

**СТРУКТУРА,  
ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ И ДИФФУЗИЯ**

УДК 669.295:620.186.8

**АТОМИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СПЕЦИАЛЬНЫХ ГРАНИЦ  
НАКЛОНА В  $\alpha$ -Ti: СТРУКТУРА, ЭНЕРГИЯ, ТОЧЕЧНЫЕ ДЕФЕКТЫ,  
ЗЕРНОГРАНИЧНАЯ САМОДИФФУЗИЯ**

© 2022 г. М. Г. Уразалиев<sup>а</sup>, М. Е. Ступак<sup>а</sup>, В. В. Попов<sup>а, \*</sup>

<sup>а</sup>Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, ул. С. Ковалевской, 18, Екатеринбург, 620108 Россия

\*e-mail: vpopov@imp.uran.ru

Поступила в редакцию 28.12.2021 г.

После доработки 01.03.2022 г.

Принята к публикации 05.03.2022 г.

Методами компьютерного моделирования с использованием межатомного потенциала погруженного атома исследованы симметричные границы наклона  $[2\bar{1}\bar{1}0](01\bar{1}3)$  и  $[2\bar{1}\bar{1}0](02\bar{2}1)$  в ГПУ титане. Методом молекулярно-статического моделирования рассчитаны структура и энергии рассматриваемых границ, энергии образования вакансий в них. Методом молекулярной динамики исследована устойчивость границ при повышенных температурах и рассчитаны коэффициенты зернограничной самодиффузии. Установлено, что граница  $[2\bar{1}\bar{1}0](01\bar{1}3)$  стабильна до температуры фазового превращения ГПУ  $\rightarrow$  ОЦК (1155 К), а граница  $[2\bar{1}\bar{1}0](02\bar{2}1)$  – до 900 К. Показано, что рассчитанные значения коэффициента зернограничной диффузии близки к экспериментальным.

*Ключевые слова:* границы зерен, молекулярная статика, молекулярная динамика, вакансии, диффузия

**DOI:** 10.31857/S0015323022060146

**ВВЕДЕНИЕ**

Титан является важнейшим металлом в аэрокосмической технике, находит широкое медицинское применение. Свойства поликристаллического титана напрямую зависят от структуры и свойств границ зерен (ГЗ). Самодиффузия по высокоугловым ГЗ составляет основу механизмов миграции ГЗ, роста зерен, ползучести Кобла и других диффузионно-контролируемых процессов в поликристаллах.

Экспериментальные исследования зернограничной диффузии не могут дать информацию о диффузии в конкретной зернограничной области, поэтому данные исследования дополняются исследованием структуры ГЗ и атомистическим моделированием диффузионных процессов.

Компьютерное моделирование ГЗ преимущественно использует модель бикристалла с разориентировкой, соответствующей теории решеток совпадающих узлов [1–4], которая не всегда подходит для определения и классификации ГЗ в гексагональных решетках [5]. Поэтому в настоящей работе не приводится значение обратной плотности совпадающих узлов в обозначениях границы.

Данная работа посвящена исследованию структуры большеугловых специальных границ зерен

наклона в  $\alpha$ -титане, имеющем гексагональную плотноупакованную (ГПУ) кристаллическую решетку.

Согласно [6] атомистическое компьютерное моделирование специальных ГЗ в ГПУ-металлах возможно, если углы разориентировки соответствуют кристаллографическим плоскостям, которые совпадают с плоскостями границ зерен.

В литературе мало сведений о границах в ГПУ титане с осью наклона  $[2\bar{1}\bar{1}0]$ . Существует ограниченное число границ зерен с осью наклона  $[2\bar{1}\bar{1}0]$ , имеющих кристаллографические плоскости ГЗ [7]. Из данного набора ГЗ для исследования выбраны две ГЗ с наименьшей энергией образования: двойниковая граница  $[2\bar{1}\bar{1}0](01\bar{1}3)$  с углом наклона  $64.3^\circ$  и симметричная граница наклона  $[2\bar{1}\bar{1}0](02\bar{2}1)$  с углом наклона  $150.3^\circ$ . При предварительном исследовании выяснено, что данные ГЗ наиболее стабильны, что делает возможным выполнить расчеты коэффициентов зернограничной диффузии вдоль этих границ.

В работе поставлены задачи рассчитать структуру и энергию рассматриваемых ГЗ, их термическую стабильность, оценить энергии образования вакансий в ГЗ, а также рассчитать коэффициенты зернограничной самодиффузии.

