

ДЕФЕКТЫ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЁТКИ

PACS numbers: 61.43.Bn, 61.72.-y, 61.80.Ba, 62.40.+i, 81.40.Gh, 81.40.Wx, 83.10.Rs

Влияние подвижности краевых дислокаций на массоперенос в ГЦК-кристалле

Д. А. Кропачёв, А. Е. Погорелов*, А. В. Филатов*

*Национальный технический университет Украины «КПИ»,
пр. Победы, 37,
03056 Киев, Украина*

**Институт металлофизики им. Г. В. Курдюмова НАН Украины,
бульв. Акад. Вернадского, 36,
03680, ГСП, Киев-142, Украина*

Методом молекулярной динамики изучен массоперенос в ГЦК-кристалле, подвергнутом импульсной деформации. Рассмотрено влияние подвижных и неподвижных краевых дислокаций на массоперенос с участием собственных междоузельных атомов (МА). Изучен вклад каждого из рассмотренных типов дефектов решётки. Показано, что неподвижные дислокации являются эффективными стоками для собственных МА. Деформационное смещение кристалла вызывает направленное движение дислокаций и ускоренный массоперенос преимущественно в плоскости скольжения. При этом дислокация выступает в роли движущейся ловушки для МА.

Методом молекулярної динаміки вивчено масоперенесення в ГЦК-кристалі, підданому імпульсній деформації. Розглянуто вплив рухомих і нерухомих крайових дислокацій на масоперенесення за участю власних міжвузлових атомів (МА). Вивчено внесок кожного з розглянутих типів дефектів ґратниці. Показано, що нерухомі дислокації є ефективними стоками для власних МА. Деформаційне зміщення кристалу спричинює спрямований рух дислокацій та прискорене масоперенесення переважно в площині ковзання. При цьому дислокація виступає в ролі рухомої пастки для МА.

Mass transfer in f.c.c. crystal under pulse deformation is studied by molecular dynamics simulation. The influence of the mobile and fixed edge dislocations on the mass transfer with self-interstitial atoms is considered. The contribution of each type of lattice defects is examined. As shown, the fixed dislocations are the effective sinks for self-interstitial atoms. The deformation of crystal causes the directed movement of dislocations and the accelerated mass transfer mainly in slip plane. Thus, dislocation acts as a moving trap for interstitial atom.

Ключевые слова: ускоренный массоперенос, импульсная деформация,

движение дислокаций, междоузельный атом, междоузельная конфигурация.

(Получено 30 мая 2013 г.)

1. ВВЕДЕНИЕ

Представленная работа посвящена исследованию механизма ускоренного переноса атомов кристалла под действием импульсного возбуждения его поверхности [1]. Это явление, отличающееся от классической диффузии глубоким проникновением атомов, в том числе собственных, с поверхности кристалла на макроскопические глубины (десятки микрон), происходит практически за время импульсного воздействия (нс–мкс) [2]. Как было предложено в работе [3] подобный перенос массы в кристалле могли бы обеспечить в основном подвижные междоузельные атомы (МА), образующиеся в избытке в процессе скоростной деформации [4]. Их количество на начальной стадии деформации, происходящей со скоростями $\dot{\epsilon} > 1 \text{ с}^{-1}$, может значительно превышать количество генерируемых при этом вакансий [4]. Однако в несвязанном виде собственные МА являются короткоживущими точечными дефектами, быстро релаксирующими на стоках за времена, меньшие времени импульсного воздействия. Экспериментальные исследования области кристалла, в которой наблюдали ускоренный перенос массы при импульсном лазерном воздействии, показали, что процесс массопереноса (МП) происходит преимущественно при комнатной температуре, но в области с повышенной плотностью дислокаций ($\rho \sim 10^{13} - 10^{15} \text{ м}^{-2}$) [5]. Это дало возможность предположить, что перенос МА осуществляется дислокациями, движущимися от возбужденной поверхности вглубь кристалла в направлении распространяющегося фронта напряжений [6]. Теоретические исследования дислокационно-междоузельной (ДМ) модели массопереноса в рамках решения одномерного уравнения, описывающего движение дислокационного перегиба с захваченным МА, показало эффективность предложенного механизма массопереноса [7, 8]. Справедливость полученных решений для одномерной цепочки атомов принципиально подтверждалась сравнительным анализом с некоторыми экспериментальными данными, но в ряде случаев имелись расхождения. Авторы [7] связывали это с невозможностью одномерной модели учесть реальное взаимодействие движущегося в поле ядра дислокации МА в 3-х мерной решетке.

