

10,13

## Энергии образования и структуры точечных дефектов на межзеренных границах наклона в молибдене

© И.И. Новоселов<sup>1,2</sup>, А.Ю. Куксин<sup>1-3</sup>, А.В. Янилкин<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н.Л. Духова, Москва, Россия

<sup>2</sup> Московский физико-технический институт (Государственный университет), Долгопрудный, Россия

<sup>3</sup> Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия

E-mail: novoselov92ivan@gmail.com

(Поступила в Редакцию 14 октября 2013 г.)

В окончательной редакции 16 января 2014 г.)

Методами классической молекулярной динамики проведено исследование структуры и энергии образования вакансий и междоузлий на симметричных межзеренных границах (МЗГ) наклона в молибдене. Вычислена зависимость энергии образования таких границ от угла разориентации кристаллитов. Для наиболее устойчивых МЗГ установлены структуры дефектов, энергии их образования, механизмы диффузии.

Расчеты проведены на вычислительных кластерах ФГУП ВНИИА. Работа выполнена при финансовой поддержке по грантам РФФИ № 12-02-13504-офи\_м\_РА.

### 1. Введение

Повышение радиационной стойкости материалов является актуальной задачей, решение которой позволит продлить срок службы ядерных реакторов, увеличить степень выгорания ядерных топлив.

При облучении металлов и сплавов образуются дефекты кристаллической решетки: вакансии и междоузлия. Оба типа дефектов имеют тенденцию образовывать скопления: вакансии образуют поры, междоузлия — дислокационные петли. Считается, что образование таких скоплений играет значительную роль в процессах радиационного старения материалов.

Облучение наноматериалов, имеющих слоистую структуру, ионами гелия [1] свидетельствует о том, что введение в систему границ раздела, служащих стоками для точечных дефектов, способствует увеличению радиационной стойкости материалов: уменьшаются размеры пор, ослабляются эффекты охрупчивания и распухания.

Аналогичные результаты получены в экспериментах по облучению молибденовых фольг ионами Кг[2] и нейтронами [3]. По мере набора дозы облучения наблюдается как образование новых, так и рост уже имеющихся скоплений радиационных дефектов, причем средний размер образующихся кластеров меньше в более тонких пленках.

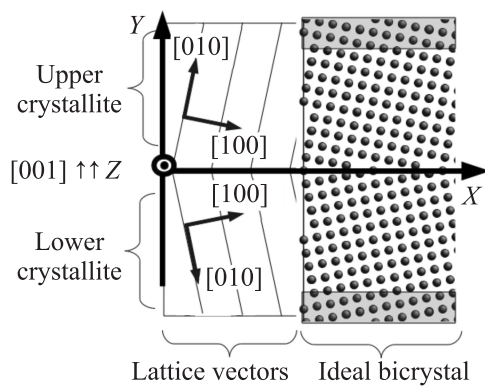
Согласно [2,4], межзеренная граница (МЗГ) наряду со свободной поверхностью и поверхностью раздела фаз может служить стоком радиационно-индуцированных дефектов. В свою очередь, поток дефектов на границы зерен является одним из механизмов радиационно-индуцированной ползучести [4,5]. Таким образом, введение в систему межзеренных границ способно уменьшить распухание материала, однако может привести и к увеличению скорости ползучести.

Диффузия дефектов кристаллической решетки вдоль межзеренных границ оказывает существенное влияние на макроскопические характеристики материалов также и в отсутствие радиационного облучения. Так, согласно модели, приведенной в [5], скорость термоактивированной ползучести определяется коэффициентом самодиффузии вдоль МЗГ.

