

ТЕОРИЯ МЕТАЛЛОВ

УДК 539.12.043

МОДЕЛИРОВАНИЕ АТОМНОЙ СТРУКТУРЫ В ОКРЕСТНОСТИ СФЕРИЧЕСКИХ ПОР В АЛЮМИНИИ И РАСЧЕТ АНИЗОТРОПИИ СКОРОСТИ РОСТА ПОР

© 2023 г. А. В. Назаров^{a, b, *}, А. П. Мельников^a, А. А. Михеев^c^aНациональный исследовательский ядерный университет, МИФИ, Каширское ш., 31, Москва, 115487 Россия^bНИЦ “Курчатовский институт”, Курчатовский комплекс теоретической и экспериментальной физики,
ул. Большая Черемушкинская, 25, Москва, 117218 Россия^cРГУ им. А.Н. Косыгина, ул. Садовническая, 33, Москва, 117997 Россия

*e-mail: avn46@mail.ru

Поступила в редакцию 05.05.2023 г.

После доработки 26.06.2023 г.

Принята к публикации 14.07.2023 г.

Моделируется структура в окрестности пор разного размера в алюминии с помощью модифицированного метода молекулярной статики (МС). В этом варианте МС атомная структура в окрестности нанопор и параметры, определяющие смещения атомов, помещенных в упругий континуум вокруг основной расчетной ячейки, определяются самосогласованным образом. Для расчетов скорости перемещения элементов поверхности пор в определенных кристаллографических направлениях применяются полученные ранее кинетические уравнения. Эти уравнения учитывают влияние полей деформации на потоки вакансий. Рассчитаны скорости перемещений в зависимости от температуры. Результаты показывают, что анизотропии скорости роста пор в алюминии заметно меньше, чем в ОЦК-железе и вольфраме.

Ключевые слова: поры, моделирование структуры, потоки вакансий, упругие поля, изменение формы пор

DOI: 10.31857/S0015323023600752, EDN: DMIRRH

ВВЕДЕНИЕ

Известно, что в материалах под облучением образуются и растут поры [1–12]. Фундаментальное понимание кинетики образования [5–7] и роста пор является важным в прогнозировании распухания в облученных материалах и изменений прочностных свойств [1–4, 10–13]. Более того, во многих случаях изначально сферически-симметричные поры со временем приобретают кубоидную форму [9, 10, 13–15]. Авторы ряда работ выделяют несколько факторов, влияющих на изменение формы пор при облучении [9, 14]:

1. Анизотропия поверхностной энергии для разных кристаллографических плоскостей.
2. Предпочтительная адсорбция атомов на определенных кристаллографических поверхностях.
3. Анизотропия диффузионных потоков вакансий в окрестности пор.

Обычно в моделях, прогнозирующих поведение материалов под облучением, не учитываются упругие поля, создаваемые порами [1]. Однако, как показано ранее [16–18], эти поля влияют на диффузионные потоки и в случае нанопор оказы-

вают существенное влияние на потоки вакансий, и, как следствие, на скорость роста и растворения пор [19–21]. Компонента плотности потока вакансий по направлению X в нулевом приближении по влиянию упругого поля, согласно результатам [18], имеет вид:

$$J_x = -\frac{1}{\Omega} \left[D_V \frac{\partial c}{\partial x} - c \frac{K^V}{kT} \left(D_V \frac{\partial Sp\epsilon}{\partial x} \right) \right], \quad (1a)$$

где J_x — плотность потока вакансий в направлении x , Ω — объем, приходящийся на атом, c — концентрация вакансий, D_V — коэффициент диффузии вакансий в идеальной (недеформированной) системе, ϵ — тензор деформаций, $Sp\epsilon$ — след тензора деформаций, k — константа Больцмана, T — температура. Вклад упругого поля в поток вакансий [18] определяет величина K^V :

$$K^V = \frac{1}{2} \sum_s \sum_{k \neq s} \frac{(x_{ks}^V)^2}{R_{ks}^V} \frac{\partial E}{\partial R_{ks}^V} \bigg|_{R_{ks}^V}, \quad (16)$$

