

УДК 538.913+539.219.3

## Моделирование границ зерен: роль потенциала межатомного взаимодействия

*А.В. Векман<sup>1</sup>, Б.Ф. Демьянов<sup>1</sup>, А.С. Драгунов<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова (Барнаул, Россия)

<sup>2</sup>Университет Инха (Ташкент, Узбекистан)

## Grain Boundary Simulation: the Role of the Interatomic Potential

*A.V. Weckman<sup>1</sup>, B.F. Dem'yanov<sup>1</sup>, A.S. Dragunov<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Polzunov Altai State Technical University (Barnaul, Russia)

<sup>2</sup>Inha University (Tashkent, Uzbekistan)

В обзоре проведено сравнение результатов моделирования атомных структур различного уровня сложности с использованием парного потенциала Морзе и многочастичного потенциала Клери — Розато. Параметры потенциальных функций соответствовали алюминию. Выполнен расчет энергии идеального кристалла, структуры и энергии образования вакансии и специальной границы зерен (ГЗ)  $\Sigma 5(013)$ , а также проведено моделирование процесса зернограницной самодиффузии. Сравнительный анализ показал, что парные потенциалы в молекулярно-динамическом эксперименте дают качественно такие же результаты, как и многочастичные потенциалы. Энергии идеального кристалла, рассчитанные с учетом трех координационных сфер, совпадают. Позиции атомов в области вакансии различаются на величину, не превышающую  $0,1 \text{ \AA}$ . Структура границы зерен не зависит от выбора потенциала: позиции атомов различаются не более чем на  $0,1 \text{ \AA}$ , что составляет 2,5% от параметра решетки. Атомная структура хорошо совпадает с экспериментальными изображениями ГЗ. Моделирование процесса самодиффузии по ГЗ проведено в интервале температур от 600 К до температуры плавления. Аррениусовы зависимости имеют по два линейных участка, изменение наклона которых свидетельствует о смене механизма самодиффузии. Получены близкие значения температуры, при которой происходит смена механизмов диффузии при использовании разных потенциалов взаимодействия. Энергии активации самодиффузии имеют близкие значения.

**Ключевые слова:** компьютерное моделирование, потенциал взаимодействия, граница зерен, молекулярная статика, молекулярная динамика.

The review compares simulation results of different levels of atomic structure complexity with the use of the Morse pair potential and the Cleri-Rosato many-body potential. The parameters of the potential functions correspond to those of aluminum. We have calculated the perfect crystal energy, the structure and energy of vacancy forming, and the structure and energy of special grain boundary GB  $\Sigma 5(013)$ . Also, we have simulated the process of grain boundary self-diffusion. The comparative analysis has shown that pair potentials and many-body potentials have results of similar quality in the molecular dynamic experiment. The perfect crystal energies calculated with the consideration of three coordination spheres coincide. Atomic positions in the vacancy area differ by the value not exceeding  $0.1 \text{ \AA}$ . A grain boundary structure does not depend on the potential choice as the difference between atomic positions does not exceed  $0.1 \text{ \AA}$  which is 2.5% of the lattice parameter. The simulation of the self-diffusion process along GB has been performed in the temperature range from 600 K up to the melting point. Each Arrhenius plot has two linear parts. A change in the tilt of the Arrhenius plots is the proof of the change in the self-diffusion mechanism. We have obtained relatively similar temperature values at which diffusion mechanisms change with the use of different interaction potentials. The activation energies of self-diffusion have relatively similar values.

**Key words:** computer modelling, potential interaction, grain boundary, molecular statics, molecular dynamics.

DOI 10.14258/izvasu(2018)1-01

### Введение

Многочисленные исследования показывают, что границы зерен (ГЗ) являются активным элементом дефектной структуры поликристаллов, влияющим на формирование таких важных свойств, как пластичность, диффузия, высокотемпературная и структурная ползучесть, рекристаллизация, текстурообразование, разрушение и др. Структура ГЗ на атомном уровне оказалась весьма сложной, особенно если учесть, что ГЗ могут обладать кристаллическим упорядоченным строением и иметь свои собственные дефекты: зернограничные дислокации, зернограничные дефекты упаковки, ступеньки, фасетки. Природа этих дефектов далеко не ясна. Актуальность исследований свойств ГЗ возрастает в связи с развитием новых направлений материаловедения и введения в практику материалов, в которых поверхностные свойства играют определяющую роль: нанокристаллические материалы, пластичные виды керамики, низкоразмерные структуры.

Исследование тонкой структуры ГЗ с помощью прямых экспериментальных методов является достаточно трудной задачей. Во многих случаях более эффективным оказывается применение метода компьютерного моделирования. Компьютерное моделирование не только позволяет с хорошей точностью определить такие характеристики, как энергия, координаты атомов, избыточный объем, коэффициенты зернограничной диффузии, но и исследовать в динамике процессы, происходящие на атомном уровне либо протекающие с высокой скоростью, что не всегда доступно для натурального эксперимента.

