

СТРУКТУРА, ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ И ДИФФУЗИЯ

УДК 544.344.015.2, 548.53, 544.022.344.2

ВЛИЯНИЕ ПОДВИЖНОСТИ ГРАНИЦ ЗЕРЕН НА ФОРМИРОВАНИЕ ВТОРЫХ ФАЗ В НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ БИНАРНЫХ СПЛАВАХ

© 2022 г. П. Е. Львов^{a, b, *}, В. В. Светухин^c

^aУльяновский государственный университет, ул. Л. Толстого, 42, Ульяновск, 432970 Россия

^bИнститут нанотехнологий микроэлектроники РАН, Ленинский просп., 32А, Москва, 119991 Россия

^cНПК “Технологический центр”, пл. Шокина, 1, Зеленоград, Москва, 124498 Россия

*e-mail: LvovPE@sv.uven.ru

Поступила в редакцию 19.07.2022 г.

После доработки 01.08.2022 г.

Принята к публикации 09.08.2022 г.

На основе теории фазового поля изучены особенности формирования выделений вторых фаз в поликристаллических бинарных сплавах с учетом подвижности границ зерен, анизотропной диффузии примеси вблизи границ, а также термических флуктуаций. Различие параметров взаимодействия на границах зерен и в их объеме, а также ускоренная зернограничная диффузия могут приводить к гетерогенному формированию вторых фаз, распределение которых может соответствовать несмачиванию, полному или частичному смачиванию границ. Наличие подвижности границ зерен приводит к увеличению объемной доли вторых фаз. В случае полного или частичного смачивания образующаяся вторая фаза может перемещаться вместе с границей зерен. В случае несмачивания вторая фаза формируется вблизи границ зерен и является практически неподвижной, при этом рост выделений может иметь преимущественное направление вдоль направления движения границы. При несмачивании также наблюдается отрыв выделений от границы.

Ключевые слова: поликристаллические сплавы, границы зерен, фазовые превращения, подвижность границ, флуктуации

DOI: 10.31857/S0015323022600939

ВВЕДЕНИЕ

Большинство металлов и сплавов являются поликристаллами, т.е. состоят из зерен, границы которых могут существенно влиять на свойства материалов [1–4]. Известно, что границы зерен (ГЗ) характеризуются высоким значением коэффициента диффузии примесей и точечных дефектов, который может на несколько порядков превышать его значение в объеме зерна [1, 5]. Перенос примесей и дефектов по ГЗ может быть анизотропным, т.к. коэффициенты диффузии в продольном и поперечном направлениях могут отличаться на порядок [1, 5, 6].

ГЗ являются дефектами структуры, вблизи которых изменяется энергия взаимодействия атомов и точечных дефектов, что может стать причиной зернограничной сегрегации примесей [4, 6, 7], а также уменьшения барьера нуклеации и перехода к гетерогенному механизму зарождения второй фазы [8]. Также особый характер взаимодействия между атомами вблизи ГЗ может приводить к реализации полного или частичного смачивания границ [2, 9, 10], которые обычно рассматриваются на основе теории Кана [2]. Изменение парамет-

ров взаимодействия вблизи ГЗ обуславливает различие равновесных составов фаз [11–13], а также формирование различных распределений фаз между зернограничной областью и объемом зерна [10, 12, 14]. Значительная часть исследований посвящена изучению неподвижных ГЗ, что в первую очередь относится к изучению различных режимов зернограничной диффузии [1, 5, 6], смачивания границ [2, 9], расчета их энергии, а также энергии формирования и диффузии точечных дефектов [15, 16]. Такие задачи относятся к сплавам, не подвергнутым деформации и находящимся при сравнительно низких температурах, при которых рост зерен отсутствует. Однако в процессе термической обработки материала температуры могут быть достаточно высокими для обеспечения роста зерен, в результате которого происходит уменьшение общей протяженности границ. Влияние подвижности ГЗ, обусловленной пластической деформацией, на фазовые превращения подробно рассмотрено в работах [4, 17].

Анализ фазовых превращений в процессе кристаллизации может быть выполнен на основе феноменологических моделей теории фазового по-

ля [18, 19], описывающих процесс формирования и роста зерен с помощью множественных параметров порядка. На основе этого подхода решались различные задачи по анализу формирования краевых углов вторых фаз на ГЗ в случае частичного смачивания [10], влияния упругих напряжений на образование выделений и вакансионных пор на ГЗ [20, 21]. Изучены различные аспекты влияния зернограничной сегрегации на процесс спинодального распада в наноструктурированных материалах [4, 17, 22]. Анизотропия диффузии примеси по ГЗ в данных работах, как правило, не учитывается.

