ФИЗИКА МЕТАЛЛОВ И МЕТАЛЛОВЕДЕНИЕ, 2020, том 121, № 9, с. 901–906

ТЕОРИЯ МЕТАЛЛОВ

УДК 539.422.23

ВЛИЯНИЕ СЕГРЕГАЦИЙ ЛЕГИРУЮЩИХ ЭЛЕМЕНТОВ НА ЗЕРНОГРАНИЧНОЕ ПРОСКАЛЬЗЫВАНИЕ В БИКРИСТАЛЛАХ СПЛАВОВ Al–Mg И Al–Ni. АТОМИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

© 2020 г. Л. Е. Карькина[a], *, И. Н. Карькин[a], Ю. Н. Горностырев[a, b]

[a] *Институт физики металлов УрО РАН, ул. С. Ковалевской, 18, Екатеринбург, 620108 Россия*

[b] *Институт квантового материаловедения, ул. Конструкторов, 5, Екатеринбург, 620007 Россия*

**e-mail: lidiakarkina@gmail.com*

Поступила в редакцию 12.03.2020 г.
После доработки 12.05.2020 г.
Принята к публикации 14.05.2020 г.

Методами атомистического моделирования изучено образование сегрегаций и зернограничное проскальзывание для специальных границ зерен Σ5{013}⟨100⟩ и Σ5{012}⟨100⟩ в бикристаллах сплавов Al–3 ат. % Mg и Al–3 ат. % Ni. Для выяснения механизмов, контролирующих процессы проскальзывания, определена энергия обобщенных зернограничных дефектов упаковки (ЗГДУ) в плоскости границ зерен, проанализирована кристаллография зернограничных сдвигов, установлены предпочтительные направления и энергетический барьер для зернограничного проскальзывания. Показано, что легирование Mg и Ni существенно модифицирует энергию ЗГДУ, повышая сопротивление проскальзыванию.

Ключевые слова: границы зерен, сегрегации, деформация, атомистическое моделирование, обобщенный дефект упаковки

DOI: 10.31857/S0015323020090077

ВВЕДЕНИЕ

Проскальзывание по границам зерен (ГЗ) и миграция ГЗ являются процессами, которые наряду с внутризеренным скольжением и процессами аккомодации в тройных стыках, обеспечивают пластическую деформацию поликристаллических материалов. Явление инициированной напряжением миграции ГЗ, впервые изученное на бикристаллах [1, 2], в последнее время привлекает повышенный интерес и рассматривается как альтернативный механизм пластичности нанозеренных материалов, в которых внутризеренное скольжение затруднено или подавлено [3–11]. В нашей работе [12] для выяснения механизмов, контролирующих процессы проскальзывания и миграции границ зерен в бикристалле Al, энергетика зернограничных сдвигов для нескольких типичных симметричных ГЗ наклона Σ3(111), Σ5 (012), Σ5(013) и Σ11(113) рассчитана с использованием методов первопринципного и молекулярно-динамического моделирования. Определена энергия обобщенных зернограничных дефектов упаковки (ЗГДУ), установлены предпочтительные направления и энергетический барьер для зернограничного проскальзывания. Показано, что относительное смещение соседних зерен при определенных направлениях частичных сдвигов сопровождается консервативной миграцией ГЗ в направлении, перпендикулярном ее плоскости.

Легирование является одним из важнейших методов увеличения структурной стабильности и улучшения механических свойств металлов. Примесные атомы вблизи ГЗ могут значительно уменьшать их подвижность, увеличивая термическую стабильность зеренной структуры. Зернограничные сегрегации могут также влиять на структуру и энергию самих границ. Фазово-структурные превращения вблизи границ зерен активно изучают как экспериментально, так и с использованием атомистического моделирования [13–26]. Так в работах [22–24] для симметричных ГЗ специального типа с осью наклона ⟨001⟩ рассмотрены зернограничные температурно-индуцированные фазовые переходы. В [23, 26] для системы Cu–Ag изучены сегрегационно-индуцированные зернограничные фазовые переходы. В [14] показано, что зернограничная диффузия Ag в бикристаллах Cu с ГЗ Σ5(013) скачком изменяется при T_c = 826 K, что обусловлено температурно-индуцированным фазовым переходом разупорядочения в зернограничной структуре. В [27] в сплавах Al–5 вес. % Mg и Al–10 вес. % Mg изучены тепловые процессы при ЗГ смачивании (GB wetting). В работе [28] методом атомистического моделирования изучено

