

Точечные дефекты и их свойства в высокоэнтропийном сплаве $\text{Fe}_{20}\text{Ni}_{20}\text{Cr}_{20}\text{Co}_{20}\text{Cu}_{20}$

М. А. Кретьова⁺, Р. А. Кончаков⁺¹⁾, Н. П. Кобелев*, В. А. Хоник⁺

⁺ Воронежский государственный педагогический университет, 394043 Воронеж, Россия

* Институт физики твердого тела РАН, 142432 Черноголовка, Россия

Поступила в редакцию 27 апреля 2020 г.

После переработки 27 апреля 2020 г.

Принята к публикации 1 мая 2020 г.

Методами молекулярной динамики и статики определены характеристики межузельных атомов и вакансий в высокоэнтропийном сплаве $\text{Fe}_{20}\text{Ni}_{20}\text{Cr}_{20}\text{Co}_{20}\text{Cu}_{20}$. Изучено влияние этих дефектов на упругие модули. Установлено, что межузельные атомы устойчивы только в виде гантелей, ответственных за значительный диаэластический эффект (снижение модуля сдвига). В сравнении с вакансиями межузельные гантели вызывают существенно более быстрое снижение модуля сдвига по мере роста объема, вызванного ростом их концентрации. Кроме того, межузельные гантели приводят к появлению специфических высоко- и низкочастотных мод в спектре колебательной плотности состояний, причем последние связаны с наблюдаемым диаэластическим эффектом. Исследована эволюция диаэластического эффекта и колебательного спектра при переводе системы в некристаллическое состояние.

DOI: 10.31857/S1234567820120034

1. Введение. В последнее десятилетие значительно активизировались исследования высокоэнтропийных сплавов (ВЭС), т.е. систем, состоящих из пяти или более компонентов [1]. Этот интерес связан, во-первых, с осознанием уникальности их структурного состояния. Твердые растворы ВЭС обычно образуют плотноупакованную (обычно ГЦК) решетку, в узлах которой разные компоненты распределены случайно. Такие сплавы обладают высокой энтропией смешения $\Delta S_m = R \ln n$ (R – универсальная газовая постоянная), растущей с увеличением числа компонентов n и при зафиксированном n достигающей максимума в случае эквиатомного состава [1]. Важной мотивацией исследований ВЭС являются основанный на энтропийном подходе фундаментально новый композиционный “дизайн”, а также чрезвычайно широкое многообразие химических составов и микроструктур.

Было обнаружено, что ВЭС обладают рядом привлекательных свойств (высокие твердость и прочность, высокотемпературная стабильность, высокая вязкость разрушения при криогенных температурах, коррозионная стойкость, биосовместимость, радиационная устойчивость и др.), которые делают ВЭС перспективными для различных конструкционных и функциональных применений [1, 2]. Высказывается

мнение о том, что изучение ВЭС может привести к созданию принципиально новых конструкционных и функциональных металлических материалов [3].

Отдельную задачу представляет собой изучение аморфных высокоэнтропийных сплавов (ВЭАС), начавшееся 6–7 лет тому назад. Эти сплавы, с одной стороны, сохраняют уникальные свойства, характерные для стандартных аморфных сплавов. С другой стороны, ВЭАС обладают более высокой стабильностью по отношению к кристаллизации (более высокие энергии активации и температура кристаллизации, пониженные скорости роста кристаллических фаз) [4], что весьма важно в плане практических применений. В литературе специально отмечается, что ВЭАС могут иметь специфические свойства, которые не проявляются ни в высокоэнтропийных кристаллических сплавах, ни в стандартных аморфных сплавах [5]. Вместе с тем, имеющаяся информация о ВЭАС довольно ограничена.

Как известно, точечные дефекты могут кардинально влиять на физические свойства материалов. Однако сколько-нибудь значимые данные о точечных дефектах в кристаллических ВЭС практически отсутствуют. При этом аморфное состояние может быть органически связано с точечными дефектами в кристалле. Это прямо аргументируется межузельной теорией (МТ) конденсированного состояния, предполагающей, что плавление происходит в

¹⁾e-mail: konchakov.roman@gmail.com

результате быстрой генерации межузельных атомов в гантельной конфигурации, остающимися идентифицируемыми структурными элементами в расплаве [6, 7]. Твердое аморфное состояние при этом наследует дефектную систему расплава, а релаксационные явления в нем можно интерпретировать как результат изменения концентрации замороженных дефектов межузельного типа. Этот подход оказался чрезвычайно плодотворным и позволил количественно описать целый ряд свойств металлических стекол (см. обзор [8] и цитируемую в нем литературу).

