

СТРУКТУРА, ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ
И ДИФФУЗИЯ

УДК 669.24:620.186.8:539.219.3

АТОМИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СИММЕТРИЧНОЙ
И АСИММЕТРИЧНЫХ ГРАНИЦ ЗЕРЕН НАКЛОНА $\Sigma 5 \langle 001 \rangle$ В НИОБИИ:
СТРУКТУРА, ЭНЕРГИЯ, ТОЧЕЧНЫЕ ДЕФЕКТЫ,
ЗЕРНОГРАНИЧНАЯ САМОДИФФУЗИЯ

© 2023 г. М. Е. Ступак^а, М. Г. Уразалиев^а, В. В. Попов^{а, *}

^аИнститут физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, ул. С. Ковалевской, 18, Екатеринбург, 620108 Россия

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

Поступила в редакцию 24.05.2023 г.

После доработки 20.06.2023 г.

Принята к публикации 22.06.2023 г.

Методами компьютерного моделирования исследованы симметричная и три асимметричные границы зерен наклона $\Sigma 5 \langle 001 \rangle$ в ниобии. Методом молекулярно-статического моделирования рассчитаны структура и энергии рассматриваемых границ, а также энергии образования точечных дефектов в них. Проанализированы зависимости энергий образования точечных дефектов от расстояния от плоскости границы зерна. Методом молекулярной динамики рассчитаны коэффициенты зернограничной самодиффузии для рассматриваемых границ.

Ключевые слова: границы зерен, молекулярная статика, молекулярная динамика, точечные дефекты, зернограничная диффузия

DOI: 10.31857/S0015323023600879, EDN: PIKNUR

ВВЕДЕНИЕ

Структура и энергия границ зерен (ГЗ), энергия образования в них точечных дефектов и скорость зернограничной диффузии существенно влияют на многие свойства поликристаллических материалов [1]. Поскольку прямое экспериментальное определение этих параметров связано со значительными трудностями, широкое распространение получило атомистическое моделирование структуры и свойств ГЗ. Для ниобия соответствующих исследований относительно немного. Так, в работе [2] было выполнено моделирование структуры и энергии границ кручения $\langle 110 \rangle$, в работах [3, 4] были рассчитаны структуры и энергии нескольких симметричных и асимметричных границ наклона $\langle 100 \rangle$, а в работах [5, 6] рассчитаны структуры и энергии границ наклона $\langle 110 \rangle$. Однако очень мало исследований, в которых выполнены расчеты параметров зернограничной самодиффузии в ниобии. Лишь в нашей недавней работе были выполнены расчеты зернограничной самодиффузии в Nb для нескольких симметричных ГЗ $\langle 110 \rangle$ [6], а в работе [7] выполнен расчет для границ зерен обшего типа.

В настоящей работе была поставлена задача рассчитать структуру и энергию симметричной и асимметричных ГЗ наклона $\Sigma 5 \langle 001 \rangle$ с углом разо-

риентации 36.86° , оценить энергии образования точечных дефектов в них и рассчитать параметры зернограничной диффузии.

МЕТОДОЛОГИЯ АТОМИСТИЧЕСКОГО
МОДЕЛИРОВАНИЯ

В настоящей работе были рассмотрены симметричная ГЗ наклона $\Sigma 5 \langle 001 \rangle$ (310) с углом разориентации 36.86° и три асимметричные ГЗ $\Sigma 5 \langle 001 \rangle$, имеющие такой же угол разориентации, и различные углы отклонения от симметричной ГЗ: 18.43° , 30.96° , 32.47° . В отличие от симметричной границы, плоскость границы зерна асимметричной ГЗ не является одинаковой кристаллографической плоскостью для обоих зерен. В случае асимметричной ГЗ на границе сопрягаются разные кристаллографические плоскости соседних кристаллитов. Термин “угол отклонения Φ ” используется для определения относительного поворота плоскости границы зерна вокруг оси наклона по отношению к симметричной границе (310). Углы отклонения были выбраны таким образом, чтобы узлы на плоскости ГЗ принадлежали обоим кристаллитам.