влияние примесей Si и Mg на зернограничное скольжение в Al при T = 750 K. Показано, что вблизи ГЗ образуются малоподвижные кластеры Al–Mg, которые подавляют диффузию и ограничивают ЗГП (зернограничное проскальзывание). В нашей работе [13] с использованием комбинированного МД/МК моделирования при T = 450 K показано, что взаимодействие различных примесных атомов (Mg, Ni, Cu, Pb) с границами зерен Σ5{012}⟨100⟩ и Σ5{013}⟨100⟩ в Al матрице приводит к их структурной реконструкции в процессе сегрегации. Показано, что наблюдаются однослойные (Mg), двуслойные (Ni, Cu) сегрегации, а также аморфные прослойки из примесных атомов (Pb).

Таким образом, существующие представления показывают, что влияние легирующих элементов на свойства ГЗ является достаточно сложным и может быть обусловлено как изменением химической связи, так и изменением структуры ГЗ. В настоящей работе зернограничное проскальзывание изучено в бикристаллах сплавов Al–3 ат. % Mg и Al–3 ат. % Ni для симметричных границ зерен специального типа Σ5(012)⟨100⟩ и Σ5(013)⟨100⟩ после формирования сегрегаций на ГЗ, описываемых с использованием МД/МК-моделирования. Полученные результаты позволили определить предпочтительные направления векторов зернограничных сдвигов и выяснить влияние Mg и Ni на сопротивление проскальзыванию в бикристалле Al.

МЕТОД РАСЧЕТА

Чтобы охарактеризовать присущее данному типу ГЗ сопротивление зернограничному сдвигу, мы провели расчет энергии обобщенного дефекта упаковки (ЗГДУ) или зернограничной γ-поверхности для плоскости границы, разделяющей два зерна. Величину обобщенного ДУ часто используют при обсуждении расщепления дислокаций и оценке сопротивления скольжению [4, 29, 30]; в этом случае она характеризует изменение энергии при сдвиге частей кристалла в плоскости скольжения дислокаций. Энергию ЗГДУ рассчитывали для симметричных ГЗ Σ5{012}⟨100⟩ и Σ5{013}⟨100⟩ специального типа. Для изучения были выбраны границы зерен, которые имеют наименьшие значения энергии [31]. При моделировании сплава Al–Mg использовали EAM/FS потенциал M.I. Mendelev et al [32]; для сплава AlNi – EAM/alloy потенциал [34]; потенциалы взяты на сайте http://www.ctcms.nist.gov/potentials/. Моделирование проводили в рамках комбинированного МД/МК подхода [13], сочетающего релаксацию кристаллита методом молекулярной динамики (МД) и обмен атомов в схеме Монте-Карло (МК); численную реализацию осуществляли с использованием пакета LAMMPS (Sandia National Laboratories) [34].

Во всех случаях плоскость YZ совпадала с плоскостью ГЗ, ось OZ – параллельна оси наклона ⟨100⟩, направление OX перпендикулярно плоскости границы. Кристаллит содержал 2 зерна, разделенные рассматриваемой границей, расположенной в его центре. Размер зерен во всех случаях вдоль направления OX, перпендикулярного плоскости ГЗ, составлял ~10 нм. В двух взаимно перпендикулярных направлениях OY и OZ в плоскости ГЗ использовали периодические граничные условия. Длина периода вдоль этих направлений была кратна трансляции вдоль заданного кристаллографического направления. Величина трансляции вдоль направления ⟨012⟩ равна $\sqrt{5}A0$, вдоль направления ⟨013⟩ – $1/2\sqrt{10}A0$, вдоль направления ⟨100⟩ – A0, где A0 – параметр решетки. При MD-моделировании кристаллит содержал в зависимости от типа ГЗ (4–8) × 10^4 атомов.