В этой связи представляло интерес провести исследования ДМ модели с помощью молекулярно-динамического (МД) моделирования. Метод МД достаточно широко используется для исследования как движения дислокаций в кристаллах [9], так и их взаимодействия с внедренными атомами [10], в частности, углерода. Этим ме-

тодом ранее были проведены исследования диффузионной подвижности собственных междоузельных атомов в ГЦК- и ОЦК-решетках при различных температурах [11] в идеальных кристаллах. Поведение рассчитанной при этом температурной зависимости коэффициентов диффузии соответствовало экспериментальным данным, хотя по абсолютной величине полученные величины оказались на два порядка меньше. Указанное несоответствие, по-видимому, было вызвано отсутствием в проведенных расчетах учета влияния подвижных дислокаций на движение МА.

Сказанное выше дает основания применить метод МД для исследования взаимодействия ядер движущихся дислокаций с собственными МА в кристаллической решетке. Это может оказаться эффективным для изучения на атомном уровне механизма ускоренного массопереноса при импульсном воздействии.

2. МЕТОДИКА ИССЛЕДОВАНИЙ

В качестве объекта моделирования был выбран нанокристалл меди в виде параллелепипеда длиной $l = 12,6$ нм (ось X), высотой $h = 10,5$ нм (ось Y) и толщиной $1,7$ нм (ось Z) с числом атомов 20192. Вдоль осей X и Z действовали периодические граничные условия, вдоль оси Y имелась свободная поверхность с двумя зафиксированными атомными слоями с каждой стороны. Краевые дислокации создавали по методике, описанной в работе [12]. Методика предусматривает удаление двух соседних полуплоскостей в нижней части кристалла и смещение атомов нижней половины кристалла обратно пропорционально расстоянию до удаленных полуплоскостей. При этом происходит образование и расхождение двух дислокаций на равновесное расстояние между ними. Такая методика обеспечила соответствие плотности дислокаций в рассматриваемой модели экспериментальным данным ($\sim 10^{16} \text{ м}^{-2}$) [5].

В итоге образовывался непрерывный кристалл с увеличенным, относительно бездефектного, межплоскостным расстоянием в нижней половине и двумя экстраплоскостями в верхней половине кристалла. Деформация, вызывающая движение дислокаций, осуществлялась путём приложения смещений с заданной скоростью к атомам, принадлежащим к двум плоскостям на верхней поверхности образца. Величина деформации и ее изменение при этом не учитывались.

Для удобства наблюдения краевой дислокации,двигающейся вдоль оси X , кристаллографическая ориентация кристалла выбиралась так, чтобы ось X соответствовало направлению $[\bar{1}10]$, ось Y — $[111]$, а ось Z — $[11\bar{2}]$, что совпадает с преимущественной системой скольжения краевой дислокации в ГЦК-структурах [4]. Таким образом, линия дислокации располагалась вдоль оси Z , а нормаль к плоскости скольжения совпадала с осью Y .

Моделирование проводилось для температуры 300 К, в области которой, как правило, и установлены основные экспериментальные факты ускоренного массопереноса [1]. Временной интервал термализации (поддержание заданной температуры) составлял 10^{-13} с. Моделирование проводили в программе XMD [13] с использованием метода погруженного атома (МПА) для меди [14].

С целью исследования взаимодействия движущейся дислокации с точечным дефектом моделировали деформацию сдвига в направлении $[110]$. Точечным дефектом являлся МА, который помещали в произвольное место в нижней половине кристалла. Вакансии в данном случае не рассматривали, так как равновесная концентрация вакансий в меди при комнатной температуре составляет 10^{-22} , что позволяет пренебречь влиянием этого точечного дефекта. Кроме того, энергия миграции вакансии в меди на порядок выше энергии миграции междоузельного атома [15].

Для адекватного сопоставления модели с экспериментом подбирали скорость деформации $\dot{\epsilon}$ моделируемого кристалла и плотность дислокаций ρ в нем, обеспечивая соответствующую скорость дислокаций согласно уравнению Орована [4]. Для численных расчетов использовали скорость деформации, близкую к скорости деформации в экспериментах с лазерным облучением (ЛО) в режиме модулированной добротности (10^6 с^{-1}) [16]. Эту величину оценивали исходя из условий скоростного термического расширения (α) поверхностного слоя металла при поглощении им лазерного импульса (ЛИ) длительностью τ_i

$$\dot{\epsilon} = \alpha \Delta T / [(1 - \nu) \tau_i]; \quad (1)$$

здесь ν — коэффициент Пуассона, ΔT — разность значений температур на облученной поверхности металла и начальной.