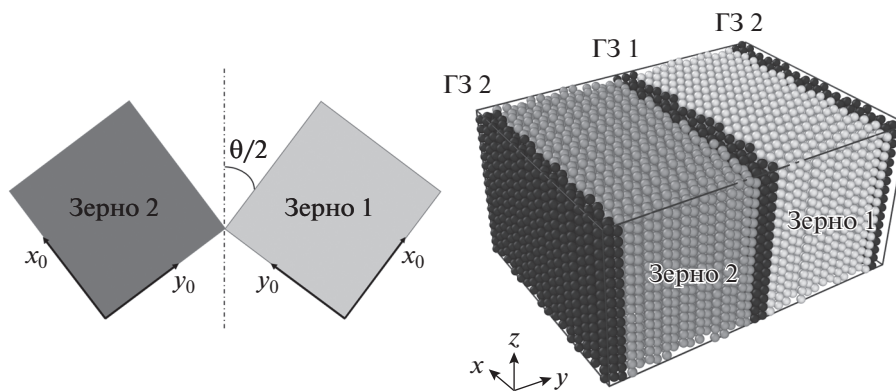


Рис. 1. Схема построения трехмерной периодической бикристаллической расчетной ячейки. Черным цветом обозначены границы зерен (ГЗ 1 и ГЗ2). Зерно 1 и зерно 2 развернуты относительно друг друга на угол  $\theta$  вокруг оси  $z$ .

### МЕТОДИКА АТОМИСТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Для расчета структуры и энергии ГЗ был использован метод молекулярной статики (МС). В данном методе по умолчанию отсутствует движение, поэтому считается, что отсутствие температуры соответствует условному 0 К. С использованием программы LAMMPS [8] были выполнены расчеты для двух большеугловых симметричных границ наклона:  $[2\bar{1}\bar{1}0](01\bar{1}3)$  и  $[2\bar{1}\bar{1}0](02\bar{2}1)$ .

Исходный кристаллит моделирования был ориентирован по следующим кристаллографическим направлениям:  $x_0 \parallel [0\bar{1}10]$ ,  $y_0 \parallel [0001]$ ,  $z_0 \parallel [2\bar{1}\bar{1}0]$ . Затем блок был разделен на две части. “Зерно 1” и “Зерно 2”, как показано на рис. 1. Расчетная ячейка, вмещающая в себя 2 блока, имела периодические граничные условия Борна–Кармана в трех ортогональных направлениях. Процедура построения симметричных ГЗ была подобна использованной в работах [9, 10].

Для создания специальной границы зерен каждый блок моделирования разворачивали один относительно другого вокруг оси наклона  $z$  на угол, соответствующий специальному углу  $\theta$  (рис. 1). Для формирования геометрии моделируемого блока использована программа АТОМСК [11]. В качестве визуализатора для анализа структур использована программа ОВИТО [12].

Ячейка моделирования имеет две идентичных ГЗ: ГЗ 2, повторяющаяся на границах ячейки вследствие периодических граничных условий, и ГЗ 1 между двумя блоками (зернами) (рис. 1).

Расчетная ячейка содержала  $\sim 18500$  атомов. Размеры блока моделирования связаны с геометрией конкретной границы. Размеры ячейки для границы  $[2\bar{1}\bar{1}0](02\bar{2}1)$  составляют приблизительно  $16 \times 8.9 \times 2.9$  нм. Размеры блока для ГЗ  $[2\bar{1}\bar{1}0](01\bar{1}3)$  равны  $7.2 \times 9.6 \times 4.8$  нм.

Для выбора потенциала для  $\alpha$ -титана, наилучшим образом описывающего межатомное взаимодействие, было проведено сравнение ряда экспериментальных параметров с параметрами, рассчитанными с использованием различных потенциалов. Наиболее перспективными являются потенциалы, удовлетворительно описывающие фазовые превращения. Такими потенциалами являются потенциалы модифицированного погруженного атома [13–15] и потенциалы типа Финисса–Синклера [16].

Все эти потенциалы для титана показали хорошее согласие с экспериментальными данными (табл. 1). Наилучшее согласие с экспериментом по совокупности расчетных характеристик обеспечивает потенциал Ti3 [16], который и использовали в расчетах.

Энергию ГЗ,  $E_{GB}$ , рассчитывали с помощью выражения:

$$E_{GB} = \frac{E_p - NE_{coh}}{2S}, \quad (1)$$

где  $E_p$  – полная потенциальная энергия релаксированного бикристалла,  $N$  – число атомов в системе,  $E_{coh}$  – энергия когезии (энергия связи, приходящаяся на один атом решетки идеального кристалла),  $S$  – площадь ГЗ. Наличие двух границ учитывает удвоенная площадь  $S$  в знаменателе.

