плавления. Согласно МТ, вблизи температуры плавления начинается лавинообразный рост концентрации межузельных дефектов в гантельной конфигурации – межузельных гантелей [3, 4, 5]. При этом энергетически выгодным оказываться процесс кластеризации межузельных гантелей [6]. Кластеры межузельных гантелей сохраняют, в определенном смысле, свою идентичность как в жидком состоянии в виде групп атомов, осуществляющих струноподобное движение [7], так и в твердом стеклообразном состоянии, получаемом закалкой расплава.

Межузельные гантели и их кластеры являются частным случаем упругих диполей, которые в кристаллическом состоянии определяются как локальные нарушения точечной симметрии [8]. Понижение локальной точечной симметрии приводит к частичному снятию вырождения фононных состояний, что проявляется в виде характерных низкочастотных (около 2 ТГц) и высокочастотных (выше дебаевской частоты) пиков в локальном спектре колебательной плотности состояний атомов, формирующих ядро межузельной гантели [9]. Низкочастотные особенности колебательных спектров как кристаллов, так и стекол имеют важнейшее значение для описания релаксационных процессов, связанных с дефектами типа упругих диполей [10].

Попытки использования представлений об упругих диполях ранее предпринимались, например, для объяснения флуктуаций плотности [11] и некоторых низкотемпературных свойств стекол [12]. Однако потенциал таких представлений удалось раскрыть относительно недавно в рамках МТ, объяснив, в частности, взаимосвязь изменений модуля сдвига металлических стекол с тепловыделением при их структурной релаксации и кристаллизации [13, 14, 4]. При этом конкретная процедура определения упругих диполей в компьютерных моделях некристаллической структуры оставалась неясной. Цель настоящей работы состоит в разработке способа идентификации упругих диполей в стеклообразном состоянии

[1)]e-mail: konchakov.roman@gmail.com

и, на этой основе, выделении дефектной подсистемы стекла.

Методика моделирования. Универсальной характеристикой дефектов любого типа, в том числе упругих диполей, является дипольный тензор P_{ij}, который в общем случае определяется как производная тензора механических напряжений σ_{ij} по числу n дефектов в единице объема при постоянной деформации ε [15, 16, 17],

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

Величина $\partial\sigma_{ij}$ характеризует изменение напряжений, вызванное дефектами.

В случае компьютерной модели кристалла дипольные тензоры как отдельных дефектов, так и их кластеров, можно вычислять по приближенной формуле

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

где N – число атомов в идеальной кристаллической решетке, $n^{\rm def}$ – число дефектов, V_0 – объем модельной системы. В этой формуле σ_{ij}^N (тензор напряжений в бездефектном кристалле) играет роль референсного тензора напряжений.

Для стеклообразной системы ситуация значительно усложняется, так как не существует корректного определения "идеального" (бездефектного) состояния стекла. Мы предлагаем каждому m-му атому модельной системы сопоставить дипольный тензор

$$P_{ij}^{m} = V_0(\sigma_{ij}^{Ng} - \sigma_{ij}^{m}), \quad (3)$$

где σ_{ij}^{Ng} – тензор напряжений в исходной стеклообразной системе, а σ_{ij}^{m} – тензор напряжений после удаления из системы m-го атома [18]. Перед вычислением тензора σ_{ij}^{Ng} осуществляется оптимизация структуры с изменением объема модельной системы. После удаления из системы m-го атома выполняется оптимизация структуры без изменения объема (сохраняя $\varepsilon = \rm const$, согласно формуле (1)) и вычисляется тензор σ_{ij}^{m}. Таким образом, в качестве референсного состояния используется само исходное стеклообразное состояние.

Безразмерной характеристикой симметрии деформационного поля упругого диполя является λ-тензор [8],

$$\lambda_{ij} = \frac{1}{\Omega} S_{ijkl} P_{kl}, \quad (4)$$

где Ω – объем в расчете на атом, S_{ijkl} – тензор упругой податливости.

Рассчитанные нами тензоры P_{ij} и λ_{ij} для дальнейшего анализа приводились к диагональному виду и представлялись в виде суммы шаровой и девиаторной компонент,

$$\lambda_{ij} = \frac{1}{3}\delta_{ij}\lambda_{ll} + \left(\lambda_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}\lambda_{ll}\right), \quad (5)$$

где δ_{ij} – символ Кронекера.