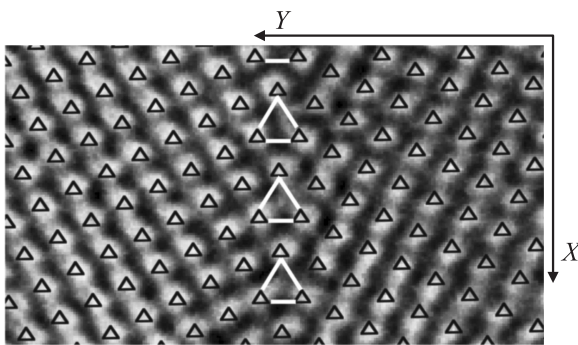
Для детального описания процессов радиационного старения материалов и термоактивированной ползучести необходимо располагать данными об энергии образования вакансий и междоузлий на границах зерен и механизмах их диффузии. Целью данной работы является определение этих характеристик. Полученные результаты могут быть использованы в качестве входных параметров для моделей, описывающих радиационно-индуцированную деградацию конструкционных материалов и металлических ядерных топлив методами кинетической теории (Rate Theory) или кинетического Монте-Карло (Kinetic Monte Carlo).

### 2. Описание модели

Исследование механизмов эволюции точечных радиационных дефектов на межзеренной границе проводится в рамках метода классической молекулярной динамики на примере бикристалла молибдена. Для описания межатомного взаимодействия используется многочастичный потенциал погруженного атома (Embedded Atom Method potential) [6,7]. Его параметризация обеспечивает количественное согласие с широким набором *ab initio* расчетов и экспериментальных данных, включая равновесную постоянную решетки, уравнение состояния, модули упругости, энергии образования точечных



**Рис. 1.** Схема расчетной ячейки. Закрепленные концы кристаллитов выделены затемненными прямоугольниками.



**Рис. 2.** Сопоставление экспериментальной и расчетной структуры МЗГ. На заднем плане представлено HRTEM изображение межзеренной границы  $\Sigma 5(310)$  из работы [11], светлые пятна — наблюдаемые позиции атомов. Черные треугольники соответствуют расчетным позициям атомов. Большими белыми треугольниками обозначена граница зерен.

дефектов. Молекулярно-динамические расчеты проведены с помощью пакета LAMMPS [8].

На подготовительном этапе работы создавалась модель бикристалла с межзеренной границей заданной структуры. Впоследствии на полученную МЗГ помещались дефекты и отслеживалась дальнейшая эволюция системы. Процесс создания межзеренной границы состоит из нескольких стадий: задание координат атомов, соответствующих зернам с различной ориентацией кристаллографических направлений; удаление близлежащих атомов; релаксация системы к состоянию термодинамического равновесия при заданной температуре и давлении.

Схема расчетной ячейки представлена на рис. 1. Верхнюю часть занимает один из кристаллитов, нижнюю — другой. Симметричная межзеренная граница наклона создавалась поворотом кристаллитов относительно кристаллографического направления  $[001]$  на одинаковые углы в противоположные направления, аналогичные методы моделирования МЗГ использованы в [9] и [10]. Слева на рис. 1 представлены векторы кристаллографических направлений, справа — схема положений атомов в идеальном бикристалле.

При проведении расчетов использовались периодические граничные условия (ПГУ) вдоль осей  $X$  и  $Z$  (рис. 1). ПГУ вдоль оси  $Y$  не использовались, поскольку в этом случае расчетная ячейка содержала бы две межзеренные границы. Что осложнило бы проведение расчетов взаимодействием между границами и их термоактивационной миграцией. Оба эффекта ослабевают при увеличении размеров ячейки в направлении, нормальном к плоскостям границы (ось  $Y$ ), однако при этом существенно возрастают затраты вычислительных ресурсов.

Для создания расчетной ячейки, содержащей одну МЗГ, свободные концы кристаллитов были закреплены (аналогично [9,10]). Для этого рассчитано расстояние, на котором вклад в потенциальную энергию атомов кристаллита, обусловленный наличием межзеренной границы, пренебрежимо мал ( $\sim 1.5$  nm). На расстоянии, превышающем расчетное, было выбрано несколько слоев атомов, положение которых в процессе расчета было фиксировано, они отмечены затемненными прямоугольниками на рис. 1.