Схема изменения угла отклонения от симметричной ГЗ наклона $\Sigma 5 \langle 001 \rangle$ (310) к асимметричной ГЗ наклона с углом отклонения Φ приведена на рис.

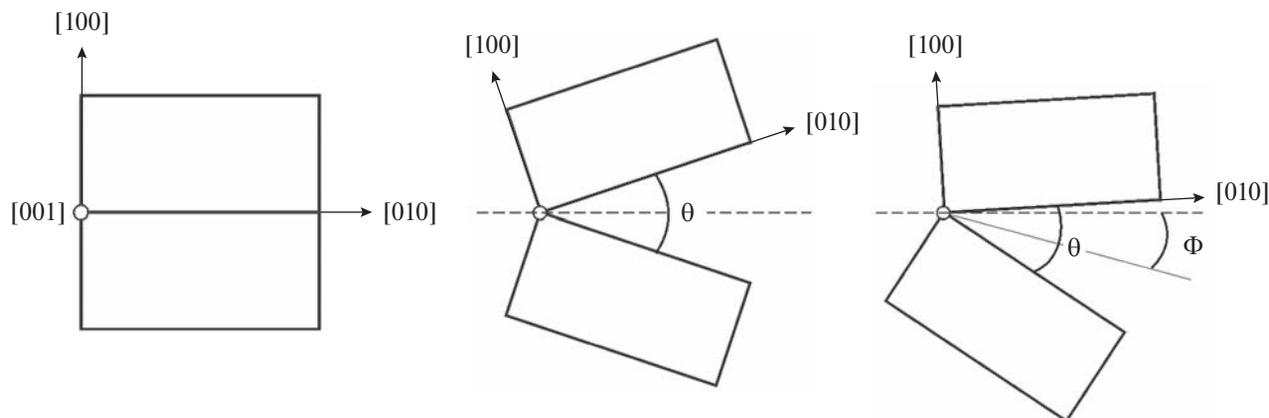


Рис. 1. Схема изменения угла отклонения от симметричной ГЗ наклона $\Sigma 5[001](310)$ к асимметричной ГЗ наклона с углом отклонения Φ : а – идеальный монокристалл; б – симметричная ГЗ наклона $\Sigma 5 [001](310)$; в – асимметричная ГЗ наклона, полученная поворотом обеих кристаллических решеток на рис. 1(б) на угол Φ по часовой стрелке относительно пунктирной линии.

1. На этой схеме плоскость границы зерен представлена длинной штриховой горизонтальной линией, а решетка показана прямоугольником для плоскости (001) элементарной ячейки ОЦК-кристаллической решетки. Рисунок 1а представляет собой идеальный монокристалл, поскольку кристаллические решетки в обеих областях идентичны.

На рис. 1б показана симметричная граница наклона $\Sigma 5 [001](310)$, $\Phi = 0^\circ$, полученная путем поворота решеток (рис. 1а) на $+18.43^\circ$ и -18.43° (т.е. угол разориентации $\theta = 36.86^\circ$) вокруг оси наклона (001).

На рис. 1в показана асимметричная граница наклона, полученная поворотом обеих кристаллических решеток на рис. 1б на угол Φ по часовой стрелке. При этом угол разориентации $\theta = 36.86^\circ$ не меняется.

В табл. 1 для исследуемых ГЗ приведены углы отклонения Φ , плоскости двух соседних зерен, отвечающих ГЗ, размеры блоков моделирования,

число атомов в них, энергии ГЗ и минимальные энергии образования точечных дефектов в них.

Для расчета структуры и энергии ГЗ и энергий образования точечных дефектов в них был использован метод молекулярной статики (МС). В данном методе по умолчанию отсутствует движение, поэтому считается, что отсутствие температуры соответствует условному 0 К. Расчеты проводили с использованием программы LAMMPS [8].