Структуру и энергию ГЗ для каждой разориентировки получали для различных начальных конфигураций в результате поиска локального минимума энергии, методом сопряженных градиентов. В дальнейшем анализировали структуру, соответствующую глобальному минимуму энергии.

Проведены расчеты энергии образования вакансий в позициях, расположенных на разном

**Таблица 1.** Сравнение экспериментальных характеристик  $\alpha$ -титана со свойствами, рассчитанными на основе потенциалов межатомного взаимодействия

Свойства	Расчет с использованием различных потенциалов межатомного взаимодействия							Эксперимент
	Ti1 [16]	Ti2 [16]	Ti3 [16]	AlTi [17]	CoTi [15]	NiTi [13]	VNiTi [14]	
$a$ , нм	0.2947	0.2949	0.2951	0.2951	0.292	0.291	0.291	0.295 [18]
$c/a$	1.588	1.597	1.593	1.585	1.633	1.62	1.633	1.587 [19]
C11, ГПа	161	160	165	178	174	158	170	176.1 [19]
C12, ГПа	80	70	88	74	82	109	96	86.9 [19]
C44, ГПа	53	54	58	51	41	34	40	50.8 [19]
C13, ГПа	86	70	83	77	73	67	72	68.3 [19]
C33, ГПа	169	165	166	191	185	200	190	190.5 [19]
C66, ГПа	40	45	39	52	46	25	37	44.6 [19]
Энергия когезии, эВ/атом	5.346	5.247	5.402	4.85	4.87	4.832	4.87	4.85 [19]
Объемный модуль упругости, ГПа	115.3	106.61	111.13	107.58	109.75	111.34	112.34	105.1 [18]
Поверхностная энергия, (0001), Дж/м <sup>2</sup>	1.346	1.882	2.212	1.725	2.094	2.023	2.023	1.92 [21]
Энергия образования вакансии, эВ	2.67	1.7	1.62	1.83	1.78	1.83	1.46	1.27 [20]

расстоянии от плоскости границы. Энергию образования вакансий рассчитывали по формуле:

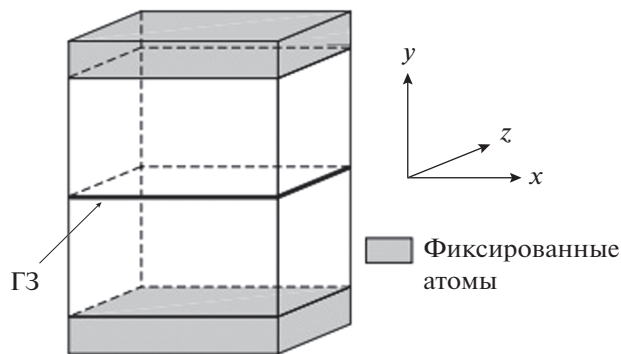
$$E_V = E_f - (N_0 - 1) \frac{E_i}{N_0}, \quad (2)$$

где  $E_i$  – начальная энергия системы, до удаления атома,  $N_0$  – общее число атомов,  $E_f$  – энергия системы после удаления атома, это энергия системы  $N_0 - 1$  частиц. Член  $E_i/N_0$  – учитывает энергию, приходящуюся на один атом. Чтобы проверить устойчивость структуры ГЗ, построенных методом молекулярной статистики для 0 К, при конечных температурах отжиг проводили методом молекулярно-динамического моделирования (NPT ан-

самбль). Стабильная структура определяется как структура, в которой конфигурация ГЗ не меняется после отжига, т.е. длительной выдержки при заданной температуре. Отжиг проводили следующим образом. Исходным состоянием была структура, полученная методом молекулярной статистики. Далее выполняли нагрев от 0 К до заданной температуры в течение 2 нс. Затем следовала выдержка при постоянной температуре (достигнутой на предыдущем этапе нагрева), в течение 40 нс, после чего запускали процедуру минимизации энергии ГЗ, методом сопряженных градиентов, встроенным в LAMMPS. Значения температуры задавали в интервале 400–1200 К с шагом 50 К. Расчет коэффициента диффузии произведен для границ зерен, сохранивших свою структуру при отжиге, при разных температурах.

При проведении МД-моделирования атомы на краях блока моделирования зафиксированы. Это необходимо в силу того, что при повышенных температурах граница может мигрировать. Чтобы предотвратить миграцию, для всех температур были использованы области с фиксированными атомами, т.е. области, в которых не работал термостат ( $T = 0$  К). Размеры данных областей составляли 0.5 нм по краям блока по оси  $y$  (рис. 2). Аналогичный подход использован в работах [22–24].

