

## ДЕФЕКТЫ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЁТКИ

PACS numbers: 61.50.Lt, 61.72.Bb, 61.72.jd, 61.80.Az, 62.20.de, 63.20.dh, 71.15.Nc

### Особливості енергетичних параметрів «деформаційної» та «електрохімічної» взаємодій вакансій у ОЦК-металах

О. В. Олійник, В. А. Татаренко

*Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України,  
бульв. Акад. Вернадського, 36,  
03680, МСП, Київ, Україна*

Розглянуто неаналітичність Фур'є-компонент  $\tilde{V}^{vv}(\mathbf{k})$  енергій  $V^{vv}(\mathbf{r})$  (за своєю природою анізотропної, далекосяжної й квазіосцилювальної в прямому просторі  $\{\mathbf{r}\}$ ) «деформаційної» взаємодії вакансій ( $v$ ) у їх «твердому розчині заміщення» на основі ОЦК-кристалу (на прикладі ОЦК-Мо, Nb, W) з врахуванням його дискретної будови й анізотропії пружності. Взаємодію вакансій досліджено в квазігармонічному наближенні методом статистики ґратниці. Проведено чисельні та аналітичні розрахунки енергетичних параметрів «деформаційної» та «електрохімічної» взаємодій вакансій у ОЦК-кристалі (на прикладі ОЦК-Мо, Nb, W). З'ясовано їх поведінку поблизу та вдалині від центру (зокрема, на поверхні) першої Бріллюєнгової зони оберненого простору ОЦК-ґратниці. У довгохвильовому наближенні ( $\mathbf{k} \equiv \mathbf{0}$ ) визначено апроксимації анізотропних коефіцієнтів  $\mathcal{A}^{vv}(\mathbf{n})$ ,  $\mathcal{B}^{vv}(\mathbf{n})$  розвинення Фур'є-компонент енергій «деформаційної» взаємодії вакансій  $Q^{vv} + \mathcal{A}^{vv}(\mathbf{n}) + \mathcal{B}^{vv}(\mathbf{n})k^2$  ( $\mathbf{n} \equiv \mathbf{k}/k$ ) в околі центру ( $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ ) Бріллюєнгової зони, зокрема, залежно від модулів пружності ОЦК-кристалу. З'ясовано, що  $\mathcal{B}^{vv}(\mathbf{n}) \geq 0$  у напрямках високої симетрії [100], [110], [111] в оберненому просторі для ОЦК-кристалу (незалежно від знаку його параметра анізотропії пружності), а  $\tilde{V}^{vv}(\mathbf{0}) < Q^{vv} + \mathcal{A}^{vv}(\mathbf{n})$  завжди.

A non-analyticity of the Fourier components,  $\tilde{V}^{vv}(\mathbf{k})$ , of the inherently anisotropic, long-range and quasi-oscillating 'strain-induced'  $v-v$ -interaction energies,  $V^{vv}(\mathbf{r})$ , dependent on distances  $\{\mathbf{r}\}$  between vacancies in their solid solution based on finite b.c.c. crystal (for example, b.c.c.-Mo, Nb, W) is considered with regard for its discrete structure and elastic anisotropy. Interactions of point defects are studied by means of the lattice statics method within the scope of the quasi-harmonic approximation. The numerical and analytical calculations of energy parameters for 'strain-induced' and 'electrochemical' interactions of vacancies within the b.c.c. crystal (for example, b.c.c.-Mo, Nb, W) are carried out. Their behaviour near and far from the centre of the b.c.c.-lattice reciprocal-space Brillouin zone (particularly, on

its surface) is studied. Within the long-wave approximation ( $\mathbf{k} \equiv \mathbf{0}$ ), anisotropic expansion coefficients,  $\mathcal{A}^{vv}(\mathbf{n})$ ,  $\mathcal{B}^{vv}(\mathbf{n})$ , for the Fourier components,  $Q^{vv} + \mathcal{A}^{vv}(\mathbf{n}) + \mathcal{B}^{vv}(\mathbf{n})k^2$  ( $\mathbf{n} \equiv \mathbf{k}/k$ ), of the 'strain-induced'  $v-v$  interaction energies near the centre ( $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ ) of Brillouin zone are defined, in particular, depending on the elasticity modules of b.c.c. crystal. As revealed,  $\mathcal{B}^{vv}(\mathbf{n}) \geq 0$  along the high-symmetry [100], [110], [111] directions in reciprocal space for b.c.c. crystal (irrespective of its elastic-anisotropy factor sign), and as always,  $\tilde{V}^{vv}(\mathbf{0}) < Q^{vv} + \mathcal{A}^{vv}(\mathbf{n})$ .

Рассмотрена неаналитичность фурье-компонент  $\tilde{V}^{vv}(\mathbf{k})$  энергий  $V^{vv}(\mathbf{r})$  (по своей природе анизотропного, дальнедействующего и квазиосциллирующего в прямом пространстве  $\{\mathbf{r}\}$ ) «деформационного» взаимодействия вакансий ( $v$ ) в их «твёрдом растворе замещения» на основе ОЦК-кристалла (на примере ОЦК-Мо, Nb, W) с учётом его дискретного строения и анизотропии упругости. Взаимодействие вакансий исследовано в квазигармоническом приближении методом статистики решётки. Проведены численные и аналитические расчёты энергетических параметров «деформационного» и «электрохимического» взаимодействий вакансий в ОЦК-кристалле (на примере ОЦК-Мо, Nb, W). Исследовано их поведение вблизи и вдали от центра (в частности, на поверхности) зоны Бриллюэна обратного пространства ОЦК-решётки. В длинноволновом приближении ( $\mathbf{k} \equiv \mathbf{0}$ ) определены аппроксимации анизотропных коэффициентов  $\mathcal{A}^{vv}(\mathbf{n})$ ,  $\mathcal{B}^{vv}(\mathbf{n})$  разложения фурье-компонент энергий «деформационного» взаимодействия вакансий  $Q^{vv} + \mathcal{A}^{vv}(\mathbf{n}) + \mathcal{B}^{vv}(\mathbf{n})k^2$  ( $\mathbf{n} \equiv \mathbf{k}/k$ ) в окрестности центра ( $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ ) зоны Бриллюэна, в частности, в зависимости от модулей упругости ОЦК-кристалла. Установлено, что  $\mathcal{B}^{vv}(\mathbf{n}) \geq 0$  по направлениям высокой симметрии [100], [110], [111] в обратном пространстве для ОЦК-кристалла (независимо от знака его параметра анизотропии упругости), а  $\tilde{V}^{vv}(\mathbf{0}) < Q^{vv} + \mathcal{A}^{vv}(\mathbf{n})$  всегда.

**Ключові слова:** вакансії, «деформаційна» взаємодія, «електрохімічна» взаємодія, дисперсійна крива, неаналітичність залежності, довгохвильове наближення.

(Отримано 19 травня 2015 р.)

## 1. ВСТУП

Вакансії є одним із найважливіших типів дефектів. Наявність вакансій у твердих тілах відіграє істотну роль в їх динамічних і статистичних властивостях. Поява вакансій у металевому кристалі призводить до зміни йонної й електронної підсистем металу. Зміненим умовам відповідають нові умови рівноваги; тому атоми навколо вакансії зміщуються до нових положень рівноваги. Вакансії в основному визначають об'ємні властивості твердого тіла, а саме, самодифузю, дифузю за вакансійним механізмом, що істотно впливає на процес перенесення речовини в тілі [1], фазові перетворення, зок-

рема, визначаючи можливий механізм мартенситних перетворень [2], стійкість інтерметалідів (проблеми стійкості інтерметалідних фаз та областей однорідності їх за високих температур нерозривно пов'язані з утворенням вакансій та їх розташуванням) [3]. Присутність вакансійних кластерів може впливати на оптичні властивості твердих тіл [4]. Участь вакансій є значною й у явищі утворення надґратниць нанопор у кристалах під опромінюванням [5–18].

Отже, необхідність у дослідженні вакансійної підсистеми в твердих тілах є прямим наслідком потреби у вивченні зазначених явищ і процесів [1–18].

Взагалі-то енергія взаємодії точкових дефектів заміщення  $\alpha$  (вакансій, домішкових атомів) у їхньому твердому розчині в скінченному кубічному кристалі може бути представленою умовно у вигляді суми [19]:

$$W^{\alpha\alpha} \approx V^{\alpha\alpha} + \Phi_{\text{el.chem}}^{\alpha\alpha}, \quad (1)$$

де  $V^{\alpha\alpha}$  — енергія «деформаційної» (чи то «пружньої») взаємодії, що визначається «непрямим» взаємочинном точкових дефектів  $\alpha$ - $\alpha$ , внаслідок інтерференції статичних полів атомових зміщень, які виникають через присутність точкових дефектів у ґратниці кристалу, і обумовлених ними пружних напружень,  $\Phi_{\text{el.chem}}^{\alpha\alpha}$  — енергія «електрохімічної» взаємодії, яка обумовлена «прямою» взаємодією зарядів, яких містять точкові дефекти.

Пружні поля статичних атомових зміщень у кристалі, які створюються точковими дефектами різного типу, впливають на частоти стрибків атомів і на кінетику зміни мікроструктури відповідного матеріалу в процесі його експлуатації. Поряд з кінетичними факторами «деформаційна» [20–24] (чи то пружня [25]) взаємодія точкових дефектів призводить до зміни температур фазових перетворень, утворення модульованих структур, виділення нової фази. В багатьох роботах особливості «деформаційної» взаємодії точкових дефектів досліджувалися континуальному моделю [20–25]; так, зокрема, в обернено-просторовому описі енергій «деформаційної» взаємодії досліджувалися залежності їх Фур'є-образів від напрямку  $\mathbf{n} \equiv \mathbf{k}/k$  квазіхвильового вектора  $\mathbf{k}$  в околі точки  $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ . Вихід за рамки континуального моделю та перехід до довгохвильового наближення при розрахунку енергій пружньої взаємодії точкових дефектів в кристалі уможлиблює неявно врахувати дискретність його будови. Але континуальне та довгохвильове наближення є адекватними лише тому випадку, коли віддаль між дефектами є достатньо великою, наприклад, за малої концентрації точкових дефектів. У випадку віддалі між дефектами порядку найменшої міжвузлової використовується мікроскопічний підхід за так званою методою статистики ґратниці [20, 21]. Власне кажучи, ця метода полягає в пе-

реході до Фур'є-образів координатної залежності геометричних та силових величин-характеристик спотворень ґратниці дефектами [26–28]. Такий підхід уможливив не лише розкрити мікроскопічний зміст феноменологічних параметрів теорії (тензор концентраційних коефіцієнтів дисторсії кристалічної ґратниці, частот і векторів поляризації власних коливань та модулів пружності кристалу), але й врахувати ефекти, які пов'язані з анізотропією просторової дисперсії пружних властивостей, що неможливо зробити в рамках макроскопічної теорії пружного середовища.