Модельные расчеты выполнялись в пакете LAMMPS [19]. Размер модельной системы для Al и $Fe_{20}Ni_{20}Cr_{20}Co_{20}Cu_{20}$ (ат. %) составлял 4000 атомов, т.е. $10 \times 10 \times 10$ трансляций ГЦК решетки. Системы достаточно маленькие, но в первом приближении можно пренебречь взаимодействием дефектов со своими "зеркальными отражениями", возникающими вследствие использования периодических граничных условий, так как поля упругих напряжений дефектов хоть и являются дальнодействующими, но по абсолютной величине достаточно быстро убывают обратно пропорциональной третьей степени расстояния от ядра дефекта.

Многочастичные межатомные потенциалы типа *eam* для Al и FeNiCrCoCu были взяты из работ [21, 22] соответственно. Межатомный потенциал для алюминия ранее нами уже был использован в работах [2, 5], он удовлетворительно описывает характеристики точечных дефектов, упругие модули и особенности спектра колебательной плотности состояний. С потенциалом для FeNiCrCoCu ситуация чуть сложнее. Нам известно, что получаемые с помощью него результаты скорее качественные, чем количественные. Тем не менее, мы полагаем, что для грубой иллюстрации предлагаемого нами метода идентификации дефектов его вполне можно использовать.

Визуализация модельной системы выполнялась в программе OVITO [20]. Колебательная плотность состояний (VDoS) $g(\nu)$ вычислялась как квадрат модуля преобразования Фурье автокорреляционной функции скорости. При этом для каждой кофигурации модельной системы проводилось усреднение 100 колебательных спектров VDoS. Для расчета колебательных спектров система предварительно уравновешивалась при $T = 30\,\rm K$ и нулевом внешнем давлении.

Мы исследовали простейшие варианты упругих диполей в кристалле – межузельные гантели и их небольшие кластеры. Межузельные гантели вносились в систему при нулевой температуре. При расчете дипольных тензоров выполнялась релаксация системы методом сопряженных градиентов. Объем в расчете на атом вычислялся путем разбиения системы на многогранники Вороного.

Стеклообразное состояние модели получалось путем закалки расплава от 3000 K до близкой к нулю температуре со скоростью охлаждения $5 \cdot 10^{13}\,\rm K/c$.

Выбор такой высокой скорости охлаждения обусловлен тем, что сплавы системы FeNiCrCoCu и чистые металлы плохо стеклуются при более низких скоростях закалки.

Результаты моделирования и обсуждение. В первую очередь мы оценили адекватность использования формулы (3) при оценке дипольного тензора упругого диполя. Косвенным обоснованием предложенного метода может служить следующее. Частным случаем упругого диполя является межузельный дефект в гантельной конфигурации – межузельная гантель. Было установлено, что если формулу (3) применить к кристаллу с межузельной гантелью, то значения P_{ij}^m совпадают с P_{ij}, вычисленными по формуле (2).

На рисунке 1 показан фрагмент модельной системы вблизи межузельной гантели ориентации [001] в монокристаллическом алюминии. Стрелками показаны направления главных осей дипольных тензоров P_{ij}^m, вычисленных по формуле (3). Длины стрелок нормированы на значения максимальных компонент соответствующих дипольных тензоров P_{ij}^m, приведенных к диагональному виду, а направления совпадают с осями, соответствующими максимальным компонентам. В случае высокоэнтропийного сплава FeNiCrCoCu ось дипольного тензора, в отличие от алюминия, не параллельна оси межузельной гантели, а для каждого узла решетки зависит от комбинации сортов атомов ближайшего окружения.