Моделирование проводили для расчетных ячеек, состоящих из двух зерен с периодическими граничными условиями Борна–Кармана по всем трем направлениям. Схема построения как симметричной, так и асимметричных границ была аналогична использованной в работах [9, 10]. В ячейке моделирования имеется две кристаллографически идентичных ГЗ: одна периодическая ГЗ в верхней и нижней границах ячейки моделирования (GZ_1) и одна ГЗ в середине ячейки (GZ_2) (рис. 2).

Таблица 1. Параметры структуры исследуемых ГЗ, энергия ($E_{ГЗ}$), размер блока моделирования, количество атомов, и минимальная энергия образования вакансий (E_{vac}) и собственных атомов внедрений (E_{int}) в ГЗ

Угол отклонения	Плоскости ГЗ	Размеры блока моделирования			Количество атомов в блоке моделирования	$E_{ГЗ}$, мДж/м ²	E_{vac} , эВ	E_{int} , эВ
		L_x , Å	L_y , Å	L_z , Å				
0°	(310)	167.29	125.47	33.06	38400	1137	1.41	0.91
18.43°	(430) ₁ /(100) ₂	165.85	129.37	33.17	39400	1432	0.23	0.37
30.96°	(670) ₁ /(920) ₂	182.99	121.99	33.08	40800	1469	0.50	0.41
32.47°	(13.16.0) ₁ /(410) ₂	136.46	136.47	33.10	34080	1513	0.26	-3.41

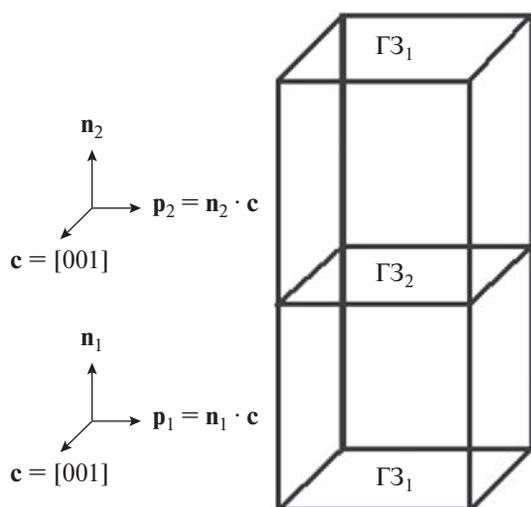


Рис. 2. Схема трехмерной периодической бикристаллической расчетной ячейки с обозначением ориентации кристалла: \mathbf{c} — ось наклона, \mathbf{n}_1 и \mathbf{n}_2 нормали к плоскости границы.

Компоненты направляющих векторов блоков определяли следующим образом. Один из векторов — это нормаль к плоскости границы зерна. Два других вектора лежат в плоскости границы, один из которых — это вектор оси наклона \mathbf{c} , другой получается векторным произведением векторов нормали и оси наклона.

При расчетах использовали потенциал погруженного атома Финнеса–Синклера [11]. Выбор этого потенциала обусловлен тем, что потенциал предназначен для исследования при относительно высоких температурах (1600–2200 К), при которых и исследована самодиффузия.

В качестве визуализатора для анализа структур использована программа OVITO [12].

Структуру и энергию ГЗ для каждой взаимной ориентировки блоков получали для различных начальных конфигураций в результате поиска локального минимума энергии методом сопряженных градиентов [13]. В дальнейшем анализировали структуру, соответствующую глобальному минимуму энергии.

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

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

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.

В работе были рассчитаны энергии образования точечных дефектов в разных позициях в исследуемых ГЗ и на разном расстоянии от плоскости границы.

Энергию образования точечных дефектов рассчитывали по формуле:

$$E_{\text{pd}} = E_f - (N_0 \pm 1) \frac{E_i}{N_0}. \quad (2)$$

Здесь E_i — начальная энергия системы, до удаления или добавления атома, N_0 — общее число атомов, E_f — энергия системы после удаления или добавления атома. Член E_i/N_0 — энергия, приходящаяся на один атом.

Энергия образования вакансии определяется как энергия, необходимая для удаления атома из позиции в ГЗ и созданию его бесконечно далеко от ГЗ. Это соответствует знаку минус в формуле (2).