Также на основе теории фазового поля рассматривалась задача о движении ГЗ через выделение вторых фаз [4, 10, 17], которая имеет важное значение для анализа изменения микроструктуры и прочностных свойств материала.

Все рассмотренные модели являются детерминированными, так как в них не учитываются флуктуации концентрации примеси и параметров порядка. Именно флуктуации обеспечивают зарождение вторых фаз в области стабильных и метастабильных состояний [8], где для образования устойчивых зародышей требуется преодоление барьера [23–26]. В отличие от однородных систем флуктуации концентрационного поля точечных дефектов и примесей в поликристаллических материалах характеризуются большой интенсивностью и анизотропией вблизи ГЗ, что обусловлено особенностями зернограничной диффузии [1, 5, 6].

Таким образом, в данной работе ставится задача по изучению влияния подвижности ГЗ на процесс формирования вторых фаз в бинарном сплаве, находящемся в области стабильных и метастабильных состояний, с учетом различия параметров взаимодействия, коэффициентов диффузии, анизотропии транспорта растворенного компонента, а также термических флуктуаций.

МОДЕЛЬ ОБРАЗОВАНИЯ ВТОРЫХ ФАЗ В ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКОМ МАТЕРИАЛЕ

Рассмотрим двумерную модель процесса образования вторых фаз в поликристаллическом материале, который будем анализировать в терминах теории множественных параметров порядка [18, 19]. Для этого введем параметры порядка $\eta_i(\mathbf{r}, t)$, $i = 1 \dots P$, зависящие от координат \mathbf{r} и времени t . Каждый из параметров η_i соответствует некоторой ориентации зерна относительно выбранного направления. Распределение растворенного компонента в сплаве будем характеризовать концентрационным полем $c(\mathbf{r}, t)$. Энергия

Гиббса рассматриваемого поликристаллического сплава имеет вид функционала Гинзбурга–Ландау:

$$G = n_0 \int_V \left[g(c, \{\eta_i\}) + \frac{\kappa_c}{2} (\nabla c)^2 + \sum_i \frac{\kappa_i}{2} (\nabla \eta_i)^2 \right] dV, \quad (1)$$

где n_0 – количество атомов, приходящихся на единицу площади двумерной системы, $g(c, \{\eta_i\})$ – плотность свободной энергии, κ_c и κ_i – коэффициенты градиентной энергии. Плотность свободной энергии $g(c, \{\eta_i\})$ строится таким образом, чтобы она имела P минимумов, соответствующих ненулевому значению одного из параметров порядка ($\eta_k = \pm 1$) и равенству нулю всех остальных параметров ($\eta_i = 0, i \neq k$).

Будем считать, что энергия парного взаимодействия между частицами в объеме зерна и на его границе отличается друг от друга, тогда функция $g(c, \{\eta_i\})$ может быть записана в виде:

$$g(c, \{\eta_i\}) = g^V h(\varphi) + g^{GB} (1 - h(\varphi)) + \sum_i \left(-\frac{\alpha_i}{2} \eta_i^2 + \frac{\beta_i}{4} \eta_i^4 \right) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \gamma_{ij} \eta_i^2 \eta_j^2. \quad (2)$$

Здесь $g^V \equiv g^V(c)$ и $g^{GB} \equiv g^{GB}(c)$ – плотности свободной энергии для фаз, находящихся в объеме и на ГЗ, $h(\varphi) = \varphi^2(3 - 2\varphi)$ – функция, аппроксимирующая изменение энергии системы при переходе между границей и объемом зерна, $\varphi = \sum_{i=1}^P \eta_i^2$, α_i , β_i и γ_{ij} – феноменологические параметры взаимодействия зерен [18, 19]. Будем полагать, что образующиеся выделения вторых фаз имеют малый размер и не формируют собственной кристаллической решетки. В противном случае необходимо рассматривать образование зерен двух типов, относящихся к фазам, обедненным и обогащенным атомами примеси [19].

Для зернограничной области и объема зерна примем приближение регулярных растворов, что соответствует плотности свободной энергии:

$$g^m(c) = g_0^m + g_1^m c + \Omega^m c(1 - c) + k_B T [c \ln c + (1 - c) \ln(1 - c)], \quad (3)$$

где индекс m указывает на соответствие объему ($m = V$) или ГЗ ($m = GB$), k_B – постоянная Больцмана. Коэффициент κ_c связан с параметром взаимодействия $\kappa_c \sim \Omega$ [12, 26], поэтому для него также следует использовать зависимость $\kappa = \kappa_c^V h(\varphi) + \kappa_c^{GB} (1 - h(\varphi))$.

