

# Соотношение между сдвиговой и дилатационной упругой энергией межузельных дефектов в металлических кристаллах

Р. А. Кончаков<sup>+1</sup>, А. С. Макаров<sup>+</sup>, Г. В. Афонин<sup>+</sup>, М. А. Кротова<sup>+</sup>, Н. П. Кобелев\*, В. А. Хоник<sup>+</sup>

<sup>+</sup> Воронежский государственный педагогический университет, 394043 Воронеж, Россия

\* Институт физики твердого тела РАН, 142432 Черноголовка, Россия

Поступила в редакцию 4 февраля 2019 г.

После переработки 4 февраля 2019 г.

Принята к публикации 20 февраля 2019 г.

Проведено молекулярно-статическое моделирование межузельных дефектов для четырех металлов с гранецентрированной кубической решеткой. Рассчитаны объемы полиэдров Вороного для атомов, образующих дефекты, и их ближайшего окружения. На этой основе показано, что отношение дилатационного вклада в упругую энергию к сдвиговому для наиболее устойчивых расщепленных межузлий не превышает 0.12–0.13. Аргументируется справедливость такого же вывода для дефектов типа межузельных гантелей в металлических стеклах.

DOI: 10.1134/S0370274X19070075

**1. Введение.** Как известно, собственные точечные дефекты металлических кристаллов – вакансии и межузельные атомы – оказывают значительное влияние на их свойства. Основные свойства вакансий известны довольно хорошо. Ситуация с межузельными атомами более сложна: относительно малоизвестный факт состоит в том, что они образуют в решетке так называемые гантели (или “расщепленные межузлия”), когда два атома стремятся занять один и тот же узел кристаллической решетки [1]. При этом межузельные атомы в октаэдрической конфигурации (т.е. в центре элементарной ячейки гранецентрированной кубической решетки (ГЦК)) имеют более высокую энтальпию формирования и их концентрация поэтому пренебрежимо мала в сравнении с концентрацией межузельных гантелей. Вакансии являются центро-симметричными дефектами, а межузельные гантели обладают ярко выраженной анизотропной структурой. Соответственно, вакансии не взаимодействуют с внешним полем сдвиговых напряжений, а межузельные гантели относятся к категории так называемых упругих диполей, эффективно взаимодействующих с этим полем [2].

В отношении межузельных гантелей распространено мнение о том, что, поскольку их энтальпия формирования в разы больше таковой для вакансий, то их равновесная концентрация должна быть много меньше концентрации вакансий, и это утверждение вошло даже в современные учебники по материало-

ведению [3]. При этом еще в 1970-х гг. было установлено, что расщепленные межузлия имеют низкочастотные колебательные моды [4], с которыми связана высокая колебательная энтропия [5]. Это уменьшает энергию формирования Гиббса и может вызвать сильный рост концентрации вблизи температуры плавления  $T_m$ .

Представляет фундаментальный интерес вопрос о факторах, определяющих энтальпию формирования дефектов. Вакансии и межузельные атомы создают локальные упругие напряжения, и работа по созданию этих упруго-напряженных областей при  $T = 0$  К представляет собой соответствующую энтальпию формирования. Упругая энергия решетки вокруг дефектов может быть разделена на сдвиговую и дилатационную (т.е. связанную с изменением объема при образовании дефекта) составляющие, одна из которых может доминировать. Соответственно, возможны различные подходы к интерпретации механизма формирования дефектов. Так, известная  $cV\Omega$ -модель исходит из того, что энтальпия формирования определяется дилатационной составляющей упругой энергии дефекта, и поэтому зависит от модуля объемной упругости  $V$  [6–8]. Эта модель позволила, в частности, интерпретировать ряд явлений, связанных с образованием, миграцией и рекомбинацией дефектов в кристаллах [9, 10].