Изложенное выше определило мотивацию настоящего исследования. Представляло интерес, с одной стороны, исследовать свойства точечных дефектов в типичном ВЭС, выбранном в качестве примера. С другой стороны, переводя этот сплав в аморфное состояние высокоскоростной закалкой расплава и исследуя его свойства, можно получить косвенную информацию о точно-подобных дефектах в нем.

Методика моделирования и результаты. Было выполнено моделирование ВЭС $Fe_{20}Ni_{20}Cr_{20}Co_{20}Cu_{20}$ (ат. %) в кристаллическом и аморфном состояниях методами молекулярной динамики и статики. Модельные расчеты реализованы в пакете LAMMPS [9] с межатомным потенциалом типа EAM из работы [10]. Модельная кристаллическая решетка строилась следующим образом. В узлы ГЦК решетки из $N = 32000$ атомов ($20 \times 20 \times 20$ трансляций элементарной ячейки) в случайном порядке помещались атомы Fe, Ni, Cr, Co, Cu с сохранением эквиатомного соотношения компонентов.

Упругие модули вычислялись при нулевой температуре как отношение изменения механических напряжений к соответствующим малым деформациям модельной системы. Модуль сдвига поликристалла G^{poly} оценивался как полусумма $G^{poly} = (G_R + G_V)/2$ усреднений по Ройсу, $G_R = \frac{5(C_{11}-C_{12})C_{44}}{4C_{44}+3(C_{11}-C_{12})}$, и Фойгту, $G_V = \frac{C_{11}-C_{12}+3C_{44}}{5}$ [11, 12]. Здесь C_{11} , C_{12} , C_{44} – компоненты тензора упругих модулей в фойгтовской нотации.

Энтальпия формирования точечных дефектов вычислялась по формуле $H_f = H_{rel} - H_{ini}(N \pm 1)/N$, где H_{ini} – энтальпия бездефектной решетки, H_{rel} – энтальпия системы после внедрения дефекта и релаксации структуры. Знаки плюс и минус соответствуют случаям межузельной гантели и вакансии соответственно. В каждом узле одной и той же решетки поочередно создавались вакансии и межузельные гантели ориентации [001]. Химические элементы пары гантельных атомов выбирались случайно.

При исследовании зависимости упругих модулей от концентрации дефектов межузельные гантели вводились в случайные узлы решетки, но так, чтобы количество дефектов с ориентациями [001], [010] и [100] было одинаковым. Концентрационные зависимости упругих модулей вычислялись путем усреднения результатов, полученных для пяти разных конфигураций дефектов в модельной системе.

Релаксационные объемы дефектов рассчитывались по формуле

$$r = \Delta V/\Omega \pm 1, \quad (1)$$

где ΔV – изменение объема при введении дефектов, плюс и минус соответствуют межузельным гантелям и вакансиям [13].

Стеклообразное состояние получалось путем закалки расплава от 3000 до 0 К со скоростями охлаждения от 10^{12} до 10^{14} К/с. Для каждой конфигурации модельной системы, соответствующей определенной скорости охлаждения, вычислялись объем и модуль сдвига при нулевой температуре.

Колебательная плотность состояний (VDoS – *vibrational density of states*) вычислялась в гармоническом приближении как преобразование Фурье квадрата модуля автокорреляционной функции скорости атомов при $T = 50$ К. В случае расчета локальной VDoS отдельной межузельной гантели выполнялось усреднение локальных колебательных спектров 1000 межузельных гантелей. При этом пара химических элементов, формирующих межузельную гантель и узел кристаллической решетки, выбиралась случайным образом.