Для описания динамики концентрационного поля было выполнено обобщение стохастическо-

Таблица 1. Параметры моделирования

Сплав	$\langle c \rangle$	g_1^{V*}	g_1^{GB*}	L^*
1	0.16	-0.4	-0.5	10^{-2}
2	0.16	-0.4	-0.5	10^{-4}
3	0.16	-0.5	-0.5	10^{-4}
4	0.16	-0.5	-0.4	10^{-2}
5	0.16	-0.5	-0.4	10^{-4}
6	0.12	-0.5	-0.4	10^{-2}
7	0.12	-0.4	-0.5	10^{-4}

го уравнения Кана–Хилларда на случай анизотропной диффузии вблизи ГЗ, которое имеет вид:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \sum_{lk} \nabla_l \left[M_{lk} \nabla_k \frac{\delta G}{\delta c} \right] + \sum_l \nabla_l \xi_l. \quad (4)$$

Здесь t – время, ∇_l – частные производные по координате ($l, k = \{x, y, z\}$), $M_{lk} \equiv M_{lk}(\varphi)$ – тензор подвижности атомов, ξ_l – случайные поля, отражающие тепловые флуктуации. Тензор подвижности $\mathbf{M} \equiv \{M_{lk}\}$ учитывает наличие анизотропии процессов переноса вблизи ГЗ и определяется с помощью нормали $\mathbf{n} = \nabla\varphi/|\nabla\varphi|$ к границе:

$$\mathbf{M} = M_\tau \mathbf{I} + (M_n - M_\tau) \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}. \quad (5)$$

Здесь \mathbf{I} – единичный тензор, а подвижности $M_\tau \equiv M_\tau(\varphi)$ и $M_n \equiv M_n(\varphi)$ соответствуют продольному и поперечному направлениям по отношению к ГЗ и выражаются с помощью формул:

$$M_m(\varphi) = M_m^V h(\varphi) + M_m^{GB} (1 - h(\varphi)), \quad m = \{n, \tau\}.$$

Динамика неконсервативных параметров порядка η_i описывается с помощью уравнений Гинзбурга–Ландау:

$$\frac{\partial \eta_i}{\partial t} = -L_i \frac{\delta G}{\delta \eta_i} + \zeta_i. \quad (6)$$

где L_i – подвижность ГЗ, ζ_i – случайное поле, отражающее тепловые флуктуации.

Выделения вторых фаз могут изменять условия движения ГЗ [4, 10, 17], что в общем случае может быть учтено введением зависимости подвижности L от концентрации c и параметров порядка η_i .

Выражения для вариационных производных в уравнениях (4) и (6) могут быть получены из определения свободной энергии (1) в виде:

$$\frac{\delta G}{\delta c} = \frac{\partial g}{\partial c} - \nabla [k_c(\varphi) \nabla c], \quad \frac{\delta G}{\delta \eta_i} = \frac{\partial g}{\partial \eta_i} - \kappa_\eta \nabla^2 \eta_i. \quad (7)$$

Стохастические переменные ξ_i и ζ_j в уравнениях (4) и (6) могут быть описаны как случайные

Гауссовы поля, характеризующие корреляционными функциями:

$$\begin{aligned} \langle \xi_i(\mathbf{r}, t) \xi_j(\mathbf{r}', t') \rangle &= 2M_{ii} k_B T w_\xi(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t') \delta_{ij}, \\ \langle \zeta_i(\mathbf{r}, t) \zeta_j(\mathbf{r}', t') \rangle &= 2L_i k_B T w_\zeta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t') \delta_{ij}. \end{aligned} \quad (8)$$

Здесь M_{ii} – диагональные компоненты тензора подвижности (5), w_ξ и w_ζ – функции, определяющие пространственную корреляцию флуктуаций, δ_{ij} – символ Кронекера. В качестве функций $w_{\xi, \zeta}$ используем функцию Гаусса [23]:

$$w_m(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = (2\pi\lambda_m^2)^{-3/2} \exp\left(-\frac{(\mathbf{r} - \mathbf{r}')^2}{2\lambda_m^2}\right), \quad (9)$$

которая позволяет непосредственно вводить корреляционную длину флуктуаций, $m = \{\xi, \zeta\}$.

Для последующего моделирования будем использовать безразмерные переменные:

$$\begin{aligned} t^* &= t \frac{n_0 M_\tau^{GB} \Omega^V}{l^2}, \quad \mathbf{r}^* = \mathbf{r}/l, \quad g^* = g/\Omega^V, \\ T^* &= 2T/\Omega^V, \\ \kappa^* &= \kappa/(\Omega^V l^2), \quad M^* = M/M_\tau^{GB}, \quad L^* = Ll^2/M_\tau^{GB}, \end{aligned} \quad (10)$$

где l – период решетки.