где x_k, y_k, z_k — координаты атомов k , которые могут принадлежать только основной расчетной ячейке [16], $x_{ks} = x_k - x_s, y_{ks} = y_k - y_s, z_{ks} = z_k - z_s, k \neq s, x_s, y_s, z_s$ — координаты атомов s , которые могут принадлежать и основной расчетной ячейке, и упругой среде, окружающей основную расчетную ячейку [16].

$$R_{ks} = |\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_s| = \sqrt{x_{ks}^2 + y_{ks}^2 + z_{ks}^2}.$$

Расстояния R_{ks}^V рассчитываются по координатам конфигурации системы, содержащей вакансию. Следует подчеркнуть, что энергия системы E зависит от расстояний R_{ks} и не зависит от внешних упругих полей [18].

Во многих работах поля смещений в окрестности дефектов определяют из уравнений изотропной теории упругости. Решение уравнений для изолированной поры сферической формы радиуса R имеет вид [22]:

$$u_i = C_1 \frac{x_i}{r^3}, \quad (2)$$

где u_i — смещение атома из исходного положения в направлении x_i, r — расстояние от центра поры, C_1 определяется как характеристиками материала, так и параметрами системы:

$$C_1 = -\frac{1+\nu}{2E} \gamma R^2, \quad (3)$$

где R — радиус сферической поры, γ — поверхностная энергия, ν — коэффициент Пуассона, E — модуль Юнга.

Компоненты тензора деформаций определяются по формулам:

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right). \quad (4)$$

После подстановки (2) в (4) диагональные компоненты тензора деформаций будут иметь вид:

$$\varepsilon_{ii} = C_1 \left(\frac{1}{r^3} - \frac{3x_i^2}{r^5} \right), \quad (5)$$

след тензора деформации в этом случае равен постоянной величине, и его производная равна нулю:

$$\nabla \text{Sp} \varepsilon = 0. \quad (6)$$

Таким образом, при таком описании упругие поля не влияют на диффузионные потоки и скорости роста пор. По этой причине во многих работах и монографиях поры называются нейтральными стоками [1].

В нашей работе используется модифицированный вариант метода молекулярной статистики [23–25], для определения изменений атомной структуры вблизи пор и нахождения смещений атомов [20, 21, 27]. Этот подход учитывает дис-

кретность структуры и ее анизотропию. В результате найденные смещения атомов для различных кристаллографических направлений различаются, след тензора деформаций отличен от константы и его градиент не равен нулю. Как следствие в уравнениях для потоков вакансий появляется дополнительное слагаемое, неодинаковое для различных кристаллографических направлений. Модель подробно описана в [20], там же и в [21] приведены некоторые результаты для ОЦК-железа.

В настоящей работе проводится изучение зависимости скоростей перемещения элементов поверхности нанопор для различных кристаллографических направлений от температуры в алюминии, металле с ГЦК-структурой. В наших работах [20, 21] было показано, что упомянутые зависимости для кристаллографических направлений типа $\langle 100 \rangle, \langle 110 \rangle, \langle 111 \rangle$ существенно различаются. Таким образом, анизотропия упругого поля в окрестности пор в металлах с ОЦК-структурой может быть причиной изменения формы изначально сферических пор в облучаемых материалах. Как оказалось, в алюминии упомянутые эффекты выражены гораздо слабее.

МЕТОДЫ И МОДЕЛИ

Модифицированный метод молекулярной статистики (МММС) [23–25] применяется для определения атомной структуры в окрестности нанопор. Атомы окружают сферическую пору радиусом R , положения атомов определяются радиус-вектором $\mathbf{r}$. Систему разбивают на две зоны — основную расчетную ячейку (зона I) и упругая среда (зона II), в которую погружены атомы. Структура зон представлена на рис. 1. Координаты атомов первой зоны рассчитывают с использованием обычной вариационной процедуры, применяемой в методе МС. Атомы, окружающие основную расчетную ячейку, погружены в упругую среду, а их смещения определяются на основе решений уравнения теории упругости, см. (2).