2. Результаты моделирования и обсуждение. Было установлено, что межузельные атомы образуются только в гантельной конфигурации с ориентацией $\langle 001 \rangle$, все другие возможные варианты оказываются неустойчивыми. На рисунке 1 показаны гистограммы распределения энтальпий формирования точечных дефектов. Наиболее вероятная энтальпия формирования вакансий H_{vac}^f составляет 1.4 эВ, тогда как для межузельных атомов эта величина значительно больше, $H_{int}^f = 4.8$ эВ. Как и в простых металлах [14], H_{int}^f значительно больше H_f^{vac} . Существенный разброс значений H_f^{vac} и H_{int}^f , очевидно, является следствием того, что вакансии и межузельные атомы могут формироваться атомами разного сорта, и иметь разное ближайшее окружение. В целом высокие значения энтальпий формирования говорят о том, что данный сплав может обладать хорошей радиационной устойчивостью. Полученные нами значения энтальпий формирования согласуются

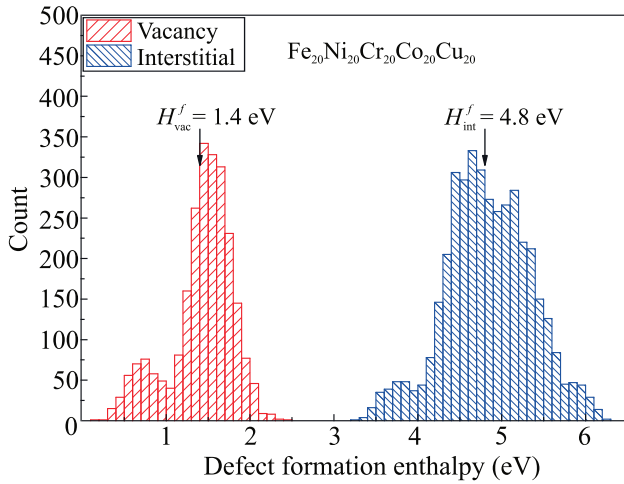


Рис. 1. (Цветной онлайн) Энтальпии формирования вакансий и межузельных гантелей в кристалле FeNiCrCoCu

ся с результатами моделирования похожего сплава FeCoCrNi [15].

На рисунке 2 представлены зависимости нормированных упругих модулей кристалла FeNiCrCoCu от концентрации межузельных гантелей c_{int} , а также зависимость нормированного модуля сдвига C_{44} от концентрации вакансий c_{vac} . Нормировка осуществлялась делением упругих модулей на их значения в бездефектном кристалле. Видно, прежде всего, что характер зависимостей упругих модулей от концентрации дефектов принципиально отличается в разных случаях: наблюдается либо линейное снижение упругих модулей с концентрацией (диаэластический эффект), либо их линейное увеличение (параэластический эффект).

Если диаэластический эффект – снижение модуля сдвига C_{44} с ростом концентрации межузельных атомов и вакансий – хорошо известен в литературе [16], то, насколько нам известно, показанный на рис. 2 параэластический эффект – рост модулей C_{11} , C_{12} и объемного модуля B с ростом c_{int} – установлен для ВЭС впервые. При этом модуль $C' = (C_{11} - C_{12})/2$, который в кристаллах несколько снижается с увеличением c_{int} [16], в нашем случае от этой концентрации практически не зависит.

Для идеальной решетки при нулевой температуре было найдены модули $C_{11}^{\text{perf}} = 230.6$ ГПа, $C_{12}^{\text{perf}} = 143.4$ ГПа, $C_{44}^{\text{perf}} = 116.4$ ГПа, $C'^{\text{perf}} = (C_{11} - C_{12})/2 = 43.6$ ГПа, $B^{\text{perf}} = 172.5$ ГПа. Эти значения согласуются с результатами *ab-initio* моделирования близкого по составу сплава CoCuFeNi [17], однако какие-либо экспериментальные данные об упругих модулях исследуемого ВЭС нам неизвестны.