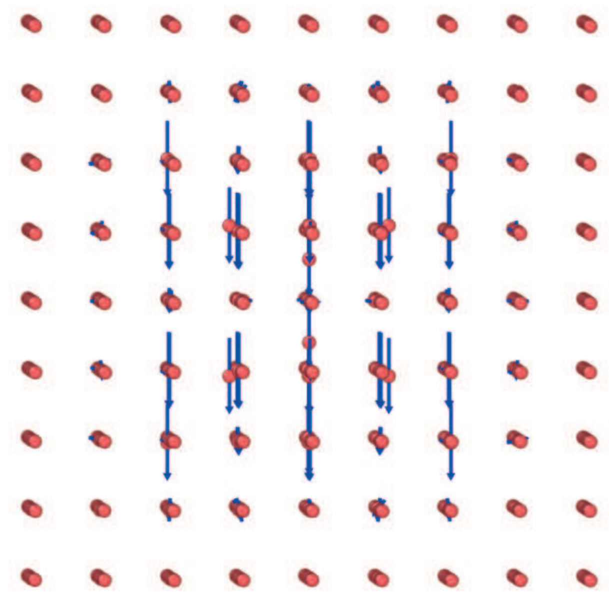

Рис. 1. (Цветной онлайн) Фрагмент монокристалла Al вблизи межузельной гантели ориентации [001]. Стрелками показаны направления главных осей дипольных тензоров P_{ij}^m, вычисленных по формуле (3). Длины стрелок нормированы на значения максимальных компонент дипольных тензоров P_{ij}^m, приведенных к диагональному виду

Из рисунка 1 видно, что для ядра дефекта (пара атомов, формирующих собственно гантель) и для атомов из первой и второй координационных сфер величина и направление осей дипольных тензоров практически совпадают. На микроскопическом уровне это означает, что независимо от того, удаляется ли атом из ядра дефекта или из его ближайшего окружения, система все равно в результате оптимизации структуры принимает конфигурацию идеальной решетки.

Как отмечено выше, значения компонент дипольных тензоров межузельных гантелей, вычисленные по формулам (2) и (3), одинаковы. Для алюминия значения $P_{11} = P_{22} = 14.2$ эВ, $P_{33} = 14.9$ эВ согласуются с более ранними оценками для меди и алюминия [15, 23, 18]. Для сплава FeNiCrCoCu, где усреднение дипольного тензора проводилось по всем узлам модельной решетки, $P_{11} = P_{22} = 19.9$ эВ, $P_{33} = 20.2$ эВ. Какие-либо соответствующие литературные значения для этого или похожего по составу сплава нам неизвестны. В случае вакансий $P_{ii} = -4.6$ эВ для FeNiCrCoCu и $P_{ii} = -4.0$ эВ для алюминия.

Преимуществом формулы (3) по сравнению с формулой (2) является то, что можно сопоставить дипольный тензор не только дефекту, как целому, а любому атому модельной системы, в том числе из ядра дефекта или его ближайшего окружения. Это может дать дополнительную полезную информацию о свойствах дефектов. Например, можно оценить размер дефекта, как будет показано ниже.

Еще одним косвенным способом проверки адекватности формулы (3) может служить реакция системы на возвращение обратно удаленного из нее атома. Соответствующая процедура состоит в следующем. Выполняется релаксация системы с изменением объема, запоминается радиус-вектор m-го атома $\mathbf{r}_1^m$, атом удаляется из системы, выполняется релаксация структуры без изменения объема, атом возвращается в исходную точку $\mathbf{r}_1^m$, снова выполняется релаксация структуры (уже без изменения объема), запоминается конечное положение возвращенного атома $\mathbf{r}_2^m$ и вычисляется величина смещения $\triangle r^m = |\mathbf{r}_2^m - \mathbf{r}_1^m|$.

На рисунке 2 показаны гистограммы распределения величин $\triangle r^m$ в кристаллических Al и FeNiCrCoCu с одним межузельным атомом ориентации [001] в структуре. Видно, что лишь несколько десятков атомов заметно смещаются при вышеописанной процедуре возврата. Это атомы, формирующие ближайшее окружение межузельной гантели. Число таких атомов составляет 32 для Al и ≈ 39 для FeNiCrCoCu (может варьироваться в зависимости от комбинации сортов атомов ближайшего окружения). Эти несколько десятков атомов можно считать грубой оценкой размера межузельной гантели в кристалле.