С другой стороны, Зинер еще в 1951 г. при анализе диффузии предположил, что изменение энергии Гиббса металла пропорционально модулю сдвига  $G$  [11]. Позднее аналогичный вывод был сделан при ис-

<sup>1</sup>)e-mail: konchakov.roman@gmail.com

следовании термодинамических свойств кристаллов с дефектами [12]. Основываясь на предположении о преобладающей роли сдвигового вклада в упругую энергию кристалла, авторы [11, 12] пришли в итоге к разумным оценкам величин термодинамических характеристик точечных дефектов. Недавний подробный анализ определения энтальпии образования дефектов на основе данных об их концентрации привел к выводу о том, что для корректного ее определения необходимо учитывать температурную зависимость упругих модулей [13]. При этом ответ на вопрос о том, какие именно модули ( $B$  или  $G$ ) определяют энтальпию образования, остался нерешенным.

В 1992 г. Гранато предложил межузельную теорию (МТ) конденсированного состояния [5], представляющую значительный интерес. Основу теории составила идея о том, что термодинамическое равновесие металлических конденсированных фаз связано с межузельными атомами в гантельной конфигурации. Свободную энергию  $f$  в расчете на один межузельный дефект Гранато представил в виде  $f = \alpha_1 G\Omega + \alpha_2 B\Omega$ , где  $\alpha_1$  и  $\alpha_2$  – безразмерные константы,  $G$  и  $B$  – модули сдвига и объемной упругости,  $\Omega$  – объем, приходящийся на один атом. Используя данные для меди, Гранато пришел к выводу о том, что основную часть упругой энергии межузельного атома в кристалле составляет сдвиговая энергия (т.е.  $\alpha_1 \gg \alpha_2$ ) [5]. Это утверждение, по сути, составляет краеугольный камень МТ, поскольку мгновенный модуль сдвига  $G$  является ее главным термодинамическим параметром (являясь второй производной энергии Гиббса по сдвиговой деформации).

Гранато вычислил энергию Гиббса кристалла с межузельными гантелями и показал, что возможны различные равновесные и метастабильные состояния ниже и выше  $T_m$  [5, 14]. Эти состояния были интерпретированы как равновесный и перегретый кристалл, равновесная и переохлажденная жидкость, в зависимости от температуры и концентрации дефектов. Плавление в рамках МТ неразрывным образом связано с генерацией межузельных дефектов. Специально поставленные для проверки этого предположения недавние эксперименты на Al и In дали убедительные свидетельства быстрого роста концентрации межузельных гантелей по мере приближения к  $T_m$  [15, 16]. Компьютерное моделирование показало, что межузельные гантели остаются идентифицируемыми объектами в жидком и твердом некристаллическом состояниях [17–19]. При этом они сохраняют все свойства межузельных гантелей в кристаллах (высокая чувствительность к внешнему сдвиговому напряжению, специфические поля напряжений

и особые низкочастотные колебательные моды, определяющие высокую энтропию дефекта), хотя и не имеют однозначного геометрического образа, как в кристаллах (два атома, стремящиеся занять один и тот же узел кристаллической решетки).

Согласно МТ, свойства замороженных расплавов – металлических стекол – должны контролировать вмороженные дефекты межузельного типа и изменение их концентрации при внешних воздействиях. Этот подход оказался весьма плодотворным и дал возможность интерпретировать целый спектр релаксационных явлений в металлических стеклах (см. обзор [20]). В частности, МТ дает удивительно точное описание кинетики тепловыделения и теплопоглощения при структурной релаксации и кристаллизации металлических стекол [21]. При этом подходе с энергетической точки зрения металлический кристалл является основным состоянием стекла, а его избыточная энтальпия определяется упругой энергией системы дефектов межузельного типа.

Изложенное определяет актуальность апробации исходных гипотез МТ. В частности, следует проверить, действительно ли сдвиговая компонента энергии межузельной гантели является доминирующей. Этот вопрос имеет и самостоятельное значение для физики дефектов, поскольку какие-либо другие данные об упругой энергии межузельных атомов, помимо упомянутых выше, нам неизвестны.