Важной особенностью модели, в отличие от ранее разработанной в работе [26], является самосогласованная итерационная процедура вычисления положений атомов в основной расчетной ячейке, и расчетов константы C_1 , определяющей смещения в упругой зоне. Константа C_1 рассчитывается на основе результатов моделирования смещений атомов в шаровом слое, расположенном примерно посередине между дефектом и границей основной расчетной ячейки, по формуле:

$$C_1 = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N r_k \left(u_k^x x_k + u_k^y y_k + u_k^z z_k \right), \quad (7)$$

полученной из уравнения (2), N — число атомов в шаровом слое. В работе [25] показана устойчивая сходимость итераций.



Рис. 1. Схема расчетной ячейки в окрестности поры радиуса R (сечение для $z = 0$). R_G — общий радиус зоны вычислений.

Модель позволила получить структуру в окрестности пор различных размеров в α -Fe и W [20, 21]. В следующем разделе представлены результаты моделирования для алюминия, которые в дальнейшем используются при расчете скорости перемещения элементов поверхности пор.

РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ АТОМНОЙ СТРУКТУРЫ В ОКРЕСТНОСТИ ПОР

Моделирование проводили с применением многочастичного EAM потенциала [28]. Этот потенциал был использован нами ранее [25] для расчетов диффузионных характеристик в Al. На рис. 2 и 3 представлены зависимости смещений атомов от расстояния до центра поры в Al для кристаллографических направлений типа $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$, $\langle 111 \rangle$. Там же для сравнения приведены расчеты смещений атомов на основе решения уравнения изотропной теории упругости для поры такого же размера. Из приведенных на этих рисунках данных следует, что смещения атомов для

различных кристаллографических направлений отрицательны и отличаются по величине. Однако эти отличия значительно меньше, чем те, что были получены при моделировании аналогичных величин для α -Fe [20, 21]. Так, в частности, для направлений типа $\langle 100 \rangle$ смещения вблизи поры положительны для α -Fe. Причем изменение знака смещения на отрицательный происходит для атомов, удаленных от центра поры на расстояние более 42 Å (более 12 параметров решетки) и для пор разных размеров (вплоть до 20 Å [33]), зависимости имеют аналогичный вид.

Из анализа результатов видно, что след тензора деформации не равен нулю, и уравнения для потоков вакансий, и как следствие, кинетические уравнения для скорости роста пор должны содержать дополнительные слагаемые, обусловленные упругим полем:

$$\nabla S p e \neq 0. \quad (8)$$

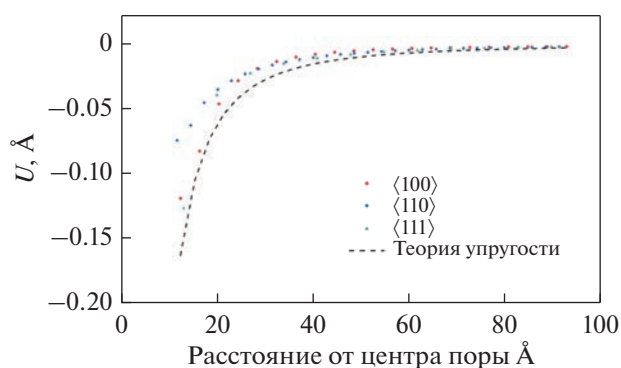


Рис. 2. Смещения атомов по различным направлениям в алюминии для нанопоры ($R = 12.7$ Å).

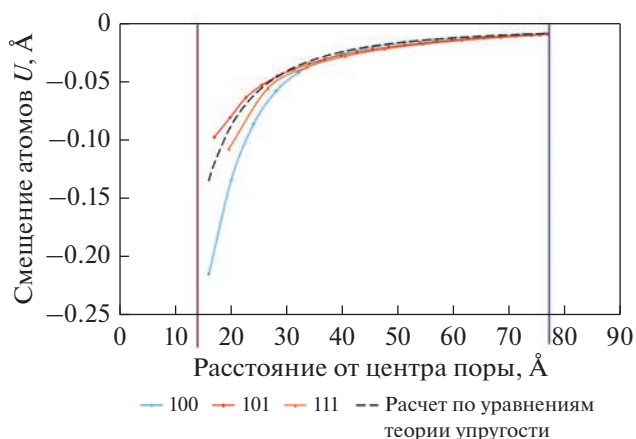


Рис. 3. Смещения атомов по различным направлениям в алюминии для нанопоры ($R = 16.91$ Å).