Коли віддаль між точковими дефектами у кубічному кристалі набагато перевищує параметер  $a$  його ґратниці, енергії ефективно парної взаємодії між ними  $W^{\alpha\alpha}(\mathbf{R} - \mathbf{R}')$  в основному визначаються тими Фур'є-компонентами  $\tilde{W}^{\alpha\alpha}(\mathbf{k})$ , яких можна наблизити Тейлоровим рядом за степенями  $k^2$  (через наявність центрів інверсії  $\tilde{W}^{\alpha\alpha}(-\mathbf{k}) = \tilde{W}^{\alpha\alpha}(\mathbf{k})$  [29]):

$$\tilde{W}^{\alpha\alpha}(\mathbf{k}) \approx \tilde{V}^{\alpha\alpha}(\mathbf{k}) + \tilde{\varphi}_{\text{el.chem}}^{\alpha\alpha}(\mathbf{k}) \cong \tilde{w}_n^{\alpha\alpha} + \tilde{B}^{\alpha\alpha}(\mathbf{n})k^2 + \dots, \quad (2)$$

де  $\tilde{V}^{\alpha\alpha}(\mathbf{k})$  — Фур'є-компонента «деформаційної» енергії взаємодії точкових дефектів,  $\tilde{\varphi}_{\text{el.chem}}^{\alpha\alpha}(\mathbf{k})$  — Фур'є-компонента «електрохімічної» енергії взаємодії точкових дефектів,  $\tilde{w}_n^{\alpha\alpha}$ ,  $\tilde{B}^{\alpha\alpha}(\mathbf{n})$  — коефіцієнти розвинення.

Фур'є-образ енергій (непрямої) «деформаційної» взаємодії точкових дефектів  $\alpha$ - $\alpha$  навіть у скінченній малій області поблизу  $\mathbf{k} = \mathbf{0}$  можна наблизити виразом [29, 30]:

$$\tilde{V}^{\alpha\alpha}(\mathbf{k}) \cong \mathcal{A}^{\alpha\alpha}(\mathbf{n}) + \mathcal{B}^{\alpha\alpha}(\mathbf{n})k^2 + \mathcal{Q}^{\alpha\alpha}(\mathbf{n} \equiv \mathbf{k}/k, \mathbf{k} \rightarrow \mathbf{0}). \quad (3)$$

Перший доданок праворуч дається власне континуальним наближенням, а другий — першою («довгохвильовою») поправкою до нього,  $\mathcal{Q}^{\alpha\alpha}$  — параметер, калібрування яким виключає ефект непрямої «самолії» (тобто враховує пружню не взаємодію дефекту з ним самим) [31]. Явний вираз для  $\mathcal{A}^{\alpha\alpha}(\mathbf{n})$  через модулі пружності кубічного кристалу відомий [20, 22, 24, 29]. Для знаходження виразу для коефіцієнта  $\mathcal{B}^{\alpha\alpha}(\mathbf{n})$ , який відповідає за ефекти просторової дисперсії в теорії пружності, треба виходити з мікроскопічного моделю. в рамках якого враховується дискретна (атомарна) будова кристалу, а  $\mathcal{B}^{\alpha\alpha}(\mathbf{n})$  визначається набором модельних параметрів цупкості його міжатомових зв'язків (див. [29, 30] та й [19, 22]). Натомість для аналітичного дослідження енергетичного впливу «деформаційної» взаємодії на конфігураційні стани сукупності дефектів у кристалі потрібно знайти апроксимацію  $\mathcal{B}^{\alpha\alpha}(\mathbf{n})$  залежно від його макроскопічних характеристик, зокрема, модулів пружності.

В даній статті зосереджено увагу на особливостях енергій «деформаційної» та «електрохімічної» взаємодії вакансій у ОЦК-кристалах. Metали з ОЦК-структурою, наприклад, Mo, Nb, W, вже давно мають інтерес з боку матеріалознавців. Так, молибден входить до групи важкотопких металів з ОЦК-структурою (V, Nb, Ta, Cr, W, Mo), що є основою важливих конструкційних матеріалів. (Завдяки вдалому поєднанню цінних фізико-хімічних і механічних властивостей молибденові стопи отримали широке застосування в хімічній, авіаційній і ракетній промисловості. Перспективною сферою застосування молибдену є й атомна енергетика: він застосовується в ядерних реакторах, оскільки має порівняно малий період захоплення теплових нейтронів.) Тому дослідження «деформаційної» та «електрохімічної» взаємодії радіаційних точкових дефектів (зокрема вакансій) в ОЦК-металах є актуальною задачею.

В даній роботі проведено аналітичний і чисельний розрахунок поведінки оберненопросторових енергетичних параметрів «деформаційної» й «електрохімічної» взаємодії вакансій у ОЦК-кристалах поблизу та в даліні від центру (зокрема, на поверхні) першої Бріллюєнної зони оберненого простору ОЦК-ґратниці, тобто тут аналітично одержано та чисельно проаналізовано коефіцієнт  $B^{\alpha\alpha}(\mathbf{n})$  розвинення (нахилу дисперсійної кривої залежності  $\tilde{V}^{\alpha\alpha}(\mathbf{k})$  для точкових дефектів заміщення, наприклад, вакансій, у ОЦК-кристалах поблизу  $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ ). Потреба у знаходженні коефіцієнта  $B^{\alpha\alpha}(\mathbf{n})$  виникає через те, що маємо використовувати його для досліджень просторово-періодичних (або модульованих) структур, які виникають під час опромінювання [32, 33].

## 2. ЕНЕРГЕТИЧНІ ПАРАМЕТРИ ВЗАЄМОДІЇ ВАКАНСІЙ

«Деформаційна» взаємодія точкових дефектів (вакансій, домішкові атоми) проявляється внаслідок локальних спотворень ними кристалічної ґратниці, що спричинює поля пружних напружень. Послідовну теорію «деформаційної» взаємодії дефектів було сформульовано А. Г. Хачатуряном [22–24] на основі мікроскопічної методи статистики ґратниці Кривоглаза–Мацубари–Канзакі [20, 21, 26–28], яка враховує анізотропію й дискретну атомову будову кристалічної ґратниці, що неможливо зробити в рамках макроскопічної теорії пружного континууму. Згідно методи статистики ґратниці Мацубари–Канзакі–Кривоглаза «деформаційна» взаємодія вакансій має наступний вигляд:

$$\tilde{V}^{vv}(\mathbf{k}) \approx -\tilde{F}^{lv*}(\mathbf{k})\tilde{G}_{ij}(\mathbf{k})\tilde{F}^{jv}(\mathbf{k}) + Q^{vv} \quad (\mathbf{k} \neq \mathbf{0}), \quad (4)$$

$$\tilde{V}^{vv}(\mathbf{0}) \approx -v_0\sigma_{ij}^v L_{ij}^v + Q^{vv} \quad (\mathbf{k} = \mathbf{0}), \quad (5)$$

$$Q^{vv} = N^{-1} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \sum_{l,j=x,y,z} \tilde{F}^{lv*}(\mathbf{k}) \tilde{G}_{lj}(\mathbf{k}) \tilde{F}^{jv}(\mathbf{k}). \quad (6)$$

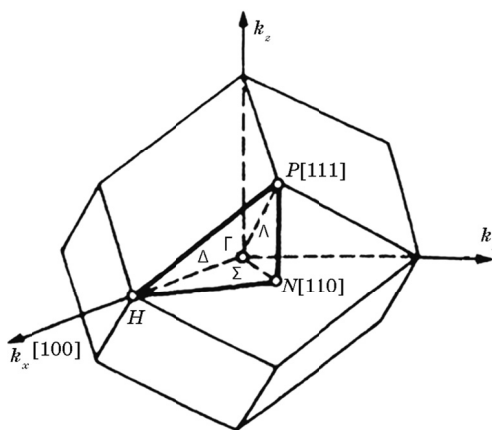
(Будь-яку функцію  $f(\mathbf{R})$ , що задовольняє періодичним крайовим умовам, можна представити рядом Фур'є:

$$f(\mathbf{R}) = N^{-1} \sum_{\mathbf{k} \in BZ} \tilde{f}(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}), \text{ де } \tilde{f}(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{R}} f(\mathbf{R}) \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R})$$

— Фур'є-компонента функції  $f(\mathbf{R})$ , причому, підсумовування виконується по всіх примітивних елементарних комірках  $\mathbf{R}$ , загальне число яких  $N \gg 1$ , а параметер  $\mathbf{k}$  Фур'є-перетвору набуває  $N$  нееквівалентних дискретних значень, яких виділено умовами циклічності в першій Бріллюєновій зоні ( $BZ$ ; рис. 1) оберненого простору ґратниці кристалу.)  $\tilde{F}^v(\mathbf{k})$  — Фур'є-компонента вектора «фіктивної» сили Канзакі  $F^v(\mathbf{R} - \mathbf{R}')$ , яка діє на атом кристалу в деякому вузлі  $\mathbf{R}$  з боку вакансії з радіусом-вектором  $\mathbf{R}'$ . Символь  $*$  в (4), (6) означає комплексне спряження. Квадратна ( $3 \times 3$ )-матриця  $\|\tilde{G}_{lj}(\mathbf{k})\|$  Фур'є-компоненти статичної ґратницевої Грінової функції системи рівнянь механічної рівноваги [19, 21–24] визначається співвідношенням  $\tilde{A}^{ll'}(\mathbf{k}) \tilde{G}_{lj}(\mathbf{k}) = \delta_{ij}(1 - \delta_{k,0})$  через  $\|\tilde{A}^{lj}(\mathbf{k})\|$  — симетричну динамічну ( $3 \times 3$ )-матрицю Фур'є-компоненти коефіцієнтів  $A^{lj}(\mathbf{R})$  квазіпружних сил взаємодій атомів кристалу;  $\delta_{ij}$  і  $\delta_{k,0}$  — Кронекерові символи. Елементи симетричної матриці «силових диполів»

$$\sigma_{ij}^v \equiv v^{-1} \sum_{\mathbf{R}} F^{lv}(\mathbf{R} - \mathbf{R}') \{R_j - R'_j\} \quad (l, j = x, y, z) \quad (5)$$

пов'язані з елементами ( $3 \times 3$ )-матриці концентраційних коефіцієн-



**Рис. 1.** Перша  $BZ$  для ОЦК-ґратниці; тут  $\Gamma$ ,  $H$ ,  $N$ ,  $P$  та  $\Delta$ ,  $\Lambda$ ,  $\Sigma$  — високосиметричні точки та напрямки у незвідній області  $BZ$  відповідно.