Характерная, зарегистрированная с помощью электронной микроскопии, остаточная после однократного лазерного облучения плотность дислокаций в железе составляла 10^{14} м^{-2} [5]. Исходя из соотношения Орована и параметра решетки $b \cong 2,5 \cdot 10^{-10} \text{ м}$, это соответствует скорости дислокаций при лазерном облучении

$$v = \dot{\epsilon} / (b\rho) = 40 \text{ м/с} . \quad (2)$$

Набор статистики задавали минимум пятикратным прохождением дислокаций через кристаллическую модель образца.

С другой стороны, плотность динамических дислокаций, зарождающихся при воздействии ЛО, оценивается по [2]

$$\rho(x) = -\frac{2\alpha}{(1-\nu)b} \frac{\partial \Delta T(x)}{\partial x} + \rho_0 \cong \frac{2\alpha \Delta T}{(1-\nu)b^2} + \rho_0 = 4,6 \cdot 10^{17} \text{ м}^{-2} .$$

Из данных, приведенных в [2, 5], следует, что основная часть дислокаций за время ЛО ($\tau = 5 \cdot 10^{-8}$ с) генерируется в поверхностном слое толщиной δ , испытывающем линейное термическое расширение с коэффициентом α , толщину которого можно оценить как $\delta \cong \alpha \Delta T L_0$; здесь L_0 — глубина материала, не претерпевшего изменений под действием термической деформации. Исходя из данных работы [5] область, не подвергшаяся механическому воздействию ЛИ (пластической деформации), простирается, начиная с глубин более 40 мкм от облученной поверхности. Таким образом, при нагреве поверхности железа ЛИ до 1500°C $\delta \cong 0,7$ мкм. С учетом времени протекания релаксационных процессов ($t_r \sim 10^{-6}$ с) [2], средняя скорость движения дислокаций составляет $\langle v_r \rangle \cong (L_0 - \delta) / t_r \approx 40$ м/с, что сопоставимо со значением v , полученным выше из соотношения Орована.

Для достижения в моделировании необходимых скоростей дислокаций скорость сдвига верхней половины кристалла относительно нижней задавали постоянной, составляющей, в соответствии с соотношением Орована, $1,3$ м/с ($\Delta l / t$). С учетом размера l моделируемого кристалла это соответствовало скорости деформации $\dot{\epsilon} = (\Delta l / l) / t = 10^8$ с $^{-1}$. При наличии в моделируемом кристалле двух дислокаций их плотность составляла

$$\rho = 2l_D / V = 2 / (lh) = 1,5 \cdot 10^{16} \text{ м}^{-2},$$

здесь l_D — длина дислокации, V — объем кристалла, l и h — длина и высота кристалла соответственно. Полученное значение соответствует значению плотности дислокаций в меди после импульсной механической обработки на глубине 2 мкм [17].

Анализ взаимодействия движущейся дислокации с МА проводили в процессе визуализации результатов расчетов движения атомов в кинетической модели «нанокристалл с дислокацией и меченым атомом» (рис. 1). Для оценки подвижности атомов в каждом выбранном направлении D_i проводили вычисления величин, подобных коэффициенту диффузии, воспользовавшись известным выражением [18]:

$$D_i = \frac{\sum_{k=1}^N \Delta_{i,k}^2}{2N \Delta t},$$

где N — количество атомов в системе, $\Delta_{i,k}^2$ — квадрат смещения k -ого атома в данном направлении $i = x, y, z$, Δt — промежуток времени, за который фиксировались смещения атомов.

При вычислении Δ^2 учитывались только те смещения, которые превышали смещения, вызываемые тепловыми колебаниями атомов. При этом из смещений атомов в верхней половине кристалла вычиталось смещение, которое искусственно прикладывалось к