Краеугольным камнем любого моделирования в твердом теле является межатомный потенциал. Несмотря на развитие наук о структуре и свойствах вещества, строении атома, пока не существует универсального метода описания межатомных взаимодействий. Было предложено большое количество модельных потенциалов, многие из которых адекватно отражали характер межатомного взаимодействия и успешно применялись для задач моделирования. К ним относятся потенциалы Морзе, Леннарда-Джонса, Борна — Майера, Джонсона. В дальнейшем происходило усложнение потенциалов, в частности, для их конструирования использовались первопринципные подходы. В настоящее время выполнено большое количество исследований в физике дефектов в металлах и сплавах с применением широкого спектра потенциальных функций, в связи с чем сравнение результатов моделирования структуры и свойств материалов, полученных с использованием разных потенциалов, является актуальной задачей.

### Границы зерен в компьютерных экспериментах

На ранних этапах моделирования для описания взаимодействия атомов использовались исключительно парные потенциалы. Это было обусловлено

их относительной простотой и недостаточной мощностью вычислительной техники. Например, для металлических систем наиболее часто используются короткодействующие потенциалы Леннарда-Джонса [1], Борна — Майера [2] и Морзе [3].

Увеличение мощности компьютеров позволило использовать для моделирования более сложные многочастичные потенциалы. Наибольшее распространение получили многочастичные потенциалы Финниса — Синклера [4, 5] и потенциалы, полученные методом погруженного атома (embedded atom method (EAM)) [6, 7]. Многочастичные потенциалы имеют более сложную форму, однако они так же, как и парные, являются эмпирическими. Параметры многочастичных потенциалов находятся путем подгонки к большому числу экспериментальных характеристик, чем при построении парных потенциалов. Кроме того, в некоторых кристаллах часть энергии, зависящая от плотности, может быть выражена как сумма парных взаимодействий, поэтому многочастичные потенциалы могут хорошо аппроксимироваться эффективными парными потенциалами [4]. С использованием многочастичных потенциалов было проведено большое количество исследований дефектов, в том числе и границ зерен [8–14].

В работах [15–18] с использованием потенциалов EAM исследованы специальные границы наклона [100] в ГЦК-металлах. Обнаружено, что граница  $\Sigma 5(210)$  имеет одну стабильную структуру. Граница  $\Sigma 5(310)$  в меди имеет две структуры, а в никеле обнаружены новые метастабильные структуры. Кроме того, проведен расчет энергии 32-х границ во всем интервале углов разориентации зерен. На основе значений энергии предпочтительных границ, полученных при атомном моделировании, с помощью дисклинационно-структурной модели рассчитаны энергия границ зерен во всем интервале разориентировки. Получено почти идеальное совпадение рассчитанных кривых зависимости энергии от угла разориентировки с результатами моделирования.

Было проведено значительное число работ, в которых проводятся сравнения результатов, получаемых с использованием парных и многочастичных потенциалов. Одним из первых фундаментальных исследований по влиянию потенциалов на структуру ГЗ и связь между энергией и избыточным объемом была серия работ Вольфа. На примере ГЦК-металлов Cu и Au [19, 20] и ОЦК-металлов  $\alpha$ -Fe и Mo [21, 22] были исследованы симметричные границы наклона и кручения. Также были проведены расчеты для несимметричных ГЗ [23] и границ общего типа [24, 25]. Расчеты проводились с использованием эмпирических потенциалов разного типа, как парных (Джонсона, Леннарда-Джонса), так и многочастичных (Финниса — Синклера, погруженного атома). Исследования Вольфа показали, что существует кор-

реляция между избыточным объемом и энергией ГЗ, т.е. с возрастанием избыточного объема растет энергия границ. Эта зависимость имеет характер, близкий к линейному. Причина зависимости энергии дефекта от избыточного объема связывается в работах Вольфа с координационным коэффициентом, показывающим изменение числа ближайших соседей на границе по сравнению с идеальным кристаллом: чем больше координационный коэффициент, тем больше энергия. Применение различных потенциалов не повлияло на выводы работ Вольфа. Основное заключение, сделанное в этих работах на основании сравнительного исследования корреляции между структурой и энергией, состоит в том, что использование многочастичного потенциала не приводит к появлению принципиальных изменений в энергетике границ, а именно все потенциалы дают одинаковые виды зависимости энергии ГЗ от угла разориентации [20, 21].

Во многих других работах также отмечается, что многочастичные потенциалы не привели к качественному изменению результатов компьютерного моделирования дефектов и новым данным по сравнению с расчетами, использующими парные потенциалы [8, 26]. Многочастичные потенциалы так же, как и парные, не позволяют получить надежные значения энергии дефектов, что является следствием их эмпиричности. В частности, расчеты энергии дефектов показывают существенное расхождение с экспериментальными значениями. В работе [27] ЕАМ-потенциал позволил получить в сплаве  $Ni_3Fe$  приемлемые значения энергии ГЗ-наклона с осью разориентации, однако заниженные значения энергии антифазных границ и завышенные значения энергии свободной поверхности. Расчеты энергии дефекта упаковки, проведенные в [28], дали заниженные значения:  $59 \text{ мДж/м}^2$  для никеля и  $81 \text{ мДж/м}^2$  для алюминия. Соответствующие экспериментальные значения энергии равны  $150 \div 300 \text{ мДж/м}^2$  и  $150 \div 250 \text{ мДж/м}^2$  [29]. В работе [30] указывается, что метод ЕАМ в целом дает атомную структуру, хорошо согласующуюся с экспериментом, однако не может использоваться для определения абсолютных значений энергии.