## 2. Постановка задачи и методика расчетов.

Известна теоретическая оценка соотношения дилатационной (объемной)  $E_{\text{bulk}}$  и сдвиговой  $E_{\text{shear}}$  упругой энергий точечного дефекта в упругом континууме. Для сферического дефекта в изотропном теле в дипольном приближении Дайре [22] получил простое соотношение

$$\frac{E_{\text{bulk}}}{E_{\text{shear}}} \leq \frac{2k}{9k^2 + 8k + 4}, \quad (1)$$

где  $k = B/G$ . Оценка по этой формуле показывает, что энергия дефекта более чем на 90 % должна состоять из упругой энергии сдвига [22]. Однако, во-первых, формула (1) получена для сферически симметричного дефекта, тогда как межузельная гантель обладает ярко выраженной анизотропией. Во-вторых, эта формула не учитывает упругую энергию области, непосредственно примыкающей к дефекту, ибо получена в рамках линейной теории упругости. Можно ожидать, что эта энергия будет весьма существенна. Соответственно, возможность применения формулы (1) для расчета энергии межузельной гантели остается *a priori* неопределенной.

С учетом изложенной проблематики мы провели моделирование методом молекулярной статистики ( $T = 0$  К) межузельных атомов в четырех ГЦК металлах. Модельные расчеты были выполнены в пакете LAMMPS [23] с межатомными потенциалами типа eam (*embedded atom method*) для Al, Ag, Cu и Ni, взятыми из работ [24–27] соответственно. Модельная система представляла собой ГЦК-решетку из  $N = 32000$  атомов ( $20 \times 20 \times 20$  трансляций элементарной ячейки). Сначала строилась идеальная решетка и вычислялся атомный объем  $V_0$ . Далее в модельную систему вводился дефект и после ее релаксации для каждого атома вычислялся объем соответствующей ему ячейки Вороного  $V_i$ . Релаксация структуры выполнялась методом сопряженных градиентов.

В первую очередь, были вычислены локальные изменения объема  $\Delta V_i = V_0 - V_i$ , вызванные дефектом. Затем был рассчитан дилатационный (объемный) вклад  $U_d$  в полную упругую энергию дефекта в линейном приближении:

$$U_d = \frac{B}{2V_0} \int_V (\Delta V/V)^2 dV \approx \frac{B}{2} \sum_{i=1}^N \frac{(V_0 - V_i)^2}{V_0^2}, \quad (2)$$

где  $B$  – изотермический модуль объемного сжатия, остальные величины определены выше. Объемный модуль определялся как  $B = \frac{1}{3}(C_{11} + 2C_{12})$ , модуль сдвига принимался как среднее модулей сдвига по Ройсу ( $G_R$ ) и Фойгту ( $G_V$ ), т.е.  $G = \frac{1}{2}(G_R + G_V)$ , где  $G_V = \frac{1}{5}(C_{11} - C_{12} + 3C_{44})$  и  $G_R = 5(C_{11} - C_{12})C_{44} / [4C_{44} + 3(C_{11} - C_{12})]$  [28]. В этих формулах компоненты тензора упругих модулей  $C_{11}$ ,  $C_{12}$  и  $C_{44}$  (фойгтовская нотация) принимались равными их экспериментальным значениям вблизи гелиевых температур для соответствующих металлов, см. ниже табл. 1. Сдвиговая компонента упругой энергии определялась как разность  $H_f - U_d$ , где  $H_f$  – энтальпия формирования дефекта, рассчитывавшаяся по формуле  $H_f = H_{\text{rel}} - H_{\text{ini}} \frac{N+1}{N}$ ,  $H_{\text{ini}}$  и  $H_{\text{rel}}$  – энтальпия системы до и после внедрения дефекта [15].

**3. Результаты и обсуждение.** На рисунке 1 показана межузельная гантель (*dumbbell interstitial*) ориентацией [001] в меди (рис. 1а) и изменение объема многогранников Вороного (рис. 1б) для атомов, составляющих межузельную гантель, а также для близлежащих атомов, лежащих вдоль оси гантели, перпендикулярно ей и в направлении [111]. Видно, что для атомов, составляющих дефект, объем полиэдра Вороного уменьшен примерно на 10%. Можно сказать, что на ту же величину увеличена локальная плотность. Для более удаленных атомов вдоль оси дефекта объем полиэдра Вороного увеличен (ло-