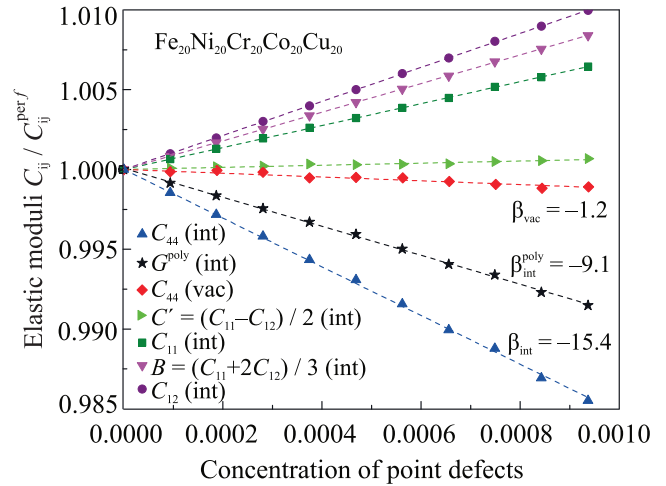


Рис. 2. (Цветной онлайн) Зависимость упругих модулей монокристалла FeNiCrCoCu от концентрации межузельных гантелей и вакансий. Показана также зависимость модуля сдвига поликристалла G^{poly} от концентрации межузельных гантелей

Наибольший интерес представляют модуль сдвига монокристалла C_{44} и модуль сдвига поликристалла G^{poly} , полученный усреднением по Ройсу–Фойгту (см. выше). Было найдено, что $G^{\text{poly}} = 78.5$ ГПа. Угловые коэффициенты для этих модулей, называемые сдвиговыми восприимчивостями, обозначены на рис. 2 как $\beta_{\text{int}} = dC_{44}/dc_{\text{int}} = -15.4$, $\beta_{\text{vac}} = dC_{44}/dc_{\text{vac}} = -1.0$ и $\beta_{\text{int}}^{\text{poly}} = dG^{\text{poly}}/dc_{\text{int}} = -9.1$. Чувствительность модуля сдвига поликристалла к вакансиям также мала: $\beta_{\text{vac}}^{\text{poly}} = dG^{\text{poly}}/dc_{\text{vac}} = -1.6$ (на рис. 2 не показано).

Отметим два обстоятельства. Во-первых, сдвиговые чувствительности для межузельных атомов по модулю на порядок или более превышают таковые для вакансий. Такая же ситуация имеет место и для простых металлов (например, для алюминия $\beta_{\text{int}} = -27$, тогда как для вакансий $\beta_{\text{vac}} = -2$ [18]). Во-вторых, диаэластический эффект для межузельных атомов, показанный на рис. 2, может быть непосредственно связан с вышеупомянутой межузельной теорией. Действительно, основное уравнение МТ связывает модуль сдвига кристалла с межузельными дефектами и идеального кристалла в виде

$$C_{44} = C_{44}^{\text{perf}} \exp(\beta_{\text{int}} \times c_{\text{int}}). \quad (2)$$

При малых концентрациях c_{int} уравнение (2) дает линейное снижение модуля C_{44} , что и имеет место на рис. 2.

Введение дефектов вызывает рост объема системы, модуль сдвига при этом снижается. На рисунке 3 показаны изменения модулей сдвига C_{44} и G моно-

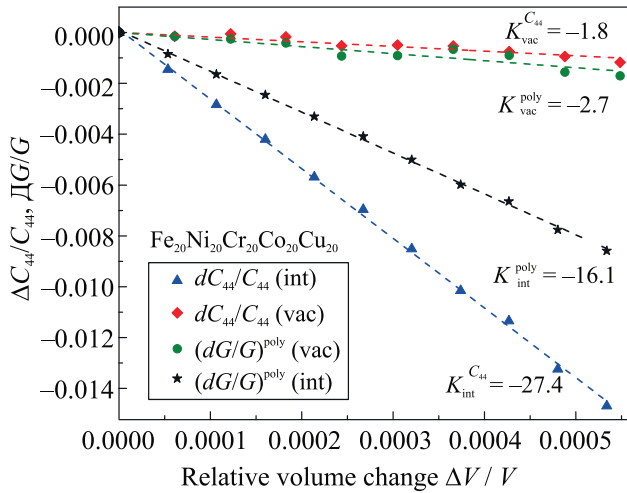


Рис. 3. (Цветной онлайн) Зависимость упругих модулей C_{44} и G для моно- и поликристалла $FeNiCrCoCu$ от относительного изменения объема, вызванного межузельными атомами и вакансиями