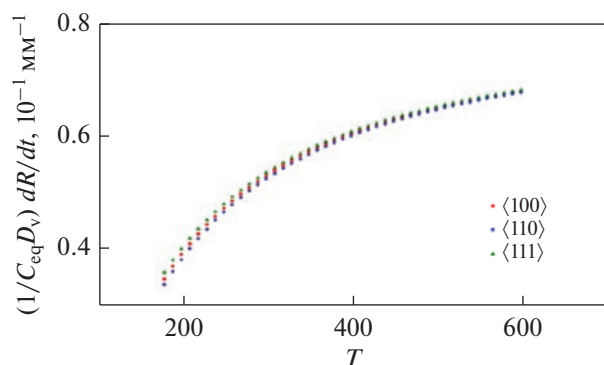


Рис. 4. Нормированные скорости перемещения элементов поверхности поры по разным направлениям, ГЦК-Al, $R = 12.7 \text{ \AA}$, $\Delta = 10$.

Поэтому в следующем разделе мы приводим вывод уравнений для скоростей перемещения элементов поверхности пор, основываясь на результатах оригинального теоретического подхода, развиваемого нами в последние годы [17, 18], позволяющего описывать диффузионные потоки под напряжением. Компонента потока вакансий по направлению X в нулевом приближении по влиянию упругого поля, согласно результатам [19], имеет вид (1a).

СКОРОСТЬ ПЕРЕМЕЩЕНИЯ ЭЛЕМЕНТОВ ПОВЕРХНОСТИ НАНОПОР ДЛЯ РАЗЛИЧНЫХ КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИХ НАПРАВЛЕНИЙ

Можно показать способом, аналогичным использованному нами ранее в [20], что перемещение элементов поверхности нанопор в определенном направлении определяется уравнением:

$$\frac{dR}{dt} = -(\vec{n}, \vec{j}), \quad (9)$$

где R — радиус поры, $\vec{n}$ — нормаль к поверхности поры, $\vec{j}$ — плотность потока вакансий на поверхность поры.

Для оценки влияния упругого поля на поток вакансий в области вблизи пор и получения аналитических решений используется метод последовательных приближений. В качестве первого приближения выберем решение уравнения диффузии для концентрации вакансий, в котором не учитывается влияние поля, аналогично тому, как это сделано в [29, 30], в этом случае скорость изменения радиуса поры R описывается уравнением [29]:

$$\frac{dR}{dt} = C_{eq} D_v \left[\frac{R_G}{R_G - R} R^{-1} \left(\Delta + 1 - \exp\left(\frac{2\gamma V^f}{kTR}\right) \right) \right], \quad (10)$$

где c_{eq} — равновесная концентрация вакансий для плоской поверхности, V^f — объем образования вакансии, $\Delta = \frac{c_m - c_{eq}}{c_{eq}}$ — пересыщение вакансиями,

ми, $c_m = c(R_G)$, где R_G — радиус сферы, приходящейся на одну пору (половина среднего расстояния между порами).

Следующим шагом является получение уравнений для скорости перемещения элемента поверхности нанопор для различных кристаллографических направлений с учетом поля упругих деформаций. Преобразования для получения таких уравнений приведены в [20], где используется модель для перемещения элемента поверхности, предложенная ранее в [31]. Окончательные выражения для скоростей перемещения элементов поверхности сферических пор для трех характерных кристаллографических направлений имеют вид:

Для направлений типа $\langle 100 \rangle$:

$$\frac{dR}{dt} = c_{eq} D_v \left[\frac{1}{R} \left(\Delta + 1 - \exp\left(\frac{2\gamma V^f}{kTR}\right) \right) - \frac{K^V}{kT} \exp\left(\frac{2\gamma V^f}{kTR}\right) \frac{\partial Sp\epsilon}{\partial x} \right]. \quad (11)$$