Таким образом, атомные структуры ГЗ, рассчитанные с использованием парных и многочастичных потенциалов, как отмечается во многих работах, практически (в пределах точности, достигаемой современными экспериментальными методами) совпадают. Сравнение потенциалов проводилось не только относительно структуры границ. Например, в [31] были исследованы механизмы диффузии и определены значения энергии активации с использованием парного и многочастичного потенциала в интерметаллиде  $Ni_3Al$ . Оба потенциала показали схожие результаты, а энергии активации диффузии имеют близкие значения. Качественное совпадение показало сравнение результатов, полученных при расчетах динамики распространения трещи-

ны с использованием парных потенциалов Леннарда-Джонса, Морзе и многочастичного ЕАМ-потенциала [32]. Система с ЕАМ-взаимодействием не отличается по вязкости от систем, описываемых парным взаимодействием. Во всех случаях картины эмиссии дислокаций из трещины качественно подобны. ЕАМ-потенциал дает значительно меньшее значение энергии вакансии и поверхностной энергии по сравнению с парными. Эти данные согласуются с другими работами, в которых отмечена тенденция к занижению энергии в методе ЕАМ [20, 27, 28].

### Влияние вида потенциала на структуру границ зерен

Несмотря на большое количество исследований, вопрос о том, возможно ли использование парных потенциалов для таких сложных дефектов, как ГЗ, остается открытым. С одной стороны, металлические связи возникают в результате коллективного использования электронов, следовательно, необходимо учитывать многочастичный характер взаимодействия. С другой стороны, применение парных потенциалов имеет свои преимущества. Существенно увеличивается скорость расчетов, что позволяет увеличивать число атомов в расчетном блоке. Кроме того, уменьшается погрешность расчетов, так как при длительном счете накапливается погрешность, связанная с округлением величин, а применение парных потенциалов уменьшает число операций счета. Также необходимо учитывать то, какие свойства ГЗ и других дефектов и процессов требуется определить в результате компьютерного эксперимента.

В настоящей работе проведено сравнение результатов моделирования специальной границы зерен наклона  $\Sigma 5(013)$  с использованием парного потенциала Морзе и многочастичного потенциала Клери — Розато.

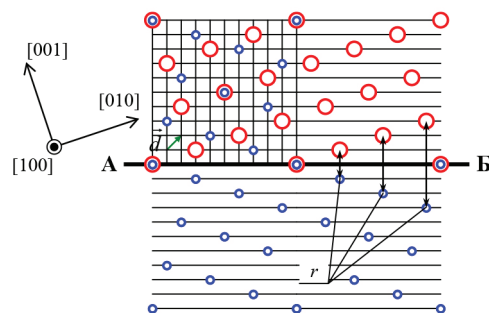


Рис. 1. Структура специальной ГЗ  $\Sigma 5(013)$  в модели РСУ

В основе используемой модели ГЗ [33, 34] лежит потенциальная энергия атомов. Исходная конфигурация атомов была выбрана в модели РСУ (рис. 1). При этом часть атомов вблизи ГЗ находятся на расстоянии, отличающемся от равновесного. В модели

PCY граница  $\Sigma 5(013)$  состоит из строго повторяющихся структурных элементов. На один период повторения данной границы в ГЦК металлах приходится по две пары сблизившихся атомов. Расстояние между ними составляет  $0,316a$  и  $0,632a$ , тогда как равновесное значение составляет  $\sqrt{2}a/2 = 0,707a$ . С энергетической точки зрения атомы, находящиеся в стесненном состоянии, дают увеличение потенциальной энергии. В результате граница в модели PCY имеет высокое значение энергии. Тем не менее структура границы может быть получена из модели PCY путем удаления части сблизившихся атомов. Данная процедура называется вакансионной релаксацией [35, 36]. Для ее реализации программа определяет пары атомов, расстояние между которыми меньше некоторого минимального  $r_{min}$ . Величину  $r_{min}$  можно варьировать, что эквивалентно варьированию числа внесенных вакансий. После удаления одного из сблизившихся атомов второй атом смещается в симметричное положение на плоскость границы, образуя распределенную вакансию. После вакансионной релаксации проводится смещение атомов под действием межатомных сил, которое дополнительно понижает энергию ГЗ.

Расчет энергии атомов проводился с использованием парного потенциала Морзе и многочастичного потенциала Клери — Розато. Энергия атомов, рассчитанная с помощью парного потенциала Морзе, имеет вид [3, 37]

$$U_i = \frac{1}{2} \sum_j D\beta^2 \exp^{-2\alpha r_{ij}} - \frac{1}{2} \sum_j D\beta \exp^{-\alpha r_{ij}}. \quad (1)$$

Параметры потенциальной функции Морзе  $\alpha$ ,  $\beta$  и  $D$  были взяты из работы [38] и соответствовали алюминию. Первое слагаемое выражает энергию отталкивания, а второе — энергию притяжения.