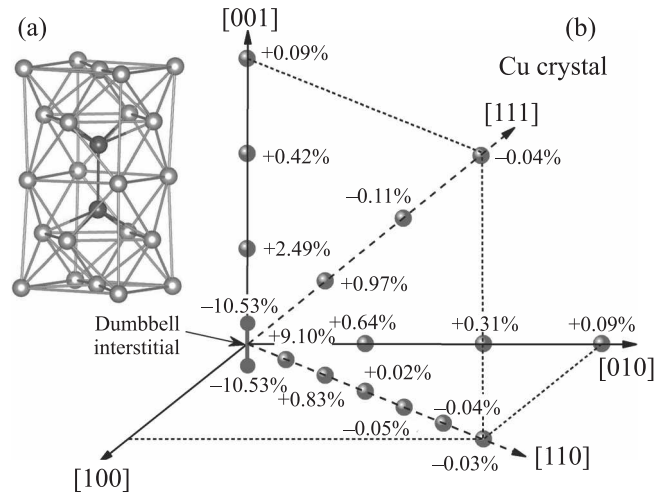


Рис. 1. (Цветной онлайн) Межузельная гантель (а) и относительные изменения объема многогранников Вороного (указаны цифрами) в сравнении с идеальной решеткой для атомов в кристалле меди (показаны кружками), составляющих межузельную гантель ориентации [001], и для соседних атомов, лежащих вдоль и перпендикулярно оси гантели, а также в направлении [111] (б)

кальная плотность уменьшена), хотя эффект быстро падает по мере удаления от гантели. Для атомов в направлении [110] (перпендикулярно оси гантели) объем полиэдров Вороного сначала растет (на  $\approx 9\%$ ), затем быстро уменьшается до нуля и становится слабо отрицательным по мере удаления от оси дефекта. Знакопеременные изменения объема полиэдров Вороного имеют место также под углом  $45^\circ$  к оси гантели. Можно прийти к довольно неожиданному выводу о том, что локальная плотность при создании дефекта как растет, так и уменьшается, в зависимости от направления и расстояния от его оси.

Как отмечено выше, межузельные атомы в октаэдрической позиции (т.е. в центре ГЦК-ячейки, см. рис. 2а) имеют более высокую энтальпию формирования в сравнении с гантельной конфигурацией, и поэтому в реальных условиях не возникают. Однако при нулевой температуре они стабильны и их изучение представляет интерес, поскольку они являются центро-симметричным дефектом, в отличие от анизотропной межузельной гантели. На рисунке 2б показаны результаты вычислений относительного изменения объема полиэдров Вороного для межузельного атома в октаэдрической позиции (в центре системы координат), а также для атомов, расположенных вдоль осей [001] и [111] (в силу центросимметричности дефекта, изменения вдоль осей [010] и [100] совпадают с таковыми для оси [001]). Видно,

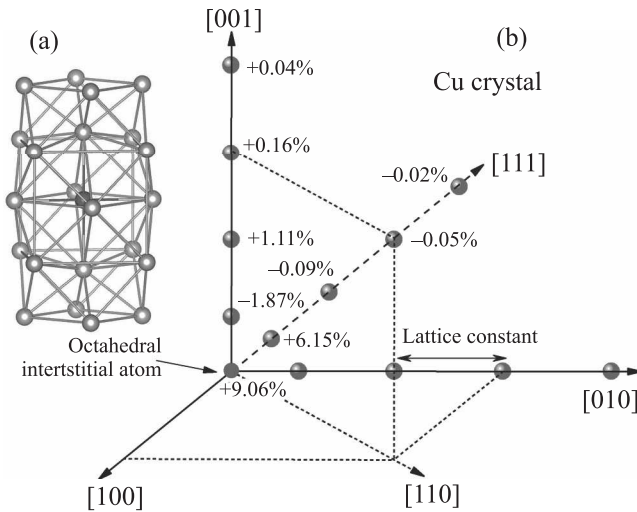


Рис. 2. (Цветной онлайн) Межузельный атом в октаэдрической позиции (а) и относительное изменение объема многогранников Вороного (указано цифрами) для атома, формирующего октаэдрическое межузлие (в центре системы координат), и атомов, расположенных вдоль осей [001] и [111] в кристалле меди (б)

что как и в случае межузельной гантели (рис. 1), область самого дефекта сжата, тогда как вдоль разных направлений имеются положительные и отрицательные изменения плотности. Подчеркнем, что макроскопическая плотность кристалла при наличии обоих видов межузельных атомов снижается, причем величина этого снижения по порядку величины равна снижению плотности при введении вакансий [29].