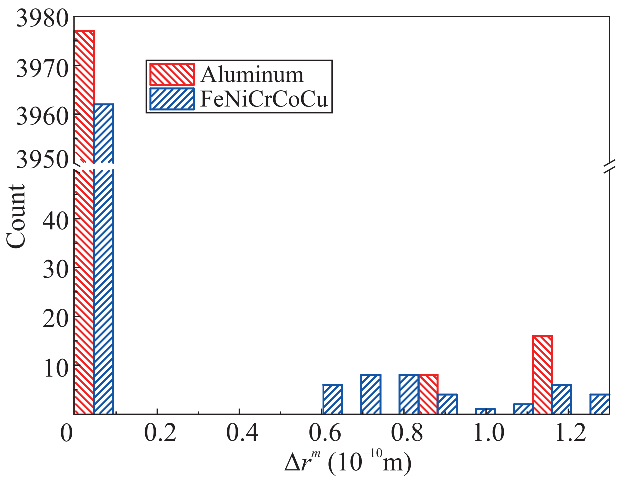

Рис. 2. (Цветной онлайн) Гистограммы распределений $\triangle r^m$ в кристаллах Al и FeNiCrCoCu

Как было упомянуто выше, кластеризация дефектов является энергетически выгодным процессом. При этом есть основания предполагать, что кластеризация упругих диполей типа межузельных гантелей может играть важную роль в механизме формирования структурных элементов жидкого и стеклообразного состояния [2]. На рисунке 3 показана зависимость максимальных девиаторных компонент дипольного тензора и λ-тензора от числа $n^{\rm def}$ межузельных дефектов в кластере. Анализ девиаторных компонент дипольных тензоров представляет особый интерес, потому что, как известно, упругие диполи эффективно взаимодействуют именно с полем сдвиговых напряжений.

Как видно из рис. 3, наибольшие значения P_{ij} и λ_{ij} имеют место для кластеров из 2-х или 3-х межузельных гантелей, что вполне объснимо с точки зрения изменения локальной точечной симметрии. Действительно, идеальная ГЦК решетка имеет точечную группу симметрии O_h. Формирование дефектов типа упругих диполей приводит к снижению локальной точечной симметрии. В частности, одиночная межузельная гантель в наиболее устойчивой ориентации [001] имеет точечную группу симметрии D_{4h}. Снижение локальной симметрии, как уже упоминалось ранее, проявляется в виде выраженных низкочастотных и высокочастотных пиков в локальном спектре колебательной плотности состояний атомов, формирущих ядро упругого диполя типа межузельной гантели [9].

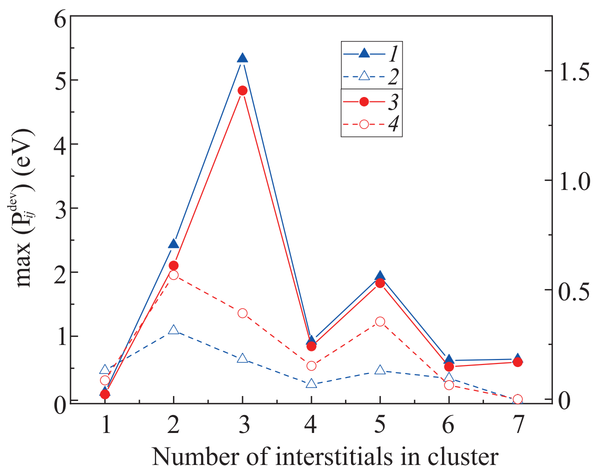

Рис. 3. (Цветной онлайн) Максимальные девиаторные компоненты дипольных тензоров межузельных кластеров в кристаллах FeNiCrCoCu (*1*) и Al (*2*), а также λ-тензоров в кристаллах FeNiCrCoCu (*3*) и Al (*4*)

Кластеризация межузельных гантелей приводит к кардинальному снижению локальной точечной симметрии. Так, кластер из двух межузельных гантелей имеет группу симметрии C_s. В случае трех межузельных гантелей их наиболее устойчивая конфигурация имеет примитивную группу симметрии C_1, содержащую только элемент идентичности. Дальнейшая кластеризация гантелей приводит к повышению локальной симметрии кластера и для 7-ми межузельных дефектов их наиболее устойчивая конфигурация представляет собой идеальный икосаэдр [2]. В последнем случае соответствующая атомная конфигурация имеет изотропный дипольный тензор, т.е. его девиаторная компонента, согласно рис. 3, близка к нулю.

Данные, показанные на рис. 3, согласуются с нашим предыдущим анализом колебательных спектров и диаэластической поляризуемости межузельных кластеров в алюминии [2], по результатам которого была высказана гипотеза о межузельном механизме формирования дефектов и аморфной матрицы стеклообразного состояния. В частности, было показано, что дефекты в стеклообразном алюминии могут формироваться на основе малых кластеров из 2–3 межузельных гантелей.