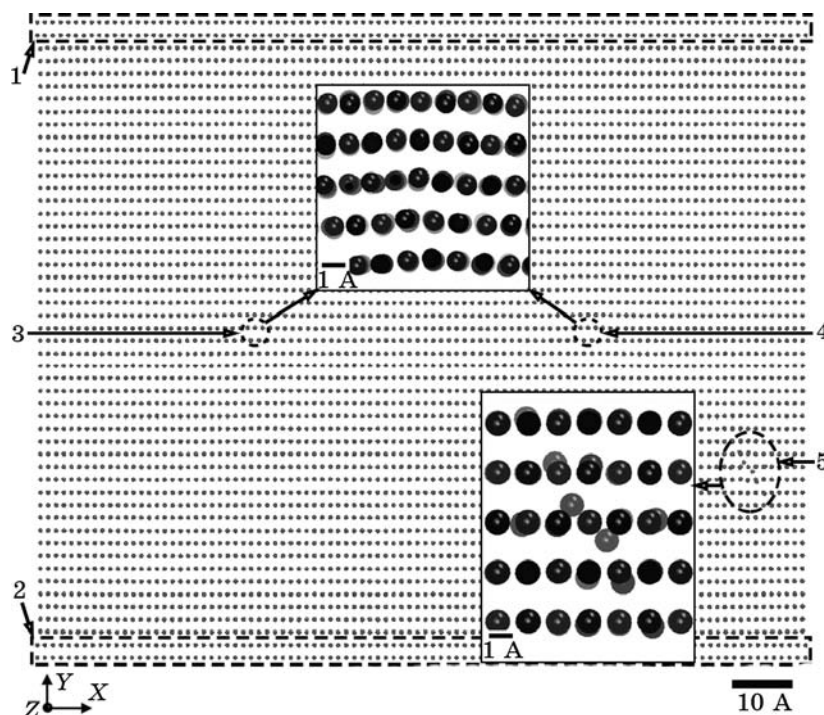


Рис. 1. Исходное положение дефектов в кристалле при температуре 300 К до деформации. Пунктиром отмечены закрепленные области кристалла (1, 2), ядра дислокаций (3, 4) и смещение атомов вблизи МА (5).

двум верхним атомным слоям для обеспечения сдвиговой деформации и движения дислокаций.

Для выяснения вклада в процесс переноса каждого из типов дефектов — МА и дислокаций, как подвижных, так и неподвижных, а также их взаимодействия, необходимо исследовать несколько систем. Для этого были предусмотрены: система с двумя движущимися краевыми дислокациями без МА (система А, количество атомов 20192), аналогичная система, но с МА (система Б, количество атомов 20193), система с двумя неподвижными краевыми дислокациями и МА (система В, количество атомов 20193) и система только с МА (система Г, количество атомов 20401). Все системы идентичны по размерам и граничным условиям.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Для системы А (с двумя движущимися дислокациями без МА) только в начальный период времени ($6 \cdot 10^{-11}$ с) наблюдалось отличное от нуля значение величины D_i вдоль оси Z (вдоль линии дислокации). Это свя-

зано с релаксацией кристалла после образования и расхождения двух дислокаций на равновесное расстояние до устойчивого положения.

Вдоль осей X (вдоль направления движения дислокации) и Y величина D_i на протяжении всего времени моделирования ($4 \cdot 10^{-9}$ с) была равна 0, несмотря на непрерывное деформирование и соответствующее этому движение дислокаций. Интересно отметить, что движение дислокаций при этом происходит не равномерно, а с небольшими ускорениями и замедлениями в соответствии с тем, как взаимодействуют их поля напряжений.

Таким образом, без МА массоперенос не наблюдается даже при наличии движущихся дислокаций, так как само по себе движение дислокации не осуществляет перенос массы.

На рисунке 2 (кривые 1–3) показано изменение величины D_i во времени вдоль осей X , Y и Z в системе Б (с двумя движущимися дислокациями и МА).

Междоузельный атом, находящийся в нижней половине кристалла, под действием растягивающих напряжений под экстраплоскостью, устремляется к ядру дислокации (рис. 3). При этом движение МА осуществляется по двум возможным механизмам: несколько скачков по междоузлиям или, преимущественно, вытеснением ближайшего атома из узла с образованием гантельной конфигурации. Это соответствует высоким значениям величины D_i в