**Fig. 1.** The first Brillouin zone ( $BZ$ ) for b.c.c. lattice; here,  $\Gamma$ ,  $H$ ,  $N$ ,  $P$  and  $\Delta$ ,  $\Lambda$ ,  $\Sigma$  are high-symmetry points and directions in the irreducible  $BZ$ , respectively.

тів однорідного «розширення» («стиску») параметра  $a(c_v)$  найменшої кубічної умовної елементарної комірки  $L_{ij}^v = L^v \delta_{ij}$  ( $l, j = x, y, z$ ), яких зведено (у вибраній системі координат  $Oxyz$ ) до головних осей, умовою відсутності макроскопічних механічних напружень у релаксованому кубічному кристалі з точковими дефектами, зокрема вакансіями, які макроскопічно однорідно розташовані по вузлах, і вільною поверхнею [19–24]:

$$\sigma_{ij}^v = (C_{11} + 2C_{12})L^v \delta_{ij}. \quad (6)$$

Тут  $c_v \equiv N_v/N$  — відносна концентрація вакансій;  $N_v$  — загальне число вакансій у їхньому твердому розчині заміщення на основі кубічного кристалу;  $C_{11}, C_{12}, C_{44}$  — Фохтові позначення трьох незалежних компонент тензора четвертого рангу модулів пружності кристалу кубічної системи симетрії;  $L^v \approx (a^{-1} \partial a / \partial c_v)_{c_v=0}$  (чи то  $L^v \equiv a_0^{-1} \{(a - a_0)/c_v\}_{c_v \rightarrow 0}$ ) — для кубічного кристалу триразово вроджене головне значення матриці  $\|L_{ij}^v\|$  в умовах виконання практично лінійної залежності  $a(c_v)$  (тобто Вегардового правила) за заданої температури  $T$ .

При  $\mathbf{k} \neq \mathbf{0}$   $\|\tilde{G}_{ij}(\mathbf{k})\| = \|\tilde{A}^{ij}(\mathbf{k})\|^{-1}$ ; елементи матриці виражаються через частоти  $\omega_\sigma(\mathbf{k})$  і компоненти ортонормованих векторів поляризації  $\mathbf{e}_\sigma(\mathbf{k})$  власних коливань ОЦК-кристалу білінійною формою [21–24]:

$$\tilde{G}_{ij}(\mathbf{k}) = M^{-1} \sum_{\sigma=1}^3 \omega_\sigma^{-2}(\mathbf{k}) e_\sigma^i(\mathbf{k}) e_\sigma^{j*}(\mathbf{k}),$$

де індекс  $\sigma$  нумерує поляризації всіх трьох акустичних гілок нормальних коливань кубічного кристалу, а  $M$  — маса атома кристалу. Фонові частоти  $\omega_\sigma(\mathbf{k})$  й вектори поляризації  $\mathbf{e}_\sigma(\mathbf{k})$  можна визначити в експериментах з непружного розсіяння повільних нейтронів і апроксимувати за допомогою того чи іншого напівфеноменологічного моделю динаміки кристалу.

Елементи динамічної матриці ОЦК-кристалу [34–36] виражаються наступним чином:

$$\begin{aligned} \tilde{A}^{xx} \cong & 8\alpha_1 \left[ 1 - \cos\left(\frac{ak_x}{2}\right) \cos\left(\frac{ak_y}{2}\right) \cos\left(\frac{ak_z}{2}\right) \right] + 2\alpha_2 [1 - \cos(ak_x)] + \\ & + 2\beta_2 [2 - \cos(ak_y) - \cos(ak_z)] + 4\alpha_3 [2 - \cos(ak_x) (\cos(ak_y) + \cos(ak_z))] + \\ & + 4\beta_3 [1 - \cos(ak_y) \cos(ak_z)] + 8\alpha_4 \left[ 1 - \cos\left(\frac{3ak_x}{2}\right) \cos\left(\frac{ak_y}{2}\right) \cos\left(\frac{ak_z}{2}\right) \right], \quad (7) \end{aligned}$$

$$\tilde{A}^{xy}(\mathbf{k}) \cong 8\gamma_1 \sin\left(\frac{ak_x}{2}\right) \sin\left(\frac{ak_y}{2}\right) \cos\left(\frac{ak_z}{2}\right) + 4\gamma_3 \sin(ak_x) \sin(ak_y), \quad (8)$$

де  $\alpha_1, \alpha_2, \beta_2, \alpha_3, \beta_3, \alpha_4, \gamma_1, \gamma_3$  — атомові силові «сталі» Борна–Кармана, якщо припустити взаємодію атомів лише у межах чотирьох координаційних сфер, а на IV-й координаційній сфері обмежити її лише центральною складовою, що описується атомовою силовою «сталою»  $\alpha_4$ , бо саме такий внесок є найдалекосіяжнішим.

Решта компонент матриці  $\|\tilde{A}^{ij}(\mathbf{k})\|$  одержується циклічним переставлянням Декартових індексів  $x, y, z$ .

Всі 8 параметрів  $\alpha_1, \alpha_2, \beta_2, \alpha_3, \beta_3, \alpha_4, \gamma_1, \gamma_3$  можуть бути знайдені з використанням експериментальних даних про модулі пружності  $C_{11}, C_{12}, C_{44}$ , поздовжню та поперечні частоти коливань для високосиметрійних точок  $H, P, N$  поверхні  $BZ$  ( $\omega_H, \omega_P, \omega_{LN}, \omega_{T_1N}, \omega_{T_2N}$ ) за допомогою наступних співвідношень, яких, в свою чергу, було знайдено зіставлянням виразів [37] із власними значеннями зазначеної динамічної матриці:

$$2\alpha_1 + 2\alpha_2 + 8\alpha_3 + 18\alpha_4 = aC_{11}, \quad (9a)$$

$$2\alpha_1 + 4\alpha_3 + 2\alpha_4 + 2\beta_2 + 4\beta_3 = aC_{44}, \quad (9б)$$

$$4\gamma_1 + 8\gamma_3 = a(C_{44} + C_{12}), \quad (9в)$$

$$16\alpha_1 + 16\alpha_4 = M\omega_H^2, \quad (9г)$$

$$8\alpha_1 + 4\alpha_2 + 8\beta_2 + 8\alpha_4 = M\omega_P^2, \quad (9д)$$

$$8\alpha_1 + 8\beta_2 + 16\alpha_3 + 8\alpha_4 = M\omega_{LN}^2, \quad (9е)$$

$$8\alpha_1 + 4\alpha_2 + 4\beta_2 + 8\beta_3 + 8\alpha_3 + 8\alpha_4 - 8\gamma_1 = M\omega_{T_1N}^2, \quad (9є)$$

$$8\alpha_1 + 4\alpha_2 + 4\beta_2 + 8\beta_3 + 8\alpha_3 + 8\alpha_4 + 8\gamma_1 = M\omega_{T_2N}^2. \quad (9ж)$$

В свою чергу, відповідні вектори Фур'є-компонент  $\tilde{\mathbf{F}}^v(\mathbf{k})$  сил Казанакі  $\mathbf{F}^v(\mathbf{r})$ , —

$$\tilde{\mathbf{F}}^v(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{r}} \mathbf{F}^v(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}},$$

— визначаються наступними наближеними виразами для ОЦК-кристалів [35]:

$$\tilde{\mathbf{F}}^v(\mathbf{k}) \cong i8\tilde{\alpha} \begin{pmatrix} \left\| \sin\left(\frac{ak_x}{2}\right) \cos\left(\frac{ak_y}{2}\right) \cos\left(\frac{ak_z}{2}\right) \right\| \\ \left\| \sin\left(\frac{ak_y}{2}\right) \cos\left(\frac{ak_z}{2}\right) \cos\left(\frac{ak_x}{2}\right) \right\| \\ \left\| \sin\left(\frac{ak_z}{2}\right) \cos\left(\frac{ak_x}{2}\right) \cos\left(\frac{ak_y}{2}\right) \right\| \end{pmatrix}, \quad (10)$$

де  $\tilde{\alpha} = a^2 L^v (C_{11} + 2C_{12}) / 8$ .



Підставленням (7)–(10) у (4) одержуються коефіцієнти розв'язання (3) [20–24, 29, 30]:

$$\mathcal{A}^{vv}(\mathbf{n}) = -9K^2v_0(L^v)^2 \left(1 + 2\xi\tilde{\mathcal{X}}(\mathbf{n}) + 3\xi^2\tilde{\mathcal{Y}}(\mathbf{n})\right) / \mathcal{D}(\mathbf{n}), \quad (11)$$

де  $v_0 = a^3/2$  — об'єм примітивної комірки ОЦК-кристалу,  $L^v$  — коефіцієнт концентраційної «дилатації» його ґратниці через присутність у ньому вакансій;  $K = (C_{11} + 2C_{12})/3$  — модуль всебічного стиску,  $\xi = (C_{11} - C_{12} - 2C_{44})/C_{44}$  — параметер анізотропії пружності, а  $C_{11}, C_{12}, C_{44}$  — модулі пружності кристалу;  $\tilde{\mathcal{X}}(\mathbf{n}) = n_x^2n_y^2 + n_y^2n_z^2 + n_z^2n_x^2$ ,  $\tilde{\mathcal{Y}}(\mathbf{n}) = n_x^2n_y^2n_z^2$  і  $\mathcal{D}(\mathbf{n}) = C_{11} + \xi(C_{11} + C_{12})\mathcal{X}(\mathbf{n}) + \xi^2(C_{11} + 2C_{12} + C_{44})\mathcal{Y}(\mathbf{n})$  [24]. (Зауважимо, що в континуальному наближенні ОЦК- та ГЦК-структури нерозрізненні (для них  $\mathcal{A}^{vv}(\mathbf{n})$  співпадають), тоді як при виході за його рамки (хоча б у довгохвильовому наближенні) проявляються істотні відмінності виразів  $\mathcal{B}^{vv}(\mathbf{n})$  для ОЦК- та ГЦК-кристалів [29, 30, 38].)

Явний вираз для  $\mathcal{A}^{vv}(\mathbf{n})$  через модулі пружності кубічного кристалу співпадає зі знайденим раніше [20, 22, 24, 29, 30, 38]. На відміну від праць [29, 30], в даній роботі одержано вираз для коефіцієнта  $\mathcal{B}^{vv}(\mathbf{n})$  другого доданку  $\mathcal{B}^{vv}(\mathbf{n})k^2$ , який враховує центрально-симетричну парну взаємодію та нецентрально-симетричну взаємодію в границі чотирьох координаційних сфер у ОЦК-ґратниці, обмежуючись на IV координаційній сфері лише центральною взаємодією (атомова силова стала  $\alpha_4$ ), оскільки вона є далекосяжною (див. Додаток).