Закрепление свободных концов препятствует смещению кристаллитов, а вследствие эффекта сопряжения [10] подавляется и миграция межзеренной границы.

Таким образом, используемая модель позволяет без дополнительных затрат вычислительных ресурсов воспроизводить поведение межзеренной границы в бикристалле большого размера.

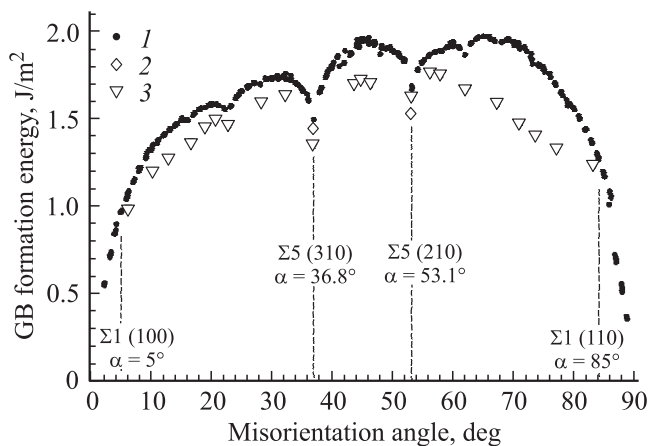
После разориентации кристаллитов на образовавшейся границе зерен могут присутствовать близлежащие атомы, которые необходимо удалить для получения равновесных структур МЗГ. Для верификации критериев удаления атомов, было проведено сопоставление расчетной структуры МЗГ с экспериментальными данными [11]. Для этого на HRTEM<sup>1</sup> изображение границы  $\Sigma 5(310)$  (проекция вдоль  $[001]$ ) нанесены позиции атомов, соответствующие расчетной структуре бикристалла. Результат сопоставления представлен на рис. 2. Наблюдаемое совпадение расчетной и экспериментальной структур свидетельствует о корректности используемых параметров удаления атомов и применимости предложенной модели.

После задания атомной структуры идеального бикристалла, производилась его релаксация к заданной температуре и близким к нулю компонентам тензора напряжений.

### 3. Зависимость энергии образования МЗГ от угла разориентации кристаллитов

На основании результатов серии предварительных расчетов, сделано предположение, что активность и преобладающие механизмы зереннограницной диффузии

<sup>1</sup> HRTEM — электронная просвечивающая микроскопия высокого разрешения.



**Рис. 3.** Зависимость энергии образования межзеренной границы от угла разориентации кристаллитов. Серия точек 1 соответствует результатам, полученным в этой работе; серии 2 и 3 опубликованы в [13] и [14] соответственно.

зависят от угла разориентации кристаллитов. Высказанное предположение хорошо согласуется с данными для других металлов [12].

Таким образом, необходимо рассмотреть несколько МЗГ с различными углами разориентации кристаллитов. Причем, особый интерес представляют границы, имеющие меньшую энергию образования по сравнению с МЗГ сходной структуры, ввиду их большей устойчивости. Для определения таких границ вычислена энергия образования МЗГ как функция угла разориентации кристаллитов.

Расчет энергии образования границы проводился по формуле

$$E_{GB}^{\text{form}} = \frac{E - E_{\text{coh}}N}{S_{\text{bound}}}, \quad (1)$$

$E$  — суммарная энергия атомов в некоторой окрестности МЗГ после минимизации;  $E_{\text{coh}}$  — энергия когезии атомов в идеальном кристалле с данным периодом решетки, например  $E_{\text{coh}} = -6.93 \text{ eV}$  для периода  $3.15 \text{ \AA}$ ;  $N$  — число атомов в рассматриваемой области;  $S_{\text{bound}}$  — площадь МЗГ, в рамках данной модели — площадь поперечного сечения расчетной ячейки плоскостью  $y = 0$  (рис. 1).