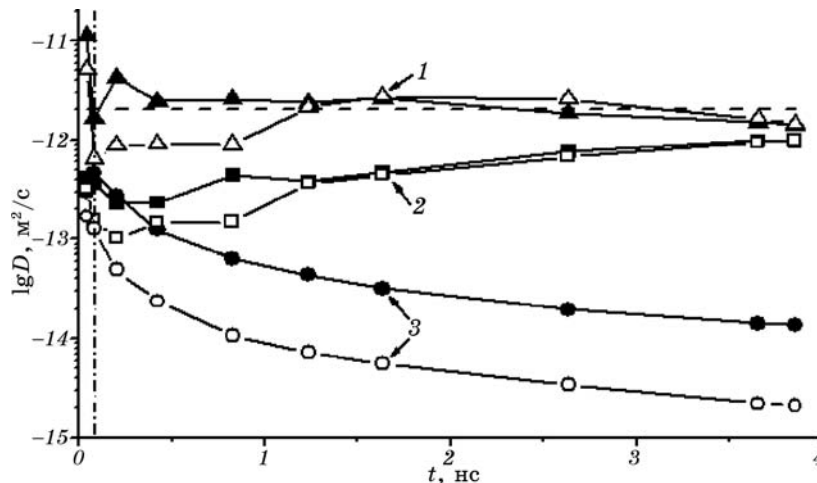


Рис. 2. Зависимость величины D_i от времени в направлениях X (■), Y (●) и Z (▲) при температурах 300 К (белые маркеры) и 500 К (черные маркеры) в системе Б. Штрихпунктирной линией указан момент захвата МА дислокацией. Для сравнения пунктирной линией отмечено значение коэффициента самодиффузии при наличии междоузельных атомов в меди при комнатной температуре [11].

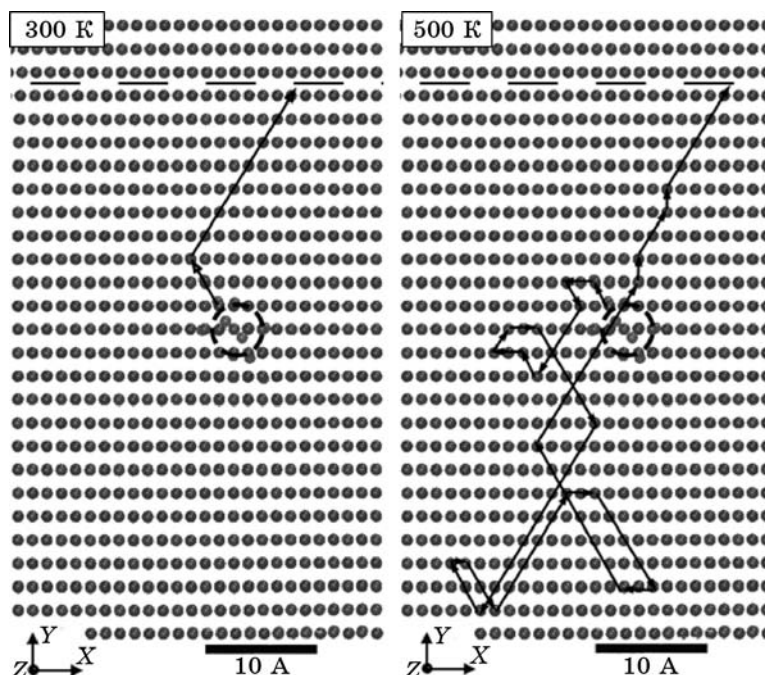


Рис. 3. Траектория движения междуузельного атома к ядру дислокации при температурах 300 К и 500 К. Показана часть кристалла. Пунктирной линией показана плоскость скольжения дислокации.

начальный момент времени (до $\sim 10^{-10}$ с) на рис. 2. С приближением МА к дислокации и по мере увлечения полем ее ядра, он теряет свою подвижность как отдельный точечный дефект, что характеризуется уменьшением значений величины D_i . В дальнейшем подвижность МА может рассматриваться только в комплексе с дислокацией, движущейся вдоль оси X . В данном случае дислокация выступает в роли движущейся ловушки для МА (рис. 4).

Наблюдаемый на рисунке 2 (кривая D_x) рост величины D_i вдоль оси X связан с возникающей асимметричностью периодического потенциального барьера решетки при наличии внешней движущей силы F [19]:

$$J = -D(\partial c / \partial x) + c \langle v \rangle_F, \quad (3)$$

где J — плотность потока вещества, $\partial c / \partial x$ — градиент концентрации в направлении движущей силы, $\langle v \rangle_F$ — средняя дополнительная скорость атома в направлении движущей силы F .

Первое слагаемое в приведенной формуле описывает поток, реализуемый механизмом случайных блужданий, а второе — характеризует вклад в перенос атомов внешней силы. В качестве такой силы в данном случае выступает движущаяся под действием дефор-