и поликристаллов от изменений объема, вызванного межузельными атомами и вакансиями. Видно, что во всех случаях модули сдвига линейно уменьшаются с ростом объема. Скорость этого уменьшения можно охарактеризовать параметрами $K^{C_{44}} = d \ln C_{44} / d \ln V$ и $K^{poly} = d \ln G / d \ln V$ для моно- и поликристалла соответственно. Из рисунку 3 видно, что в случае межузельных атомов этот параметр составляет -27.4 и -16.1 для моно- и поликристалла соответственно. Для вакансий эти величины в 6–15 меньше. Причины этой разницы вполне понятны. С одной стороны, межузельные атомы вызывают гораздо большее снижение модуля сдвига в силу значительно большей сдвиговой восприимчивости, связанной с большей дополнительной (неаффинной) деформацией вокруг ядра межузельной гантели [19]. С другой стороны, межузельная гантель, в отличие от вакансии, является упругим диполем, переориентировка которого в поле знакопеременных напряжений дает дополнительное неупругое снижение модуля сдвига [20].

Изменение объема при введении дефектов можно описать на языке релаксационного объема r (см. определение (1)). Результаты расчета r показаны на рис. 4. Видно, что в среднем $r_{vac} = -0.35$ и $r_{int} = 1.57$ для вакансий и межузельных гантелей соответственно. Разброс r обусловлен теми же причинами, что и разброс энтальпий формирования (см. выше). Отношение соответствующих объемных изменений есть $(\Delta V/V)_{int} / (\Delta V/V)_{vac} = (r_i - 1) / (r_v + 1) = 0.89$, т.е. вакансии дают несколько большее изменение объе-

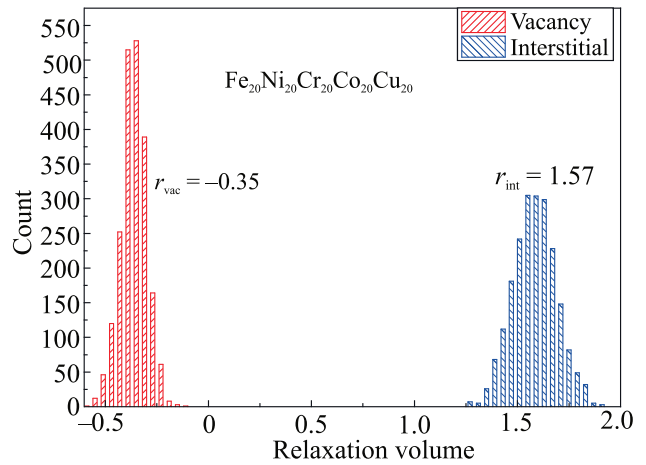


Рис. 4. (Цветной онлайн) Релаксационный объем вакансий и межузельных гантелей в кристалле $FeNiCrCoCu$

ма. Для сравнения, в чистом алюминии имеет место обратная ситуация [19].

Величины r можно связать с зависимостью модуля сдвига от объема для моно- и поликристалла. С этой целью формулу (2) для поликристалла можно переписать в виде $G = G^{perf} \exp(\beta_{int}^{poly} \times c)$, где G^{perf} – модуль сдвига поликристалла без точечных дефектов, c – их концентрация. Комбинируя эту формулу, уравнение (2) и определение релаксационного объема (1), можно прийти к выражению для вышеупомянутого параметра K , удобного для идентификации механизмов релаксации, сопровождающихся изменениями модуля сдвига и объема:

$$K = \frac{d \ln G}{d \ln V} = \frac{\beta}{r \pm 1}, \quad (3)$$

где “+” и “–” отвечают вакансионному и межузельному механизмам релаксации, r и β – соответствующие релаксационный объем и сдвиговая чувствительность, под G для монокристалла подразумевается упругий модуль C_{44} , а для поликристалла – усредненный по Ройсу–Фойгту модуль сдвига.

