

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ВАКАНСИЙ И АТОМОВ, ОБРАЗУЮЩИХ В АЛЬФА-ЖЕЛЕЗЕ РАСТВОРЫ ЗАМЕЩЕНИЯ

А.А. Мирзоев, Г.Е. Рузанова, Д.А. Мирзаев, К.Ю. Окишев

Представлены результаты первопринципных расчётов в пакете WIEN2k энергии связи вакансии в α -железе с примесями Pd, Ti, V и Cr, располагающимися в первой–третьей координационных сферах вакансии. Энергия связи для Pd и Cr достигает 0,3 эВ, а для V и Cr составляет менее 0,1 эВ. При этом для атомов Pd и Cr она положительна и монотонно убывает по мере удаления от вакансии, а для Ti и V положительна в первой и третьей координационных сферах и отрицательна во второй. Разработана статистико-термодинамическая теория образования вакансий в разбавленных растворах замещения с учётом ближнего взаимодействия вакансий с растворёнными атомами. Расчёты показывают, что легирование железа палладием и титаном может приводить к многократному увеличению равновесной концентрации вакансий; эффект ванадия и хрома значительно слабее.

Ключевые слова: железо, вакансии, концентрация вакансий, примеси замещения, первопринципные расчёты, термодинамика.

Вакансии играют важную роль во многих кинетических процессах в сплавах. Доля не заполненных атомами узлов кристаллической решётки,

или концентрация вакансий $\frac{n_V}{N}$, зависит прежде

всего от энергии их образования ε_V , которая представляет повышение полной энергии (точнее, энтальпии) кристалла при появлении одной вакансии. В выражении для свободной энергии чистого металла с вакансиями возрастание энергии компенсируется ростом конфигурационной и колебательной энтропии [1, 2], так что для определённой

(равновесной) концентрации порядка $\exp\left(-\frac{\varepsilon_V}{kT}\right)$

свободная энергия системы оказывается минимальной. Прекрасный обзор экспериментальных данных о величинах ε_V и методиках измерения приведён в [2].

В бинарных сплавах замещения, которые являются предметом рассмотрения в данной работе, вакансии, совершая случайные перескоки по решётке, могут оказаться вблизи атома растворённого элемента. Для некоторых элементов между их атомами и вакансиями возникает притяжение, а фактически захват, который как бы выводит такие вакансии из группы равновесных. Тем самым возрастает общее количество вакансий. Будем считать, что энергии образования вакансии вблизи и вдали от примесного атома X равны ε_{V0} и ε_{VX} соответственно. Тогда величина

$$\varepsilon_b = \varepsilon_{V0} - \varepsilon_{VX} \quad (1)$$

представляет энергию связи вакансии и растворённого атома. Обычно принимают, что ε_{V0} совпадает с энергией образования вакансии в основе сплава, в данном случае в α -железе [2].

Экспериментальные измерения ε_b обычно проводят, сравнивая равновесные концентрации

вакансий в чистых металлах и сплавах на их основе. Погрешности таких измерений весьма значительны. Поэтому в настоящей работе было проведено первопринципное моделирование взаимодействия примесей замещения с вакансиями в α -железе, в основе которого лежат квантовомеханические методы расчёта энергии кристалла, содержащего дефекты, в рамках теории функционала электронной плотности.

Было изучено взаимодействие с вакансиями в α -железе атомов четырёх элементов: палладия, титана, ванадия и хрома. Расчёт электронной структуры проводился методом линейных присоединённых плоских волн (LAPW) с учётом обобщённого градиентного приближения (GGA) в программном пакете WIEN2k [3]. При моделировании были использованы следующие параметры: радиус muffin-tin сферы атомов железа $R_{\text{mt}} = 2,0$ а.е.; параметр, контролирующий сходимость, $R_{\text{mt}}K_{\text{max}} = 10$; количество k -точек, характеризующее дискретную сетку, используемую для численного интегрирования по зоне Бриллюэна, $n_k = 27$. Был выбран параметр решётки $a = 2,84$ Å, являющийся равновесным для чистого ОЦК-железа [4]. В качестве модели была выбрана суперячейка, состоящая из 54 атомов. Для оценки энергии образования моновакансии в ОЦК-железе примерно в центре суперячейки был удалён один из атомов. Было определено значение энергии образования вакансии в чистом железе $\varepsilon_V = 2,15$ эВ. Далее один из атомов Fe, находящийся в первом, втором либо третьем окружении относительно вакансии, поочередно замещался атомом примеси. Для получения более точного результата система, содержащая вакансию и примесь, была отрелаксирована.