Энергия образования собственных атомов внедрения определяется как энергия создания атома в позиции внедрения в ГЗ и удаления его в решетке бесконечно далеко от ГЗ. Это соответствует знаку плюс в формуле (2).

Расчет коэффициента диффузии выполнен методом прямой молекулярной динамики с использованием изотермо-изобарического ансамбля (NPT). Изменение температуры контролировалось при помощи термостата Ноэе–Гувера [14, 15].

В случае МД-моделирования при повышенных температурах может происходить миграция границ блока. Для предотвращения миграции использовали фиксированные условия на краях блока моделирования. Фиксированные условия достигали путем отключения термостата в атомах, находящихся в этой области (ширина области порядка 0.5 нм). Аналогичный подход использован в работах [5, 16].

Коэффициент самодиффузии рассчитывали в течение 10 нс на основании среднего квадратичного смещения в диапазоне температур от 1600 до 2000 К. Предварительно границу отжигали в течение 0.5 нс.

Самодиффузию рассчитывали по формуле:

$$D_{\text{eff}} = \langle r_i^2(t) \rangle / 6t, \quad (3)$$

где $\langle r_i^2(t) \rangle$ — среднее квадратичное смещений атомов за время t .

При повышенных температурах ГЗ имеет тенденцию мигрировать, в частности, для асимметричных ГЗ данный эффект наблюдали в работе [17]. Данное явление создает трудности при расчете коэффициента зернограницной самодиффузии.

Чтобы обойти эту трудность, использовали следующий подход. Сначала рассчитывали эф-

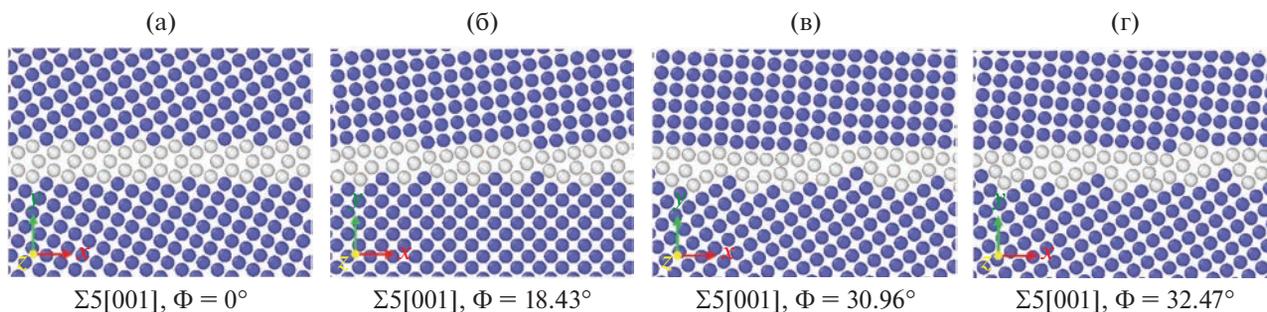


Рис. 3. Структура ГЗ, построенная с использованием модификатора CNA [21] в программе OVITO. Синим цветом отмечены атомы, соответствующие структуре ОЦК, белым – атомы, отклоняющиеся от регулярной решетки, т.е. граница зерна.

эффективный коэффициент самодиффузии D_{eff} для всего блока моделирования, а затем вычисляли значение коэффициента зернограницной самодиффузии, используя уравнение Харта для параллельного расположения ГЗ в направлении диффузии [18]:

$$D_{\text{eff}} = gD_{\text{gb}} + (1 - g)D_V, \quad (4)$$

где D_V – коэффициент объемной самодиффузии, g – объемная доля ГЗ.

Используя это выражение, можно рассчитать коэффициент зернограницной самодиффузии, используя рассчитанные значения эффективного коэффициента самодиффузии. Для этого необходимо знать объемную долю границ зерен и коэффициент объемной диффузии.