Энергия атомов, рассчитанная с помощью многочастичного потенциала Клери — Розато, состоит из парного потенциала Борна — Майера

$$U_R^i = \sum_j A \exp^{-p(r_{ij}/r_i^{-1})}, \quad (2)$$

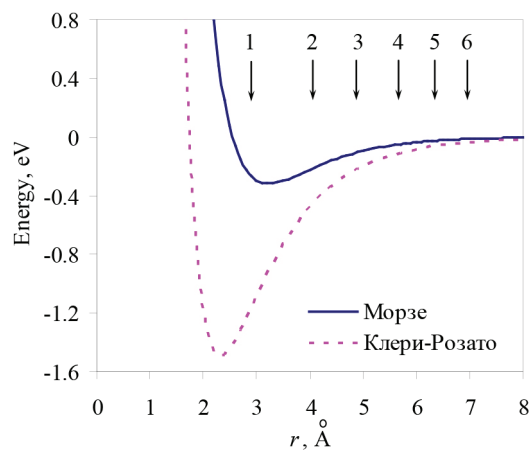
описывающего отталкивание, и многочастичного слагаемого

$$U_B^i = - \sqrt{\sum_j \xi^2 \exp^{-2q(r_{ij}/r_i^{-1})}}, \quad (3)$$

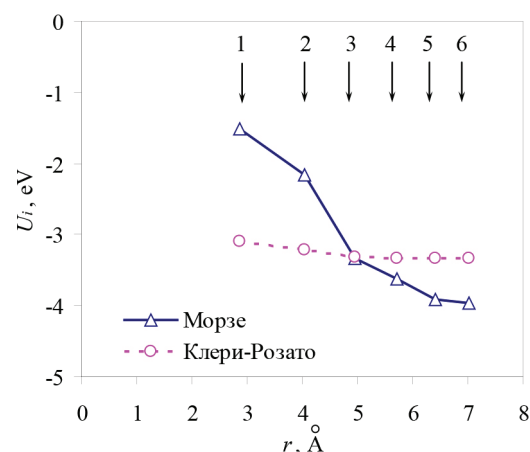
описывающего притяжение атомов.  $A$ ,  $p$ ,  $q$ ,  $\xi$  взяты из [39].

На рисунке 2а изображены зависимости потенциальной функции от расстояния между атомами. Стрелками с цифрами обозначены положения координационных сфер. Из рисунка видно, что глубина потенциальной ямы, соответствующая потенциалу Клери — Розато, почти в пять раз превышает анало-

гичное значение для потенциала Морзе. Кроме того, минимум данного потенциала соответствует значению  $2,3 \text{ \AA}$ , что меньше расстояния первой координационной сферы для алюминия ( $r_1 = 2,86 \text{ \AA}$ ).



а)



б)

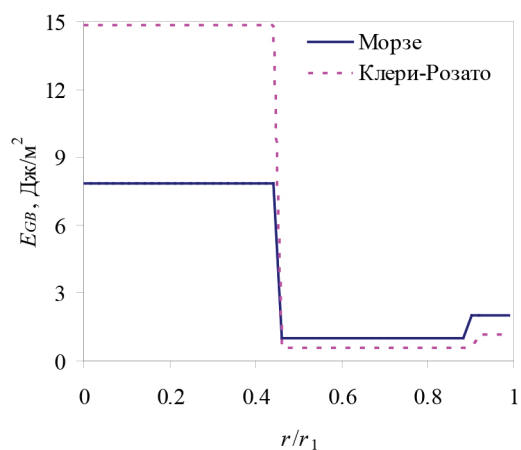
Рис. 2. Потенциалы взаимодействия (а) и потенциальная энергия атома в идеальном кристалле (б)

На рисунке 2б изображена зависимость потенциальной энергии атома в идеальном кристалле в зависимости от радиуса обрезания потенциала. Данные зависимости показывают, что для получения адекватных сравнительных результатов потенциалами Морзе и Клери — Розато необходимо учитывать взаимодействие в трех координационных сферах, так как энергия имеет близкие значения именно при таком радиусе обрезания потенциалов.

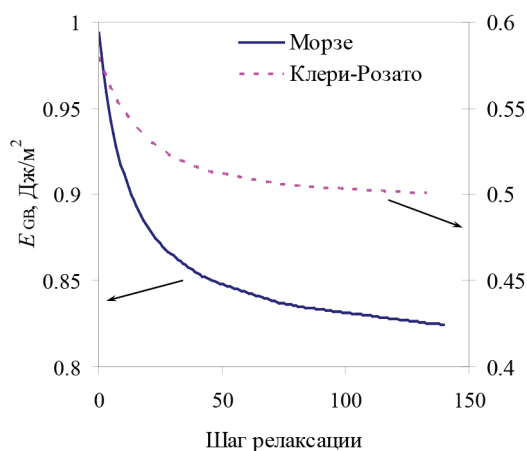
Сравнение результатов моделирования с разными потенциальными функциями дает возможность решить две основные задачи: проверить адекватность выбранной модели и возможность применения более простых парных потенциалов для моделирования границ зерен. Для этого мы исследовали

полученную атомную структуру границы и самодиффузию по границе.

На рисунке 3а приведены кривые изменения энергии границы в процессе вакансионной релаксации. Из рисунка видно, что стабилизация структуры наступает тогда, когда параметр  $r_{min}$  равен  $0,316a$ , что соответствует удалению одного из первой пары сближившихся атомов. Удаление из структуры еще одного атома приводит к повышению энергии. В результате получается структура, изображенная на рисунке 4а.