Энергия образования точечного дефекта любого вида A определялась как разница между энергиями суперячейки, содержащей дефект, и суперячейки чистого железа:

$$\varepsilon(A) = E(A) - E_{\text{ref}} - E(A_{\text{ref}}), \quad (2)$$

где $E(A)$ – энергия системы, содержащей дефект, E_{ref} – энергия чистого железа, а $E(A_{\text{ref}})$ – энергия одиночного дефекта. В частности, при расчёте энергии образования вакансии в системе с примесью замещения X использовалась формула [5]:

$$\varepsilon_{VX} = E_{\text{Fe}52-X} - \left(E_{\text{Fe}53-X} - \frac{1}{54} E_{\text{Fe}54} \right), \quad (3)$$

где $E_{\text{Fe}52-X}$ – энергия системы из 52 атомов Fe + вакансия + 1 атом X ; $E_{\text{Fe}53-X}$ – энергия системы из 53 атомов Fe + 1 атом X (без вакансии), а $E_{\text{Fe}54}$ – энергия системы из 54 атомов чистого железа.

На рис. 1 представлена зависимость энергии образования вакансии в ОЦК-железе от положения атома палладия. Добавление примеси Pd к ОЦК-железу снижает энергию образования вакансии; следовательно, образуется связанный комплекс V -Pd. Взаимодействие между вакансией и растворённым

атомом наиболее сильно тогда, когда они расположены в ближайших соседних узлах решётки. Энергия связи в этом случае максимальна и равна 0,30 эВ. Если переместить атом палладия во вторую, третью и т. д. координационные сферы по отношению к вакансии, то энергия связи заметно уменьшается (см. таблицу и рис. 1).

Энергии связи с вакансиями в различных координационных сферах для атомов остальных трёх элементов (Ti, V, Cr) даны в таблице и на рис. 2. Отметим, что энергия связи и в этих случаях максимальна для позиций ближайших соседей. Удивительно, что во второй координационной сфере энергия связи V -Ti и V -V отрицательна, что отражает отталкивание, то есть перескок атомов в первую или третью сферу. У атома Cr энергия связи положительна и для второй сферы, но её значение мало. Полученные нами результаты согласуются с данными других расчётных работ [6, 7], а также

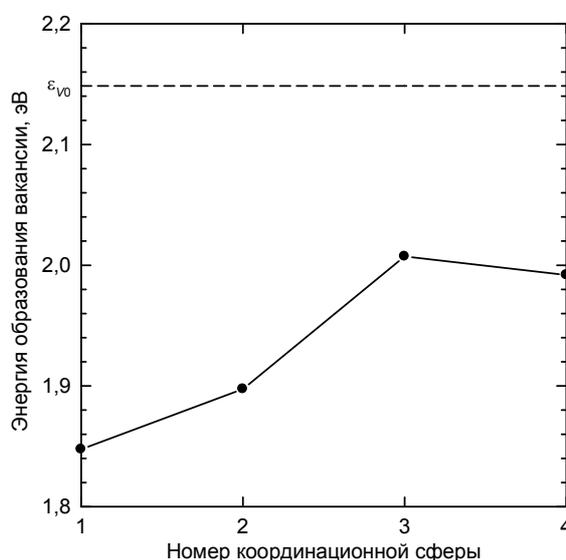


Рис. 1. Энергии образования вакансии при её расположении в различных координационных сферах относительно атома Pd в системе Fe_{52} + вакансия + Pd (пунктирная линия соответствует энергии образования вакансии в чистом ОЦК-железе)