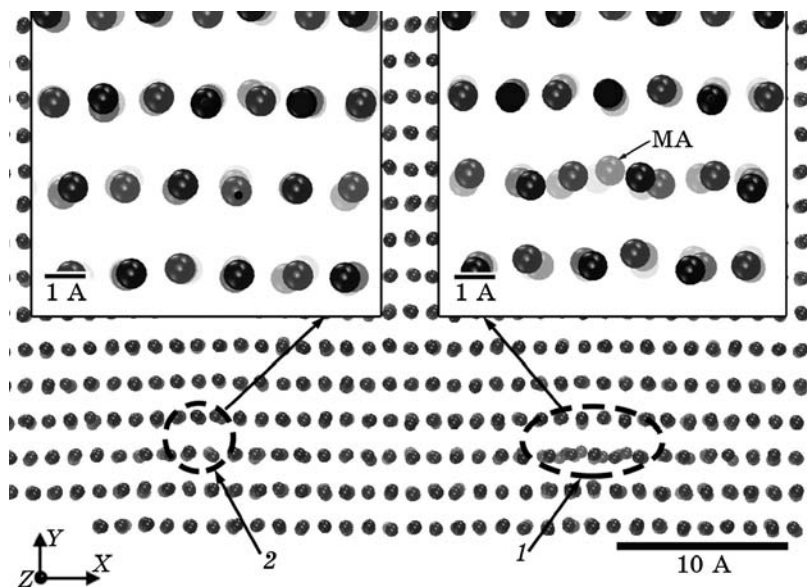


Рис. 4. Ядро дислокации с междуузельной конфигурацией (1) и без нее (2) при температуре 300 К. Показана часть кристалла.

мации дислокация, и перемещение атомов становится связанным с движением дислокации. Поэтому в данном случае более корректно говорить не о диффузии по механизму случайных блужданий, а о направленном массопереносе, при котором частота перескоков МА в направлении движения дислокации становится преобладающей. В этом случае при одинаковом количестве атомных скачков эффективность массопереноса резко возрастает, поскольку вклад второго слагаемого становится преобладающим.

Вдоль оси Y , т.е. перпендикулярно плоскости скольжения (рис. 2, кривая D_y), смещения атомов обусловлены лишь тепловыми колебаниями. Это свидетельствует о том, что дислокация является надежным фиксатором МА в плоскости скольжения.

Как следует из анализа атомных перестроек (рис. 5), вдоль линии дислокации (ось Z) также наблюдается направленное движение атомов, которые располагаются под экстраплоскостью, что характеризуется отличным от нуля значением величины D_i (рис. 2, кривая D_i). Наблюдения за атомными конфигурациями показали, что скачки атомов вдоль линии дислокации совпадают с моментом прохождения дислокации с междуузельной конфигурацией (МК) через этот атом, а направление определяется кристаллографией решетки. В результате движение атома в плоскости скольжения осуществляется по различным траекториям (рис. 5).

Атом, находящийся в узле решетки, при приближении к нему

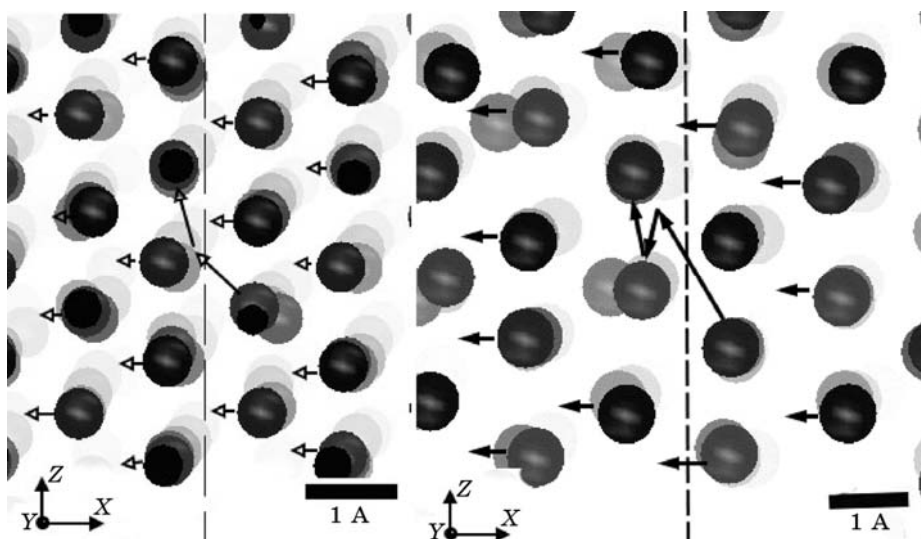


Рис. 5. Различные траектории движения атома, расположенного под плоскостью скольжения дислокации, вдоль ядра дислокации. Стрелками обозначено направление движения атомов, стрелка сверху показывает направление движения дислокации. Пунктиром обозначена линия дислокации. Показана часть кристалла. Размер атомов — условный.