Объемная доля границы зерна в бикристалле принималась равной отношению диффузионной ширины границы зерна к ширине блока моделирования. При этом диффузионную ширину ГЗ, следуя работе [19], полагали равной 0.5 нм. Коэффициент объемной самодиффузии в ниобии взят из работы [20]:

$$D_V = (3.84_{-0.78}^{+0.98}) \times 10^{-6} \times \exp\left[-\frac{256.13.3 \text{ кДж/моль}}{RT}\right] \text{ м}^2/\text{с}. \quad (5)$$

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Структуры ГЗ, исследованные в настоящей работе, показаны на рис. 3. Структуры границ видны перпендикулярно оси наклона. Все структуры релаксированные. Для визуализации использовали встроенный в программу OVITO модификатор CNA [21] (алгоритм вычисления локального окружения) с применением интервального анализа общих соседей [22]. Эта процедура позволяет показать, где имеется регулярная ОЦК-кристаллическая решетка, и где имеются отклонения от нее. Темные окружности обозначают позиции атомов в регулярной ОЦК-решетке, белые окружности –

позиции атомов в искаженных областях ГЗ. Рассчитанные значения энергии исследованных границ приведены в табл. 1.

Зависимость энергии ГЗ от угла отклонения Φ показана на рис. 4. Видно, что имеет место существенное различие энергий симметричной и асимметричных ГЗ, а энергии асимметричных ГЗ с различными углами разориентации отличаются мало. Показано, что энергии симметричных границ наклона ниже, чем асимметричных. Аналогичный эффект был отмечен в работе [4]. Это может быть связано с нерегулярной атомной конфигурацией для асимметричных ГЗ наклона.

Для сравнения нами был проведен расчет энергии симметричной и асимметричной ГЗ, используя потенциал [23]. Энергии ГЗ получилось ниже, чем при использовании потенциала [11] и ниже, чем в работах [3, 4], но имеют аналогичную зависимость энергии ГЗ от угла отклонения.

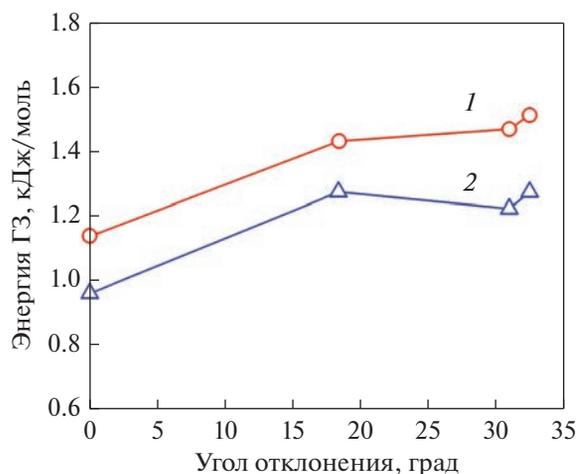


Рис. 4. Зависимость энергии границы зерен $\Sigma 5(310)$ с углом разориентации $\theta = 36.86^\circ$ от угла отклонения, рассчитанные с использованием потенциалов [11] (1) и [23] (2).