Энергии связи комплекса вакансия – атом замещения M

Атом замещения	Номер координационной сферы	Энергия связи, эВ			
		Данная работа	[6]	[7]	Эксперимент [8]
Pd	1	0,30		0,36	0,21
	2	0,25	–	0,26	
	3	0,14			
Ti	1	0,28	0,22	0,18	0,16
	2	–0,15		–0,11	
	3	0,04			
V	1	0,08	0,04	0,04	< 0,105
	2	–0,07		–0,06	
	3	0,03			
Cr	1	0,07	0,05	0,05	< 0,105
	2	0,04		0,03	
	3	0,03			

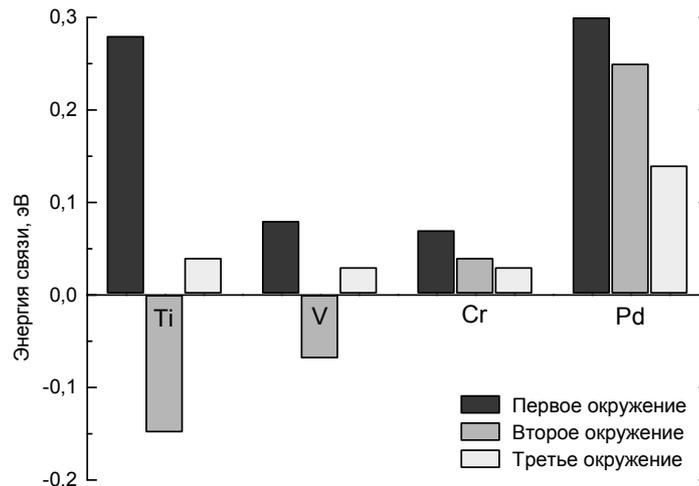


Рис. 2. Энергия связи вакансии и атома замещения, расположенного относительно неё в первой, второй и третьей координационной сфере

экспериментальными данными [1, 8]. Так, на основании данных об электросопротивлении сплавов Fe–Cr [1], энергия образования вакансии в железе увеличивается на 0,05 эВ на каждый атомный процент хрома; энергии связи примесей с вакансиями, найденные методом положительных мюонов [8], приведены в таблице.

Между вакансией и атомом замещения может возникать как упругое, обусловленное несоответствием размеров примеси и матричного атома, так и магнитное взаимодействие. Уменьшение энергии системы при добавлении к железу примесей, радиус которых превосходит радиус его атомов, связано с частичной компенсацией поля возмущений, создаваемого вакансией. Если бы взаимодействие между вакансией и атомом замещения было чисто упругим, то энергии связи вакансии с Ti и V имели бы большие значения, чем с Pd, так как радиус Ti (1,47 Å) превосходит радиус Pd (1,37 Å), а радиус V сопоставим с ним (1,35 Å); напомним, что радиус железа составляет 1,24 Å. При этом Ti и V проявляют в такой системе антиферромагнитные свойства, тогда как атом Cr практически не взаимодействует с вакансией ввиду его близости к атомам Fe как по размеру, так и по свойствам. Таким образом, сложный характер взаимодействия примесей с вакансией вызван суперпозицией двух сопоставимых вкладов: упругого и химического.

Полученные данные об энергиях взаимодействия примесных атомов с вакансиями позволяют рассчитать эффект изменения равновесной концентрации вакансий при легировании железа исследованными элементами.

Предположим, что в твёрдом растворе замещения железа и элемента X, содержащем N_{Fe} и N_X атомов этих элементов, возникает n_V вакансий. Их атомные доли тогда равны $x_{Fe} = \frac{N_{Fe}}{N}$; $x_X = \frac{N_X}{N}$ и

$x_V = \frac{n_V}{N}$, где $N = N_{Fe} + N_X + n_V$. Ограничимся

взаимодействием ближайших соседей и введём вероятности событий, что данный ближайший узел решётки, соседствующий с вакансией, занят атомом железа:

$$P_{V-Fe} = \frac{N_{V-Fe}}{zn_V} = \frac{N_{V-Fe}}{zN x_V} \quad (4a)$$

или атомом элемента X:

$$P_{V-X} = \frac{N_{V-X}}{zn_V} = \frac{N_{V-X}}{zN x_X}, \quad (4b)$$

где N_{V-Fe} и N_{V-X} представляют числа соответствующих атомных пар, а z – координационное число решётки. Поскольку концентрация вакансий мала, то соседством вакансия–вакансия можно пренебрегать, и тогда $N_{V-Fe} + N_{V-X} = zN x_V$, а $P_{V-Fe} + P_{V-X} = 1$.