В работе выполнены расчеты зернограничной диффузии для температур, при которых граница стабильна. При этом предполагали, что зернограничная диффузия протекает по вакансионному ме-



**Рис. 2.** Схема расчетной ячейки молекулярно-динамического моделирования, где  $z$  является осью наклона. Серым цветом указана зона с фиксированными атомами.

ханизму. Это предположение основывали на проведенных ранее мёссбауэровских исследованиях, которые показали, что в случае, если диффундирующий атом близок по размеру к атому матрицы, реализуется вакансионный механизм зернограничной диффузии [25]. Следовательно, можно достаточно уверенно утверждать, что зернограничная самодиффузия должна протекать по вакансионному механизму.

Расчет самодиффузии по ГЗ осуществляли следующим образом. Перед проведением расчета в границе зерна в позиции, соответствующей минимальной энергии образования вакансии, создавали одну вакансию. После того, как вакансия создана в нужной позиции, проводили нагрев до заданной температуры в течение 2 нс, потом отжиг в течение 40 нс, а затем моделирование диффузии в течение 20 нс.

Время шага выбирали порядка 1 фс. Время моделирования составляло 20 нс. При этом рассчитывали коллективное среднее квадратичное смещение атомов в границе зерна, ширину которой принимали ~1 нм. Коэффициент зернограничной диффузии  $D$  рассчитывали на основании среднего квадратичного смещения по формуле:

$$D = \frac{\sum [(x_i - x_{i0})^2 + (y_i - y_{i0})^2 + (z_i - z_{i0})^2] \frac{n}{N}}{6nt}, \quad (3)$$

где  $x_i, y_i, z_i$  – координаты атомов в момент времени  $t$ ;  $x_{i0}, y_{i0}, z_{i0}$  – исходные координаты атомов,  $n$  – количество атомов в ГЗ в блоке моделирования,  $N$  – число атомов на 1 вакансию,  $t$  – общее время молекулярно-динамического моделирования. Множитель  $n/N$  добавлен, чтобы учесть, что количество атомов в ГЗ в блоке моделирования отличается от количества атомов, приходящихся на 1 вакансию.

Количество атомов, приходящихся на 1 вакансию, рассчитывали как величину, обратную равновесной концентрации вакансий  $C_v$ :

$$N = 1/C_v. \quad (4)$$

Равновесную концентрацию вакансий рассчитывали по формуле:

$$C_v = \exp\left(-\frac{E_{v \min}}{kT}\right), \quad (5)$$

где  $E_{v \min}$  – минимальная энергия образования вакансии в границе зерна,  $T$  – абсолютная температура.

### РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

На рис. 3 показаны структуры релаксированных ГЗ, исследованных в настоящей работе (плоскость рисунка перпендикулярна оси наклона). Черные и светлые кружки обозначают позиции атомов в чередующихся плоскостях, перпендикулярных оси наклона, т.е. соответствуют раз-

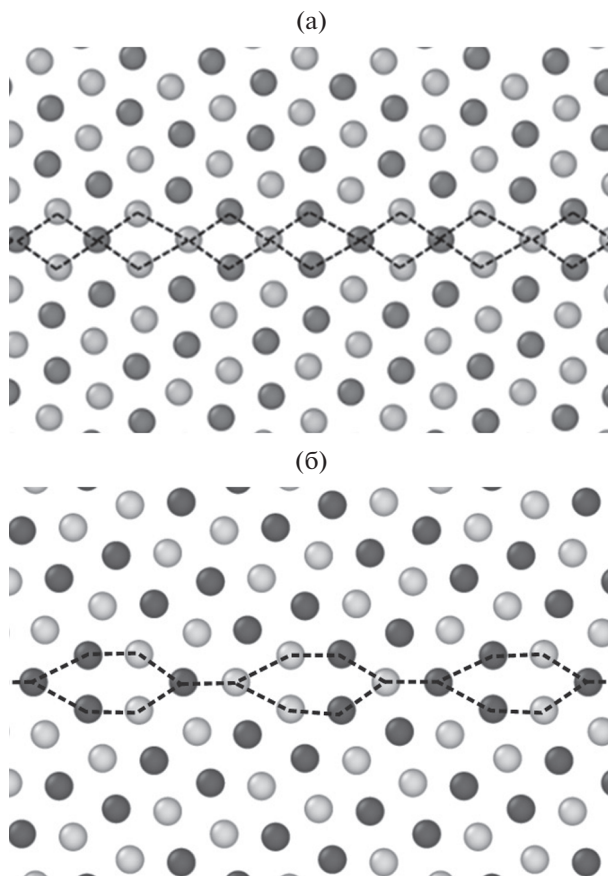


Рис. 3. Рассчитанная релаксированная структура границ зерен  $[2\bar{1}\bar{1}0](01\bar{1}3)$   $\theta = 64.3^\circ$  (а) и  $[2\bar{1}\bar{1}0](02\bar{2}1)$   $\theta = 150.3^\circ$  (б).