Для направлений типа $\langle 110 \rangle$:

$$\frac{dR}{dt} = \frac{c_{eq} D_v}{\sqrt{2}} \left[\frac{\sqrt{2}}{R} \left(\Delta + 1 - \exp\left(\frac{2\gamma V^f}{kTR}\right) \right) - \frac{K^V}{kT} \exp\left(\frac{2\gamma V^f}{kTR}\right) \left(\frac{\partial Sp\epsilon}{\partial x} + \frac{\partial Sp\epsilon}{\partial y} \right) \right]. \quad (12)$$

Для направлений типа $\langle 111 \rangle$:

$$\frac{dR}{dt} = \frac{c_{eq} D_v}{\sqrt{3}} \left[\frac{\sqrt{3}}{R} \left(\Delta + 1 - \exp\left(\frac{2\gamma V^f}{kTR}\right) \right) - \frac{K^V}{kT} \exp\left(\frac{2\gamma V^f}{kTR}\right) \left(\frac{\partial Sp\epsilon}{\partial x} + \frac{\partial Sp\epsilon}{\partial y} + \frac{\partial Sp\epsilon}{\partial z} \right) \right]. \quad (13)$$

На основе аппроксимированных результатов моделирования для смещений атомов вблизи поверхности пор рассчитываются компоненты тензора деформаций для каждого из кристаллографических направлений, след тензора деформаций и его производные по соответствующим координатам. Это позволяет рассчитать, используя уравнения (11)–(13), скорости перемещения элементов поверхности пор в зависимости от температуры при различных значениях пересыщений. На рис. 4 приведены нормированные зависимости упомянутых скоростей от температуры для алюминия при степени пересыщения $\Delta = 10$.

Аналогичные зависимости таких скоростей от температуры были получены для пор нескольких других размеров. Во всех случаях различие скоростей мало. Отметим, что с уменьшением степени

пересыщения вакансий различие скоростей по разным кристаллографическим направлениям немного увеличивается в области низких температур, однако остается небольшим.

ОБСУЖДЕНИЕ

Как видно из уравнений (11)–(13), дополнительное слагаемое, связанное с упругим полем смещений в окрестности пор, может вносить вклад в скорости перемещения элементов поверхности пор. По результатам ранее проведенного моделирования для α -Fe [20, 21, 32], скорость перемещения элементов поверхности поры в направлении типа $\langle 100 \rangle$ существенно отличается от направлений типа $\langle 110 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$. Для W [21] смещения в направлении $\langle 100 \rangle$ также положительные. Однако смещения атомов на поверхности поры в вольфраме заметно меньше, чем в железе, и влияние упругих полей в меньшей степени сказывается на скорости перемещений элементов поверхности пор.

Вклад упругих смещений в скорость перемещения элементов поверхности поры в ГЦК-Al (рис. 4) значительно меньше, чем в железе и вольфраме. Причем в алюминии скорость роста пор в направлениях типа $\langle 110 \rangle$ заметно уменьшается по сравнению с другими направлениями по мере понижения температуры.

Нужно подчеркнуть, что из вида уравнений (11)–(13) следует, что вклад второго слагаемого будет тем более значимым, чем меньше величина пересыщения. Этот эффект характерен как для ОЦК металлов [20, 21], так и для ГЦК-алюминия.

Таким образом, если для α -Fe [20, 21] основной причиной, влияющей на изменение формы изначально сферических пор, является анизотропия потока вакансий из-за асимметрии атомных смещений в окрестности пор, то для алюминия этот эффект не является определяющим. Для алюминия, вероятно, основной причиной изменения формы поры является различие поверхностных энергий для кристаллографических плоскостей разного типа. Однако в этой работе мы применили линеаризованное уравнение для потока вакансий (1a). Следует ожидать, что использование более общего уравнения для потока вакансий [18] должно приводить к большему влиянию упругого поля на компоненты скорости роста пор в области низких температур. (Отметим, что упомянутое уравнение учитывает нелинейную зависимость элементов матрицы коэффициентов диффузии от компонент тензора деформаций). И как следствие применения такого уравнения, большему различию скоростей роста по разным кристаллографическим направлениям как для металлов с ОЦК-структурой, так и с ГЦК.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Разработана модель для определения атомной структуры вблизи нанопор и расчета скоростей смещения элементов поверхности пор в ГЦК-металлах.