В таблице 1 показаны рассчитанные релаксационные объемы и сдвиговые чувствительности межузельных атомов и вакансий в монокристалле и поликристалле, упругие модули которого получены усреднением модулей монокристалла по Ройсу–Фойгту. В таблице 1 приведены также величины релаксационного параметра K для межузельных атомов и вакансий, определенные из показанных на рис. 3 зависимостей упругих модулей от объема (обозначены как K^{simul}) и рассчитанные (обозначены как K^{theor}) с помощью МТ по формуле (3). Как видно, величины, определенные по результатам моделиро-

Таблица 1. Релаксационные параметры межузельных атомов (int) и вакансий (vac) в моно- и поликристалле FeNiCrCoCu: релаксационные объемы r , сдвиговые восприимчивости β , а также полученные по результатам моделирования (simul) и рассчитанные по формуле (3) (theor) значения параметра релаксационного K

	Single crystal	Polycrystal
r_{int}	1.57	1.57
r_{vac}	-0.36	-0.36
β_{int}	-15.4	-9.1
β_{vac}	-1.2	-1.7
$K_{\text{int}}^{\text{simul}}$	-27.4	-16.1
$K_{\text{int}}^{\text{theor}}$	-27.0	-16.0
$K_{\text{vac}}^{\text{simul}}$	-1.8	-2.7
$K_{\text{vac}}^{\text{theor}}$	-1.9	-2.7

вания (K^{simul}) во всех случаях практически совпадают с расчетом (K^{theor}) по формуле (3). Из этого следует, что основное уравнение межузельной теории в обоих вышеприведенных вариантах адекватно соответствует результатам проведенного моделирования.

Высокоскоростная закалка расплава приводит к образованию аморфного состояния. Степень релаксации, модуль сдвига и объем при этом зависят от скорости закалки. Представляет интерес сопоставить эту зависимость с полученными результатами для моно- и поликристаллического состояний. С этой целью вычислялись модуль сдвига и объем модели при $T = 0$ К в некристаллическом состоянии, полученном со скоростями закалки расплава от 1×10^{12} К/с до 1×10^{14} К/с.

Рисунок 5 показывает, что модуль сдвига линейно снижается с увеличением объема, вызванного ростом скорости закалки. При этом параметр релаксации $K^{\text{glass}} = dnG/d \ln V = \frac{\Delta G/G}{\Delta V/V}$ равен -11.6 . Это по модулю примерно на треть меньше его значения для межузельных атомов в поликристаллическом состоянии ($K_{\text{int}}^{\text{simul}} = -16.1$, см. табл. 1), но в 4.3 раза выше, чем для вакансий ($K_{\text{vac}}^{\text{simul}} = -2.7$).

Можно предполагать поэтому, что степень релаксации стекла при изменении скорости закалки контролируется в основном изменением концентрации дефектов типа межузельных гантелей, замороженных из расплава, как и предполагается в МТ [8, 19]. Концентрацию этих дефектов c_d можно тогда оценить с помощью основного уравнения МТ, которое в этом случае следует записать как $G^{\text{glass}} = G^{\text{poly}} \exp(\beta_{\text{int}}^{\text{poly}} \times c_d)$, где G^{poly} – модуль сдвига бездефектного материнского поликристалла, полученный усреднением по Ройсу–Фойгту, и $\beta_{\text{int}}^{\text{poly}} = -9.1$ – его сдвиговая восприимчивость (табл. 1). Для аморфного состояния было найдено, что при скоро-

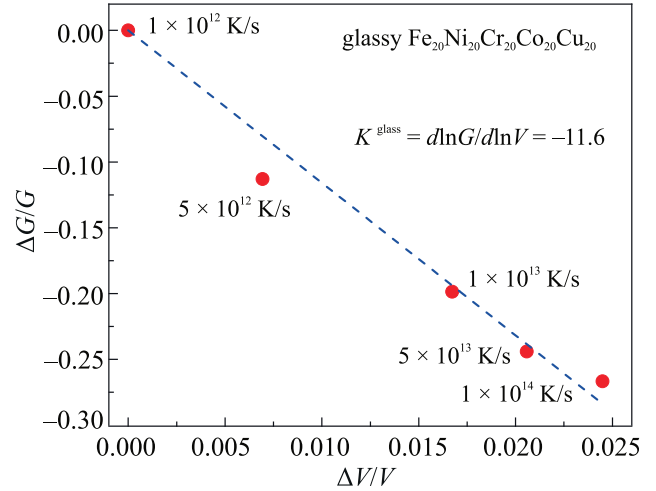


Рис. 5. (Цветной онлайн) Изменение модуля сдвига сплава в некристаллическом состоянии при $T = 0$ К при изменении объема, вызванного увеличением скорости закалки (указаны) расплава

сти закалки 10^{12} К/с модуль сдвига $G^{\text{glass}} = 53.7$ ГПа. Тогда концентрацию замороженных дефектов можно оценить как $c_d \approx 4.2\%$, что близко к типичным оценкам этой величины (2.5–3%) для объемных металлических стекол [8].