В таком случае изменение энергии кристалла при образовании вакансии должно отражать лишь эффекты её взаимодействия с атомами Fe и X. Обозначим через ϵ_b энергию связи вакансии и растворённого атома X (положительную при притяжении и отрицательную при отталкивании). Тогда изменение энергии кристалла при образовании n_V вакансий

$$\Delta E = n_V \epsilon_V - zn_V P_{V-X} \epsilon_b, \quad (5)$$

где ϵ_V – энергия образования вакансии в чистом железе.

Происходящее при этом изменение свободной энергии твёрдого раствора, как обычно, равно

$$\Delta G = \Delta E - kT \ln W, \quad (6)$$

где W – термодинамическая вероятность рассматриваемой атомной конфигурации. Основываясь на статистически-термодинамическом подходе [9, 10], запишем W в следующем виде:

$$W = \frac{N!}{(N - n_V)! n_V!} \cdot \frac{W_1 \cdot W_2}{W_1^{неуп} \cdot W_2^{неуп}}. \quad (7)$$

Здесь через W_1 обозначено число способов размещения N_{V-Fe} пар V–Fe по zN_{Fe} парам, которые

атомы железа образуют с соседними узлами решётки, а через W_2 – число способов размещения N_{V-X} пар $V-X$ по zN_X таким же парам, образующим атомами X :

$$W_1 = \frac{(zN_{Fe})!}{(zN_{Fe} - N_{Fe-V})!N_{Fe-V}!}; \quad (8a)$$

$$W_2 = \frac{(zN_X)!}{(zN_X - N_{X-V})!N_{X-V}!}. \quad (8б)$$

При этом N_{V-Fe} и N_{V-X} определяются соотношениями (4), в которых значения вероятностей P_{V-Fe} и P_{V-X} отражают существующий в растворе ближний порядок в расположении атомов замещения и вакансий. В условиях же полностью неупорядоченного размещения вакансий и атомов X по решётке ($W_1^{неуп}$ и $W_2^{неуп}$) вероятности равны атомным долям: $P_{V-Fe} = x_{Fe}$; $P_{V-X} = x_X$.

Подставив эти значения в (8), (7) и далее в (6), получим с учётом формулы Стирлинга $\ln n! \approx n \ln n - n$ общее выражение для изменения свободной энергии раствора при образовании n_V вакансий:

$$\begin{aligned} \Delta G = & n_V \varepsilon_V - z n_V P_{V-X} \varepsilon_b - kT [N \ln N - (N - n_V) \times \\ & \times \ln(N - n_V) - n_V \ln n_V - (zN_{Fe} - z n_V + z n_V P_{V-X}) \times \\ & \times \ln(zN_{Fe} - z n_V + z n_V P_{V-X}) - (z n_V - z n_V P_{V-X}) \times \\ & \times \ln(z n_V - z n_V P_{V-X}) - (zN_X - z n_V P_{V-X}) \times \\ & \times \ln(zN_X - z n_V P_{V-X}) - z n_V P_{V-X} \ln(z n_V P_{V-X}) + \\ & + (zN_{Fe} - z n_V x_{Fe}) \ln(zN_{Fe} - z n_V x_{Fe}) + z n_V x_{Fe} \times \\ & \times \ln(z n_V x_{Fe}) + (zN_X - z n_V x_X) \ln(zN_X - z n_V x_X) + \\ & + z n_V x_X \ln(z n_V x_X)]. \quad (9) \end{aligned}$$