Получена атомная структура вблизи нанопор в алюминии.

Расчеты скоростей смещения элементов поверхности пор в ГЦК-Al выполнены с использованием результатов атомного моделирования.

Показано, что если основной причиной анизотропии скорости роста пор в ОЦК-железе является существенное различие в смещениях атомов по разным кристаллографическим направлениям, то в алюминии эти эффекты выражены заметно слабее.

Нет конфликта интересов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Was G.S. Fundamentals of radiation materials science: Metals and alloys. Second edition, Springer-Verlag Berlin Heidelberg. 2016. P. 827.
2. Garner F.A. Radiation damage in austenitic steels, in: Comprehensive Nuclear Materials., Elsevier Ltd. 2012. P. 33–95.
3. Конобеев Ю.В., Голубов С.И., Печенкин В.А. Распухание и газы в металлах под облучением // Вопр. атомной науки и техники. Сер. Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение. 1981. Вып. 3(17). С. 44–55.
4. Wang Xu, Monterrosa Anthony M., Zhang Feifei, Huang Hao, Yan Qingzhi, Jiao Zhijie, Was Gary S., Wang Lumin. Void swelling in high dose ion-irradiated reduced activation ferritic–martensitic steels // J. Nucl. Mater. 2015. V. 462. P. 119–125.
5. Singh B.N., Bilde-sbrensen J.B., Leffers T., Ozhigov L.S., Gann V.V. Cavity formation in aluminium irradiated with a pulsating beam of 225 mev electrons // J. Nucl. Mater. 1984. V. 122–123. P. 542–546.
6. Девятко Ю.Н., Тронин В.Н. Возникновение зародышей новой фазы в облучаемых металлах // ФММ. 1987. Т. 63. № 4. С. 635–643.
7. Девятко Ю.Н., Каган М.Ю., Хомяков О.В. Новый механизм образования вакансионных пор // Физика низких температур. 2010. Т. 36. № 4. С. 398–402.
8. Антропов А.С., Озрин В.Д., Стегайлов В.В., Тарасов В.И. Связь поверхностной самодиффузии и подвижности пузырей в твердом теле: теория и атомистическое моделирование // ЖЭТФ. 2019. Т. 156. № 1. С. 7.
9. Chen C.W. The shapes of irradiation-produced voids in nickel // Phys. Stat. Sol. (a). 1973. V. 16. P. 197–210.
10. Zinkle S.J. Radiation-induced effects on microstructure // Comprehen. Nucl. Mater. 2012. P. 4.
11. Ge W., Zhao S., Wang C., Liu H., Su Y., Huang J., Gao Z., Xue J., Wang Y. A Model for Dose Dependence of the Void Swelling in Electron Irradiated Alloys // Metals. 2022. V. 12. P. 244–255.