Важнейшей составляющей МТ является утверждение о высокой колебательной энтропии межузельных гантелей, связанной с наличием характерных низкочастотных мод в их колебательном спектре [7]. Можно поэтому ожидать наличия таких мод и в колебательном спектре кристалла ВЭС с межузельными дефектами. С этой целью мы рассчитали VDoS бездефектного кристалла, а также колебательные спектры атомов, составляющих межузельную гантель, и стекла, приготовленного закалкой расплава. Соответствующие результаты показаны на рис. 6. Колебательный спектр бездефектного кристалла представляет собой два размытых максимума плотности состояний в интервале от ≈ 3 ТГц до ≈ 12 ТГц. Для атомов межузельной гантели VDoS имеются два больших пика: а) низкочастотный пик в области вокруг 2 ТГц и б) высокочастотный пик выше 12 ТГц. Колебательные состояния в бездефектном кристалле на таких частотах практически отсутствуют.

Аналогичные низко- и высокочастотные пики VDoS характерны для простых металлов [21]. Эти особенности вызваны колебаниями атомов гантели вдоль или поперек ее оси, а также их фазовыми соотношениями. Низкочастотные (в 5–7 раз ниже дебаевской частоты) особенности VDoS вызваны синфазными колебаниями атомов поперек оси ганте-

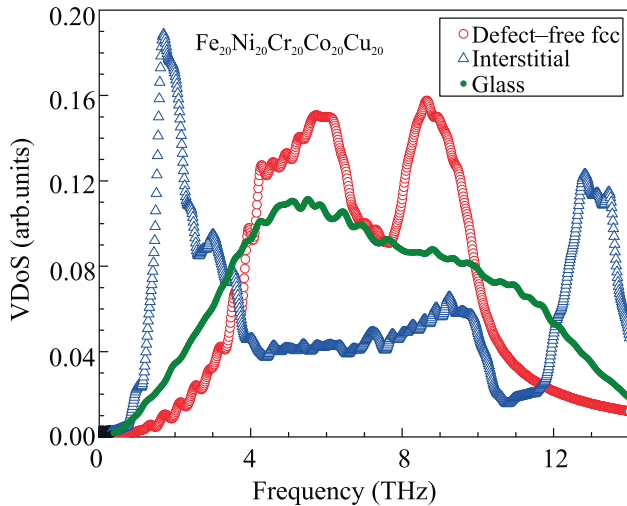


Рис. 6. (Цветной онлайн) Плотности колебательных состояний атомов бездефектного кристалла, отдельной межузельной гантели и стеклообразного $FeNiCrCoCu$

ли и именно они ответственны за диаэластический эффект, связанный с этими дефектами [21]. Таким образом, образование межузельных гантелей в кристалле приводит к смещению VDoS в низкочастотную и высокочастотную области. Можно ожидать поэтому, что эти особенности будут присутствовать в колебательном спектре стекла, полученного плавлением кристалла и закалкой расплава.

Колебательный спектр исследуемого ВЭС в стеклообразном состоянии представляет собой широкую колоколообразную кривую (рис. 6). Особенность этого VDoS состоит в наличии значительной плотности состояний на низких частотах (≤ 2 ТГц) и в высокочастотной области (≥ 12 ТГц), т.е. на тех областях, где для бездефектного кристалла плотность состояний мала. Сравнивая VDoS на рис. 6, можно вновь прийти к предположению о том, что исследуемый ВЭС в стеклообразном состоянии содержит дефекты, аналогичные межузельным гантелям, в соответствии с МТ и результатами моделирования [19]. Подчеркнем в этой связи работу [22], показавшую на примере ВЭС $CuNiCoFe$, что низкочастотный максимум VDoS межузельных дефектов является причиной возникновения низкотемпературного бозонного пика теплоемкости, являющегося характерной особенностью некристаллических систем.