Важно отметить, что, поскольку концы кристаллитов закреплены, то подставлять в формулу (1) энергию всей системы целиком было бы некорректно. Необходимо выделить слой атомов, симметричный относительно плоскости границы таким образом, чтобы энергия образования МЗГ, вычисляемая по формуле (1), не зависела от толщины слоя. Таким образом, в формулу (1) необходимо подставлять суммарную энергию и число атомов в указанном слое.

Результаты расчета зависимости представлены на рис. 3 (серия 1). На графике присутствуют выраженные локальные минимумы, соответствующие наиболее устойчивым границам. Пунктиром с подписями отме-

чены межзеренные границы  $\Sigma 1(100)$ ,  $\Sigma 5(310)$ ,  $\Sigma 5(210)$  и  $\Sigma 1(110)$ , отобранные для последующего анализа структур дефектов и механизмов диффузии.

Также на рис. 3 пустыми символами (сериями точек 2 и 3) нанесены результаты расчетов других авторов ([13] и [14] соответственно). Наблюдается качественное согласие представленных зависимостей, что подтверждает правильность проведенных расчетов. Совпадение углов разориентации и близкие значения энергий образования границы  $\Sigma 5(310)$  и  $\Sigma 5(210)$ , полученные при использовании различных потенциалов межчастичного взаимодействия в [13] и в данной работе, свидетельствует о высокой устойчивости выбранных границ.

Различие энергий образования, полученных в [13] и в данной работе, по-видимому, вызвано использованием различных потенциалов межчастичного взаимодействия. В [13] использовался потенциал типа Finnis-Sinclair [15], предложенный Ackland et al [16]. Этот потенциал не воспроизводит иерархию энергий образования различных структур собственных межузельных атомов, полученную из *ab initio* расчетов [17]. Не воспроизводится также и сдвиг кристаллитов как целого (Rigid body shift) вдоль [001] для границы  $\Sigma 5(310)$ , наблюдаемый в эксперименте и *ab initio* расчетах [18].

Потенциал [6], используемый в данной работе, напротив, правильно воспроизводит иерархию энергий образования точечных дефектов. Для  $\Sigma 5(310)$  сдвиг кристаллитов воспроизводится на уровне 7% периода решетки, против экспериментально наблюдаемых 25%.

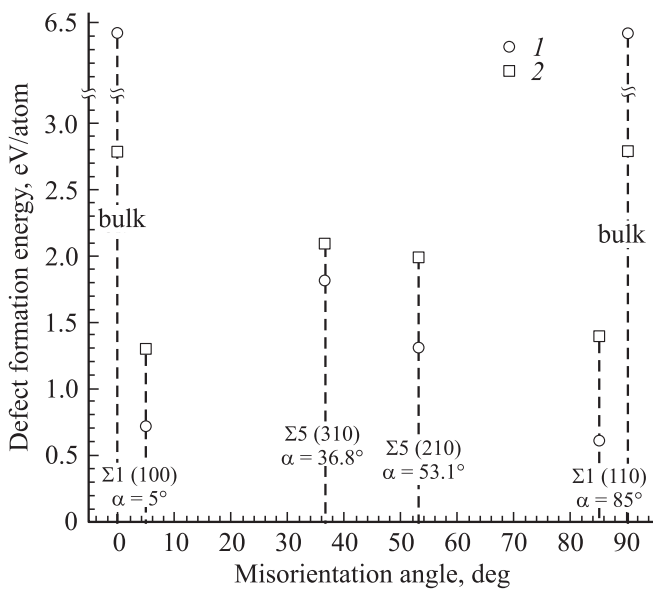
#### 4. Энергии образования дефектов на МЗГ