ным атомным плоскостям. Пунктирные линии охватывают структурные элементы.

Каждая из границ образована одним типом структурных элементов (показаны пунктиром), хотя и различных. Следовательно, они относятся к типу так называемых “предпочтительных” границ. Энергия границы  $[2\bar{1}\bar{1}0](01\bar{1}3)$  составляет  $0.196 \text{ Дж/м}^2$ , границы  $[2\bar{1}\bar{1}0](02\bar{2}1)$  –  $0.286 \text{ Дж/м}^2$ . Близкие значения энергии ГЗ наблюдали в работе [6] для границ, соответствующих минимальной энергии: двойниковой ГЗ  $[\bar{1}2\bar{1}0](\bar{1}011)$  и симметричной ГЗ  $[\bar{1}2\bar{1}0](\bar{2}021)$ , которые имеют структуру, похожую на структуру ГЗ, исследуемых в данной работе.

В работе проведены расчеты энергии образования вакансий в зависимости от расстояния от плоскости границы зерна. Зависимость энергии образования вакансии от расстояния от плоскости границы для рассматриваемых границ показана на рис. 4.

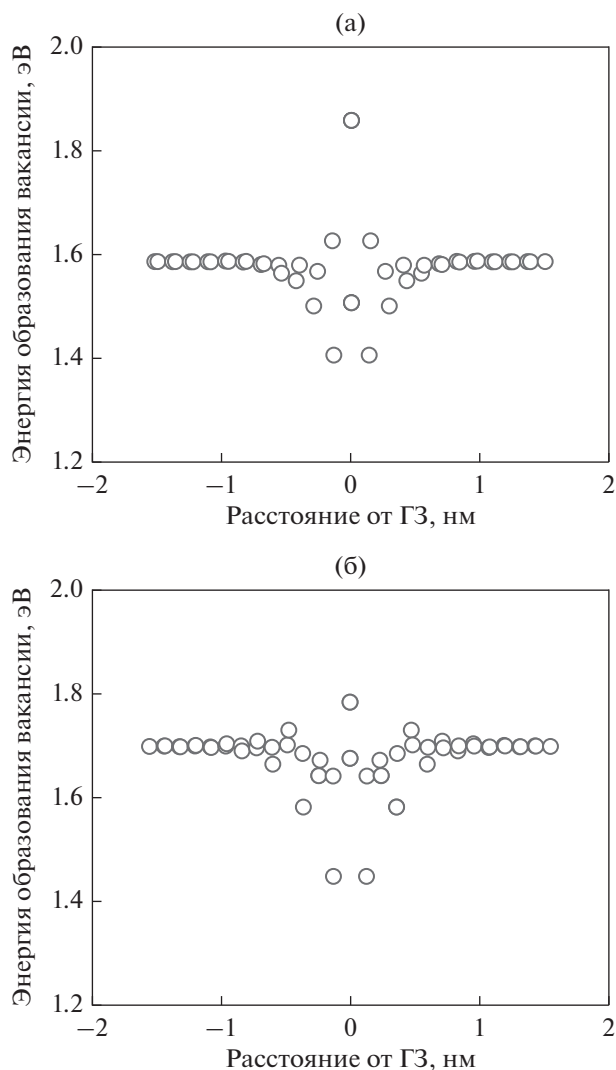


Рис. 4. Зависимость энергии образования вакансии от расстояния от плоскости границы. а – граница  $[2\bar{1}\bar{1}0](01\bar{1}3)$ ; б – граница  $[2\bar{1}\bar{1}0](02\bar{2}1)$ .

Ширина приграничной области, для которой энергия образования вакансий существенно меньше, чем энергия образования вакансий в объеме, составляет приблизительно 1 нм. Почти такое же значение приводится в работах [9, 10, 26]. Это приблизительно в два раза больше, чем структурная и диффузионная ширина ГЗ [27, 28]. Минимальная энергия образования вакансии для границы  $[2\bar{1}\bar{1}0](01\bar{1}3)$  составляет 1.405 эВ, для границы  $[2\bar{1}\bar{1}0](02\bar{2}1)$  – 1.447 эВ. Следует отметить, что позиции вакансий в области ГЗ могут иметь энергию выше, чем в объеме. Подобную ситуацию наблюдали в работе [29].