Таблица 1. Компоненты тензора упругих модулей  $C_{11}$ ,  $C_{12}$  и  $C_{44}$ , модули сдвига и объемной упругости ГЦК металлов в области гелиевых температур [30]

Металл	$C_{11}$ (ГПа)	$C_{12}$ (ГПа)	$C_{44}$ (ГПа)	$B$ (ГПа)	$G$ (ГПа)
Al	114.3	62.0	31.7	79.4	29.3
Ag	131.5	97.3	51.1	108.7	33.0
Cu	176.2	124.9	81.7	142.0	51.4
Ni	261.0	151.0	132.0	187.7	92.9

В таблице 1 представлены компоненты  $C_{11}$ ,  $C_{12}$  и  $C_{44}$  тензора упругих модулей, а также модули сдвига  $G$  и модули объемной упругости  $B$  исследуемых ГЦК металлов в области гелиевых температур по данным работы [30]. Модули сдвига даны для случая поликристалла, т.е. после усреднения по Ройсу и Фойгту, как описано выше. Данные этой таблицы были использованы для расчета дилатационной и сдвиговой составляющих упругой энергии межузельных дефектов, как описано выше.

Таблица 2. Энтальпии формирования межузельных атомов в гантельной ( $H_f^{\text{int}}$ ) и октаэдрической ( $H_f^{\text{oct}}$ ) конфигурациях, отношение объемной и сдвиговой упругой энергии для межузельных атомов в гантельной ( $\varepsilon_{\text{int}}^{\text{eam}}$ ) и октаэдрической ( $\varepsilon_{\text{oct}}^{\text{eam}}$ ) конфигурациях по данным настоящей работы и рассчитанное по формуле (1) ( $\varepsilon^D$ )

Металл	$H_f^{\text{int}}$ (эВ)	$H_f^{\text{oct}}$ (эВ)	$\varepsilon_{\text{int}}^{\text{eam}}$	$\varepsilon_{\text{oct}}^{\text{eam}}$	$\varepsilon^D$
Al	2.58	2.78	0.115	0.066	0.059
Ag	3.26	3.45	0.126	0.080	0.051
Cu	3.07	3.25	0.120	0.075	0.058
Ni	4.53	4.82	0.102	0.083	0.071

В таблице 2 приведены рассчитанные энтальпии формирования межузельных атомов в гантельной ( $H_f^{\text{int}}$ ) и октаэдрической ( $H_f^{\text{oct}}$ ) конфигурации. Видно, что во всех случаях  $H_f^{\text{int}} < H_f^{\text{oct}}$ , подтверждая тем самым, что гантельная конфигурация является более устойчивой. Отношение дилатационной и сдвиговой упругой энергии в табл. 2 представлено величиной  $\varepsilon^{\text{eam}} = U_d / (H_f - U_d)$  для гантельных и октаэдрических межуздузлий, где дилатационная энергия  $U_d$  рассчитана по формуле (2), а способ определения энтальпии формирования  $H_f$  описан выше. Как видно, это отношение весьма близко для всех четырех металлов и составляет  $\approx 11.6\%$  для расщепленных межузлий и  $\approx 7.6\%$  для октаэдрических межузлий. Сдвиговая упругая энергия, таким образом, в обоих случаях доминирует.

Интересно оценить, в какой степени формула (1) работоспособна для расчета отношения дилатационной и сдвиговой упругой энергии межузлий. Расчет по этой формуле представлен в табл. 2 величиной  $\varepsilon^D = E_{\text{bulk}} / E_{\text{shear}}$ . Видно, что величина  $\varepsilon^D$  для всех металлов составляет 6–7%, что немного меньше наших данных для октаэдрического межузлия ( $\varepsilon_{\text{oct}}^{\text{eam}}$ ) и примерно вдвое меньше расчетов этого отношения для гантельного межузлия ( $\varepsilon_{\text{int}}^{\text{eam}}$ ). Причина этого различия очевидна – анизотропия расщепленного межузлия и неучет упругой энергии вблизи ядра дефекта в рамках линейной теории упругости при выводе соотношения (1). Последнее обстоятельство в определенной степени устраняется использованием при расчетах eam-потенциала.