а)



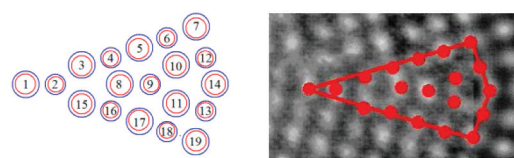
б)

Рис. 3. Изменение энергии в процессе вакансионной (а) и атомной (б) релаксации

После проведения вакансионной релаксации была осуществлена атомная релаксация, в процессе которой атомы смещаются из узлов кристаллической решетки под действием межатомных сил. На рисунке 3б изображено изменение энергии в процессе проведения этого вида релаксации. Окончательные значения энергии получились равными  $825 \text{ мДж/м}^2$  и  $501 \text{ мДж/м}^2$  при использовании потенциала Морзе и Клери — Розато соответственно. Из рисунка 3б так-

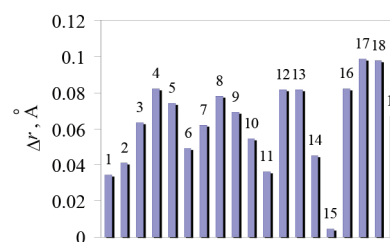
же следует, что для полной стабилизации структуры необходимо примерно одинаковое количество шагов.

На рисунке 4а цифрами обозначены атомы в пределах структурной единицы, а кружками разного размера — позиции атомов при расчетах разными потенциалами: большие — потенциал Морзе, маленькие — потенциал Клери — Розато. На рисунке 4б приведены значения расстояний между позициями атомов при использовании разных потенциалов. Видно, что эти значения не превышают  $0,1 \text{ \AA}$ , что для алюминия составляет порядка 2,5% от значения параметра кристаллической решетки. Для сравнения на рисунке 4б приведен снимок данной границы, полученный методом ВРЭМ [40]. Видно, что атомная структура, полученная в нашей модели, хорошо согласуется с электронно-микроскопическим снимком. Подобные структуры наблюдались на электронно-микроскопических снимках в бикристаллах оксида никеля [41], сплава Al-5%Mg [42] и титаната стронция [43].



а)

б)



в)

Рис. 4. Структурная единица ГЗ  $\Sigma 5(013)$ : расчетная (а), снимок ВРЭМ [40] (б), расстояния между позициями атомов при использовании разных потенциалов (в)

Границы зерен, как и любой дефект, обладают избыточным объемом. Распределение избыточного объема вдоль плоскости границы может характеризовать ее структурные особенности. На рисунке 5а приведены значения избыточного объема границы после проведения всех этапов релаксации. Как видно из рисунка, при моделировании с разными потенциалами распределение избыточного объема ГЗ практически полностью совпадает.

Еще один параметр, характеризующий структуру границы, — это функция радиального распределения (ФРР) атомов. Данная функция показывает степень кристалличности ее структуры. На рисунке 5б изображена ФРР, рассчитанная для исследованной границы. В целом профиль данной функции с применением парного (сплошная линия) и многочастичного (прерывистая линия) потенциалов совпадают. Однако

использование парного потенциала показывает большую степень кристалличности, что выражается в более острых пиках, соответствующих точным значениям координационных сфер.

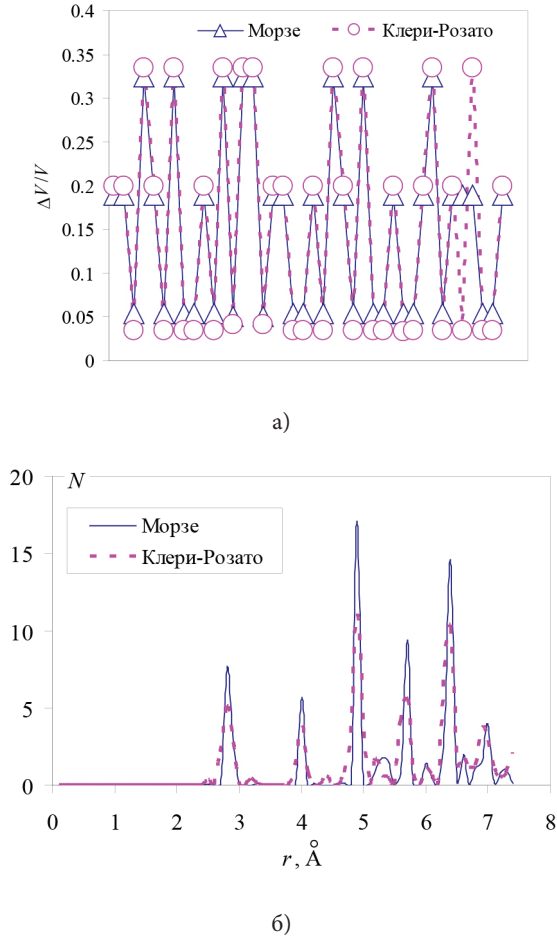


Рис. 5. Распределение избыточного объема (а) и функция радиального распределения атомов (б)

**Влияние вида потенциала на динамику перемещения атомов**

Структурные особенности ГЗ неизбежно влияют на свойства материалов. В частности, атомные перестройки границ приводят к изменению энергии активации зернограничной диффузии. Например, в работе [44] авторы методом молекулярной динамики исследовали структуру специальных ГЗ  $\Sigma 5(012)$  и  $\Sigma 5(013)$ , а также влияние структуры на зернограничную диффузию. Оказалось, что граница  $\Sigma 5(013)$  может содержать два типа структурных единиц, причем для разных структурных элементов энергия активации диффузии оказалась различной. Изменение наклона аррениусовой зависимости при диффузии атомов золота [45] и серебра [46] в меди по ГЗ  $\Sigma 5(013)$ , как считают авторы, может быть связано с изменением структуры границы.