На рисунке 4 показаны распределения максимальных девиаторных и сферических компонент тензоров P_{ij}^m, рассчитанных по формуле (3) для каждого атома модельного стекла FeNiCrCoCu. Из их сравнения видно, что распределение сферических компонент близко к нормальному, тогда как для девиаторных компонент имеется выраженный "хвост" в области больших значений и распределение близко к логнормальному. Для стеклообразного алюминия наблюдается аналогичная закономерность. Мы полагаем, что именно атомы с большими девиаторными компонентами дипольных тензоров и формируют дефектную подсистему стекла.

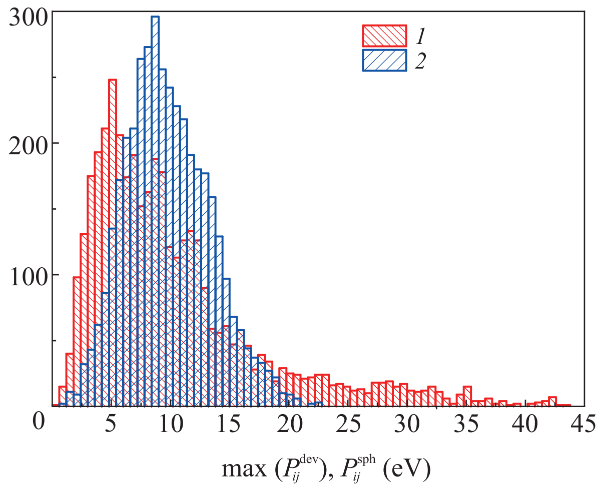

Рис. 4. (Цветной онлайн) Распределение максимальных девиаторных (*1* – $\max(P_{ij}^{\mathrm{dev}})$) и сферических (*2* – P_{ij}^{sph}) компонент дипольных тензоров P_{ij}^{m} в стекле FeNiCrCoCu

Справедливость такого вывода можно оценить путем анализа спектров VDoS. На рисунке 5 приведены спектры колебательной плотности состояний $g(\nu)$ стекол Al и FeNiCrCoCu, как для всей системы (зеленые символы), так и для отдельных ее частей с наибольшими значениями девиаторных компонент дипольных тензоров P_{ij}^{m} (красные символы). Красные кривые, соответствующие атомам с большими значениями девиаторных компонент P_{ij}^{m}, имеют выраженные пики в области низких частот. Это может служить подверждением нашей гипотезы о принадлежности атомов с большими значениями девиаторных компонент дипольных тензоров к дефектной подсистеме стекла, так как низкочастотные особенности колебательного спектра являются характерным свойством упругих диполей [9].

Для того, чтобы определить, относится ли данный атом к дефектной подсистеме, выполнялось сравнение максимальных девиаторных компонент дипольных тензоров P_{ij}^{m} с определенным граничным значением. Мы предположили, что в качестве граничного можно использовать значение, совпадающее

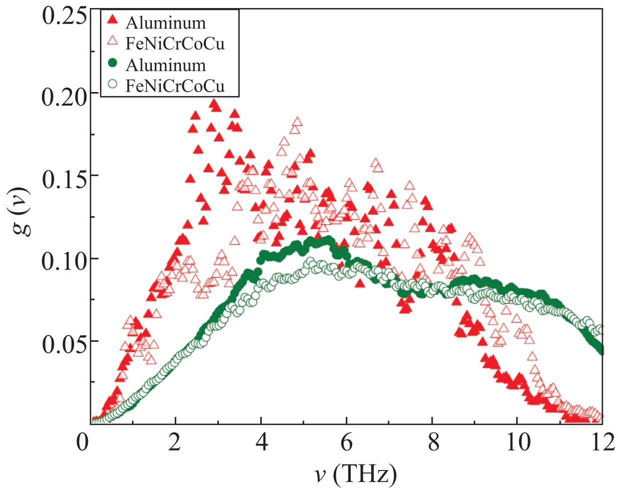

Рис. 5. (Цветной онлайн) Спектры колебательной плотности состояний для стеклообразных Al и FeNiCrCoCu. Кругами показаны колебательные спектры для всей модельной системы, треугольниками – для ее дефектной подсистемы