Слід зауважити, що основне достоїнство такої апроксимації полягає в тому, що вона уможливорює досліджувати поведінку залежності поблизу  $\mathbf{k} = \mathbf{0}$  за макроскопічними «сталими» пружності  $C_{11}, C_{12}, C_{44}, \xi$ , частотами поздовжніх і поперечних коливань для високосиметричних точок  $H, P, N$  поверхні  $BZ$ , експериментальні значення яких добре відомі для багатьох матеріалів. Для симетричних напрямків [100], [110], [111], вздовж яких, як правило, і відбуваються вибудовування модульованих структур маємо:

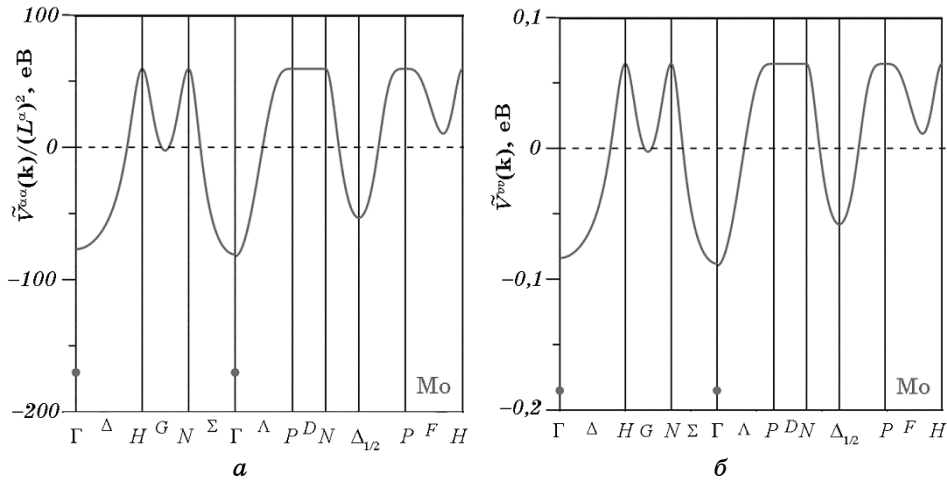
$$\mathcal{B}^{vv}(\mathbf{n}_{\Gamma H}) \cong a^4(C_{11} + 2C_{12})^2(L^v)^2 \times \frac{-16a(C_{11} + 2C_{44}) + M \left[ 8(\omega_{LN}^2 + \omega_{T_1N}^2 + \omega_{T_2N}^2 - \omega_P^2) - \omega_H^2 \right]}{256C_{11}^2}, \quad (12)$$

$$\mathcal{B}^{vv}(\mathbf{n}_{\Gamma N}) \cong \frac{a^4(C_{11} + 2C_{12})^2(L^v)^2 M \omega_{T_2N}^2}{16(C_{11} + C_{12} + 2C_{44})^2}, \quad (13)$$

$$\mathcal{B}^{vv}(\mathbf{n}_{\Gamma P}) \cong a^4(C_{11} + 2C_{12})^2(L^v)^2 \times \frac{16a(C_{11} + 4C_{12} + 6C_{44}) + M \left[ 8(\omega_{LN}^2 + 2\omega_{T_2N}^2 + \omega_P^2) - \omega_H^2 \right]}{256(C_{11} + 2C_{12} + 4C_{44})^2}. \quad (14)$$

Зазначимо, що вирази  $\mathcal{A}^{vv}(\mathbf{n})$ ,  $\mathcal{B}^{vv}(\mathbf{n})$  для точкових дефектів заміщення, наприклад, домішкових атомів, будуть такі ж самі, лише із заміною  $L^v$  для вакансій на  $L^i$  для атомів.

На рисунках 2–4 представлено дисперсійні криві зведених Фур'є-компонент енергій деформаційної взаємодії точкових дефектів заміщення  $\tilde{V}^{\alpha\alpha}(\mathbf{k}) / (L^\alpha)^2$  та Фур'є-компонент енергій «деформаційної»  $v-v$ -взаємодії  $\tilde{V}^{vv}(\mathbf{k})$  уздовж усіх високосиметрійних напрямків в оберненому просторі із використанням експериментальних значень (при  $T = 298$  К):  $C_{11} = 440,8$  ГПа,  $C_{12} = 172,4$  ГПа,  $C_{44} = 121,7$  ГПа [40],  $a = 3,1475$  Å [41],  $L^v = -0,033$  [39],  $\omega_H = 5,52$  ТГц,  $\omega_P = 6,49$  ТГц,  $\omega_{LN} = 8,14$  ТГц,  $\omega_{T_1N} = 5,73$  ТГц,  $\omega_{T_2N} = 4,56$  ТГц [42],  $M \cong 159,31 \cdot 10^{-27}$  кг для Мо;  $C_{11} = 246,5$  ГПа,  $C_{12} = 134,5$  ГПа,  $C_{44} = 28,73$  ГПа [40],  $a = 3,3063$  Å [43],  $L^v = -0,0946$  [39],  $\omega_H = 6,49$  ТГц,  $\omega_P = 5,03$  ТГц,  $\omega_{LN} = 5,66$  ТГц,  $\omega_{T_1N} = 3,93$  ТГц,  $\omega_{T_2N} = 5,07$  ТГц [42],  $M \cong 154,27 \cdot 10^{-27}$  кг для Nb;  $C_{11} = 512,57$  ГПа,  $C_{12} = 205,82$  ГПа,  $C_{44} = 152,67$  ГПа [40],  $a = 3,1649$  Å [44],  $L^v = -0,067$  [39],  $\omega_H = 5,5$  ТГц,  $\omega_P = 5,5$  ТГц,  $\omega_{LN} = 6,75$  ТГц,  $\omega_{T_1N} = 4,4$  ТГц,  $\omega_{T_2N} = 4,15$  ТГц [42],



**Рис. 2.** Дисперсія залежності Фур'є-компоненти  $\tilde{V}^{\alpha\alpha}(\mathbf{k})$  енергій «деформаційної» взаємодії (в основних високосиметрійних напрямках оберненого простору, зокрема, у високосиметрійних точках  $\Gamma$ ,  $H$ ,  $N$ ,  $P$  першої  $BZ$ ): (а) точкових дефектів заміщення у ОЦК-Мо (зведена  $\tilde{V}^{\alpha\alpha}(\mathbf{k}) / (L^\alpha)^2$ ), (б) зокрема вакансій з концентраційним коефіцієнтом дилатації ґратниці через них  $L^v = -0,033$  [39]; ● —  $\tilde{V}^{\alpha\alpha}(\mathbf{0}) / (L^\alpha)^2$  (а),  $\tilde{V}^{vv}(\mathbf{0})$  (б).

**Fig. 2.** Dispersion of dependence of Fourier components of energy of 'strain-induced' interaction (along the main high-symmetry directions of reciprocal space, particularly, in high-symmetry points  $\Gamma$ ,  $H$ ,  $N$ ,  $P$  of first  $BZ$ ) for: (a) the substitutional point defects in b.c.c. Mo (reduced  $\tilde{V}^{\alpha\alpha}(\mathbf{k}) / (L^\alpha)^2$ ), (b) in particular, vacancies with concentration coefficient of dilatation of lattice due to them  $L^v = -0.033$  [39]; ● —  $\tilde{V}^{\alpha\alpha}(\mathbf{0}) / (L^\alpha)^2$  (a),  $\tilde{V}^{vv}(\mathbf{0})$  (b).

$M \cong 305,27 \cdot 10^{-27}$  кг для W.

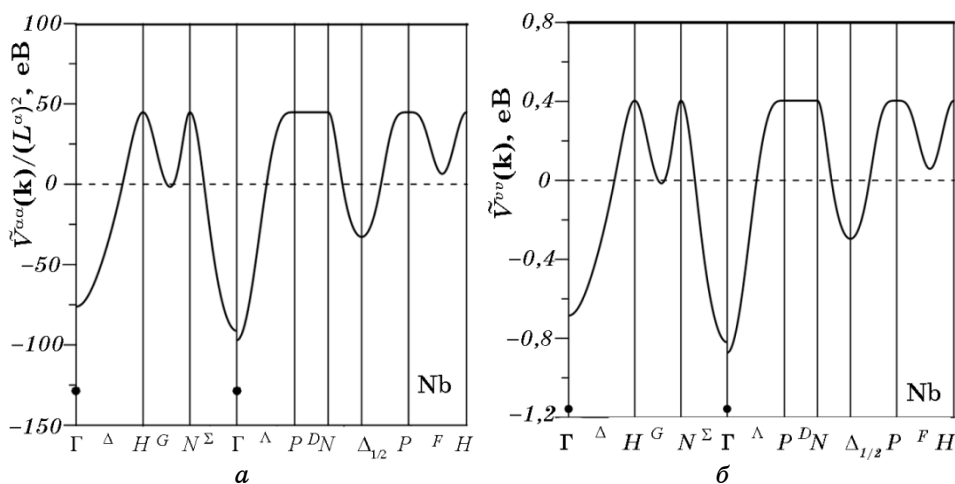
Таким чином, для граничних значень Фур'є-компонент  $\tilde{V}^{vv}(\mathbf{k})$  у високосиметрійних напрямках з точок високої симетрії на поверхні BZ у її центр (вздовж яких, як правило, й відбувається вибудовування модульованих структур) маємо, наприклад:

$$\tilde{V}^{vv}(\mathbf{k}_{\downarrow\uparrow\mathbf{k}_H} \rightarrow \mathbf{0}) \cong -\frac{9K^2v_0(L^v)^2}{C_{11}} + \mathcal{B}^{vv}(\mathbf{n}_{\Gamma H})k^2 + Q^{vv}, \quad (15)$$

$$\tilde{V}^{vv}(\mathbf{k}_{\downarrow\uparrow\mathbf{k}_N} \rightarrow \mathbf{0}) \cong -\frac{18K^2v_0(L^v)^2(2+\xi)}{4C_{11} + \xi(C_{11} + C_{12})} + \mathcal{B}^{vv}(\mathbf{n}_{\Gamma N})k^2 + Q^{vv}, \quad (16)$$

$$\begin{aligned} \tilde{V}^{vv}(\mathbf{k}_{\downarrow\uparrow\mathbf{k}_P} \rightarrow \mathbf{0}) &\cong \\ &\cong -\frac{27K^2v_0(L^v)^2(3+\xi)^2}{27C_{11} + 9\xi(C_{11} + C_{12}) + (C_{11} + 2C_{12} + C_{44})\xi^2} + \mathcal{B}^{vv}(\mathbf{n}_{\Gamma P})k^2 + Q^{vv}. \end{aligned} \quad (17)$$

Фур'є-компонента  $\tilde{V}^{vv}(\mathbf{k})$  енергій «деформаційної» взаємодії вакансій має найглибший однобічний локальний мінімум з напрямку [111], але навіть в ньому  $\tilde{V}^{vv}(\mathbf{k}_{\downarrow\uparrow\mathbf{k}_P} \rightarrow \mathbf{0}) > \tilde{V}^{vv}(\mathbf{0})$ , тобто граничне



**Рис. 3.** Те ж, що на рис. 2, але для: (а) точкових дефектів заміщення у ОЦК-Nb (зведена  $\tilde{V}^{\alpha\alpha}(\mathbf{k})/(L^\alpha)^2$ ), (б) зокрема вакансій з концентраційним коефіцієнтом дилатації ґратниці через них  $L^v = -0,0946$  [39]; • —  $\tilde{V}^{\alpha\alpha}(\mathbf{0})/(L^\alpha)^2$  (а),  $\tilde{V}^{vv}(\mathbf{0})$  (б).