Хорошо известно, что атомы в твердом теле мигрируют, занимая позиции, не занятые другими атомами.

Таким образом, именно вакансии, в том или ином виде, определяют вероятность диффузионного движения атомов. Расчет структуры кристалла в окружении вакансии показал, что, как и в случае со структурой ГЗ, позиции атомов различались на величину, не превышающую  $0,1 \text{ \AA}$ . При этом атомы первой координационной сферы сместились в сторону вакансии на расстояние  $0,83r_1$ , второй — на  $0,25r_1$  от вакансии, а третьей — на  $0,04r_1$  к вакансии. Энергия вакансии, полученная при расчете потенциалом Морзе, оказалась равна  $0,64 \text{ эВ}$ , а потенциалом Клери — Розато —  $0,77 \text{ эВ}$ . Данные значения хорошо согласуются с экспериментальным значением энергии образования вакансии  $0,66 \text{ эВ}$  [47–49].

В нашей работе методом молекулярной динамики была исследована зернограничная самодиффузия в алюминии. Коэффициенты самодиффузии находились по количеству перескоков атомов ( $\Gamma$ ) в соответствии с выражением [50]

$$D_{GB} = \frac{1}{6} \alpha^2 \Gamma = \frac{1}{12} a^2 \Gamma, \quad (4)$$

где  $\alpha = r_1 = a\sqrt{2}/2$  — расстояние, на которое атом совершает единственный скачок. Результаты расчетов представлены на рисунке 6.

Видно, что зависимости имеют по два линейных участка: высоко- и низкотемпературные. Смена наклона графиков приходится на интервал температур  $750 \div 800 \text{ К}$ , что составляет  $0,8 \div 0,86$  от температуры плавления алюминия ( $T_{пл} = 933 \text{ К}$ ). При этом с увеличением температуры наклон графиков уменьшается, что согласуется с результатами, полученными в [44]. Значения энергии активации зернограничной самодиффузии при низких температурах составили  $55,9 \text{ кДж/моль}$  при использовании парного потенциала и  $46,9 \text{ кДж/моль}$  при использовании многочастичного потенциала. Энергии активации высокотемпературного участка составили  $31,2 \text{ кДж/моль}$  и  $17,1 \text{ кДж/моль}$  соответственно.

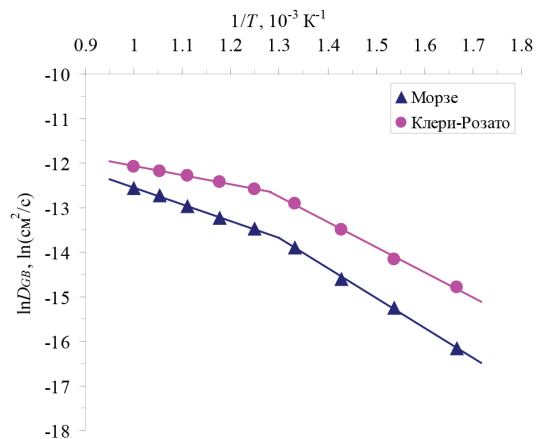


Рис. 6. Температурные зависимости  $\ln D_{GB}$  зернограничной самодиффузии по ГЗ  $\Sigma 5(013)$

### Заключение

Таким образом, проведенное сравнение результатов моделирования структуры и свойств ГЗ при использовании парного и многочастичного потенциалов показывает, что парный потенциал в молекулярно-динамическом эксперименте дает качественно такие же результаты, как и многочастичный. Однако при решении задач разного уровня сложности существует расхождение, связанное прежде всего с определением энергии. В частности, определение энергии идеального кристалла дает хорошее совпадение при условии учета числа координационных сфер, для которых получен парный потенциал, тогда как величины энергии ГЗ показывают более высокое значение, полученное с использованием парного потенциала, по сравнению со значением, полученным с использованием многочастичного потенциала. Это является ожидаемым результатом, поскольку потенциалы строились по свойствам идеального кристалла. Моделирование атомной структуры ГЗ также дает хорошее совпадение значе-

ний координат атомов и величины свободного объема на границе.

Моделирование такого сложного динамического процесса, как зернограничная диффузия, дает сходный характер аррениусовской зависимости. Получены близкие значения температуры смены механизма диффузии. Энергии активации хорошо согласуются в низкотемпературной области, а в высокотемпературной области величина энергии активации, рассчитанная в парном потенциале, выше, что приводит к более медленной диффузии по сравнению с расчетами с использованием многочастичного потенциала. На основании изложенного можно сделать вывод, что расчеты с применением парных потенциалов полностью способны обнаруживать общие закономерности атомной структуры ГЗ. Имеется хорошее качественное совпадение структуры ГЗ, рассчитанной с применением парных и многочастичных потенциалов. В то же время энергия дефекта может существенно зависеть от вида потенциала.