Моделирование фазовых превращений выполняли на двумерной сетке 512×512 с периодическими граничными условиями. Численное решение уравнений (4) и (6) проводили с помощью явной конечно-разностной схемы [27], генерацию флуктуаций выполняли в фурье-пространстве [23]. Шаг по времени составлял $\Delta t^* = 5 \times 10^{-3}$.

Для анализа динамики средних характеристик проводили идентификацию отдельных зародышей с помощью метода ближайшего соседа [24, 25, 28]. В качестве размера зародыша выбирали эквивалентный радиус.

Параметры взаимодействия между зёрнами считали равными $\alpha_i^* = \alpha^* = 1.0$, $\beta_i^* = \beta^* = 1.0$, $\gamma_{ij}^* = \gamma^* = 10$ и $\kappa_i^* = \kappa_\eta^* = 2.0$. Параметры взаимодействия и подвижности атомов растворенного компонента принимали равными $g_0^{V*} = g_0^{GB*} = 0$, $\Omega^{GB*} = 0.8$ и $M^V = 10^{-5}$, $M_\tau^{GB*} = 1.0$, $M_n^{GB*} = 0.1$. Коэффициенты градиентной энергии рассчитывали как $\kappa_c^{*m} = \kappa_{c0}^* \Omega^{m*}$ ($m = \{GB, V\}$, $\kappa_{c0}^* = 0.25$), а температура была принята равной $T^* = 0.65$. Корреляционные длины равны $\lambda_\xi^* = \lambda_\zeta^* = 1.2$, а остальные параметры и составы сплавов $\langle c \rangle$ приведены в табл. 1. Рассматриваемые составы показаны также на фазовых диаграммах бинарных сплавов с выбранными параметрами взаимодействия Ω^{V*} и Ω^{GB*} (рис. 1).

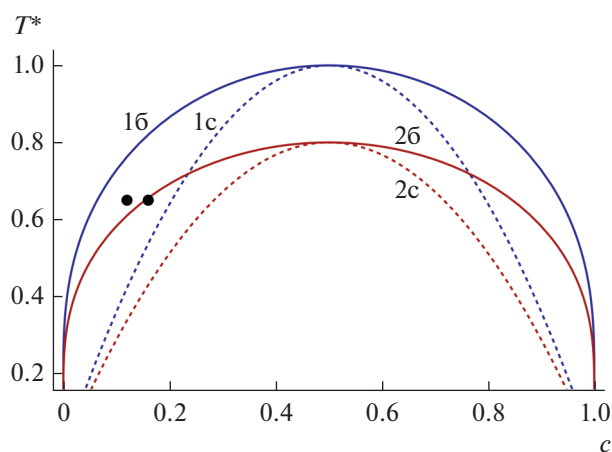


Рис. 1. Фазовые диаграммы бинарных сплавов, характеризующихся параметрами взаимодействия $\Omega^{V*} = 1.0$ (1б, 1с) и $\Omega^{GB*} = 0.8$ (2б, 2с). 1б и 2б – линии бинадали, 1с и 2с – линии спинодали. Точки соответствуют составам 0.12 и 0.16 при температуре $T^* = 0.65$.

РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ И ИХ АНАЛИЗ

На рис. 2 приведены результаты моделирования фазовых превращений в бинарных наноструктурированных сплавах с различными параметрами взаимодействия и подвижностями ГЗ (табл. 1). На рис. 2а показана исходная микроструктура сплава, которая была получена при моделировании отжига при температуре выше кри-

тической ($T^* = 1.0$). В зависимости от параметров взаимодействия и подвижности ГЗ могут наблюдаться различные типы распределения зернограницных фаз (рис. 2б–2з).

На рис. 2б показан результат расчета для параметров, соответствующих сплаву 1 (табл. 1). Из рисунка следует, что снижение параметра взаимодействия на границе $g_1^{V*} > g_1^{GB*}$ и значительная подвижность границ приводят к сильному обогащению зернограницной области (рис. 2б). При этом формируется фаза с составом, близким к равновесному (рис. 1), которая полностью смачивает большинство границ. Быстрое движение ГЗ способствует обогащению зернограницной области, т.к. в процессе роста зерен может происходить перемещение границы в области с более высокой концентрацией примеси. При этом вторая фаза перемещается вместе с границами. Для меньшей подвижности ГЗ (сплав 2, табл. 1) происходит меньшее обогащение зернограницной области, и вторая фаза находится на стыках зерен (рис. 2в), образуя выделения с острыми двугранными углами. Полное смачивание границ для этого случая не наблюдалось из-за медленного притока вещества из объема зерна.