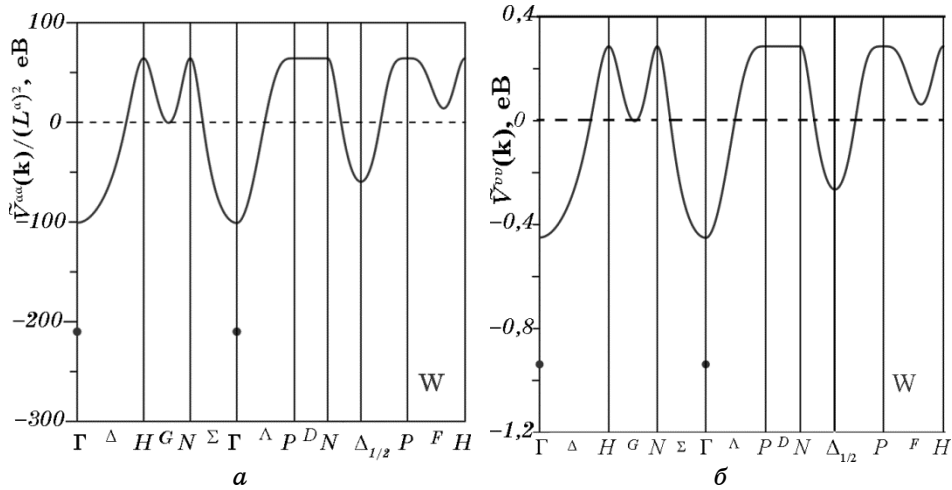
**Fig. 3.** The same as in Fig. 2, but for: (a) the substitutional point defects in b.c.c. Nb (reduced  $\tilde{V}^{\alpha\alpha}(\mathbf{k})/(L^\alpha)^2$ ), (b) in particular, for vacancies with concentration coefficient of dilatation of lattice due to them  $L^v = -0.0946$  [39]; • —  $\tilde{V}^{\alpha\alpha}(\mathbf{0})/(L^\alpha)^2$  (a),  $\tilde{V}^{vv}(\mathbf{0})$  (b).

значення Фур'є-компоненти  $\tilde{V}^{vv}(\mathbf{k}_{\downarrow\uparrow\mathbf{k}_p} \rightarrow \mathbf{0})$  (з напрямку [111]) є мінімальним, але більшим, аніж у самій точці  $\mathbf{k} = \mathbf{0}$  (саме через далекосяжність пружної взаємодії вакансій). У випадку позитивного параметра анізотропії  $\xi$  граничне значення  $\tilde{V}^{vv}(\mathbf{k}_{\downarrow\uparrow\mathbf{k}_N} \rightarrow \mathbf{0})$  з напрямку [110] є дещо більшим, аніж з напрямку [111]. Отже, виконуються наступні нерівності, що засвідчують неаналітичність і анізотропію «деформаційної» взаємодії вакансій:

$$\begin{aligned} \tilde{V}^{vv}(\mathbf{0}) < \tilde{V}^{vv}(\mathbf{k}_{\downarrow\uparrow\mathbf{k}_p} \rightarrow \mathbf{0}) < \tilde{V}^{vv}(\mathbf{k}_{\downarrow\uparrow\mathbf{k}_N} \rightarrow \mathbf{0}) < \tilde{V}^{vv}(\mathbf{k}_{\downarrow\uparrow\mathbf{k}_H} \rightarrow \mathbf{0}) < \\ < 0 < \tilde{V}^{vv}(\mathbf{k}_H) = \tilde{V}^{vv}(\mathbf{k}_N) = \tilde{V}^{vv}(\mathbf{k}_p); \end{aligned}$$

останні ж рівності є слушними саме в наближенні (10) (див. також рис. 2–4).

Одержана інформація про Фур'є-компоненти  $\tilde{V}^{vv}(\mathbf{k})$  енергій «деформаційної» взаємодії вакансій (рис. 2–4) уможливорює розкрити особливості та проаналізувати загальні закономірності цієї взаємодії, яка, поряд з іншими внесками, відповідає за (пере)розподіл вакансій.



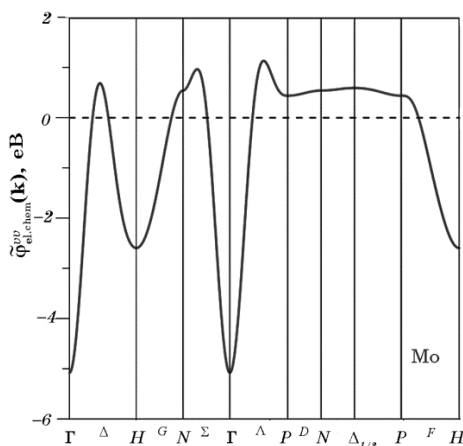
**Рис. 4.** Те ж, що на рис. 2, але для: (а) точкових дефектів заміщення у ОЦК-W (зведена  $\tilde{V}^{\alpha\alpha}(\mathbf{k}) / (L^\alpha)^2$ ), (б) зокрема вакансій з коефіцієнтом концентраційної дилатації ґратниці через них  $L^v = -0,067$  [39]; ● —  $\tilde{V}^{\alpha\alpha}(\mathbf{0}) / (L^\alpha)^2$  (а),  $\tilde{V}^{vv}(\mathbf{0})$  (б).

**Fig. 4.** The same as in Fig. 2, but for: (a) the substitutional point defects in b.c.c. W (reduced  $\tilde{V}^{\alpha\alpha}(\mathbf{k}) / (L^\alpha)^2$ ), (b) in particular, for vacancies with concentration coefficient of dilatation of lattice due to them  $L^v = -0.067$  [39]; ● —  $\tilde{V}^{\alpha\alpha}(\mathbf{0}) / (L^\alpha)^2$  (a),  $\tilde{V}^{vv}(\mathbf{0})$  (b).

У формулі (2)  $\tilde{\varphi}_{\text{el.chem}}^{vv}(\mathbf{k})$  — Фур'є-компонента енергій (прямої) «електрохімічної»  $v-v$ -взаємодії. Дисперсійні криві для [22]

$$\begin{aligned} \tilde{\varphi}_{\text{el.chem}}^{vv}(\mathbf{k}) \cong & 8\varphi^{vv}(r_I) \cos\left(\frac{ak_x}{2}\right) \cos\left(\frac{ak_y}{2}\right) \cos\left(\frac{ak_z}{2}\right) + \\ & + 2\varphi^{vv}(r_{II}) \left[ \cos(ak_x) + \cos(ak_y) + \cos(ak_z) \right] + \\ & + 4\varphi^{vv}(r_{III}) \left[ \cos(ak_x) \cos(ak_y) + \cos(ak_x) \cos(ak_z) + \cos(ak_y) \cos(ak_z) \right] + \\ & + 8\varphi^{vv}(r_{IV}) \left[ \cos\left(\frac{3ak_x}{2}\right) \cos\left(\frac{ak_y}{2}\right) \cos\left(\frac{ak_z}{2}\right) + \right. \\ & \left. + \cos\left(\frac{3ak_y}{2}\right) \cos\left(\frac{ak_x}{2}\right) \cos\left(\frac{ak_z}{2}\right) + \right. \\ & \left. + \cos\left(\frac{3ak_z}{2}\right) \cos\left(\frac{ak_x}{2}\right) \cos\left(\frac{ak_y}{2}\right) \right] + 8\varphi^{vv}(r_V) \cos(ak_x) \cos(ak_y) \cos(ak_z) \end{aligned}$$

уздовж усіх високосиметрійних напрямків всередині першої  $BZ$  представлено на рис. 5–7;  $\varphi^{vv}(r_I)$ ,  $\varphi^{vv}(r_{II})$ , ...,  $\varphi^{vv}(r_V)$ , ... — значення

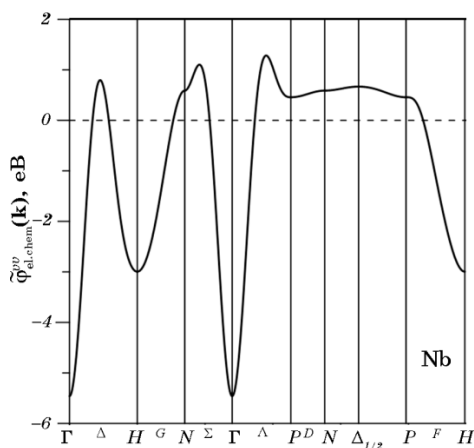


**Рис. 5.** Дисперсійні криві Фур'є-компоненти енергій «електрохімічної» взаємодії вакансій уздовж усіх високосиметрійних напрямків у оберненому просторі, яких побудовано з використанням Маклінового потенціалу [45] для кристалу ОЦК-Мо (тобто за енергії когезії  $-6,83$  еВ/атом [46]).

**Fig. 5.** Dispersion curves of Fourier components of energy of 'electrochemical' interaction of vacancies along all high-symmetry directions in reciprocal space, which are plotted using Machlin potential [45] for b.c.c.-Mo crystal (*i.e.*, at cohesion energy of  $-6.83$  eV/atom [46]).