ЗГДУ-поверхность вычисляли при свободных граничных условиях в направлении OX, перпендикулярном плоскости ГЗ. Сдвиг одного зерна относительно другого при создании ЗГДУ проводили в плоскости, ближайшей к плоскости ГЗ, и осуществляли параллельно плоскости ГЗ. В пределах элементарной ячейки выбирали некоторый вектор сдвига **f**. Одно зерно сдвигали на этот вектор и вычисляли энергию кристаллита, отвечающую вектору сдвига. Энергию поверхностных дефектов вычисляли как разность между энергией кристаллита с дефектом упаковки и кристаллита без дефекта, отнесенную к площади границы. Полученные таким образом значения энергий в пределах элементарной ячейки на рассматриваемых плоскостях образуют поверхность зернограничных сдвигов ЗГДУ. Анализ ее позволяет сделать выводы о существовании стабильных поверхностных дефектов, определить соответствующие им сдвиги. В точках локальных минимумов зернограничной ЗГДУ проводили полную релаксацию кристаллита, в других точках, отвечающих обобщенному зернограничному сдвигу **f**, проводили релаксацию в направлении OX, перпендикулярном плоскости ГЗ.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

На рис. 1 показаны фрагменты структуры ГЗ изученных сплавов, полученные после завершения МД/МК-моделирования. Значение, равное нулю вдоль оси абсцисс, соответствует стартовому положению ГЗ (до проведения процедуры МД/МК).

Образование сегрегаций сопровождалось структурной реконструкцией границ зерен [1]. В структуре ГЗ, формирующейся после МД/МК, тонкими линиями выделены структурные единицы [31], ко-

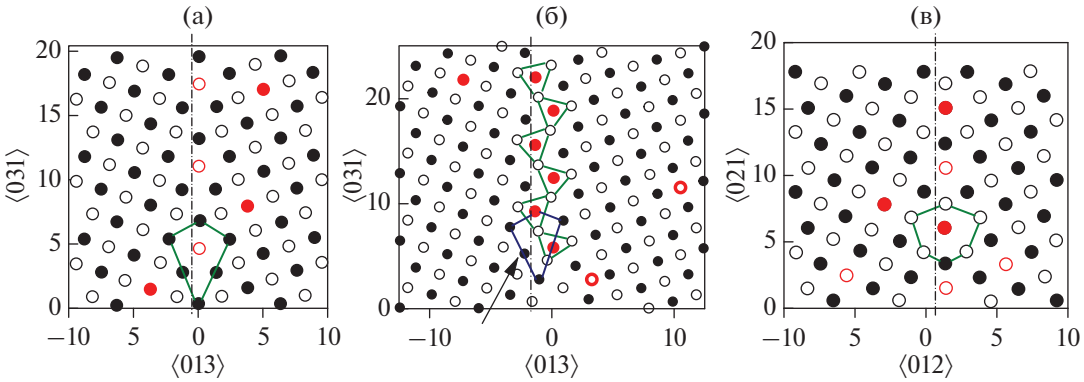

Рис. 1. Фрагмент кристаллита с ГЗ Σ5{013}⟨100⟩ для Al–3 ат. % Mg (а) и Al–3 ат. % Ni (б); с ГЗ Σ5{012}⟨100⟩ для Al–3 ат. % Mg (в) после 10^6 МД/МК шагов релаксации [13]. Черные и красные кружки обозначают атомы Al и примесные атомы (Mg или Ni); открытые и заштрихованные кружки соответствуют атомам в ближайших {100} плоскостях. Штриховой линией обозначено сечение, вдоль которого проводился сдвиг.