Для близких значений $g_1^{V*} \approx g_1^{GB*}$ (сплав 3, табл. 1) на границах и стыках зерен формируются зародыши в виде частиц с острыми краевыми углами (рис. 2г), что соответствует частичному смачиванию границы.

Смена знака $g_1^{V*} < g_1^{GB*}$ (сплав 4, табл. 1) приводит к формированию зародышей и выделений

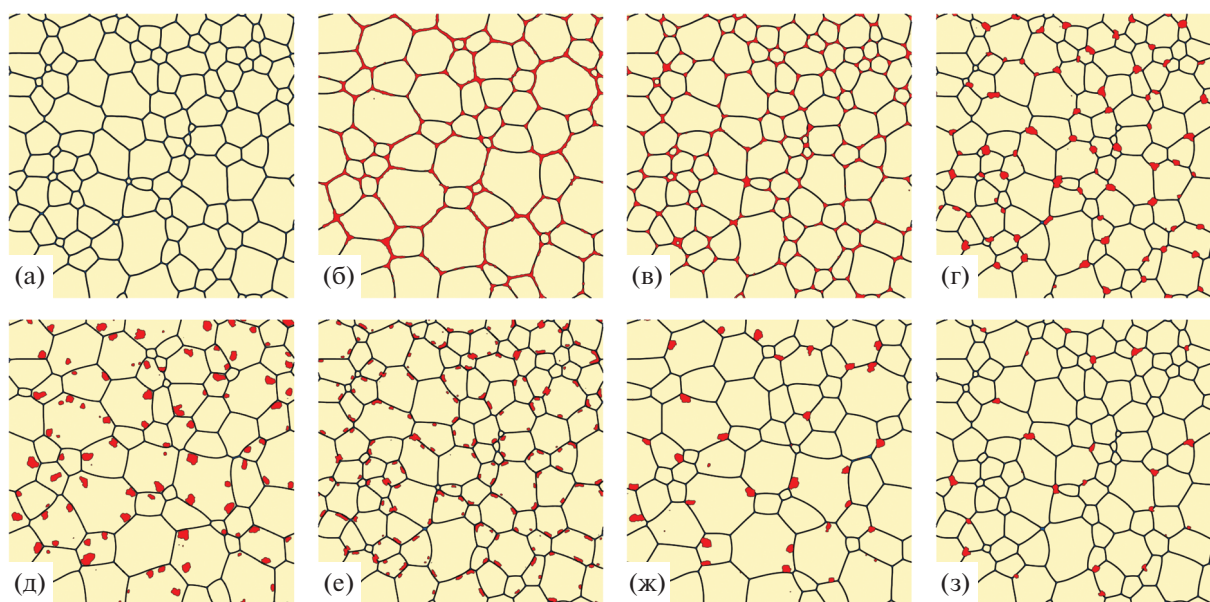


Рис. 2. Микроструктура сплавов и распределение второй фазы в конце моделирования ($t^* = 75000$, $P = 54$). (а) Соответствует начальной микроструктуре сплава. (б–з) Соответствуют сплавам 1–7 из табл. 1. Черные линии показывают ГЗ; участки, выделенные цветом, относятся ко второй фазе. Размеры показанных областей составляют 512×512 .