с окончанием распределения сферических компонент (см. рис. 4). Это значение примерно в 2.5 раза превышает среднее значение девиаторной компоненты. Оказалось, что в этом случае для FeNiCrCoCu оценка концентрации дефектов в стекле, полученная из анализа дипольных тензоров, практически совпадает с оценкой концентрации дефектов по формуле Гранато [3]

$$c = \ln(G^{\mathrm{cryst}}/G^{\mathrm{glass}})/\beta, \tag{6}$$

где β – сдвиговая восприимчивость упругих диполей типа межузельных гантелей, G^{cryst} и G^{glass} – модули сдвига кристалла и стекла, соответственно, определенные в работе [24]. То же самое справедливо и для алюминия.

На рисунке 6 показана реакция подсистемы дефектов в стекле FeNiCrCoCu на сдвиговую деформацию модельной системы. В качестве дефектной подсистемы были выбраны атомы, у которых девиаторная компонента в 2.5 раза превышает ее среднее значение. Стрелками показаны проекции направлений осей дипольных тензоров упругих диполей на плоскость рисунка. Как и выше, под осью диполя понимается главная ось с максимальной амплитудой. Длины стрелок пропорциональны максимальным компонентам соответствующих дипольных тензоров. Для удобства восприятия атомы разных сортов показаны одним цветом. Для стеклообразного алюминия качественно наблюдается аналогичная картина.

Как видно из рис. 6, при наложении сдвиговой деформации (в плоскости рисунка), а также при изме-

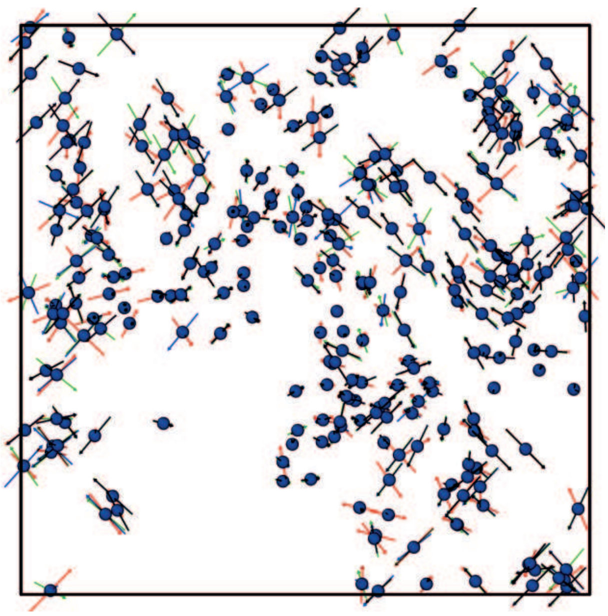

Рис. 6. (Цветной онлайн) Реакция упругих диполей дефектной подсистемы стеклообразного FeNiCrCoCu на сдвиговую деформацию в плоскости рисунка. Синие стрелки – ориентация осей упругих диполей при отсутствии деформации. Красные и зеленые стрелки соответствуют деформациям $\varepsilon = +10^{-3}$ и $\varepsilon = -10^{-3}$ соответственно

нении ее знака, оси дипольных тензоров большинства атомов дефектной подсистемы заметно меняют направление. Такая реакция дефектной подсистемы свидетельствует о том, что ее можно рассматривать как распределенную сеть упругих диполей, эффективно взаимодействующих с приложенным сдвиговым напряжением. Следует отметить, что нами не обнаружена какая-либо корреляция между распределением упругих диполей в стекле и распределениями областей пониженной или повышенной плотности.

Исходя из вышеизложенного, можно предложить следующий относительно простой способ выделения в модельной аморфной системе тех групп атомов, которые являются частью дефектной подсистемы. По формуле (3) каждому атому системы ставится в соответствие тензор P_{ij}^{m}, для которого выделяется девиаторная компонента. Строится распределение максимальных девиаторных компонент дипольных тензоров и выделяются атомы, формирующие "хвост" распределения, в котором значения девиаторных компонент в некоторое число раз и более превышают их среднее значение (процедура оценки этого числа проиллюстрирована выше). Концентрация таких атомов для рассмотренных примеров стеклообразных Al и FeNiCrCoCu оказывается равной нескольким процентам, как и предсказывает межузельная теория [3].