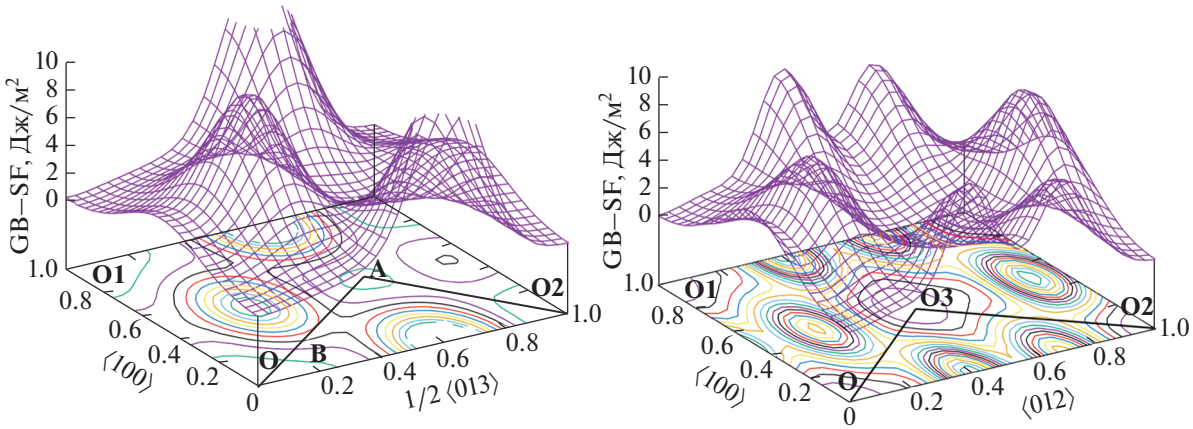

Рис. 2. Поверхности ЗГДУ (GB–SF) для ГЗ Σ5{013}⟨100⟩ (а) и Σ5{012}⟨100⟩ (б) для сплава Al–3 ат. % Mg (без учета релаксации). Значения энергий даны в Дж/м^2.

торый определяют локальную атомную конфигурацию границы. Для ГЗ Σ5{013}⟨100⟩ атомы Mg располагаются в центре структурного элемента (рис. 1а). Геометрия границ в этом случае для сплава и для Al совпадают. Для этой же ГЗ атомы Ni образуют двойной слой вблизи ГЗ (рис. 1б), при этом положение ГЗ смещается и изменяется форма структурного элемента. На рис. 1в показана конфигурация области вблизи ГЗ Σ5{012}⟨100⟩, которая также испытала структурную реконструкцию в результате сегрегации атомов Mg; подобная же структура формируется при сегрегации атомов Ni. Как обсуждалось в [13], характер структурной реконструкции ГЗ определяется энергией сегрегации примесного атома и наиболее энергетически выгодной его позицией вблизи ГЗ.

Штриховой линией на рис. 1 обозначено сечение, вдоль которого проводился сдвиг соседних зерен при образовании ЗГДУ. Выделенная плоскость является ближайшей к положению ГЗ в сплавах. В случае Al–Ni (рис. 1б) между двумя слоями Ni межплоскостное расстояние столь мало, что энергия ЗГДУ будет велика. Поэтому ближайшим плотноупакованным сечением выбирали то, которое показано на рис. 1б.

На рис. 2 представлены ЗГДУ-поверхности в сплаве Al–3 ат. % Mg для изученных границ зерен с осью наклона ⟨100⟩. Во всех случаях вдоль направлений *OY* и *OZ* в плоскости границы длина дана в относительных единицах (по отношению к трансляции вдоль заданного кристаллографического направления). Значения ЗГДУ даны без учета релаксации. На рис. 2а обозначена точка **A**, в которой ЗГДУ имеет локальный минимум. Значение энергии ЗГДУ в этой точке равно 0.22 Дж/м^2 для Al, 0.36 Дж/м^2 для Al–Mg, 0.67 Дж/м^2 для Al–Ni. Вектор сдвига **OA** равен ~1/6⟨326⟩. Для сплава Al–3 ат.%Ni форма поверхностей ЗГДУ подобна представленной на рис. 2; положение экстремумов близки, отличаются лишь интенсивности. Для ГЗ Σ5{012}⟨100⟩ (рис. 1в) структура границы для обоих сплавов совпадает. Для ГЗ Σ5{013}⟨100⟩

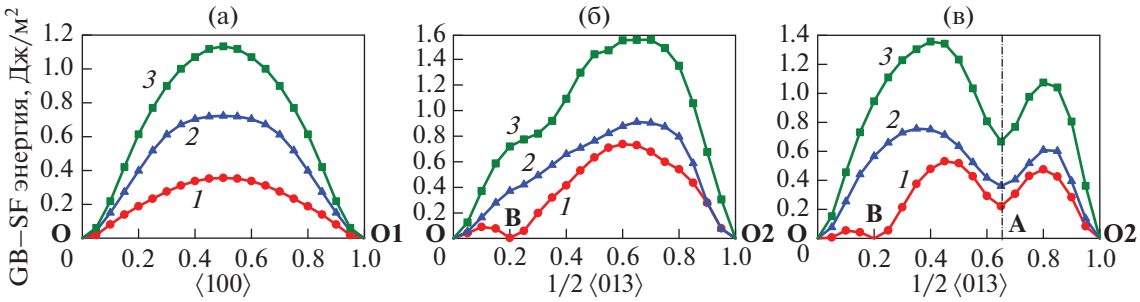

Рис. 3. Изменение энергии ЗГДУ (GB–SF) (с учетом релаксации) при сдвиге вдоль направления ⟨100⟩ (а); вдоль направления ⟨013⟩ (б); вдоль комбинированного направления OAO2 (в) для ГЗ Σ5{013}⟨100⟩. Кривая *1* соответствует Al; кривая *2* – сплаву Al–Mg, кривая *3* – Al–Ni.