Тем не менее, поскольку наши модельные расчеты для всех четырех металлов дают примерно в два раза больший результат в сравнении с расчетом по формуле (1), то ее можно использовать для оценки отношения дилатационной и сдвиговой упругой энергии межузельных гантелей в других металлах с известными модулями  $B$  и  $G$ , если получающийся результат удвоить. Соответствующие данные показаны на рис. 3 в виде гистограмм для 63 поликристаллических

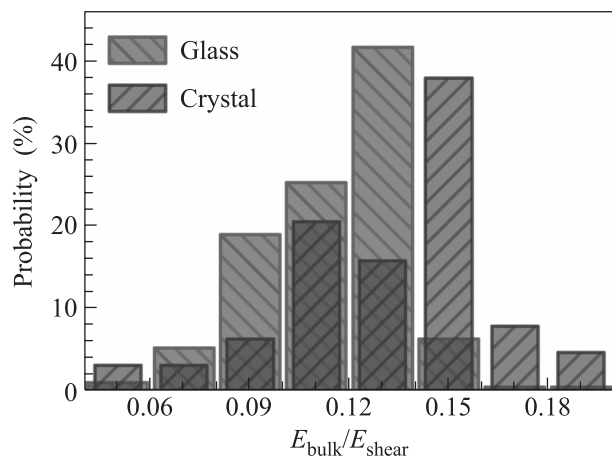


Рис. 3. (Цветной онлайн) Гистограммы распределения отношения дилатационной и сдвиговой энергии  $E_{\text{bulk}}/E_{\text{shear}}$  расщепленного межузлия для 63 поликристаллических металлов и аналогичных дефектов для 189 металлических стекол. Показаны удвоенные результаты расчета по формуле (1) с использованием значений упругих модулей  $B$  и  $G$ , взятых из работ [31, 32]

ских металлов, значения  $B$  и  $G$  для которых при комнатной температуре приведены в монографии [31]. Как видно, для  $\approx 90\%$  металлов таблицы Менделеева величина  $E_{\text{bulk}}/E_{\text{shear}} \leq 0.15$ . Эта величина весьма близка к нашим расчетам для межузельной гантели (табл. 2) и может служить подтверждением как описанного способа использования формулы (1), так и исходной гипотезы МТ о доминировании сдвиговой энергии в полной упругой энергии дефекта.

МТ предполагает наследование металлическим стеклом системы дефектов типа межузельных гантелей, образующихся при плавлении материнского кристалла. Поэтому расчет  $E_{\text{bulk}}/E_{\text{shear}}$  по удвоенной правой части формулы (1) имеет смысл проделать и для металлических стекол. Соответствующие результаты для 189 металлических стекол, упругие модули  $B$  и  $G$  которых представлены в обзоре [32], показаны на рис. 3. Гистограмма распределения  $E_{\text{bulk}}/E_{\text{shear}}$  для металлических стекол весьма сходна с таковой для поликристаллических металлов. Небольшое отличие состоит лишь в ее небольшом сдвиге в сторону меньших значений этого отношения так, что для подавляющего числа металлических стекол  $E_{\text{bulk}}/E_{\text{shear}} \leq 0.13$ . Это показывает, что сдвиговая составляющая упругой энергии дефектов типа межузельных гантелей в металлических стеклах также доминирует. Это обстоятельство оправдывает применение формализма МТ к металлическим стеклам.

**4. Заключение.** Проведенные молекулярно-статистические расчеты с потенциалом типа eam для кристаллов Al, Ag, Cu и Ni показали, что отношение дилатационной составляющей  $E_{\text{bulk}}$  к сдвиговой компоненте упругой энергии  $E_{\text{shear}}$  расщепленного межузлия не превышает 0.12–0.13, что подтверждает базовую гипотезу межузельной теории о доминирующей роли сдвиговой компоненты у упругой энергии дефектов. Расчет этого же отношения по формуле (1), полученной для изотропного дефекта в рамках линейной теории упругости, дает примерно вдвое меньшие величины. Это обстоятельство использовано для оценки отношения  $E_{\text{bulk}}/E_{\text{shear}}$  для 63 металлов и 189 металлических стекол. Эта оценка хорошо согласуется с результатами нашего моделирования.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (задание 3.1310.2017/4.6).