Методом молекулярно-динамического моделирования проверена устойчивость структуры границ зерен при отжиге. Установлено, что струк-

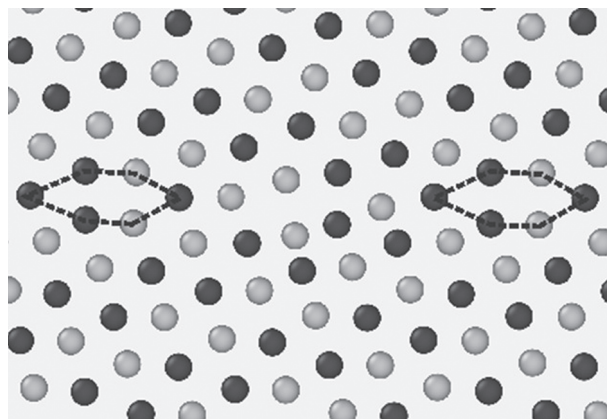


Рис. 5. Структура границы  $[2\bar{1}\bar{1}0](02\bar{2}1)$  после отжига при 1000 К.

тура ГЗ  $[2\bar{1}\bar{1}0](01\bar{1}3)$  стабильна практически до температуры фазового превращения ГПУ → ОЦК (1155 К [16]). Граница  $[2\bar{1}\bar{1}0](02\bar{2}1)$  стабильна до 900 К. При более высоких температурах структура разрушается, что иллюстрирует рис. 5, на котором показана структура этой границы после отжига при 1000 К. Видно, что после отжига при 1000 К наряду с участками, в которых сохраняются структурные элементы, характерные для структуры этой границы при более низких температурах отжига, появляются разупорядоченные области.

В интервалах температур, в которых структуры границ  $[2\bar{1}\bar{1}0](01\bar{1}3)$  и  $[2\bar{1}\bar{1}0](02\bar{2}1)$  стабильны, проведены расчеты коэффициентов зернограничной самодиффузии в этих границах и сравнение с результатами экспериментального измерения коэффициента зернограничной самодиффузии в титане [30].

В работе [30] получено следующее выражение для двойного произведения  $P = \delta D_{gb}$ :

$$P = 4.5_{-2.9}^{+8.1} \times 10^{-12} \times \exp\left(\frac{-186 \pm 8.3 \text{ кДж/моль}}{RT}\right), \text{ м}^3 \text{ с}^{-1}. \quad (6)$$

Полагая, что диффузионная ширина ГЗ  $\delta = 0.5$  нм, из этого выражения можно получить следующую формулу для коэффициента зернограничной самодиффузии  $D_{gb}$  в ГПУ Ti:

$$D_{gb} = 9.0_{-5.8}^{+16.2} \times 10^{-3} \times \exp\left(\frac{-186.8 \pm 8.3 \text{ кДж/моль}}{RT}\right), \text{ м}^2 \text{ с}^{-1}. \quad (7)$$

На рис. 6 показано сравнение рассчитанных значений коэффициента зернограничной самодиффузии в ГПУ-Ti для границ  $[2\bar{1}\bar{1}0](01\bar{1}3)$  и  $[2\bar{1}\bar{1}0](02\bar{2}1)$  с экспериментальной температур-

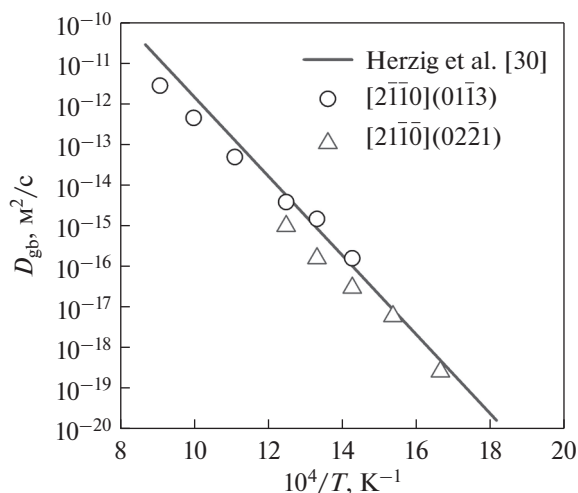


Рис. 6. Сравнение рассчитанных значений коэффициента зернограничной самодиффузии в ГПУ Ti для границ  $[2\bar{1}\bar{1}0](01\bar{1}3)$  и  $[2\bar{1}\bar{1}0](02\bar{2}1)$  с экспериментальной температурной зависимостью этого параметра [30].