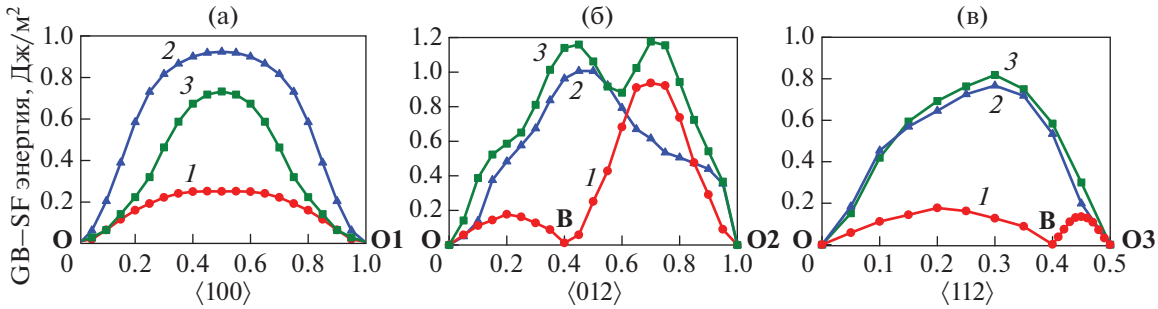

Рис. 4. Изменение энергии ЗГДУ (GB–SF) (с учетом релаксации) при сдвиге вдоль направления ⟨100⟩ (а); вдоль направления ⟨012⟩ (б); вдоль направления ⟨112⟩ (в) для ГЗ Σ5{012}⟨100⟩. Кривая *1* соответствует Al; кривая *2*– сплаву Al–Mg, кривая *3* – Al–Ni.

для сплава Al–Ni можно представить другой структурный элемент (в нижней части рис. 1б показан стрелкой). Видно, что в таком варианте структурные элементы для Al–Mg и Al–Ni похожи, что и отражается в геометрии поверхностей ЗГДУ.

На рис. 2а, 2б отмечена точка **B**, отвечающая локальному минимуму для Al, в которой энергия ЗГДУ близка к нулю. Как показано в [12], соответствующие сдвиги равны 0.2(1/2⟨013⟩) и 0.4(⟨021⟩) (величина сдвига 0.32*a* и 0.9*a*). В результате сдвига **OB** плоскость ГЗ перемещается на величину, равную вектору Бюргерса зернограничных сдвигов $\mathbf{b}_{gb}$ (см. подробнее [12]). Зернограничное проскальзывание может быть продолжено путем осуществления частичного сдвига в следующей, параллельной ГЗ плоскости, соответствующей новому положению ГЗ после миграции. В результате многократного повторения частичного сдвига по последовательной системе параллельных плоскостей, реализуемый процесс зернограничного проскальзывания сопровождается миграцией в направлении, перпендикулярном плоскости ГЗ. В [12] показано, что частичный сдвиг на вектор **OB** является наиболее легким сдвигом для Al. Для сплавов локальный минимум вблизи точки **B** отсутствует (рис. 2). Появление упорядоченного сегрегационного зернограничного слоя для сплавов препятствует многократному зернограничному скольжению по последовательной системе параллельных плоскостей. Таким образом, наиболее легкий для Al вариант ЗГДУ для сплавов становится невозможным.

На рис. 3 и 4 представлены зависимости энергии ЗГДУ для наиболее легких направлений сдвига для ГЗ Σ5{013}⟨100⟩ и Σ5{012}⟨100⟩, полученные с учетом атомной релаксации вдоль направления, перпендикулярного плоскости ГЗ. Такими сдвигами являются: по направлению вдоль оси наклона ГЗ ⟨100⟩ (рис. 3а, 4а); вдоль направления, перпендикулярного оси наклона (рис. 3б, 4б); вдоль ломаной кривой через точку локального минимума **A** (рис. 3в) или в точку трансляции **O3** (рис. 4в). На всех рисунках кривая *1* соответствует Al [12], кривая *2* – сплаву Al–Mg, кривая *3* – Al–Ni.