1. W.G. Wolfer, *Fundamental properties of defects in metals*, Comprehensive Nuclear Materials, ed. by R. J. M. Konings, Elsevier, Amsterdam (2012).
2. А. С. Новик, Б. С. Берри, *Релаксационные явления в кристаллах*, Атомиздат, М. (1975).
3. Г. Готтштейн, *Физико-химические основы материаловедения*, БИНОМ. Лаборатория знаний, М. (2014).
4. P. H. Dederichs, C. Lehman, H. R. Schober, A. Scholz, and R. Zeller, *J. Nucl. Mater.* **69–70**, 176 (1978).
5. A. V. Granato, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 974 (1992).
6. P. Varotsos and K. Alexopoulos, *Phys. Rev. B* **15**, 2348 (1977).
7. P. Varotsos, W. Ludwig, and K. Alexopoulos, *Phys. Rev. B* **18**, 2683 (1978).
8. P. Varotsos and K. Alexopoulos, *Thermodynamics of Point Defects and Their Relation with the Bulk Properties*, North-Holland, Amsterdam (1986).
9. P. Varotsos, *J. Appl. Phys.* **101**, 123503 (2007).
10. B. Zhang, X. Wu, J. Xu, and R. Zhou, *J. Appl. Phys.* **108**, 053505 (2010).
11. C. Zener, *J. Appl. Phys.* **22**, 372 (1951).
12. J. Holder and A. V. Granato, *Phys. Rev.* **182**, 729 (1969).
13. Н. П. Кобелев, В. А. Хоник, *ЖЭТФ* **153**, 409 (2018).
14. A. V. Granato, *Eur. J. Phys. B* **87**, 18 (2014).
15. E. V. Safonova, Yu. P. Mitrofanov, R. A. Konchakov, A. Yu. Vinogradov, N. P. Koblelev, and V. A. Khonik, *J. Phys.: Condens. Matter* **28**, 215401 (2016).
16. Е. В. Гончарова, А. С. Макаров, Р. А. Кончаков, Н. П. Кобелев, В. А. Хоник, *Письма в ЖЭТФ* **106**, 39 (2017).
17. K. Nordlund, Y. Ashkenazy, R. S. Averback, and A. V. Granato, *Europhys. Lett.* **71**, 625 (2005).

18. Р. А. Кончаков, Н. П. Кобелев, В. А. Хоник, А. С. Макаров, ФТТ **58**, 209 (2016).
19. E. V. Goncharova, R. A. Konchakov, A. S. Makarov, N. P. Kobelev, V. A. Khonik, J. Phys.: Condens. Matter **29**, 305701 (2017).
20. V. A. Khonik, Chin. Phys. B **26**, 016401 (2017).
21. Y. P. Mitrofanov, D. P. Wang, A. S. Makarov, W. H. Wang, and V. A. Khonik, Sci. Rep. **6**, 23026 (2016).
22. J. C. Dyre, Phys. Rev. B **75**, 092102 (2007).
23. J. Plimpton, J. Comp. Phys. **117**, 1 (1995).
24. Y. Mishin, D. Farkas, M. J. Mehl, and D. A. Papaconstantopoulos, Phys. Rev. B **59**, 3393 (1999).
25. H. W. Sheng, M. J. Kramer, A. Cadien, T. Fujita, and M. W. Chen, Phys. Rev. B **83**, 134118 (2011).
26. Y. Mishin, M. J. Mehl, D. A. Papaconstantopoulos, A. F. Voter, and J. D. Kress, Phys. Rev. B **63**, 224106 (2001).
27. S. M. Foiles, M. I. Baskes, and M. S. Daw, Phys. Rev. B **37**, 10378 (1988).
28. R. Meister and L. Peselnick, J. Appl. Phys. **37**, 4121 (1966).
29. V. A. Khonik and N. P. Kobelev, J. Appl. Phys. **115**, 093510 (2014).
30. G. Simons and H. Wang, *Single crystal elastic constants and calculated aggregate properties*, MIT Press, Cambridge, MA (1977).
31. М. А. Штремель, *Прочность сплавов. Часть 1. Дефекты решетки*, М. (1990).
32. W. H. Wang, Prog. Mater Sci. **57**, 487 (2012).