МК, выталкивается в область растяжения под экстраплоскостью, после чего совершает перемещение вдоль ядра дислокации в другой узел решетки. Таким образом, атом за один проход дислокации с МК смещается в соседнюю атомную плоскость вдоль ядра дислокации и в соседнюю атомную плоскость в направлении движения дислокации. Результирующее направление движения атомов составляет острый угол с направлением движения дислокации.

Полученный результат не противоречит известным фактам увеличения самодиффузии вдоль ядра дислокации [4]. Однако, в отличие от диффузии по механизму случайных блужданий с пониженной относительно объемной диффузии энергией активации, в данном случае наблюдаются перескоки атомов только в одном направлении в ядре дислокации. При изменении движения дислокации на противоположное направление перескоков не изменяется.

Сравнение значений величины D_i в системе с подвижными дислокациями и МА (Б) с аналогичными показателями для системы с МА, но без дислокаций (Г) показало следующие результаты. Вдоль оси X среднее значение величины D_i в системе Б больше в 3 раза, вдоль оси Z — больше в 5 раз. То есть, при наличии в системе МА движущиеся дислокации существенно увеличивает подвижность атомов в плоскости скольжения.

В то же время, с учетом первоначального перемещения между-

узельного атома к плоскости скольжения, значение величины D_i вдоль оси Y меньше в 20 раз, что характеризует дислокацию как сток и надежный фиксатор МА в плоскости скольжения.

Для системы с МА и неподвижными дислокациями (В) после начальной релаксации системы, характеризующейся движением МА к плоскости скольжения, наблюдается снижение величины D_i до нуля, что позволяет очередной раз рассматривать дислокацию как эффективный сток для МА. При этом неподвижная дислокация надежно удерживает его от движения во всех направлениях, в том числе и вдоль ядра дислокации.

Известно, что повышение температуры системы приводит к увеличению коэффициентов диффузии, осуществляемой вследствие термической активации атомов. В результате моделирования для повышенной температуры (500 К) оказалось (см. рис. 3 и рис. 2), что на начальной стадии до захвата МА ядром дислокации, значение величины D_i заметно возрастает. После захвата перемещение атомов вдоль плоскости скольжения, характеризующее коэффициентами D_x и D_z , осуществляется за счет дислокационного переноса, на который повышение температуры не оказывает существенного влияния. Однако при 500 К увеличивается влияние тепловых колебаний на движение атомов вдоль оси Z , чего не было замечено при 300 К. Это проявляется в усложнении траектории атомов в ядре дислокации. Также частота перескоков атомов вдоль ядра дислокации незначительно повышается по сравнению с аналогичным значением при 300 К. Таким образом, влияние температуры существенно только в направлении, перпендикулярном плоскости скольжения (D_y). Полученный результат хорошо согласуется с экспериментальными данными [1] по влиянию температуры на массоперенос при импульсных воздействиях.

Полученные данные подтверждают модель, основанную на решающей вкладе движущихся дислокаций в массоперенос при импульсном воздействии.

Проведем оценки. Предполагая осуществление массопереноса перемещением междоузельной конфигурации при каждой встрече с проходящей через нее линией очередной краевой дислокации, рассчитаем возможную глубину массопереноса в плоскости скольжения. Поскольку принципиально глубины ускоренного массопереноса не сильно отличаются для различных металлов [1], сопоставление результатов моделирования будем проводить с данными для наиболее изученного армко-железа [2, 5]. Для упрощения оценок, полиморфные $\alpha \rightarrow \gamma$ -превращения в железе, проявляемые достижением при ударном сжатии давлений выше 13 ГПа [20], не учитывались. Такие давления достигаются при облучении армко-железа гигантскими импульсами лазера с модулированной добротностью [16].

Исходя из оцененной ранее плотности динамических дислока-

ций, зарождающихся при воздействии ЛО, количество дислокаций на длине δ составит: $N_d = \delta r^{1/2} = 490$. Пройдя под действием напряжений через межатомную конфигурацию и сдвинув ее на 1 межатомное расстояние, эти дислокации последовательно сдвинут их на глубину $x = a\delta r^{1/2} = 0,12$ мкм.

Полученное значение существенно отличается от экспериментально установленных максимальных глубин МП после десятикратного лазерного воздействия (до 5–7 мкм), полученных для армко-железа [16]. Эти величины могут стать сопоставимы с учетом десятикратного воздействия и, если дислокация сдвинет междоузельную конфигурацию не на одно межатомное расстояние, а на несколько. По-видимому, подобное рассмотрение должно предусматривать продвижение МА, связанного с ядром дислокации, через несколько междоузлий до образования очередной междоузельной конфигурации. Такое предположение не противоречит результатам численных расчетов, полученным в [7, 8] при решении модифицированного уравнения Френкеля–Конторовой для движения дислокации с МА.