Из зависимости энергии поверхностного дефекта от величины сдвига (рис. 2) можно получить значение энергии нестабильных дефектов упаковки γ_{us} (максимальное значение энергии вдоль выбранного направления сдвига [36, 37]). Чем меньше параметр γ_{us}, тем легче осуществляется сдвиг в плоскости ГЗ в данном направлении при зернограничном проскальзывании.

Таблица 1. Энергии нестабильных ДУ (γ_{us}, Дж/м^2) для сдвигов вдоль наиболее легких направлений для ГЗ Σ5{013}⟨100⟩ и ГЗ Σ5{012}⟨100⟩

Тип ГЗ	Σ5{013}			Σ5{012}		
Сдвиг	⟨100⟩	⟨013⟩	**OA–AO2**	⟨100⟩	⟨012⟩	⟨112⟩
	γ_{us}, Дж/м^2					
Al–Mg	0.72	0.92	0.76 – 0.61	0.92	1.01	0.77
Al–Ni	1.13	1.56	1.36 – 1.10	0.73	1.16	0.82
Al	0.36	0.04 (**OB**)	0.04 (**OB**)	0.25	0.20 (**OB**)	0.20 (**OB**)

В табл. 1 представлены значения энергии нестабильных ЗГДУ с учетом релаксации вдоль наиболее легких направлений сдвига для сплавов Al–Mg, Al–Ni и для Al. Из рис. 3, 4 и табл. 1 видно, что для всех направлений зернограничных сдвигов значения γ_{us} для сплавов существенно выше, чем для Al, т.е. сегрегации примесных атомов препятствуют проскальзыванию по границам зерен. Из таблицы видно, что наиболее легким направлением зернограничного скольжения для ГЗ Σ5{013}⟨100⟩ для обоих сплавов является направление вдоль оси наклона ⟨100⟩.

Для ГЗ Σ5{012}⟨100⟩ для сплава Al–Mg наиболее легким направлением сдвига является направление ⟨112⟩, для Al–Ni – направление ⟨100⟩.

При скольжении вдоль направления оси наклона ⟨100⟩ для ГЗ Σ5{013} значения γ_{us} возрастают (по сравнению с Al) в 2.0–3.0 раза, для ГЗ Σ5{012} – в 3.0–3.5 раза. Еще более заметное различие получено при скольжении вдоль направления, перпендикулярного (или направленного под углом) оси наклона. Для Al это проскальзывание контролируется созданием частичного сдвига **OB** [12], который характеризуется значениями γ_{us}, сопоставимыми с самыми низкими энергиями ДУ в металлах с ГЦК-решеткой. Однако для сплавов частичный сдвиг, соответствующий какому-либо локальному минимуму, отсутствует. Скольжение на вектор трансляции превосходит значения γ_{us} для наиболее легкого частичного сдвига в Al для ГЗ Σ5{013} в 20.0–80.0 раза, для ГЗ Σ5{012} – в 3.5–5.0 раз.

Из рис. 3 видно, что для ГЗ Σ5{013}⟨100⟩ энергия ЗГДУ для Al–Ni лежит закономерно выше (кривые *3*), чем для сплава Al–Mg (кривые *2*). Значения γ_{us} для Al–Ni превосходят в 1.5–1.8 раз соответствующие значения для Al–Mg. Иная ситуация для ГЗ Σ5{012}⟨100⟩: на рис. 4а выше расположена кривая *2*, на рис. 4б – кривая *3*, на рис. 4в кривые *2* и *3* близки (различие между значениями γ_{us} в пределах 1.1–1.3 раза). На основании этих результатов можно предположить, что существование двойного слоя атомов Ni вблизи ГЗ Σ5{013}⟨100⟩ способствует дополнительному увеличению сопротивления при проскальзывании вблизи этой границы в сплаве Al–Ni по сравнению с Al–Mg.