Заключение. Методами молекулярной динамики и статики вычислены дипольные тензоры межузельных дефектов и их кластеров в кристаллах Al и FeNiCrCoCu. Наибольшие значения девиаторных компонент дипольных тензоров наблюдаются в случае кластеров из 2–3 межузельных гантелей.

Для стекол Al и FeNiCrCoCu установлена корреляция больших значений девиаторных компонент дипольных тензоров атомов с низкочастотными особенностями спектров их локальной колебательной плотности состояний. Это может свидетельствовать о принадлежности указанных атомов к дефектной подсистеме стекол. Какая-либо корреляция девиаторных компонент дипольных тензоров упругих диполей с локальной плотностью структуры не обнаружена.

Предложен новый подход к проблеме выделения дефектной подсистемы в модельных стеклах, основанный на вычислении компонент дипольных тензоров атомов. Показано, что выделенная предложенным методом дефектная подсистема представляет собой разветвленную сеть упругих диполей.

Работа поддержана грантом Российского научного фонда 20-62-46003.

1. H. Fan, Z. Fan, X. Liu, Z. Lu, and E. Ma, Mater. Horiz. **8**, 2359 (2021).
2. 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).
3. A. V. Granato, Phys. Rev. Lett. **68**, 974 (1992).
4. V. Khonik and N. Kobelev, Metals **9**, 605 (2019).
5. Р. А. Кончаков, А. С. Макаров, А. С. Аронин, Н. П. Кобелев, В. А. Хоник, Письма в ЖЭТФ **113**, 341 (2021).
6. W. Ingle, R. C. Perrin, and H. R. Schober, J. Phys. F: Met. Phys. **11**, 1161 (1981).
7. C. Donati, J. F. Douglas, W. Kob, S. J. Plimpton, P. H. Poole, and S. C. Glotzer, Phys. Rev. Lett **80**, 2338 (1998).
8. A. S. Nowick and B. S. Berry, *Anelastic Relaxation* in *Crystalline Solids*, Academic, N.Y. (1972).
9. P. H Dederichs, C. Lehman, H. R. Schober, A. Scholz, and R. Zeller, J. Nucl. Mater. **69–70**, 176 (1978).
10. A. Makarov, G. Afonin, K. Zakharov, A. Vasiliev, J. Qiao, N. Kobelev, and V. Khonik, Intermetallics **141**, 107422 (2022).
11. J. Jäckle and K.-L. Jüngst, Z. Phys. B **30**, 243 (1978).
12. E. R. Grannan, M. Randeria, and J. P. Sethna, Phys. Rev. B **41**, 7784 (1990).

13. N. P. Kobelev, V. A. Khonik, A. S. Makarov, G. V. Afonin, and Yu. P. Mitrofanov, J. Appl. Phys. **115**, 033513 (2014).
14. N. P. Kobelev, V. A. Khonik, G. V. Afonin, and E. L. Kolyvanov, J. Non-Cryst. Solids **411**, 1 (2015).
15. V. Spiric, L. E. Rehn, K.-H. Robrock, and W. Schilling, Phys. Rev. B **15**, 672 (1977).
16. D. A. Freedman, D. Roundy, and T. A. Arias, Phys. Rev. B **80**, 064108 (2009).
17. J. S. Wrobel, M. R. Zemła, D. Nguyen-Manh, P. Olsson, L. Messina, C. Domain, T. Wejrzanowski, and S. L. Dudarev, Comput. Mater. Sci. **194**, 110435 (2021).
18. Р. А. Кончаков, В. А. Хоник, Н. П. Кобелев, ФТТ **57**, 844 (2015).
19. J. Plimpton, J. Comp. Phys. **117**, 1 (1995).
20. A. Stukowski, Model. Simul. Mater. Sci. Eng. **18**, 015012 (2010).
21. Y. Mishin, D. Farkas, M. J. Mehl, and D. A. Papaconstantopoulos, Phys. Rev. B **59**, 3393 (1999).
22. D. Farkas and A. Caro, J. Mater. Res. **33**, 3218 (2018).
23. W. Schilling, J. Nucl. Mater. **69–70**, 465 (1978).
24. М. А. Кретова, Р. А. Кончаков, Н. П. Кобелев, В. А. Хоник, Письма в ЖЭТФ **111**, 806 (2020).