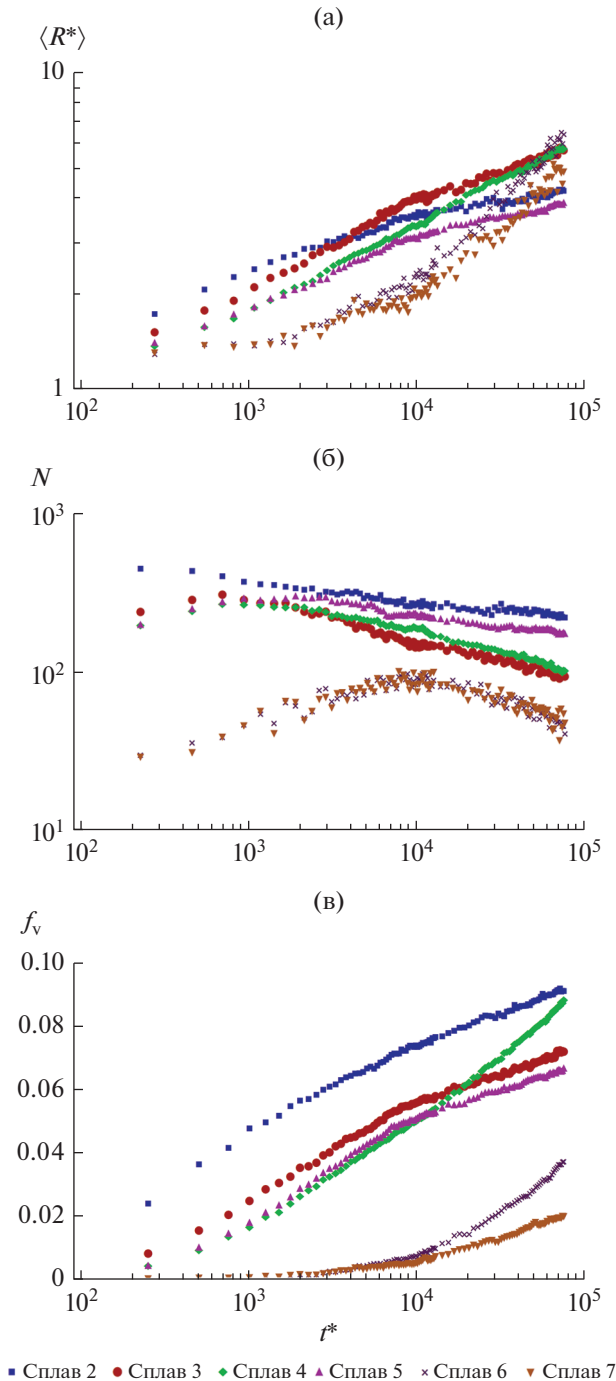


Рис. 3. Кинетика изменения среднего радиуса (а), количества выделений (б) и объемной доли выделений второй фазы (в). Серии точек соответствуют сплавам из табл. 1.

вблизи ГЗ, что соответствует тупому краевому углу (рис. 2д, 2е) или несмачиваемости ГЗ. Высокая подвижность границ приводит к искажению формы выделений, которые вытягиваются в направлении движения границ благодаря наиболее быстрому притоку вещества в области контакта с границей. Данная особенность сходна с форми-

рованием слоистых структур, ориентированных поперек границы зерна в процессе спинодального распада в наноструктурированных сплавах [22].

Также при высокой подвижности границ может происходить отрыв выделений от ГЗ. При этом выделения оказываются внутри зерна (рис. 2д). При уменьшении подвижности ГЗ (сплав 5, табл. 1) средний размер выделений и объемная доля второй фазы существенно снижаются, что связано с медленным притоком растворенных атомов из объема зерна (рис. 2е). Сами выделения при этом оказываются вытянутыми вдоль границы (рис. 2е). Для данного случая также наблюдались отдельные акты слияния выделений через границу зерна (рис. 2е). Поскольку краевой угол для данных параметров взаимодействия является тупым, то выделения, сформированные в результате слияния, имеют форму двуглава, расположенного симметрично относительно границы.

Следует отметить, что форма выделений, а также значения краевых углов могут испытывать заметные изменения в окрестности среднего значения, что обусловлено влиянием флуктуаций концентрационного поля и параметра порядка.

Таким образом, на основе результатов моделирования (рис. 2) можно заключить, что переход полное смачивание–несмачивание может наблюдаться при температурах, обеспечивающих смену знака разности $(g_1^{V*} - g_1^{GB*})$.

Необходимо отметить, что влияние знака $(g_1^{V*} - g_1^{GB*})$ на обогащение или обеднение зернограницной области в целом согласуется с выводами теории зернограницной сегрегации [7]. Вместе с тем значения параметра g_1 , наряду с Ω и κ_c , влияют на поверхностное натяжение [26] на границах раздела фаз, значения которого определяют краевые углы [2]. В связи с этим можно ожидать, что изменение любого из параметров g_1 , Ω или κ_c вблизи ГЗ также могут приводить к изменению значений краевых углов и распределения фаз между зернограницной областью и объемом зерна (см. также [12]).

Отличие параметров взаимодействия между атомами приводит к перераспределению вещества между объемом и границей зерна [7]. Поэтому образование вторых фаз становится возможным вне области сосуществования бинарного сплава, соответствующего параметрам взаимодействия в зернограницной области (рис. 1). Например, для состава сплава $\langle c \rangle = 0.12$ (сплавы 6 и 7, табл. 1) происходит образование второй фазы, не смачивающей (рис. 2ж) и частичного смачивающей (рис. 2з) границу.