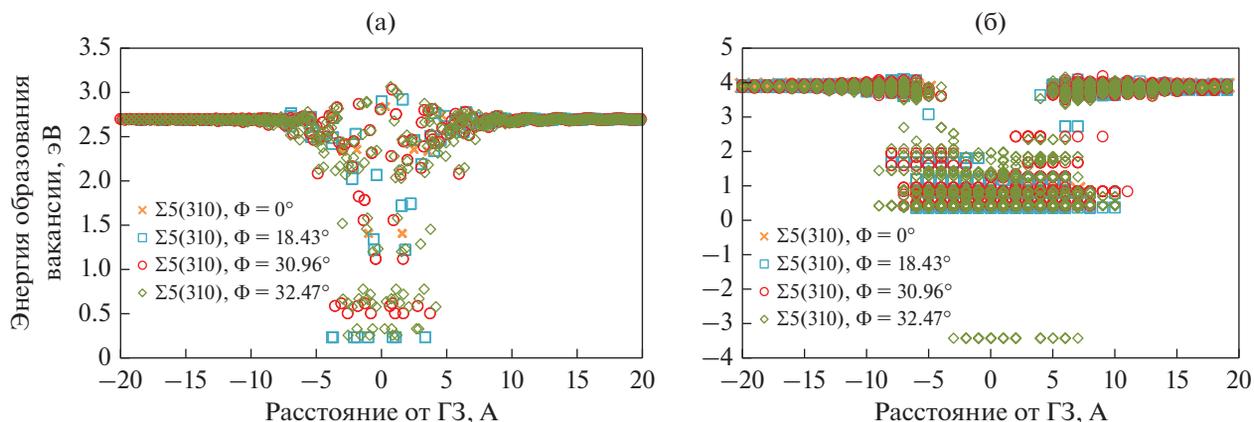


Рис. 5. Зависимости энергий образования вакансий (а) и внедренных атомов (б) от расстояния от плоскости ГЗ.

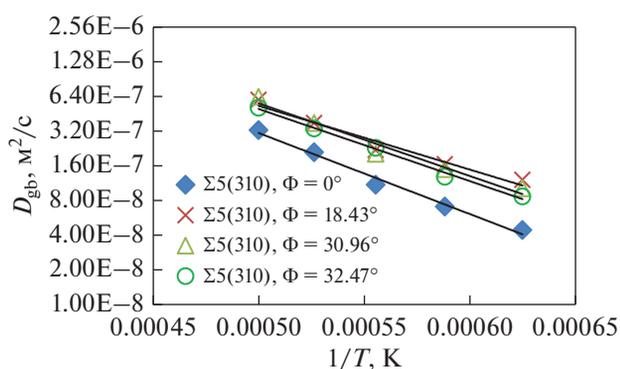


Рис. 6. Расчетные температурные зависимости коэффициентов самодиффузии по границам зерен.

Нами были рассчитаны энергии образования точечных дефектов в исследуемых ГЗ. Минимальные энергии образования вакансий и внедренных атомов в рассмотренных ГЗ приведены в табл. 1, а на рис. 5 показаны зависимости энергий образования вакансий и внедренных атомов в зависимости от расстояния от плоскости ГЗ.

Как видно из рис. 5, ширина приграничной области, в которой энергия образования точечных дефектов существенно меньше, чем в объеме, составляет ~ 10 Å для вакансий, и ~ 20 Å для атомов

Таблица 2. Энтальпия активации зернограничной диффузии для симметричной и асимметричных ГЗ $\Sigma 5 \langle 001 \rangle$

Угол отклонения	Плоскости ГЗ	$\Delta H_{ГЗ}$, эВ
0°	(310)	1.40
18.43°	(430) ₁ /(100) ₂	1.10
30.96°	(670) ₁ /(920) ₂	1.25
32.47°	(13.16.0) ₁ /(410) ₂	1.25

внедрения. Обращает на себя внимание, что для ГЗ с углом отклонения 32.47° энергия образования внедренных атомов в ГЗ отрицательна. Подобную ситуацию наблюдали в работе [24] для точечных дефектов в асимметричных ГЗ в α -Fe. Отрицательная энергия дефекта означает, что данная ГЗ отклонилась от своего равновесного состояния, но имеет более выраженную способность к поглощению дефектов, чем в равновесном состоянии.

Сравнение минимальных энергий образования точечных дефектов в симметричной и асимметричных ГЗ показывает, что энергии образования как вакансий, так и внедренных атомов для асимметричных ГЗ существенно меньше, чем для симметричной границы.

В работе были выполнены расчеты зернограничной самодиффузии для всех рассмотренных ГЗ. Рассчитанные температурные зависимости коэффициентов зернограничной самодиффузии в Nb приведены на рис. 6, а в табл. 2 приведены значения энтальпии активации. Видно, что значения коэффициента зернограничной самодиффузии для асимметричных ГЗ заметно больше, а энтальпия активации меньше, чем для симметричной ГЗ.