ной зависимостью этого параметра, описываемой выражением (7). Видно, что во всем температурном интервале, для которого были выполнены расчеты, имеется удовлетворительное согласие расчетов и эксперимента. В большинстве случаев различие расчетных и экспериментальных значений коэффициента зернограничной самодиффузии не превышает ошибки эксперимента.

Расчет коллективного среднего квадратичного смещения в отсутствие вакансии показал, что его изменение близко к нулю, что также является подтверждением вакансионного механизма диффузии.

Имеющееся различие расчетных и экспериментальных значений коэффициента самодиффузии обусловлено тем, что расчет проводили для конкретных специальных ГЗ, а в случае эксперимента имеется ансамбль различных специальных границ и границ общего типа.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Методом молекулярно-статического моделирования рассчитаны структура и энергия симметричных границ наклона  $[2\bar{1}\bar{1}0](01\bar{1}3)$  и  $[2\bar{1}\bar{1}0](02\bar{2}1)$  в ГПУ-титане и энергии образования вакансий в них.

Проанализирована зависимость энергии образования вакансий от расстояния от плоскости границы. Показано, что ширина приграничной области, для которой энергия образования вакансий существенно меньше, чем энергия образования вакансий в объеме, составляет приблизительно 1 нм.

Методом молекулярно-динамического отжига проверена термическая стабильность структуры границ зерен при повышенных температурах и показано, что структура границы  $[2\bar{1}\bar{1}0](01\bar{1}3)$  в основном сохраняется до температуры фазового превращения ГПУ  $\rightarrow$  ОЦК (1155 К), а границы  $[2\bar{1}\bar{1}0](02\bar{2}1)$  – до 900 К.

Рассчитаны значения коэффициента зернограничной самодиффузии в ГПУ-Ti для границ  $[2\bar{1}\bar{1}0](01\bar{1}3)$  и  $[2\bar{1}\bar{1}0](02\bar{2}1)$  для нескольких температур и проведено сравнение полученных результатов с имеющимися литературными экспериментальными данными. Показано, что между ними имеется удовлетворительное согласие.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 21-13-00063, <https://rscf.ru/project/21-13-00063>.

При проведении работ был использован суперкомпьютер “Уран” ИММ УрО РАН.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Suzuki A., Mishin Y. Atomistic Modeling of Point Defects and Diffusion in Copper Grain Boundaries // *Interface Sci.* 2003. V. 11. P. 131–148.
2. Tschopp M.A., McDowell D.L. Structures and energies of  $\Sigma 3$  asymmetric tilt grain boundaries in copper and aluminium // *Philosoph. Mag.* 2007. V. 87. № 22. P. 3147–3173.
3. Векман А.В. Энергия границ зерен наклона в металлах и сплавах с гцк решеткой // *Изв. Томского политехнического ун-та.* 2008. Т. 313. № 3. С. 96–100.
4. Hickman J., Mishin Y. Extra variable in grain boundary description // *Phys. Rev. Mater.* 2017. V. 1. P. 010601.
5. Farkas D. Grain-boundary structures in hexagonal materials: Coincident and near coincident grain boundaries // *Metall. Mater. Trans. A.* 1994. V. 25. P. 1337–1346.
6. Wang J., Beyerlein I.J. Atomic structures of symmetric tilt grain boundaries in hexagonal close packed (hcp) crystals // *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* 2012. V. 20. P. 024002.
7. Xu Ch., Yuana L., Shiyapuric R., Shana D., Guo B. Role of misorientation angle in twinning and dislocation slip for nano Mg bicrystals with  $[2\bar{1}\bar{1}0]$  symmetric tilt grain boundaries under uniaxial compression and tension // *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* 2019. V. 27. № 3. P. 1–35.
8. Plimton S. Fast parallel algorithms for short rangemolecular dynamics. // *J. Comp. Phys.* 1995. V. 117. P. 1–19.
9. Ступак М.Е., Уразалиев М.Г., Попов В.В. Структура и энергия симметричных границ наклона  $\langle 110 \rangle$  в поликристаллическом W // *ФММ.* 2020. Т. 121. № 8. С. 877–883.
10. Уразалиев М.Г., Ступак М.Е., Попов В.В. Структура и энергия симметричных границ наклона с осью  $\langle 110 \rangle$  в Ni и энергии образования вакансий в границах зерен // *ФММ.* 2021. Т. 122. № 7. С. 713–720.