Заключение. Рассчитаны энтальпии формирования и релаксационные объемы вакансий и межузельных атомов в высокоэнтропийном сплаве $Fe_{20}Ni_{20}Cr_{20}Co_{20}Cu_{20}$. Определено влияние этих дефектов на упругие модули и объем V моно- и поликристалла. Показано, что межузельные атомы,

в сравнении с вакансиями, вызывают значительно более существенное снижение модуля сдвига G (диаэластический эффект). Зависимость $G(V)$ может быть охарактеризована единственным параметром $K = d \ln G / d \ln V$, величина которого сильно отличается для межузельных атомов и вакансий. Этот параметр, по существу, является индикатором природы релаксационных процессов, обусловленных точечными дефектами.

Перевод системы в стеклообразное состояние закалкой расплава с разными скоростями дает изменения модуля сдвига и объема, описываемые параметром K , близким к случаю межузельных атомов в кристалле. Спектр колебательной плотности состояний кристалла с межузельными гантелями содержит специфические низкочастотные моды, связанные с диаэластическим эффектом. Колебательный спектр атомов в некристаллическом состоянии косвенно указывает на наличие дефектов, аналогичных по своим свойствам межузельным гантелям в кристалле.

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

1. M. C. Gao, J.-W. Yeh, P. K. Liaw, and Y. Zhang, *High Entropy alloys. Fundamentals and Applications*, Springer, Switzerland (2016).
2. Y. Zhang, *High Entropy Materials. A Brief Introduction*, Springer, Singapore (2019).
3. Y. F. Ye, Q. Wang, J. Lu, C. T. Liu, and Y. Yang, *Mater. Today* **19**, 349 (2016).
4. M. Yang, X. J. Liu, Y. Wu, H. Wang, X. Z. Wang, and Z. P. Lu, *Mater. Res. Lett.* **6**, 495 (2018).
5. Y. Zhang, T. T. Zuo, Z. Tang, M. C. Gao, K. A. Dahmen, P. K. Liaw, and Z. P. Lu, *Prog. Mater. Sci.* **61**, 1 (2014).
6. A. V. Granato, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 974 (1992).
7. A. V. Granato, *Eur. J. Phys. B* **87**, 18 (2014).
8. V. A. Khonik and N. P. Kobelev, *Metals* **9**, 605 (2019).
9. J. Plimpton, *J. Comput. Phys.* **117**, 1 (1995).
10. D. Farkas and A. Caro, *J. Mater. Res.* **33**, 3218 (2018).
11. R. Meister and L. Peselnick, *J. Appl. Phys.* **37**, 4121 (1966).
12. P. A. Кончаков, А. С. Макаров, Г. В. Афонин, М. А. Кретова, Н. П. Кобелев, В. А. Хоник, *Письма в ЖЭТФ* **109**, 473 (2019).
13. A. S. Makarov, Yu. P. Mitrofanov, R. A. Konchakov, N. P. Kobelev, K. Csach, J. C. Qiao, and V. A. Khonik, *J. Non-Cryst. Solids* **521**, 119474 (2019).
14. W. G. Wolfer, *Fundamental properties of defects in metals*, Comprehensive Nuclear Materials, ed. by R. J. M. Konings, Elsevier, Amsterdam (2012).

15. W. Chen, X. Ding, Y. Feng, X. Liu, K. Liu, Z. P. Lu, D. Li, Y. Li, C. T. Liu, and X.-Q. Chen, *J. Mater. Sci. Technol.* **34**, 355 (2018).
16. L. E. Rehn, J. Holder, A. V. Granato, R. R. Coltman, and F. W. Young (Jr.), *Phys. Rev. B* **10**, 349 (1974).
17. F. Tian, *Front. Mater.* **4**, 36 (2017).
18. C. A. Gordon and A. V. Granato, *Mater. Sci. Eng. A* **370**, 83 (2004).
19. 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).
20. A. S. Nowick and B. S. Berry, *Anelastic Relaxation in Crystalline Solids*, Academic Press, N.Y., London (1972).
21. P. H. Dederichs, C. Lehman, H. R. Schober, A. Scholz, and R. Zeller, *J. Nucl. Mater.* **69–70**, 176 (1978).
22. T. Brink, L. Koch, and K. Albe, *Phys. Rev. B* **94**, 224203 (2016).