Равновесное значение P_{V-X} тогда можно най-

ти из соотношения $\frac{\partial \Delta G}{\partial P_{V-X}} = 0$. После дифференцирования это соотношение приводит к квадратному уравнению относительно P_{V-X} , положительный корень которого равен

$$\begin{aligned} P_{V-X} = & \frac{x_{Fe} h - x_V (h+1) + 1}{2x_V h} \times \\ & \times \left(-1 + \sqrt{1 + \frac{4x_X x_V h}{(x_{Fe} h - x_V (h+1) + 1)^2}} \right), \quad (10) \end{aligned}$$

где обозначено $h = \exp\left(-\frac{\varepsilon_b}{kT}\right) - 1$. Поскольку

$x_V \ll 1$, можно использовать разложение $\sqrt{1+x} \approx 1 + x/2$, и тогда выражение (10) приводится к виду

$$P_{V-X} \approx \frac{x_X}{1 + x_{Fe} h}. \quad (11)$$

Это означает, что равновесные вероятности P_{V-X} и P_{V-Fe} практически не зависят от концентрации

вакансий, что значительно облегчает дальнейшее рассмотрение.

Теперь найдём равновесное значение концентрации самих вакансий, которое определяется также из условия минимума свободной энергии $\frac{\partial \Delta G}{\partial n_V} = 0$. После дифференцирования с учётом соотношения (11) и малости x_V получим выражение

$$x_V = \exp\left(-\frac{\varepsilon_V}{kT}\right) \left(1 - x_X + x_X \exp\left(\frac{\varepsilon_b}{kT}\right)\right)^2, \quad (12)$$

в котором множитель

$$x_V^0 = \exp\left(-\frac{\varepsilon_V}{kT}\right) \quad (13)$$

представляет долю вакансий в чистом железе.

Результаты нашего первопринципного моделирования дали для энергии образования вакансии значение $\varepsilon_V = 2,15$ эВ. Авторами [6] и [11] было получено значение 2,17 эВ. Следует отметить, что эти величины находятся на верхнем пределе диапазона значений, наблюдавшихся экспериментально (от $1,4 \pm 0,1$ до $2,0 \pm 0,2$ эВ [12, 13]). А. Зеегер в обзоре [14] на основании литературных данных и собственных экспериментов пришёл к значениям $\varepsilon_V = 1,61 \dots 1,75$ эВ, а из результатов работы [15], где непосредственно измерялась концентрация вакансий после закалки от 1040 К, получил $\varepsilon_V = 1,59$ эВ. М.А. Штремель [2] считает наиболее надёжным значение $\varepsilon_V = 1,6$ эВ. Авторы [12] показали, что повышение концентрации углерода в α -железе с $2 \cdot 10^{-5}$ до $1 \cdot 10^{-3}$ мас. % приводит к снижению наблюдаемой энергии образования вакансии с $1,79 \pm 0,10$ до $1,53 \dots 1,60$ эВ; согласно первопринципным расчётам [6], энергия связи вакансии с атомом углерода составляет 0,60 эВ. Возможно, именно поэтому рассчитанное для чистого железа значение ε_V выше, чем в большинстве экспериментов, выполненных на железе технической чистоты. Кроме того, точное выражение для доли вакантных узлов имеет вид

$$x_V^0 = \exp\left(-\frac{\Delta G}{kT}\right) = \exp\left(-\frac{\Delta S}{k}\right) \exp\left(-\frac{\varepsilon_V}{kT}\right), \quad (14)$$

где ΔS – изменение энтропии колебательной подсистемы, обусловленное тем, что частота колебаний атомов вблизи вакансии (v') и вдали от неё (v) значительно различается; при использовании модели независимых колебаний атомов $\Delta S = zk \ln \frac{v}{v'}$.

Следовательно, определяемая в эксперименте эффективная энергия образования вакансии, которая и входит в формулу (13), будет меньше истинной. Поэтому в дальнейших расчётах мы использовали экспериментальное значение $\varepsilon_V = 1,6$ эВ.