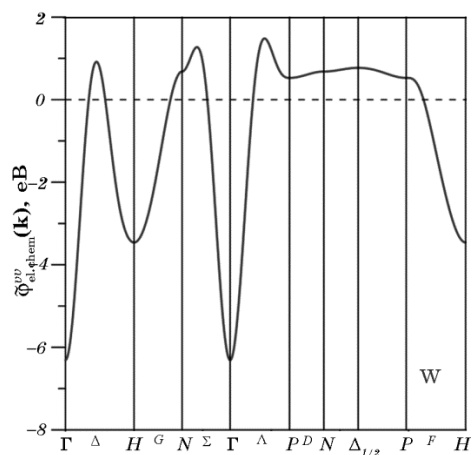
енергій ефективної ізотропної «електрохімічної»  $\nu$ - $\nu$ -взаємодії в справжніх першій, другій, ..., п'ятій, ... вузлових координаційних сферах.

В підході, розробленому авторами [47–51] для прямої (в основному когезійної за природою) «електрохімічної» взаємодії вакансій у



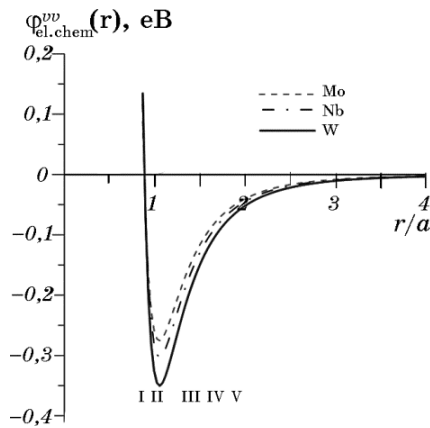
**Рис. 6.** Те ж, що й на рис.5, але для кристалу ОЦК-Nb (тобто за енергії когезії у  $-7,5$  eV/атом [46]).

**Fig. 6.** The same as in Fig. 5, but for b.c.c.-Nb crystal (*i.e.*, at cohesion energy of  $-7.5$  eV/atom [46]).



**Рис. 7.** Те ж, що на рис.5, але для кристалу ОЦК-W (тобто за енергії когезії у  $-8,67$  eV/атом [46]).

**Fig. 7.** The same as in Fig. 5, but for b.c.c.-W crystal (*i.e.*, at cohesion energy of  $-8.67$  eV/atom [46]).



**Рис. 8.** Залежність енергії «електрохімічної»  $v-v$ -взаємодії в ОЦК-кристалах Mo, Nb, W (тобто за Макліновим потенціалом [45]) від зведеної віддалі  $r(298\text{ K})/a(298\text{ K})$  між вакансіями у вузлах.

**Fig. 8.** ‘Electrochemical’  $v-v$ -interaction dependence on the reduced distance  $r(298\text{ K})/a(298\text{ K})$  between vacancies at lattice sites in b.c.c. crystals of Mo, Nb, W (*i.e.*, using Machlin potential [45]).

кубічному кристалі (для якого взагалі-то й  $\tilde{\Phi}_{el.chem}^{vv}(-\mathbf{k}) = \tilde{\Phi}_{el.chem}^{vv}(\mathbf{k})$ ), у довгохвильовому наближенні [22, 49] в околі  $\mathbf{k} = \mathbf{0}$  маємо наступне розвинення в Тейлорів ряд за степенями  $k^2$ :

$$\tilde{\Phi}_{el.chem}^{vv}(\mathbf{k}) \cong \tilde{\Phi}_{el.chem}^{vv}(\mathbf{0}) + \gamma_0^{vv} k^2 + \dots,$$

де

$$\begin{aligned} \tilde{\Phi}_{el.chem}^{vv}(\mathbf{0}) &= \sum_{\mathbf{r} \in \{r_I, r_{II}, \dots\}} \Phi_{el.chem}^{vv}(|\mathbf{r}|) \approx \\ &\approx 8\varphi^{vv}(r_I) + 6\varphi^{vv}(r_{II}) + 12\varphi^{vv}(r_{III}) + 24\varphi^{vv}(r_{IV}) + 8\varphi^{vv}(r_V) + \dots, \\ \gamma_0^{vv} &\approx -a^2 \{ \varphi^{vv}(r_I) + \varphi^{vv}(r_{II}) + 4\varphi^{vv}(r_{III}) + 11\varphi^{vv}(r_{IV}) + 4\varphi^{vv}(r_V) + \dots \}. \end{aligned}$$

На рисунку 8 зображено залежність центральносиметричного потенціалу  $\Phi_{el.chem}^{vv}(|\mathbf{r}|)$  такої «електрохімічної» взаємодії  $v-v$  у ОЦК-кристалі від зведеної міжвакансійної віддалі  $r/a$  із врахуванням взаємодії у 5-х координаційних сферах по вузлах.

### 3. ВИСНОВКИ

Із застосуванням напівфеноменологічної мікроскопічної методи статички ґратниці Мацубари–Канзакі–Кривоглаза розраховано та проаналізовано залежність Фур’є-компонент  $\tilde{V}^{vv}(\mathbf{k})$  енергій «дефо-

рмаційної» взаємодії вакансій у їх «твердому розчині заміщення» на основі ОЦК-кристалу (на прикладі ОЦК-Мо, Nb, W) від квазивильових векторів  $\mathbf{k}$  з першої Бріллюєнової зони його оберненого простору (для цього використано експериментальні дані про модулі пружності, поздовжню та поперечні частоти у високосиметрійних точках  $H, P, N$  поверхні зони).

Встановлено, що функція  $\tilde{V}^{vv}(\mathbf{k})$  є взагалі-то неаналітичною в точці  $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ , маючи в ній розрив першого роду:  $\lim_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{0}} \tilde{V}^{vv}(\mathbf{k}) \neq \tilde{V}^{vv}(\mathbf{0})$ , що є наслідком далекосяжності «деформаційної» взаємодії вакансій у кристалі.

Продемонстровано, що у наближенні короткосяжної ефективної взаємодії вакансії з її найближчим атомовим оточенням (на першій координаційній сфері) модуль кута нахилу дисперсійної кривої Фур'є-компонент  $\tilde{V}^{vv}(\mathbf{k})$  енергій «деформаційної» міжвакансійної взаємодії з наближенням до центру зони має спадний характер.

Дисперсійна крива (рис. 2) Фур'є-компонент  $\tilde{V}^{vv}(\mathbf{k})$  енергій «деформаційної» взаємодії вакансій у ґратниці зберігає залежність від напрямку  $\mathbf{n} \equiv \mathbf{k}/k$  вектора  $\mathbf{k}$  навіть для дуже малих  $k$  ( $0 < ka \ll 2\pi$ ): ажень поблизу точки  $\mathbf{k} = \mathbf{0}$  ізоенергетична поверхня для Фур'є-компонент (далекосяжної) «деформаційної» взаємодії вакансій у ОЦК-кристалі не є сферою, що підтверджує анізотропію «деформаційної» взаємодії між вакансіями [20, 21, 52–55].

Саме внаслідок анізотропії пружних властивостей і структури ОЦК-кристалу маємо різні граничні значення  $\tilde{V}^{vv}(\mathbf{k})$  з різних напрямків:

$$\tilde{V}^{vv}(\mathbf{k}_{\downarrow\uparrow GH} \rightarrow \mathbf{0}) \neq \tilde{V}^{vv}(\mathbf{k}_{\downarrow\uparrow GN} \rightarrow \mathbf{0}) \neq \tilde{V}^{vv}(\mathbf{k}_{\downarrow\uparrow GP} \rightarrow \mathbf{0}).$$

Неоднозначні (локально мінімальні) граничні значення  $\tilde{V}^{vv}(\mathbf{k})$  при  $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{0}$  не співпадають із (іще меншим) значенням  $\tilde{V}^{vv}(\mathbf{0})$ , тобто саме через далекосяжність «деформаційної» взаємодії функція  $\tilde{V}^{vv}(\mathbf{k})$  є взагалі неаналітичною в точці  $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ , оскільки має в ній розрив першого роду (рис. 2–4) [52–55].

Як зазначалося, непряма «деформаційна» взаємодія — не єдиний внесок у взаємодію точкових дефектів, зокрема, вакансій; вона доповнюється «прямою» «електрохімічною» взаємодією.

Видно, що модулі енергій «електрохімічної»  $v-v$ -взаємодії зменшуються зі збільшенням віддалі  $r_n$  (монотонно для  $n \geq \text{II}$ ). Саме достатньо різким спаданням абсолютних величин  $|\varphi_{\text{el.chem}}^{vv}(|\mathbf{r}|)|$  зі збільшенням віддалі між вакансіями (тобто «короткосяжним» характером «електрохімічної» взаємодії  $v-v$ ; рис. 8) забезпечується аналітичність функції  $\tilde{\varphi}_{\text{el.chem}}^{vv}(\mathbf{k})$  в околі  $\mathbf{k} = \mathbf{0}$  (рис. 5–7), тоді як енергія (непрямої) «деформаційної» (чи то пружної) за природою  $v-v$ -



взаємодії має істотно далекосяжніший (та анізотропний і «квазиосцилівний») характер, що спричиняє *неаналітичність* (розрив першого роду) функції  $\tilde{V}^{vv}(\mathbf{k})$  в точці  $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ :  $\lim_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{0}} \tilde{V}^{vv}(\mathbf{k}) \neq \tilde{V}^{vv}(\mathbf{0})$ . Але, незважаючи на далекосяжність «деформаційної» взаємодії вакансій, абсолютні значення її енергій є значно меншими, аніж модулі енергій «електрохімічної» взаємодії вакансій, і тому найістотнішим внеском в енергію взаємодії між вакансіями в ОЦК-Мо, Nb, W є енергія саме їхньої «електрохімічної» взаємодії.

Через те, що Маклінів потенціал [45], наприклад для ОЦК-Мо  $\varphi^{\text{MoMo}}(r) = -A_{\text{MoMo}}r^{-4} + B_{\text{MoMo}}r^{-8}$  (в термінах його параметра  $a_0$  ґратниці, енергії когезії  $\varepsilon^0$  і ґратницевих сум  $S_4 \cong 22,63872$ ,  $S_8 \cong 10,3552$ , за якими  $A_{\text{MoMo}} = -9\varepsilon^0 a_0^4 S_4^{-1}/4$ ,  $B_{\text{MoMo}} = -81\varepsilon^0 a_0^8 S_8^{-1}/128$  (дані про  $a_0$  ОЦК-кристалів молібдену, ніобію та вольфраму при  $T = 0$  К див. у [56, 57], а щодо енергій когезії  $\varepsilon^0$  — у [46])) все ж таки простягається значно за межі першої вузлової координаційної сфери (з радіусом  $r_1 = a\sqrt{3}/2$ ), стається посутнє переладнання відповідної залежності  $\tilde{\varphi}_{\text{el.chem}}^{vv}(\mathbf{k}) \approx \tilde{\varphi}^{\text{MoMo}}(\mathbf{k})$  (та й  $\tilde{\varphi}_{\text{el.chem}}^{vv}(\mathbf{k}) \approx \tilde{\varphi}^{\text{NbNb}}(\mathbf{k})$  і  $\tilde{\varphi}_{\text{el.chem}}^{vv}(\mathbf{k}) \approx \tilde{\varphi}^{\text{WW}}(\mathbf{k})$ ), що робить її (хоча б локально) екстремальною не лише в точках високої симетрії на поверхні, але й усередині першої *BZ*. Гіпотетично таке відповідає урізноманітненню довгохвильових (модульованих) структур у просторовому розподілі вакансійної підсистеми, які могли б утворитися в ОЦК-кристалі за сприятливих умов.