12. *Портных И.А., Козлов А.В.* Рост вакансионных пор на начальной стадии нестационарного распухания // ФММ. 2018. Т. 119. № 6. С. 636–644.
13. *Niwase K., Ezawa T., Fujita F.E., Kusanagi H., Takaku H.* Morphology of micro-cavities in nickel during Helium bombardment and post-irradiation annealing // Radiation Effects. 1998. V. 106. № 1–2. P. 65–76.
14. *Han G.M., Wang H., Lin D.Y., Zhu X.Y., Hu S.Y., Song H.F.* Phase-field modeling of void anisotropic growth behavior in irradiated zirconium // Comp. Mater. Sci. 2017. V. 133. P. 22–34.
15. *Kitayama M., Glaeser A.M.* The kinetics of pore shape evolution in alumina // J. Mater. Synthesis and Processing. 1998. № 6. P. 161–167.
16. *Nazarov A.V., Mikheev A.A.* Diffusion under a stress in fcc and bcc metals // J. Phys.: Condens. Matter. 2008. V. 20. P. 485203–7.
17. *Nazarov A.V., Mikheev A.A., Valikova I.V., Zaluzhnyi A.G.* Diffusion under a stress in metals and interstitial alloys // Solid State Phenomena. 2011. V. 172–174. P. 1156–1163.
18. *Nazarov A.V., Mikheev A.A.* General Approach to Diffusion under a Stress in Metals and Interstitial Alloys // Defect and Diffusion Forum. 2015. V. 363. P. 112–119.
19. *Mikheev A.A., Nazarov A.V., Ershova I.V., Zaluzhnyi A.G.* Kinetics of Void Growth in Cubic Metals. Theory and Simulation // Defect and Diffusion Forum. 2015. V. 363. P. 91–98.
20. *Nazarov A.V., Mikheev A.A., Melnikov A.P.* Simulation of the atomic structure near voids and estimation of their growth rate anisotropy // J. Nucl. Mater. 2020. V. 532. P. 152067–7.
21. *Nazarov A.V., Melnikov A.P., Mikheev A.A., Ershova I.V.* Modeling the atomic structure in the vicinity of the spherical voids and calculation of void growth rate anisotropy in bcc iron and tungsten // IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng. 2020. V. 1005. P. 012026–6.
22. *Eshelby J.D.* The continuum theory of lattice defects in Solid State Physics / Ed. by *F. Seitz and D. Turnbull*. Academic Press. New York, 1956. P. 79–144.
23. *Valikova I.V., Nazarov A.V.* Simulation of Pressure Effects on Self-Diffusion in BCC Metals // Defect and Diffusion Forum. 2008. V. 277. P. 125–132.
24. *Валикова И.В., Назаров А.В.* Моделирование характеристик, определяющих влияние давления на концентрацию и диффузионную подвижность вакансий в ОЦК металлах: Новый подход // ФММ. 2008. Т. 105. № 6. С. 1–9.
25. *Валикова И.В., Назаров А.В.* Моделирование характеристик, определяющих влияние давления на самодиффузию в ОЦК и ГЦК металлах // ФММ. 2010. Т. 109. № 3. С. 237–244.
26. *Ganchenkova M., Nazarov A., Kuznetsov A.* Formation and stability of radiation defect complexes in Si and Si:Ge: Composition and pressure effects // Nucl. Instrum. Method B. 2003. V. 202. P. 107–113.
27. *Germanov A.B., Ershova I.V., Kislytskaya E.V., Nazarov A.V., Zaluzhnyi A.G.* Atomic structure in the vicinity of nanovoids and features of these defects // Met. Phys. Adv. Techn. 2013. V. 35. № 10. P. 1391–1403.
28. *Mishin Y., Farkas D., Mehl M.J., Papaconstantopoulos D.A.* Interatomic potentials for monoatomic metals from experimental data and ab initio calculations // Phys. Rev. B. 1999. V. 59. № 5. P. 3393–3407.
29. *Nazarov A.V., Ershova I.V., Volodin Y.S.* Simulation of Atomic Structure Near Nanovoids in BCC Iron // KnE Mater. Sci. 2018. <https://doi.org/10.18502/kms.v4i1.2197>
30. *Черемской П.Г., Слезов В.В., Бетехтин В.И.* Поры в твердых телах. М.: Энергоатомиздат, 1990. 615 с.
31. *Slezov V.V.* Kinetics of First-order Phase Transitions. WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2009. 415 p.
32. *Назаров А.В.* Нескомпенсированный поток вакансий и эффект Киркендалла // ФММ. 1973. Т. 35. № 3. С. 645–649. *Nazarov A.V.* // Phys. Metals. and Metallography, 1973. V. 35. № 3. P. 184–186. https://www.researchgate.net/publication/283492271_Uncompensated_vacancy_flow_and_the_kirkendall_effect.
33. *Nazarov A.V., Ershova I.V., Volodin Y.S.* Simulation of Atomic Structure Near Nanovoids in BCC Iron // KnE Mater. Sci. 2018. <https://doi.org/10.18502/kms.v4i1.2197w>