Таким образом, данные проведенного моделирования подтверждают модель [2], основанную на решающем вкладе движущихся дислокаций в массоперенос при импульсном воздействии.

4. ВЫВОДЫ

В результате моделирования методом МД обнаружено, что в ГЦК-решетке под действием напряжений собственный МА устремляется к ядру краевой дислокации, образуя единый комплекс «дислокация + МА». При этом неподвижные дислокации являются стопором для МА, а движущиеся существенно ускоряют массоперенос в плоскости их скольжения. Обнаружено, что массоперенос осуществляется как в направлении движения дислокации, так и вдоль ее линии. Наблюдали скачки только тех атомов, в непосредственной близости к которым проходит ядро дислокации с междоузельной конфигурацией. Строгая направленность такого процесса обеспечивает макроскопические глубины массопереноса вследствие последовательного прохождения большого количества дислокаций.

Установлено, что после захвата МА ядром дислокации процесс массопереноса не является термически активируемым. Это позволяет объяснить слабое влияние температуры на массоперенос при различных видах импульсных воздействий [1].

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Д. С. Герцрикен, В. Ф. Мазанко, В. М. Фальченко, *Импульсная обработка и мас-*

- соперенос в металлах при низких температурах* (Киев: Наукова думка: 1991).
2. A. Pogorelov and A. Zhuravlev, *Defect and Diffusion Forum*, **194–199**: 1247 (2001).
 3. М. Е. Гуревич, Л. Н. Лариков, В. Ф. Мазанко, А. Е. Погорелов, В. М. Фальченко, *ФиХОМ*, № 2: 7 (1977).
 4. Дж. Хирт, И. Лоте, *Теория дислокаций* (Москва: Атомиздат: 1970).
 5. П. Ю. Волосевич, А. Е. Погорелов, *Поверхность. Физика, химия, механика*, № 9: 126 (1986).
 6. М. Е. Гуревич, А. Ф. Журавлев, Ю. В. Корнюшин, А. Е. Погорелов, *Металлофизика*, № 2: 113 (1985).
 7. И. Н. Карнаузов, А. Е. Погорелов, М. С. Чернолевский, *Металлофиз. новейшие технол.*, **28**, № 6: 743 (2007).
 8. И. Н. Карнаузов, А. Е. Погорелов, М. С. Чернолевский, *Металлофиз. новейшие технол.*, **4**, № 2: 159 (2012).
 9. K. Tarasa, Yu. N. Osetsky, and D. J. Bacon, *Acta Mater*, No. 55: 93 (2007).
 10. Yu. N. Osetsky and D. J. Bacon, *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, No. 11: 427 (2003).
 11. О. В. Філатов, *Міграція атомів при ударній деформації ідеальних металевих кристалів* (Автореферат дис. ... д-ра фіз.-мат. наук) (Київ: Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України: 2005).
 12. А. А. Назаров, Р. Р. Мулюков, *Атомистическое моделирование материалов, наноструктур и процессов нанотехнологии* (Уфа: РИО БашГУ: 2010).
 13. *XMD — Molecular Dynamics for Metals and Ceramics*
<http://xmd.sourceforge.net>
 14. R. A. Johnson, *Phys. Rev B*, **37**, No. 8: 3924 (1988).
 15. И. И. Новиков, *Дефекты кристаллического строения металлов* (Москва: Металлургия: 1975).
 16. А. Е. Погорелов, *Направленный перенос атомов в железе и алюминии при импульсном лазерном воздействии* (Дисс. ... канд. физ.-мат. наук) (Киев: Институт металлофизики АН УССР: 1985).
 17. А. Г. Букатов, *Дислокаційна структура і механізм масопереносу в умовах імпульсного ударного навантаження в металах* (Дис. ... магістра фізичного матеріалознавства) (Київ: НТУУ «КПІ»: 2011).
 18. С. Д. Герцрикен, И. Я. Дехтяр, *Диффузия в металлах и сплавах в твердой фазе* (Москва: Физматгиз: 1960).
 19. Дж. Маннинг, *Кинетика диффузии атомов в кристаллах* (Москва: Мир: 1971).
 20. R. C. Johnson, B. A. Stein, and R. S. Davis, *J. Appl. Phys.*, **33**, No. 2: 557 (1962).