## ДОДАТОК

$$\begin{aligned} \mathcal{B}^{vv}(\mathbf{n}) \cong & \frac{3a^4(L^v)^2 K^2}{256[D(\mathbf{n})]^2} \{16a[-3C_{11} - 6C_{44} + \\ & + (4(C_{11} + 5C_{12} + 12C_{44}) - 2(\xi + 2)(C_{11} + 2C_{12})) \tilde{X}(\mathbf{n}) + \\ & + 2(83C_{11} - 4(41C_{12} + 43C_{44}) + 2(\xi + 2)^3 C_{44} - (7C_{11} - 52C_{12})(\xi + 2)) \tilde{Y}(\mathbf{n}) + \\ & + 8\xi(C_{11} + 2C_{12} + 6C_{44}) \tilde{Z}(\mathbf{n}) + \\ & + 2\xi^2(2(\xi + 2)(C_{11} + 2C_{12}) + C_{11} + 16(2C_{12} + 5C_{44})) \tilde{X}(\mathbf{n})\tilde{Y}(\mathbf{n}) + \\ & + \xi^3(3(\xi + 2)(C_{11} + 4C_{12}) + 2(11C_{12} + 2(5C_{11} + 32C_{44}))) [\tilde{Y}(\mathbf{n})]^2 - \\ & - 8\xi^4 C_{44} \tilde{Y}(\mathbf{n})\tilde{Z}(\mathbf{n})\} + 3M\omega_H^2 [-1 + (\xi^2 + 4)\tilde{X}(\mathbf{n}) + \\ & + ((\xi + 2)(72 + (\xi + 2)(4\xi - 23)) - 64) \tilde{Y}(\mathbf{n}) - 4\xi^2 \tilde{Z}(\mathbf{n}) + \\ & + \xi^3(\xi - 16)\tilde{X}(\mathbf{n})\tilde{Y}(\mathbf{n}) + 6\xi^3(4 - \xi)[\tilde{Y}(\mathbf{n})]^2 - 4\xi^4 \tilde{Y}(\mathbf{n})\tilde{Z}(\mathbf{n})] + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& +24M\omega_{LN}^2 [1 + 2(\xi - 2)\tilde{X}(\mathbf{n}) + 2((\xi + 2)(4\xi - 11) + 28)\tilde{Y}(\mathbf{n}) - 8\xi\tilde{Z}(\mathbf{n}) + \\
& + 2\xi^2(2\xi - 9)\tilde{X}(\mathbf{n})\tilde{Y}(\mathbf{n}) - \xi^3(\xi + 24)[\tilde{Y}(\mathbf{n})]^2 + 2\xi^4\tilde{Y}(\mathbf{n})\tilde{Z}(\mathbf{n})] + \\
& + 24M\omega_{TN}^2 [1 + (\xi - 4)\tilde{X}(\mathbf{n}) + (23 + (\xi + 2)(\xi - 7))\tilde{Y}(\mathbf{n}) - 4\xi\tilde{Z}(\mathbf{n}) - \\
& - 3\xi^2\tilde{X}(\mathbf{n})\tilde{Y}(\mathbf{n})] + \\
& + 24M\omega_{TN}^2 [1 + (3(\xi + 2) - 8)\tilde{X}(\mathbf{n}) + ((\xi + 2)(7\xi - 29) + 55)\tilde{Y}(\mathbf{n}) + \\
& + 2\xi(\xi - 2)\tilde{Z}(\mathbf{n}) + \xi^2(4\xi - 15)\tilde{X}(\mathbf{n})\tilde{Y}(\mathbf{n}) + 2(\xi - 6)\xi^3[\tilde{Y}(\mathbf{n})]^2] + \\
& + 24M\omega_p^2 [-1 - 2(\xi - 2)\tilde{X}(\mathbf{n}) - 2(2\xi - 1)(\xi - 3)\tilde{Y}(\mathbf{n}) + 8\xi\tilde{Z}(\mathbf{n}) + \\
& + 18\xi^2\tilde{X}(\mathbf{n})\tilde{Y}(\mathbf{n}) + \xi^3(\xi + 12)[\tilde{Y}(\mathbf{n})]^2] \Big\};
\end{aligned}$$

тут  $\tilde{Z}(\mathbf{n}) = n_x^4 n_y^4 + n_y^4 n_z^4 + n_z^4 n_x^4$ .

## ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. A. Seeger, D. Shumacher, W. Schilling, and J. Diehl, *Vacancies and Interstitials in Metals* (Amsterdam: North-Holland: 1970).
2. E. Vives and A. Planes, *Phys. Rev. Lett.*, **68**, No. 6: 812 (1992).
3. R. de Ridder, G. van Tendeloo, and S. Amelinckx, *phys. status solidi (a)*, **43**, No. 1: 133 (1977).
4. P. W. M. Jacobs and E. Kotomin, *Philosophical Magazine A*, **68**, No. 4: 695 (1993).
5. J. H. Evans, *Nature*, **229**, No. 5: 403 (1971).
6. В. И. Щербак М. И. Захарова, В. Н. Быков, *ВАНТ. Сер. Физика радиац. поврежд. и радиац. матер.*, **3**, № 1: 61 (1976).
7. V. K. Sikka and J. Moteff, *J. Appl. Phys.*, **43**, No. 12: 4942 (1972).
8. F. W. Wiffen, *J. Nucl. Mater.*, **67**, Nos. 1/2: 119 (1977).
9. F. W. Wiffen, *Proc. Int. Conf. 'Radiation Induced Voids in Metals' (Albany, NY, June 9-11, 1971)* (Oak Ridge: 1972), p. 386.
10. J. L. Brimhall and G. I. Kulcinski, *Radiat. Eff.*, **20**, No. 1: 25 (1973).
11. B. A. Loomis, S. B. Gerber, and A. Taylor, *J. Nucl. Mater.*, **68**, No. 1: 19 (1977).
12. В. В. Брык, В. Н. Воеводин, В. Ф. Зеленский, *ВАНТ. Сер. Физика радиац. поврежд. и радиац. матер.*, **6**, № 1: 33 (1981).
13. G. L. Kulcinski, J. L. Brimhall, and H. E. Kissinger, *J. Nucl. Mater.*, **40**, No. 2: 166 (1971).
14. D. J. Mazey, S. Francis, and J. A. Hudson, *J. Nucl. Mater.*, **47**, No. 2: 137 (1973).
15. P. Fratzl, S. Klaumunzer, M. Rammensee, and G. Vogl, *Europhys. Lett.*, **11**, No. 6: 547 (1990).
16. S. B. Fisher and K. R. Williams, *Radiat. Eff.*, **32**, Nos. 1-2: 123 (1977).
17. L. J. Chen and A. J. Ardell, *J. Nucl. Mater.*, **75**, No. 1: 177 (1978).
18. О. В. Олійник, В. А. Татаренко, *Успехи физ. мет.*, **13**, № 4: 417 (2012).
19. В. Н. Бугаев, В. А. Татаренко, *Взаимодействие и распределение атомов в*

- сплавах внедрения на основе плотноупакованных металлов* (Киев: Наукова думка: 1989).
20. М. А. Кривоглаз, *Диффузное рассеяние рентгеновских лучей и нейтронов на флуктуационных неоднородностях в неидеальных кристаллах* (Киев: Наукова думка: 1984).
  21. М. А. Кривоглаз, *Дифракция рентгеновских лучей и нейтронов в неидеальных кристаллах* (Киев: Наукова думка: 1983).
  22. A. G. Khachaturyan, *Theory of Structural Transformations in Solids* (Mineola, NY: Dover Publications, Inc: 2008).
  23. A. G. Khachaturyan, *Progr. Mater. Sci.*, **22**, Nos. 1–2: 1 (1978).
  24. А. Г. Хачатурян, *Теория фазовых превращений и структура твёрдых растворов* (Москва: Наука: 1974).
  25. J. D. Eshelby, *Acta Metallurgica*, **3**, No. 5: 487 (1955).
  26. H. Kanzaki, *J. Phys. Chem. Solids*, **2**, No. 1: 24 (1957).
  27. М. А. Кривоглаз, *ЖЭТФ*, **34**, вып. 1: 204 (1958).
  28. T. J. Matsubara, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **7**, No. 3: 270 (1952).
  29. А. А. Кацнельсон, А. И. Олемской, *Микроскопическая теория неоднородных структур* (Москва: Издательство МГУ: 1987).
  30. А. И. Олемской, В. В. Чернышева, *Изв. высших учебных заведений*, № 2: 20 (1982).
  31. D. J. Chadi and M. L. Cohen, *Phys. Rev. B*, **8**, No. 12: 5747 (1973).
  32. О. В. Олійник, П. О. Селищев, В. А. Татаренко, Ю. Б. Парк, *Металлофиз. новейшие технол.*, **34**, № 9: 1231 (2012).
  33. V. A. Tatarenko, P. O. Selyshchev, O. V. Oliinyk, and Y. B. Park, *Philosophical Magazine*, **94**, No. 24: 2724 (2014).
  34. D. W. Hoffman, *Acta Metallurgica*, **18**, No. 7: 819 (1970).
  35. H. E. Cook and D. De Fontaine, *Acta Metallurgica*, **17**, No. 7: 915 (1969).
  36. J. E. Gragg, Jr., *J. Phys. Chem. Solids*, **32**, No. 6: 1195 (1971).
  37. Дж. Рейсленд, *Физика фононов* (Москва: Мир: 1975) (пер. с англ.).
  38. О. В. Олійник, В. А. Татаренко, С. М. Бокоч, *Металлофиз. новейшие технол.*, **33**, № 10: 1383 (2011), *ibidem*, **34**, № 1: 135 (2012).
  39. W. G. Wolfer, *Comprehensive Nuclear Materials*, **1**: 1 (2012).
  40. И. Н. Францевич, Ф. Ф. Воронов, С. А. Бакута, *Упругие постоянные и упругие модули металлов и неметаллов: Справочник* (Киев: Наукова думка: 1982).
  41. J. W. Edwards, R. Speiser, and H. Johnson, *Journal of Applied Physics*, **22**, No. 4: 424 (1951).
  42. H. R. Schober and P. H. Dederichs, *Electronic Properties Metals: Phonon States. Electron States and Fermi Surfaces Phonon State of Elements. Electron States and Fermi Surfaces of Alloys* (Berlin: Springer-Verlag: 1981).
  43. R. Roberge, *Journal of the Less-Common Metals*, **40**, No. 1: 161 (1975).
  44. B. N. Dutta and B. Dayl, *phys. status solidi*, **3**, No. 12: 2253 (1963).
  45. E. S. Machlin, *Acta Metallurgica*, **22**, No. 1: 95 (1974).
  46. L. Brewer, *The Cohesive Energies of the Elements: Report LBL-3720* (Berkeley, CA: Lawrence Berkeley Laboratory: 1977).
  47. V. G. Weizer and L. A. Girifalco, *Phys. Rev.*, **120**, No. 3: 837 (1960).
  48. R. Yamamoto and M. Doyama, *J. Phys. F: Met. Phys.*, **3**, No. 8: 1524 (1973).
  49. W. A. Harrison, *Pseudopotentials in the Theory of Metals* (New York: W. A. Benjamin Inc.: 1966).