### Библиографический список

1. Jones J.E. On the Determination of Molecular Fields II. From the equation of state of a gas // *Proc. Roy. Soc. Lond. Series A.* — 1924. — V. 106, N738.
2. Born M., Mayer J.E. Zur Gittertheorie der Ionenkristalle // *Zeitschrift für Physik.* — 1932. — V. 75, N1–2.
3. Morse P.M. Diatomic molecules according to the wave mechanics. II. Vibrational levels // *Phys. Rev.* — 1929. — V. 34, N1.
4. Finnis M.W., Sinclair J.E. A simple empirical N-body potential for transition metals // *Phil. Mag. A.* — 1984. — V. 50, N1.
5. Rafii-Tabar H., Sulton A.P. Long-range Finnis-Sinclair potentials for f.c.c. metallic alloys // *Phil. Mag. Lett.* — 1991. — V. 63, N4.
6. Foiles S.M., Baskes M.I., Daw M.S. Embedded-atom-method functions for the fcc metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and their alloys // *Phys. Rev. B.* — 1986. — V. 33, N12.
7. Pasianot R., Farkas D., Savino E.J. Empirical many-body interatomic potential for bcc transition metals // *Phys. Rev. B.* — 1991. — V. 43, N9.
8. Hofmann D., Finnis M.W. Theoretical and experimental analysis of near  $\Sigma=3(211)$  boundaries in silver // *Acta Met.* — 1994. — V. 42, N10.
9. Bacia M., Morillo J., Penisson J.M., Pontikis V. Atomic structure of the  $\Sigma=5(210)$  and  $(310)$ ,  $[001]$  tilt axis grain boundaries in Mo: a joint study by computer simulation and high-resolution electron microscopy // *Phil. Mag.* — 1997. — V. 76, N5.
10. Tschopp M.A., McDowell D.L. Structures and energies of S3 asymmetric tilt grain boundaries in copper and aluminium // *Phil. Mag.* — 2007. — V. 87, N22.
11. Mishin Y., Asta M., Li J. Atomistic modeling of interfaces and their impact on microstructure and properties // *Acta Mater.* — 2010. — V. 58, N4.
12. Gautam A., Ophus C., Lancon F., Radmilovic V., Dahmen U. Atomic structure characterization of an incommensurate grain boundary // *Acta Mater.* — 2013. — V. 61, N13.
13. Homer E.R., Foiles S.M., Holm E.A., Olmsted D.L. Phenomenology of shear-coupled grain boundary motion in symmetric tilt and general grain boundaries // *Acta Mater.* — 2013. — V. 61, N4.
14. Frolov T., Asta M., Mishin Y. Segregation-induced phase transformations in grain boundaries // *Phys. Rev. B.* — 2015. — V. 92, N2.
15. Бачурин Д.В., Мурзаев Р.Т., Назаров А.А. Атомное компьютерное и дисклинационное моделирование границ наклона  $[001]$  в никеле и меди // *Физика металлов и металловедение (ФММ).* — 2003. — Т. 96, №6.
16. Бачурин Д.В., Назаров А.А. Влияние относительно-го сдвига под действием внешнего напряжения на структуру и энергию границы наклона  $\Sigma=5(210)$   $[001]$  в никеле // *ФММ.* — 2004. — Т. 98, №1.
17. Мурзаев Р.Т., Назаров А.А. Энергия образования вакансий в границах наклона  $[001]$  в никеле: компьютерное моделирование // *ФММ.* — 2005. — Т. 100, №3.
18. Мурзаев Р.Т., Назаров А.А. Энергия активации миграции вакансии в границах наклона  $[001]$  в никеле // *ФММ.* — 2006. — Т. 101, №1.
19. Wolf D. Structure-energy correlation for grain boundaries in fcc metals. I. Boundaries on the  $(111)$  and  $(100)$  planes // *Acta Met.* — 1989. — V. 37, N7.