Более высокие значения коэффициента зернограничной самодиффузии и более низкие значения энергии активации для асимметричных ГЗ показывают, что диффузия по ним протекает легче. Это объясняется их менее совершенной структурой, что также отмечено для асимметричных границ $\Sigma 5$ в работе [25].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Методом молекулярно-статического моделирования рассчитаны структуры и энергии симметричной ГЗ наклона $\Sigma 5 \langle 001 \rangle (310)$ с углом разориентации 36.86° и трех асимметричных ГЗ $\Sigma 5 \langle 001 \rangle$, имеющих такой же угол разориентации, и

различные углы отклонения от симметричной ГЗ: 18.43° , 30.96° , 32.47° в ниобии. Показано, что асимметричные ГЗ имеют менее совершенную структуру и большие энергии по сравнению с симметричной границей.

Проанализированы зависимости энергий образования вакансий и внедренных атомов от расстояния от плоскости границы. Из анализа данных МС-моделирования следует, что ширина приграничной области, для которой энергии образования вакансий и внедренных атомов существенно меньше, чем в объеме, составляет $\sim 10 \text{ \AA}$ для вакансий и $\sim 20 \text{ \AA}$ для внедренных атомов.

Показано, что минимальные энергии образования точечных дефектов для асимметричных ГЗ существенно меньше, чем для симметричной границы.

Определены коэффициенты зернограничной самодиффузии для исследованных ГЗ. Показано, что значения коэффициента зернограничной самодиффузии для асимметричных ГЗ заметно больше, а энтальпий активации меньше, чем для симметричной ГЗ, что, по-видимому, обусловлено менее совершенной структурой асимметричных ГЗ.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 21-13-00063, <https://rscf.ru/project/21-13-00063/>, ИФМ УрО РАН).

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

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Sutton A.P., Balluffi R.W.* Interfaces in Crystalline Materials. Clarendon Press, Oxford, 1995. 819 p.
2. *Liu Z.-H., Feng Y.-X., Shang J.-X.* Characterizing twist grain boundaries in BCC Nb by molecular simulation: Structure and shear deformation // *Appl. Surface Sci.* 2016. V. 370. P. 19–24. <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2016.02.097>
3. *Singh D., Parashar A.* Effect of symmetric and asymmetric tilt grain boundaries on the tensile behaviour of bcc-Niobium // *Comp. Mater. Sci.* 2018. V. 143. P. 126–132. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2017.11.005>
4. *Singh D., Sharma P., Parashar A.* Atomistic simulations to study point defect dynamics in bi-crystalline niobium // *Mater. Chem. Phys.* 2020. V. 255. P. 123628. <https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2020.123628>
5. *Singh D., Parashar A.A.* Comparison between Σ Asymmetrical Tilt Grain Boundary Energies in Niobium Obtained Analytically and through Molecular Dynamics Based Simulations // *Mater. Sci. Forum Submitted*. 2020. V. 998. P. 179–184. <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/MSF.998.179>
6. *Popov V.V., Stupak M.E., Urazaliev M.G.* Atomistic Simulation of Grain Boundaries in Niobium: Structure, Energy, Point Defects and Grain-Boundary Self-Diffusion // *J. Phase Equilib. Diffus.* 2022. V. 43. P. 401–408. <https://doi.org/10.1007/s11669-022-00981-6>
7. *Lipnitskii A.G., Nelasov I.V., Golosov E.V., Kolobov Y.R., Maradudin D.N.* A molecular-dynamics simulation of grain-boundary diffusion of niobium and experimental investigation of its recrystallization in a niobium-copper system // *Russian Phys. J.* 2013. V. 56(3). P. 330–337. <https://doi.org/10.1007/s11182-013-0036-2>
8. *Plimton S.* Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics // *J. Comp. Phys.* 1995. V. 117. P. 1–19. <https://doi.org/10.1006/jcph.1995.1039>
9. *Tschopp M.A., McDowell D.L.* Structures and energies of Σ 3 asymmetric tilt grain boundaries in copper and aluminium // *Phil. Mag.* 2007. V. 87(22). P. 3147–3173. <https://doi.org/10.1080/14786430701255895>
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. <https://doi.org/10.1134/S0031918X21070139>
11. *Zhang Y., Ashcraft R., Mendeleev M.I., Wang C.Z., Keltson K.F.* Experimental and molecular dynamics simulation study of structure of liquid and amorphous $\text{Ni}_{62}\text{Nb}_{38}$ alloy // *J. Chem. Phys.* 2016. V. 145(20). P. 204505. <https://doi.org/10.1063/1.4968212>
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. <https://doi.org/10.1088/0965-0393/18/1/015012>
13. *Polyak B.T.* The conjugate gradient method in extremal problems // *USSR Comput. Math. Math. Phys.* 1969. V. 9(4). P. 94–112. [https://doi.org/10.1016/0041-5553\(69\)90035-4](https://doi.org/10.1016/0041-5553(69)90035-4)
14. *Nosé S.* A unified formulation of the constant temperature molecular dynamics methods // *J. Chem. Phys.* 1984. V. 81. P. 511. <https://doi.org/10.1063/1.447334>
15. *Hoover W.G., Holian B.L.* Kinetic moments method for the canonical ensemble distribution // *Phys. Lett. Sect. A Gen. Solid State Phys.* 1996. V. 211. P. 253–257. [https://doi.org/10.1016/0375-9601\(95\)00973-6](https://doi.org/10.1016/0375-9601(95)00973-6)
16. *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. <https://doi.org/10.1134/S1063783414070282>
17. *Mendeleev M.I., Zhang H., Srolovitz D.J.* Grain boundary self-diffusion in Ni: Effect of boundary inclination // *J. Mater. Res.* 2005. V. 20. No. 5. P. 1146–1153. <https://doi.org/10.1557/JMR.2005.0177>
18. *Hart E.W.* On the role of dislocations in bulk diffusion // *Acta Metal.* 1957. V. 5. Issue 10. P. 597. [https://doi.org/10.1016/0001-6160\(57\)90127-X](https://doi.org/10.1016/0001-6160(57)90127-X)
19. *Divinski S.V., Bokstein B.S.* Recent Advances and Unsolved Problems of Grain Boundary Diffusion // *Defect and Diffusion Forum* 2011. V. 309–310. P. 1–8. <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/DDF.309-310.1>