Следует отметить, что рассмотренные выше процессы миграции ГЗ, осуществляемые частичным зернограничным сдвигом, реализуются для специфического случая симметричных специальных ГЗ наклона. В мелкозернистом поликристалле с преобладанием произвольных ГЗ механизм индуцированной напряжением миграции границ может быть более сложным и включать протекающие на мезоуровне процессы, обеспечивающие проскальзывание несимметричных ГЗ путем движения уступов [11] и совместность деформации в тройных стыках зерен [9]. Тем не менее полученные в настоящей работе результаты дают представление о фундаментальных механизмах, определяющих проскальзывание зерен и условиях реализации инициированного напряжением процесса миграции ГЗ.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Склонность к проскальзыванию по границам зерен Σ5{013}⟨100⟩ и Σ5{012}⟨100⟩ для сплавов Al–3 ат. % Mg и Al–3 ат. % Ni (после старения при $T = 450$ K) изучена методом МД на основе анализа структуры и энергии зернограничных дефектов упаковки. Дана оценка величины барьера, определяющего сопротивление относительному смещению зерен. Показано, что сопротивление проскальзыванию по ГЗ для изученных сплавов существенно возрастает по сравнению с Al [28]. Упорядоченные сегрегации примесных атомов на границах зерен препятствуют реализации наиболее легкого механизма, включающего проскальзывание и миграцию в Al. Установлено, что двуслойный примесный слой на ГЗ Σ5{013}⟨100⟩ в Al–Ni (образовавщийся в процессе сегрегации атомов Ni и реконструкции границы зерна) усиливает сопротивление зернограничному проскальзыванию.

Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки РФ по темам “Давление” № АААА-А18-118020190104-3 и “Структура” № АААА-А18-118020190116-6.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Guillope M., Poirier J.P.* A model for stress-induced migration of tilt grain boundaries in crystals of NaCl structure // Acta Metall. 1980. V. 28. P. 163.
2. *Babcock S.E., Balluffi R.W.* Grain boundary kinetics // Acta Metall. 1989. V. 37. P. 2357–2367.
3. *Schiotz K.W., Jacobsen K.W.* A Maximum in the Strength of Nanocrystalline Copper // Science. 2003. V. 301. P. 1357.
4. *Van Swygenhoven H., Weertman J.R.* Deformation in nanocrystalline metals// Mater. Today. 2006. V. 9. P. 24.
5. *Farkas D., Froseth A., Van Swygenhoven H.* Grain boundary migration during room temperature deformation of nanocrystalline Ni // Scripta Mater. 2006. V. 55. P. 695.
6. *Gianola D.S., Van Petegem S., Legros M., Brandstetter S., Van Swygenhoven H., Hemker K.J.* Stress-assisted discontinuous grain growth and its effect on the deformation behavior of nanocrystalline aluminum thin films // Acta Mater. 2006. V. 54. P. 2253.
7. *Legros M., Gianola D.S., Hember K.J.* In situ TEM observations of fast grain-boundary motion in stressed nanocrystalline aluminum films // Acta Mater. 2008. V. 56. P.3380.
8. *Cahn J. W., Mishin Yu., Suzuki A.* Coupling grain boundary motion to shear deformation //Acta Materialia 2006. V. 54. P. 4953.
9. *Gutkin M.Yu., Mikaelyan K. N. and Ovid'ko I. A.* Grain growth and collective migration of grain boundaries during plastic deformation of nanocrystalline materials // Phys. Sol. State. 2008. V. 50. P. 1266.
10. *Bobylev S. V., Morozov N. F. and Ovid'ko I. A.* Cooperative grain boundary sliding and nanograin nucleation process in nanocrystalline, ultrafine-grained, and polycrystalline solids // Phys. Rev B. 2011. V. 84. P. 094103
11. *Hadian R., Grabowski B., Race C.P., Neugebauer J.* Atomistic migration mechanisms of atomically flat, stepped, and kinked grain boundaries // Phys. Rev. B. 2016. V. 94. P. 165413.
12. *Карькина Л.Е., Карькин И.Н., Кузнецов А.Р., Горностырев Ю.Н.* Зернограничное проскальзывание и миграция специальных границ зерен в бикристаллах Al. Атомистическое моделирование. // ФТТ. 2018. Т. 60. С. 1974.
13. *Karkina L., Karkin I., Kusnetsov A., and Gornostyrev Yu.* Alloying elements segregation and grain boundaries reconstruction. Atomistic modeling // Metals. 2019. V. 9(12). P. 1319.
14. *Divinski S. V. and Edelhoff H.* Diffusion and segregation of silver in copper Σ5(310) grain boundary // Phys. Rev. B. 2012. V. 85. P. 144104.
15. *Luo J., Cheng H., Asl K.M., Kiely C.J., Harmer M.P.* The Role of a Bilayer Interfacial Phase on Liquid Metal Embrittlement // Science. 2011. V. 33. P. 1730–1733.
16. *Sigle W., Richter G., Rühle M.* Insight into the atomic-scale mechanism of liquid metal embrittlement // Appl. Phys. Lett. 2006. V. 89. P. 121911.
17. *Straumal B.B., Kogtenkova O., Zieba P.* Wetting transition of grain-boundary triple junctions // Acta Materialia 2008. V. 56. P. 925–933.
18. *Alfthan S. von, Kaski K., Sutton A.P.* Molecular dynamics simulations of temperature-induced structural transitions at twist boundaries in silicon // Phys. Rev. B. 2007. V. 76. P. 245317.
19. *Dillon S.J., Tang M., Carter W.C., Harmer M.P.* Complexion: A new concept for kinetic engineering in materials science // Acta Mater. 2007. V. 55. P. 6208–6218.
20. *Frolov T., Mishin Y.* Molecular dynamics modeling of self-diffusion along a triple junction // Phys. Rev. B. 2009. V. 79. P. 174110.
21. *Olmsted D.L., Buta D., Adland A., Foiles S.M., Asta M., Karma A.* Dislocation-Pairing Transitions in Hot Grain Boundaries // Phys. Rev. Lett. 2011. V. 106. P. 046101.
22. *Frolov T., Olmsted D.L., Asta M., Mishin Y.* Structural phase transformations in metallic grain boundaries // Nat. Commun. 2013. V. 4. P. 1899.
23. *Frolov T., Divinski S.V., Asta M., Mishin Y.* Effect of Interface Phase Transformations on Diffusion and Segregation in High-Angle Grain Boundaries // Phys. Rev. Lett. 2013. V. 110. P. 255502.
24. *Cantwell P.R., Tang M., Dillon S.J., Luo J., Rohrer G.S., Harmer M.P.* Grain boundary complexions // Acta Materialia. 2014. V. 62. P. 1–48.
25. *Frolov T., Mishin Y.* Phases, phase equilibria, and phase rules in low-dimensional systems // J. Chem. Phys. 2015. V. 143. P. 044706.
26. *Frolov T., Asta M., Mishin Y.* Segregation-induced phase transformations in grain boundaries // Phys. Rev. B. 2015. V. 92. P. 020103(R).
27. *Kogtenkova O.A., Protasova S.G., Mazilkin A.A., Straumal B.B., Zieba P., Czeppe T., Baretzky B.* Heat effect of grain boundary wetting in Al–Mg alloys // J. Mater. Sci. 2012. V. 47. P. 8367–8371.
28. *Du N., Qi Y., Krajewski P.E., Bower A.F.* The Effect of Solute Atoms on Aluminum Grain Boundary Sliding at Elevated Temperature // Met. and Mater. Trans. A. 2011. V. 42A. P. 651–659.
29. *Vitek V.* Cryst. Dislocations in Solids // Latt. Def. 1974. V. 5. P. 1.
30. *Bollmann W.* Crystal defects and crystalline interfaces. Berlin: Springer-Verlag, 1970. 254 p.
31. *Tschopp M.A., Macdowell D.L.* Asymmetric tilt grain boundary structure and energy in copper and aluminum // Phil. Mag. 2007. V. 87. P. 3871.
32. *Mendelev M.I., Asta M., Rahman M.J., Hoyt J.J.* Development of interatomic potentials appropriate for simulation of solid–liquid interface properties in Al–Mg alloys // Phil. Mag. 2009. V. 89. P. 3269.
33. *Pun G.P.P., Mishin Y.* Development of an interatomic potential for the Ni–Al system // Philosophical Magazine 2009. V. 89(34–36). P. 3245–3267.
34. http://lammps.sandia.gov/index.html.
35. *Kelly A., Tyson W., Cottrell A.H.* Ductile and brittle crystals // Phil. Mag. 1967. V. 15. P. 567–586.
36. *Karkin I.N., Karkina L.E., Kuznetsov A.R., Petrik M.V., Gornostyrev Yu.N., Korzhavyi P.A.* Segregation of Mg to generic tilt grain boundaries in Al: Monte Carlo modeling // Mater. Phys. Mech. 2015. V. 24. P. 201–210.