На рис. 3 показана кинетика изменения среднего радиуса и количества выделений, а также объемной доли второй фазы. Из рис. 3а–3в (сплавы 4 и 5) следует, что при увеличении подвижно-

сти ГЗ увеличивается объемная доля и средний радиус выделений, а концентрация снижается (рис. 2д, 2е). Это обусловлено влиянием подвижности ГЗ, повышение которой приводит к увеличению скорости переноса атомов примеси, что обеспечивает более раннее зарождение, быстрый рост и переход к режиму коалесценции. Для механизма коалесценции характерен рост среднего размера выделений при уменьшении их количества и слабом изменении объемной доли [29]. Однако в рассматриваемом случае процесс роста выделений обусловлен не только быстрой диффузией по ГЗ, но и ростом зерен, который может приводить к слиянию зародышей (см. также [10]).

При смене знака разности $(g_1^{V*} - g_1^{GB*})$, наряду с изменением краевого угла, происходит увеличение объемной доли вторых фаз (сплавы 5, 3, 2 на рис. 3). При этом радиус и количество выделений ведут себя немонотонно. Радиус достигает наибольшего, а количество выделений – наименьшего значения для $(g_1^{V*} - g_1^{GB*}) = 0$, соответствующего сплаву 3.

Результаты расчета формирования выделений для сплавов с меньшей концентрацией $\langle c \rangle = 0.12$, при равных параметрах взаимодействия и подвижности границ (сплавы 6 и 4, 7 и 2, рис. 3), характеризуются меньшей объемной долей второй фазы (рис. 3в). В конце моделирования средние размеры выделений оказываются близкими (рис. 3а), а концентрация существенно ниже (рис. 3б), чем для сплавов с составом $\langle c \rangle = 0.16$. Это обусловлено более длительной инкубационной стадией, меньшей скоростью зародышеобразования и более длительной стадией диффузионного роста, которая, как правило, характеризуется более быстрым ростом среднего размера выделений, чем коалесценция [24, 25, 29].

ВЫВОДЫ

На основе теории фазового поля разработана модель образования вторых фаз в наноструктурированных бинарных сплавах с учетом подвижности ГЗ, изменения параметров взаимодействия, анизотропии зернограничного транспорта примесей, а также тепловых флуктуаций.

Наличие ускоренного транспорта примесей по подвижным границам зерен, а также различие параметров взаимодействия может приводить к реализации полного и частичного смачивания, а также несмачивания границ второй фазой. Сплавы с более высокой подвижностью границ характеризуются большей объемной долей второй фазы.

Выполненное моделирование в области стабильных и метастабильных состояний показывает, что при реализации полного или частичного

смачивания вторая фаза может перемещаться вместе с ГЗ, что обусловлено высоким значением коэффициента зернограничной диффузии и меньшей энергией границы, обогащенной атомами примеси.

При несмачивании зародыши и выделения формируются вблизи границ, что, главным образом, связано с высоким значением коэффициента зернограничной диффузии и высокой интенсивностью флуктуаций. Движение границ может привести к возникновению преимущественного направления роста таких выделений, которые могут вытягиваться по направлению движения границы. При значительной подвижности границ может произойти отрыв выделения от границы, выделения при этом оказываются в объеме зерна, где их формирование без участия ГЗ затруднено медленной диффузией и низкой интенсивностью флуктуаций.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (№ 22-11-00036, <https://rscf.ru/project/22-11-00036/>).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Kaur I., Mishin Y., Gust W.* Fundamentals of Grain and Interphase Boundary Diffusion. John Wiley & Sons LTD, Chichester, 1995. 536 p.
2. *Страумал Б.Б.* Фазовые переходы на границах зерен. М.: Наука, 2003. 327с.
3. *Чувильдеев В.Н.* Неравновесные границы зерен в металлах. Теория и приложения. М.: Физматлит, 2004. 304 с.
4. *Разумов И.К., Ермаков А.Е., Горностырев Ю.Н., Страумал Б.Б.* Неравновесные фазовые превращения в сплавах при интенсивной пластической деформации // УФН. 2020. Т. 190. № 8. С. 785–810.
5. *Herzig C., Mishin Y.* Grain boundary diffusion in metals / in book Diffusion in Condensed Matter eds. P. Heitjans, J.Kärger (Eds.) Springer-Verlag, Berlin. 2005. P. 337–366.
6. *Koju R.K., Mishin Y.* Atomistic study of grain-boundary segregation and grain-boundary diffusion in Al–Mg alloys // Acta Mater. 2020. V. 201. P. 596–603.
7. *Lejček P.* Grain boundary segregation in metals. Springer. Berlin, 2010. 250 p.
8. *Kelton K.F. Greer A.L.* Nucleation in condensed matter. Elsevier, Oxford, 2010. 735 p.
9. *Straumal B.B., Kogtenkova O.A., Murashkin M.Yu., Bulatov M.F., Czepe T., Zięba P.* Grain boundary wetting transition in Al–Mg alloys // Materials Letters. 2017. V. 186. P. 82–85.
10. *Kundin J., Sohaib H., Scheidung R., Steinbach I.* Phase-field modeling of pores and precipitates in polycrystalline systems // Modell. Sim. Mater. Sci. Eng. 2018. V. 26. P. 065003.
11. *Федосеев В.Б.* Расщепление фазовой диаграммы расслаивающегося твердого раствора в микро- и наноразмерных системах // ФТТ. 2015. Т. 57. № 3. С. 585–589.