Результаты расчётов температурной зависимости концентрации вакансий для двойных спла-

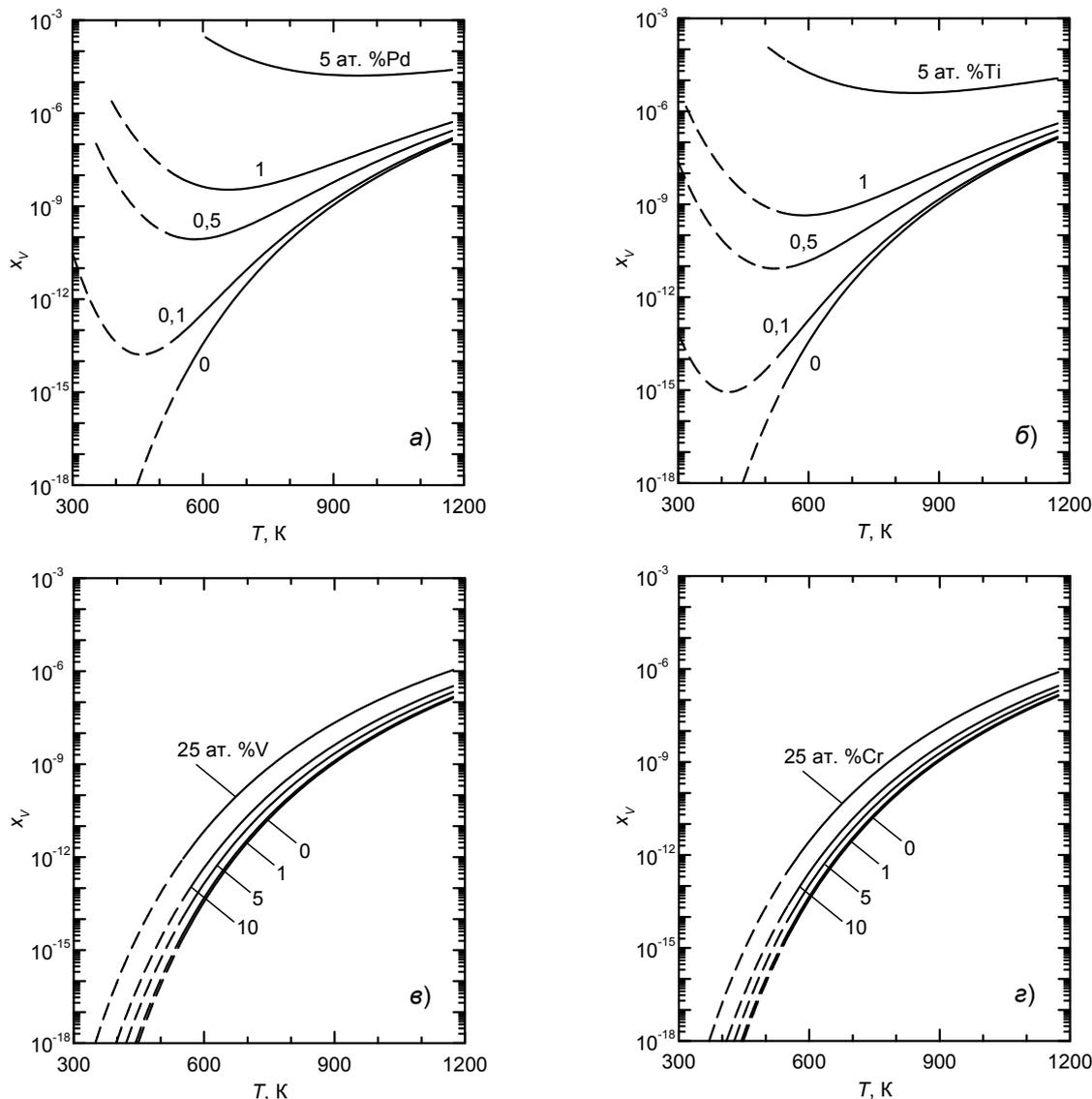


Рис. 3. Температурная зависимость доли вакантных узлов x_v , рассчитанная по формуле (12) при $\epsilon_v = 1,6$ эВ и энергиях связи ϵ_b из таблицы для различных концентраций примесей Pd (а), Ti (б), V (в) и Cr (г)

вов Fe с Pd, Ti, V и Cr разной концентрации приведены на рис. 3. Из него видно, что притяжение вакансий к примесным атомам приводит к тому, что в системах Fe–Pd и Fe–Ti, где энергия связи примеси с вакансией относительно велика (см. таблицу), заметно возрастает их равновесная концентрация; более того, при понижении температуры снижение концентрации вакансий может даже смениться ростом (рис. 3, а, б).