11. *Hirel P.* “Atomsk”: A tool for manipulating and converting atomic data files // *Comput. Phys. Comm.* 2015. V. 197. P. 212–219.
12. *Stukowski A.* Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO – the Open Visualization Tool Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 2010. V. 18. P. 015012.
13. *Kavousi S., Novak B.R., Baskes M.I., Zaeem M.A., Moldovan D.* Modified embedded-atom method potential for high-temperature crystal-melt properties of Ti–Ni alloys and its application to phase field simulation of solidification // *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* 2019. V. 28. № 1. P. 015006.
14. *Maisel S.B., Ko W.-S., Zhang J.-L., Grabowski B., Neugebauer J.* Thermomechanical response of NiTi shape-memory nanoprecipitates in TiV alloys // *Phys. Rev. Mater.* 2017. V. 1(3). P. 033610.
15. *Oh S.-H., Seol D., Lee B.-J.* Second nearest-neighbor modified embedded-atom method interatomic potentials for the Co–M (M = Ti, V) binary systems // *Calphad.* 2020. V. 70. P. 101791.
16. *Mendelev M.I., Underwood T.L., Ackland G.J.* Development of an interatomic potential for the simulation of defects, plasticity, and phase transformations in titanium // *J. Chem. Phys.* 2016. V. 145(15). P. 154102.
17. *Zope R.R., Mishin Y.* Interatomic potentials for atomistic simulations of the Ti–Al system // *Phys. Rev. B.* 2003. V. 68. P. 024102.
18. *Kittel C., McEuen P., McEuen P.* Introduction to Solid State Physics. Wiley, N.Y., 1996. V. 8.
19. *Fisher E.S., Renken C.J.* Single-Crystal Elastic Moduli and the hcp → bcc Transformation in Ti, Zr, and Hf // *Phys. Rev.* 1964. V. 135. P. A482.
20. *Hashimoto E., Smirnov E.A., Kino T.* Temperature dependence of the Doppler-broadened lineshape of positron annihilation in  $\alpha$ -Ti // *J. Phys. F Met. Phys.* 1984. V. 14. P. L215.
21. *Tyson W.R., Miller W.A.* Surface free energies of solid metals. Estimation from liquid surface tension measurements // *Surf. Sci.* 1977. V. 62. P. 267–276.
22. *Novoselov I.I., Kuksin A.Y., Yanilkin A.V.* Energies of formation and structures of point defects at tilt grain boundaries in molybdenum // *Phys. Solid State.* 2014. V. 56. P. 1401–1407.
23. *Wang J., Beyerlein I.J.* Atomic Structures of [0–110] Symmetric Tilt Grain Boundaries in Hexagonal Close-Packed (hcp) CrystalsModel// *Simul. Mater. Sci. Eng.* 2012. V. 20. P. 3557–3568.
24. *Cahl J.W., Mishin Y., Suzuki A.* Coupling grain boundary motion to shear deformation// *Acta Mater.* 2006. V. 54. P. 4953–4975.
25. *Popov V.V.* Mossbauer spectroscopy of interfaces in metals // *Phys. Met. Metallogr.* 2012. V. 113. № 13. P. 1257–1289.
26. *Hallil A., Metsu A., Bouhattate J., Feaugas X.* Correlation between vacancy formation and  $\Sigma 3$  grain boundary structures in nickel from atomistic simulations // *Phil. Mag.* 2016. V. 96. № 20. P. 2088–2114.
27. *Surholt T., Mishin Yu., Herzig Chr.* Grain-boundary diffusion and segregation of gold in copper: Investigation in type-B and type-C kinetic regimes // *Phys. Rev. B.* 1994. V. 50. № 6. P. 3577–3587.
28. *Fultz B., Kuwano H., Ouyang H.* Average widths of grain boundaries in nanophase alloys synthesized by mechanical attrition // *J. Appl. Phys.* 1995. V. 77. P. 3458–3466.
29. *Bhatia M.A., Solanki K.N.* Energetics of vacancy segregation to symmetric tilt grain boundaries in hexagonal closed pack materials. // *J. Appl. Phys.* 2013. V. 114. 244309.
30. *Herzig C., Wilger T., Przeorski T., Hisker F., Divinski S.* Titanium tracer diffusion in grain boundaries of  $\alpha$ -Ti,  $\alpha_2$ -Ti<sub>3</sub>Al, and  $\gamma$ -TiAl and in  $\alpha_2/\gamma$  interphase boundaries // *Intermetallics.* 2001. V. 9. P. 431–442.