20. Wolf D. Structure-energy correlation for grain boundaries in fcc metals. III. Symmetrical tilt boundaries // *Acta Met.* — 1990. — V. 38, N5.
21. Wolf D. Correlation between the energy and structure of grain boundaries in bcc metals. I. Symmetrical boundaries on the (110) and (100) planes // *Phil. Mag. B.* — 1989. — V. 59, N6.
22. Wolf D. Correlation between the energy and structure of grain boundaries in bcc metals. II. Symmetrical tilt boundaries // *Phil. Mag. A.* — 1990. — V. 62, N4.
23. Wolf D. Structure-energy correlation for grain boundaries in fcc metals. IV. Asymmetrical twist (general) boundaries // *Acta Met.* — 1990. — V. 38, N5.
24. Wolf D. A broken-bond model for grain boundaries in face-centred cubic metals // *J. Appl. Phys.* — 1990. — V. 68, N7.
25. Wolf D. Structure and energy of general grain boundaries in bcc metals // *J. Appl. Phys.* — 1991. — V. 69, N1.
26. MacLaren J.M., Crampin S., Vvedensky D.D., Eberhart M.E. Mechanical stability and charge densities near stacking faults // *Phys. Rev. Lett.* — 1989. — V. 63, N23.
27. Chen S.P., Srolovitz D.J., Voter A.F. Computer simulation on surfaces and [001] symmetric tilt grain boundaries in Ni, Al and Ni<sub>3</sub>Al // *J. Mater. Res.* — 1989. — V. 4, N1.
28. Farkas D., Savino E.J., Chidambaram P. Oscillatory relaxations in (111) planar defects in Ni<sub>3</sub>Al // *Phil. Mag. A.* — 1989. — V. 60, N4.
29. Носкова Н.И. Дефекты и деформация монокристаллов. — Екатеринбург, 1995.
30. Wright A.F., Atlas S.R. Density-functional calculations for grain boundaries in aluminum // *Phys. Rev. B.* — 1994. — V. 50, N2.
31. Харина Е.Г., Старостенков М.Д., Полетаев Г.М., Ракитин Р.Ю. Энергия активации самодиффузии по симметричным границам зерен наклона <111> в интерметаллиде Ni<sub>3</sub>Al // *ФТТ.* — 2011. — Т. 53, №5.
32. Holian B.L., Ravelo R. Fracture simulations using large-scale molecular dynamics // *Phys. Rev. B.* — 1995. — V. 51, N17.
33. Драгунов А.С., Векман А.В., Демьянов Б.Ф. Теоретическая модель границ зерен наклона общего и специального типа для ГЦК кристаллов // *Ползуновский альманах.* — 2011. — № 4.
34. Векман А.В., Драгунов А.С., Демьянов Б.Ф., Адарич Н.В. Энергетический спектр границ зерен наклона в меди // *Известия вузов. Физика.* — 2012. — Т. 55, №7.
35. Векман А.В., Демьянов Б.Ф., Старостенков М.Д. Ориентационная зависимость энергии границ зерен в металлах с объемноцентрированной кубической решеткой // *Известия вузов. Черная металлургия.* — 2001. — №2.
36. Драгунов А.С., Демьянов Б.Ф., Векман А.В. Энергия симметричных границ зерен наклона в алюминии // *Ползуновский альманах.* — 2009. — Т. 2, №3.
37. Козлов Э.В., Попов Л.Е., Старостенков М.Д. Расчет потенциалов Морзе для твердого золота // *Известия вузов. Физика.* — 1972. — №3.
38. Царегородцев А.И., Горлов Н.В., Демьянов Б.Ф., Старостенков М.Д. Атомная структура антифазной границы и ее влияние на состояние решетки вблизи дислокации в упорядоченных сплавах со сверхструктурой L12 // *ФММ.* — 1984 — Т. 58, №2.
39. Cleri F., Rosato V. Tight-binding potentials for transition metals and alloys // *Phys. Rev. B.* — 1993. — V. 48, N1.
40. Cosandey F., Chan S.-W., Stadelmann P. HREM studies of [001] tilt grain boundaries in gold // *Colloque De Physique. Colloque Cl.* — 1990. — V. 51, N1.
41. Merkle K. L., Smith D.J. Atomic structure of symmetric tilt grain boundaries in NiO // *Phys. Rev. Lett.* — 1987. — V. 59, N25.
42. Shamsuzzoha M., Vazquer I., Deymier P.A., Smith D.J. The atomic structure of a  $\Sigma=5$ [001]/(310) grain boundary in an Al-5% Mg alloy by high-resolution electron microscopy // *Interface Science.* — 1996. — V. 3, N3.
43. Lee S.B., Lee J.-H., Cho Y.-H., Kim D.-Y., Sigle W., Philipp F; van Aken P.A. Grain-boundary plane orientation dependence of electrical barriers at S5 boundaries in SrTiO<sub>3</sub> // *Acta Mater.* — 2008. V. 56, N18.
44. Frolov T., Olmsted D.L., Asta M., Mishin Y. Structural phase transformations in metallic grain boundaries // *Nature Communications.* — 2013. — N4.
45. Budke E., Surholt T., Prokofjev S.I., Shvindlerman L.S., Herzig Chr. Tracer diffusion of Au and Cu in a series of near  $\Sigma=5(310)[001]$  symmetrical Cu tilt grain boundaries // *Acta Mater.* — 1999. — V. 47, N2.
46. Divinski S.V., Edelhoff H., Prokofjev S. Diffusion and segregation of silver in copper S5(310) grain boundary // *Phys. Rev. B.* — 2012. — V. 85, N14.
47. Siegel R.W. Vacancy concentrations in metals // *J. Nucl. Mater.* — 1978. — V. 69–70.
48. Balluffi R.W. Vacancy defect mobilities and binding energies obtained from annealing studies // *J. Nucl. Mater.* — 1978. — V. 69–70
49. McKee B.T.A., Triftshäuser W., Stewart A.T. Vacancy-formation energies in metals from positron annihilation // *Phys. Rev. Lett.* — 1972. — V. 28, N6.
50. Бокштейн Б.С. Атомы блуждают по кристаллу / под ред. Л.Г. Асламазова. — М., 1984.