В системах же Fe–V и Fe–Cr, где энергии связи примеси с вакансией в 3–4 раза меньше, даже значительно большие концентрации примеси оказывают относительно небольшое воздействие на равновесную концентрацию вакансий: она возрастает примерно на порядок при концентрации $x_X = 0,25$ (впрочем, не очевидно, что значения энергии связи ϵ_b из таблицы, рассчитанные для концентрации $x_X = 1/54 \approx 0,019$, сохранятся неиз-

менными вплоть до таких высоких значений концентрации примеси).

Работа выполнена в рамках Государственного задания Министерства образования и науки РФ и частично поддержана грантом РФФИ 13-02-00048_а.

Литература

1. Кристал, М.А. Механизм диффузии в железных сплавах / М.А. Кристал. – М.: Металлургия, 1972. – 400 с.
2. Штремель, М.А. Прочность сплавов: учеб. для вузов. Ч. I: Дефекты решётки / М.А. Штремель. – М.: МИСиС, 1999. – 384 с.
3. Schwarz, K. Solid State Calculations Using WIEN2k / K. Schwarz, P. Blaha // Computational Materials Science. – 2003. – Vol. 28, no. 2. – P. 259–273.
4. Урсаева, А.В. Выбор оптимальных параметров для построения максимально точной мо-

дели ОЦК-железа / А.В. Урсаева, Г.Е. Рузанова, А.А. Мирзоев // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика, физика, химия». – 2010. – Вып. 2, № 9. – С. 97–101.

5. Terentyev, D. / Diffusion of 3D-migrating self-interstitial clusters in diluted and concentrated Fe–Cr alloys / D. Terentyev, P. Olsson, L. Malerba // Journal of Nuclear Materials. – 2009. – Vol. 386–388. – P. 140–152.

6. Ohnuma, T. First-principles calculations of vacancy–solute element interactions in body-centered cubic iron / T. Ohnuma, N. Soneda, M. Iwasawa. // Acta Materialia. – 2009. – Vol. 57, no. 20. – P. 5947–5955.

7. Vacancy–solute interactions in ferromagnetic and paramagnetic bcc iron: Ab initio calculations / O.I. Gorbатов, P.A. Korzhavyi, A.V. Ruban et al. // Journal of Nuclear Materials. – 2011. – Vol. 419, no. 1–3. – P. 248–255.

8. Doyama, M. Study of metallic properties by positive muons / M. Doyama // Bulletin of the Japan Institute of Metals. – 1986. – Vol. 25, no. 10. – P. 808–815.

9. Fowler, R.H. Statistical Thermodynamics /

R.H. Fowler, E.A. Guggenheim. – Cambridge University Press, 1949. – 701 p.

10. Лесник, А.Г. Улучшенный вариант квази-химической теории упорядочения сплавов / А.Г. Лесник // Физика металлов и металловедение. – 1977. – Т. 44, вып. 5. – С. 945–955.

11. Counts, W.A. First-Principles Energetics of Hydrogen Traps in α -Fe: Point Defects / W.A. Counts, C. Wolverton, R. Gibala // Acta Materialia. – 2010. – Vol. 58, no. 14. – P. 4730–4741.

12. Positron Annihilation on Pure and Carbon-Doped α -Iron in Thermal Equilibrium. / L. De Schep- per, D. Segers, L. Dorikens-Vanpraet et al. // Physical Review B. – 1983. – Vol. 27, no. 9. – P. 5257–5269.

13. Atomic Defects in Metals / ed. by H. Ull- maier. – Landolt-Börnstein, New Series, vol. III/25. – Springer-Verlag, 1991. – P. 128.