20. *Koppers M., Mishin Yu., Herzig Chr.* Diffusion of cobalt along stationary and moving grain boundaries in niobium // *Acta Metal, Mater.* 1994. V. 42. № 8. P. 2859–2868.
[https://doi.org/10.1016/0956-7151\(94\)90227-5](https://doi.org/10.1016/0956-7151(94)90227-5)
21. *Faken Daniel, Jónsson Hannes.* Systematic analysis of local atomic structure combined with 3D computer graphics // *Comp. Mater. Sci.* 1994. V. 2. Issue 2. P. 279–286.
[https://doi.org/10.1016/0927-0256\(94\)90109-0](https://doi.org/10.1016/0927-0256(94)90109-0)
22. *Larsen P.M.* Revisiting the common neighbour analysis and the centrosymmetry parameter, arXiv preprint arXiv:2003.08879 (2020).
<https://doi.org/10.48550/arXiv.2003.08879>
23. *Fellinger M.R., Park H., Wilkins J.W.* Force-matched embedded atom method potential for niobium // *Phys. Rev. B: Condens. Matter.* 2010. V. 81. P. 144119.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.81.144119>
24. *Tschopp M.A., Solanki K.N., Gao F., Sun X., Khaleel M.A., Horstemeyer M.F.* Probing grain boundary sink strength at the nanoscale: Energetics and length scales of vacancy and interstitial absorption by grain boundaries in α -Fe // *Phys. Rev.* 2012. V. 85. P. 064108.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.85.064108>
25. *Карькина Л.Е., Карькин И.Н., Горностырев Ю.Н.* Зернограничное проскальзывание по специальным асимметричным границам зерен в бикристаллах Al. Атомистическое молекулярно-динамическое моделирование // *ФММ.* 2021. Т. 122. № 11. С. 1187–1195.
<https://doi.org/10.31857/S0015323021110073>