50. W. A. Harrison, *Solid State Theory* (New York: McGraw-Hill: 1970).
51. O. V. Oliinyk and V. A. Tatarenko, *Журнал нано- та електронної фізики*, **4**, № 1: 01023-1 (2012).
52. S. M. Bokoch and V. A. Tatarenko, *Solid State Phenomena*, **138**: 303 (2008).
53. В. А. Татаренко, К. Л. Цинман, *Металлофизика*, **14**, № 10: 14 (1992).
54. В. А. Татаренко, *Металлофиз. новейшие технол.*, **21**, № 11: 60 (1999);  
V. A. Tatarenko, *Met. Phys. Adv. Tech.*, **19**, No. 11: 1479 (2001).
55. V. A. Tatarenko, *Defect and Diffusion Forum*, **194–199**: 1793 (2001).
56. T. R. Mattsson, N. Sandberg, R. Armiento, and A. E. Mattsson, *Phys. Rev. B*, **80**: 224104 (2009).
57. A. K. Giri and G. B. Mitra, *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **18**, No. 7: L75 (1985).

## REFERENCES

1. A. Seeger, D. Shumacher, W. Schilling, and J. Diehl, *Vacancies and Interstitials in Metals* (Amsterdam: North-Holland: 1970).
2. E. Vives and A. Planes, *Phys. Rev. Lett.*, **68**, No. 6: 812 (1992).
3. R. de Ridder, G. van Tendeloo, and S. Amelinckx, *phys. status solidi (a)*, **43**, No. 1: 133 (1977).
4. P. W. M. Jacobs and E. Kotomin, *Philosophical Magazine A*, **68**, No. 4: 695 (1993).
5. J. H. Evans, *Nature*, **229**, No. 5: 403 (1971).
6. V. I. Shherbak, M. I. Zakharova, and V. N. Bykov, *VANT. Ser. Fizika Radiats. Povrezhd. i Radiats. Mater.*, **3**, No. 1: 61 (1976) (in Russian).
7. V. K. Sikka and J. Moteff, *J. Appl. Phys.*, **43**, No. 12: 4942 (1972).
8. F. W. Wiffen, *J. Nucl. Mater.*, **67**, Nos. 1/2: 119 (1977).
9. F. W. Wiffen, *Proc. Int. Conf. 'Radiation Induced Voids in Metals' (Albany, NY, June 9–11, 1971)* (Oak Ridge: 1972), p. 386.
10. J. L. Brimhall and G. I. Kulcinski, *Radiat. Eff.*, **20**, No. 1: 25 (1973).
11. B. A. Loomis, S. B. Gerber, and A. Taylor, *J. Nucl. Mater.*, **68**, No. 1: 19 (1977).
12. V. V. Bryk, V. N. Voevodin, and V. F. Zelenskij, *VANT. Ser. Fizika Radiats. Povrezhd. i Radiats. Mater.*, **6**, No. 1: 33 (1981) (in Russian).
13. G. L. Kulcinski, J. L. Brimhall, and H. E. Kissinger, *J. Nucl. Mater.*, **40**, No. 2: 166 (1971).
14. D. J. Mazey, S. Francis, and J. A. Hudson, *J. Nucl. Mater.*, **47**, No. 2: 137 (1973).
15. P. Fratzl, S. Klaumunzer, M. Rammensee, and G. Vogl, *Europhys. Lett.*, **11**, No. 6: 547 (1990).
16. S. B. Fisher and K. R. Williams, *Radiat. Eff.*, **32**, Nos. 1–2: 123 (1977).
17. L. J. Chen and A. J. Ardell, *J. Nucl. Mater.*, **75**, No. 1: 177 (1978).
18. O. V. Oliinyk and V. A. Tatarenko, *Uspehi Fiziki Metallov*, **13**, No. 4: 417 (2012) (in Ukrainian).
19. V. N. Bugaev and V. A. Tatarenko, *Interaction and Arrangement of Atoms in Interstitial Solid Solution Based on Close-Packed Metals* (Kiev: Naukova Dumka: 1989) (in Russian).
20. M. A. Krivoglaz, *Diffuznoe Rasseyanie Rentgenovskikh Luchey i Neitronov na Fluktuatsionnykh Neodnorodnostyakh v Neideal'nykh Kristallakh* (Kiev: Naukova Dumka: 1984) (in Russian).

21. M. A. Krivoglaz, *Difraktsiya Rentgenovskikh Luchej i Neitronov v Neideal'nykh Kristallakh* (Kiev: Naukova Dumka: 1983) (in Russian).
22. A. G. Khachaturyan, *Theory of Structural Transformations in Solids* (Mineola, NY: Dover Publications, Inc: 2008).
23. A. G. Khachaturyan, *Progr. Mater. Sci.*, **22**, Nos. 1–2: 1 (1978).
24. A. G. Khachaturyan, *Teoriya Fazovykh Prevrashchenij i Struktura Tvorydykh Rastvorov* (Moscow: Nauka: 1974) (in Russian).
25. J. D. Eshelby, *Acta Metallurgica*, **3**, No. 5: 487 (1955).
26. H. Kanzaki, *J. Phys. Chem. Solids*, **2**, No. 1: 24 (1957).
27. M. A. Krivoglaz, *ZhETF*, **34**, Iss. 1: 204 (1958) (in Russian).
28. T. J. Matsumura, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **7**, No. 3: 270 (1952).
29. A. A. Katsnelson and A. I. Olemskoi, *Mikroskopicheskaya Teoriya Neodnorodnykh Struktur* (Moscow: Izdatel'stvo MGU: 1987) (in Russian).
30. A. I. Olemskoi and V. V. Chernysheva, *Izv. Vysshikh Uchebnykh Zavedenij*, No. 2: 20 (1982).
31. D. J. Chadi and M. L. Cohen, *Phys. Rev. B*, **8**, No. 12: 5747 (1973).
32. O. V. Oliinyk, P. O. Selyshchev, V. A. Tatarenko, and Y. B. Park, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **34**, No. 9: 1231 (2012) (in Ukrainian).
33. V. A. Tatarenko, P. O. Selyshchev, O. V. Oliinyk, and Y. B. Park, *Philosophical Magazine*, **94**, No. 24: 2724 (2014).
34. D. W. Hoffman, *Acta Metallurgica*, **18**, No. 7: 819 (1970).
35. H. E. Cook and D. De Fontaine, *Acta Metallurgica*, **17**, No. 7: 915 (1969).
36. J. E. Gragg, Jr., *J. Phys. Chem. Solids*, **32**, No. 6: 1195 (1971).
37. J. A. Reissland, *The Physics of Phonons* (London–New York–Sydney–Toronto: John Wiley and Sons Ltd.: 1973).
38. O. V. Oliinyk, V. A. Tatarenko, and S. M. Bokoch, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **33**, No. 10: 1383 (2011), *ibidem*, **34**, No. 1: 135 (2012).
39. W. G. Wolfer, *Comprehensive Nuclear Materials*, **1**: 1 (2012).
40. I. N. Frantsevich, F. F. Voronov, and S. A. Bakuta, *Uprugie Postoyannyye i Uprugie Moduli Metallov i Nemetallor: Spravochnik* (Kiev: Naukova Dumka: 1982) (in Russian).
41. J. W. Edwards, R. Speiser, and H. Johnson, *Journal of Applied Physics*, **22**, No. 4: 424 (1951).
42. H. R. Schober and P. H. Dederichs, *Electronic Properties Metals: Phonon States. Electron States and Fermi Surfaces Phonon State of Elements. Electron States and Fermi Surfaces of Alloys* (Berlin: Springer-Verlag: 1981).
43. R. Roberge, *Journal of the Less-Common Metals*, **40**, No. 1: 161 (1975).
44. B. N. Dutta and B. Dayl, *phys. status solidi*, **3**, No. 12: 2253 (1963).
45. E. S. Machlin, *Acta Metall.*, **22**, No. 1: 95 (1974).
46. L. Brewer, *The Cohesive Energies of the Elements: Report LBL-3720* (Berkeley, CA: Lawrence Berkeley Laboratory: 1977).
47. V. G. Weizer and L. A. Girifalco, *Phys. Rev.*, **120**, No. 3: 837 (1960).
48. R. Yamamoto and M. Doyama, *J. Phys. F: Met. Phys.*, **3**, No. 8: 1524 (1973).
49. W. A. Harrison, *Pseudopotentials in the Theory of Metals* (New York: W. A. Benjamin Inc.: 1966).
50. W. A. Harrison, *Solid State Theory* (New York: McGraw-Hill: 1970).
51. O. V. Oliinyk and V. A. Tatarenko, *J. Nano-Electron. Phys.*, **4**, No. 1: 01023-1 (2012).
52. S. M. Bokoch and V. A. Tatarenko, *Solid State Phenomena*, **138**: 303 (2008).

53. V. A. Tatarenko and K. L. Tsinnman, *Metallofizika*, **14**, No. 10: 14 (1992).
54. V. A. Tatarenko, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **21**, No. 11: 60 (1999);  
V. A. Tatarenko, *Met. Phys. Adv. Tech.*, **19**, No. 11: 1479 (2001).
55. V. A. Tatarenko, *Defect and Diffusion Forum*, **194–199**: 1793 (2001).
56. T. R. Mattsson, N. Sandberg, R. Armiento, and A. E. Mattsson, *Phys. Rev. B*, **80**: 224104 (2009).
57. A. K. Giri and G. B. Mitra, *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **18**, No. 7: L75 (1985).