14. Seeger, A. Lattice Vacancies in High-Purity α -Iron / A. Seeger // Physica Status Solidi (a). – 1998. – Vol. 167, no. 2. – P. 289–311.

15. Seydel, O. Quenching-in of Vacancies in Pure α -Iron / O. Seydel, G. Froberg, H. Wever // Physica Status Solidi (a). – 1994. – Vol. 144, no. 1. – P. 69–79.

Мирзоев Александр Аминулаевич, доктор физико-математических наук, профессор кафедры общей и теоретической физики, Южно-Уральский государственный университет. 454080, г. Челябинск, пр. Ленина, 76. Тел.: (351)2654713. E-mail: mirzoev@physics.susu.ac.ru.

Рузанова Галина Евгеньевна, аспирант кафедры общей и теоретической физики, Южно-Уральский государственный университет. 454080, г. Челябинск, пр. Ленина, 76. Тел.: (351)2654713. E-mail: ruzanova@physics.susu.ac.ru.

Мирзаев Джалал Аминулович, доктор физико-математических наук, профессор кафедры физического металловедения и физики твёрдого тела, Южно-Уральский государственный университет. 454080, г. Челябинск, пр. Ленина, 76. Тел.: (351)2679013. E-mail: mirzaev@physmet.susu.ac.ru.

Окишев Константин Юрьевич, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физическо- го металловедения и физики твёрдого тела, Южно-Уральский государственный университет. 454080, г. Челябинск, пр. Ленина, 76. Тел.: (351)2679013. E-mail: okishev@physmet.susu.ac.ru.

Bulletin of the South Ural State University
Series “Metallurgy”
2013, vol. 13, no. 1, pp. 108–114

INTERACTION OF VACANCIES WITH SUBSTITUTIONAL SOLUTE ATOMS IN ALPHA IRON

A.A. Mirzoev, G.E. Ruzanova, D.A. Mirzaev, K.Yu. Okishev

The paper presents the results of *ab initio* calculations in WIEN2k package of binding energy of a vacancy in α iron with Pd, Ti, V and Cr impurity atoms located in the first, second and third spheres of coordination with respect to the vacancy. The binding energy reaches 0.3 eV for Pd and Cr being less than 0.1 eV for V and Cr. It is positive and monotonically decreases with increasing distance from the vacancy to Pd and Cr atoms, while for Ti and V atoms it is positive in the first and the third spheres of coordination and negative in the second sphere. A statistical and thermodynamic theory of vacancy formation in dilute substitutional solutions is proposed that takes into account the short-range interaction of vacancies with impurity atoms. Calculations show that palladium and titanium additions to α iron may lead to multiple increase of equilibrium vacancy concentration, while the effect of vanadium and chromium is much smaller.

Keywords: iron, vacancies, vacancy concentration, substitutional impurities, ab initio calculation, thermodynamics.

Mirzoev Aleksandr Aminulaevich, doctor of physical and mathematical science, professor of the General and Theoretical Physics Department, South Ural State University. 76 Lenin avenue, Chelyabinsk, Russia 454080. Tel.: 7(351)2654713. E-mail: mirzoev@physics.susu.ac.ru.

Ruzanova Galina Evgen'evna, post-graduate student of the General and Theoretical Physics Department, South Ural State University. 76 Lenin avenue, Chelyabinsk, Russia 454080. Tel.: 7(351)2654713. E-mail: ruzanova@physics.susu.ac.ru.

Mirzaev Dzhahal Aminulovich, doctor of physical and mathematical science, professor of the Physical Metallurgy and Solid State Physics Department, South Ural State University. 76 Lenin avenue, Chelyabinsk, Russia 454080. Tel.: 7(351)2679013. E-mail: mirzayev@physmet.susu.ac.ru.

Okishev Konstantin Yur'evich, candidate of physical and mathematical science, associate professor of the Physical Metallurgy and Solid State Physics Department, South Ural State University. 76 Lenin avenue, Chelyabinsk, Russia 454080. Tel.: 7(351)2679013. E-mail: okishev@physmet.susu.ac.ru.

Поступила в редакцию 25 февраля 2013 г.