12. Львов П.Е., Светухин В.В. Влияние границ зерен на распределение компонентов в бинарных сплавах // ФТТ. 2017. Т. 59. № 12. С. 2425–2434.
13. Wang L., Kamachali R.D. Density-based grain boundary phase diagrams: Application to Fe–Mn–Cr, Fe–Mn–Ni, Fe–Mn–Co, Fe–Cr–Ni and Fe–Cr–Co alloy systems // Acta Mater. 2021. V. 207. P. 116668.
14. Карькин И.Н., Карькина Л.Е., Коржавый П.А., Горностырев Ю.Н. Моделирование методом Монте-Карло кинетики распада и образования выделений на границах зерен общего типа в разбавленных ОЦК-сплавах Fe–Cu // ФТТ. 2017. Т. 59. С. 103–109.
15. Zhang J., Liu W., Chen P., He H., He C., Yun D. Molecular dynamics study of the interaction between symmetric tilt $\Sigma 5(210)$ $\langle 001 \rangle$ grain boundary and radiation-induced point defects in Fe–9Cr alloy // Nuclear Inst. and Methods in Physics Research B 2019. V. 451. P. 99–103.
16. Tikhonchev M., Muralev A., Svetukhin V. MD simulation of atomic displacement cascades in random Fe–9 at. % Cr binary alloy with twin grain boundaries // Fusion Sci. Tech. 2014. V. 66. P. 91–99.
17. Разумов И.К., Горностырев Ю.Н., Ермаков А.Е. Неравновесные диффузионные фазовые превращения в сплавах, обусловленные миграцией границ зерен и дислокаций // ФТТ. 2019. Т. 61. № 2. С. 346–356.
18. Fan D., Chen L.-Q. Computer simulation of grain growth using a continuum field model // Acta Mater. 1997. V. 45. P. 611–622.
19. Fan D., Chen L.-Q. Diffusion-controlled grain growth in two-phase solids // Acta Mater. 1997. V. 45. P. 3297–3310.
20. Bhattacharyya S., Wook T., Chang H. K., Chen L.-Q. A phase-field model of stress effect on grain boundary migration // Modell. Sim. Mater. Sci. Eng. 2011. V. 19. P. 035002.
21. Kundin J., Farhandi H., Ganesan K.P., Almeida R.S.M., Tushtev K., Rezwani K. Phase-field modeling of grain growth in presence of grain boundary diffusion and segregation in ceramic matrix mini-composites // Comp. Mater. Sci. 2021. V. 190. P. 110295.
22. Ramanarayan H., Abinandanan T. Grain boundary effects on spinodal decomposition // Acta Mater. 2004. V. 52. P. 921–930.
23. Garcia-Ojalvo J., Sancho J.M. Noise in Spatially Extended Systems. Springer, N.Y., 1999. 307p.
24. L'vov P.E., Svetukhin V.V. Stochastic simulation of nucleation in binary alloys // Modell. Simul. Mater. Sci. Eng. 2018. V. 26. P. 045001.
25. L'vov P.E., Svetukhin V.V. Generalized non-classical nucleation model in binary alloys // Modell. Simul. Mater. Sci. Eng. 2019. V. 27. P. 25002.
26. Cahn J.W., Hilliard J.E. Free energy of a nonuniform system. I. Interfacial free energy // J. Chem. Phys. 1958. V. 28. № 2. P. 258–267.
27. Biner S.B. Programming Phase-Field Modeling. Springer, Cham, 2017. 400 p.
28. Miller M.K., Forbes R.G. Atom-Probe Tomography: The Local Electrode Atom Probe. Springer, N.Y., 2014. 423 p.
29. Slezov V.V. Kinetics of First-order Phase Transitions. Wiley-VCH, Weinheim, 2009. 429 p.