После выбора четырех исследуемых межзеренных границ (см. рис. 3), на каждой из них были рассчитаны энергии образования вакансии и междоузлия. Алгоритм расчета аналогичен рассмотренному для энергии образования МЗГ, за тем исключением, что после создания равновесного бикристалла на границу помещается дефект. Энергия образования дефекта вычислялась по формуле

$$E_{\text{def}}^{\text{form}} = E_{\text{id}}(N_{\text{id}}) - E_{\text{def}}(N_{\text{def}}) + (N_{\text{def}} - N_{\text{id}}) \cdot E_{\text{coh}},$$

$E_{\text{id}}(N_{\text{id}})$  — суммарная потенциальная энергия  $N_{\text{id}}$  атомов, находящихся в заранее определенной окрестности МЗГ (см. комментарий к формуле (1)) для системы без дополнительных дефектов. Слагаемое  $E_{\text{def}}(N_{\text{def}})$  — суммарная потенциальная энергия атомов, находящихся в той же окрестности МЗГ, но для системы, содержащей дефекты на границе, в этом случае, количество атомов в рассматриваемой области будет уже не  $N_{\text{id}}$ , а некоторое  $N_{\text{def}}$ . Член  $(N_{\text{def}} - N_{\text{id}})E_{\text{coh}}$  компенсирует изменение  $E_{\text{def}}$ , вызванное различием числа атомов в рассматриваемой области.

При вычислении по формуле (2) вместо  $E_{\text{coh}}$  подставлялась энергия когезии атома в идеальном кристалле



**Рис. 4.** Зависимость энергии образования дефектов на межзеренной границе от угла разориентации кристаллитов. 1, 2 — энергии образования междоузлий и вакансий соответственно.

(аналогично [12]). В этом случае неявно подразумевается, что возникновение лишнего (при образовании междоузлия, или недостающего — при образовании вакансии) атома на границе зерен сопряжено с уходом атома со свободной поверхности (для вакансии — выхода на свободную поверхность), при этом энергия самой поверхности не меняется.

Данное предположение справедливо в том случае, если можно пренебречь эффектами, возникающими при выходе МЗГ на поверхность образца, поскольку для атомов межзеренной границы, лежащих на свободной поверхности, энергия когезии может значительно отличаться от значений для идеального кристалла. Что справедливо для не слишком мелких поликристаллов, однако может не выполняться для образцов, спрессованных из частиц малого размера.

Результаты расчетов энергии образования точечных дефектов на МЗГ и в объеме кристалла представлены на рис. 4. Полученные значения могут быть использованы для определения равновесных концентраций дефектов на границе.

Следует обратить внимание, что разница энергий образования на границе и в объеме кристалла для междоузлий составляет примерно 4.5–6 eV, для вакансий 0.5–1.5 eV. Этот результат можно интерпретировать следующим образом: междоузлия имеют большую энергию связи с границей зерен, чем вакансии. Кроме того, согласно [4], разница энергий образования точечных дефектов на границе зерен и в объеме кристалла приводит к возникновению потока радиационных дефектов на границу зерен, который, в свою очередь, может служить одним из механизмов радиационно-индуцированной ползучести.

## 5. Структуры дефектов на МЗГ

После создания идеального бикристалла и удаления близлежащих атомов, на границу помещался дефект и проводилась релаксация системы. Дальнейший расчет молекулярно-динамической траектории позволяет определить механизмы диффузии и структуру дефектов на межзеренных границах.

Известно, что длина диффузионного скачка междоузлий  $\Delta_i$  в отличие от вакансий может существенно отличаться от радиуса первой координационной сферы. Значение  $\Delta_i$  определяется механизмом диффузии, который, в свою очередь, связан со структурой дефекта. Поэтому в рамках данной работы наибольший интерес представляют структуры дефектов и механизмы диффузии именно междоузельных атомов.

**5.1. Малоугловые границы.  $\Sigma 1(100)$ .**  $\Sigma 1(100)$  является малоугловой границей с углом разориентации кристаллитов около 5°. Проекция бикристалла на плоскость XY показана на рис. 5, а. Горизонтальными черными линиями показано положение плоскостей среза, представленного на рис. 5, b–d.

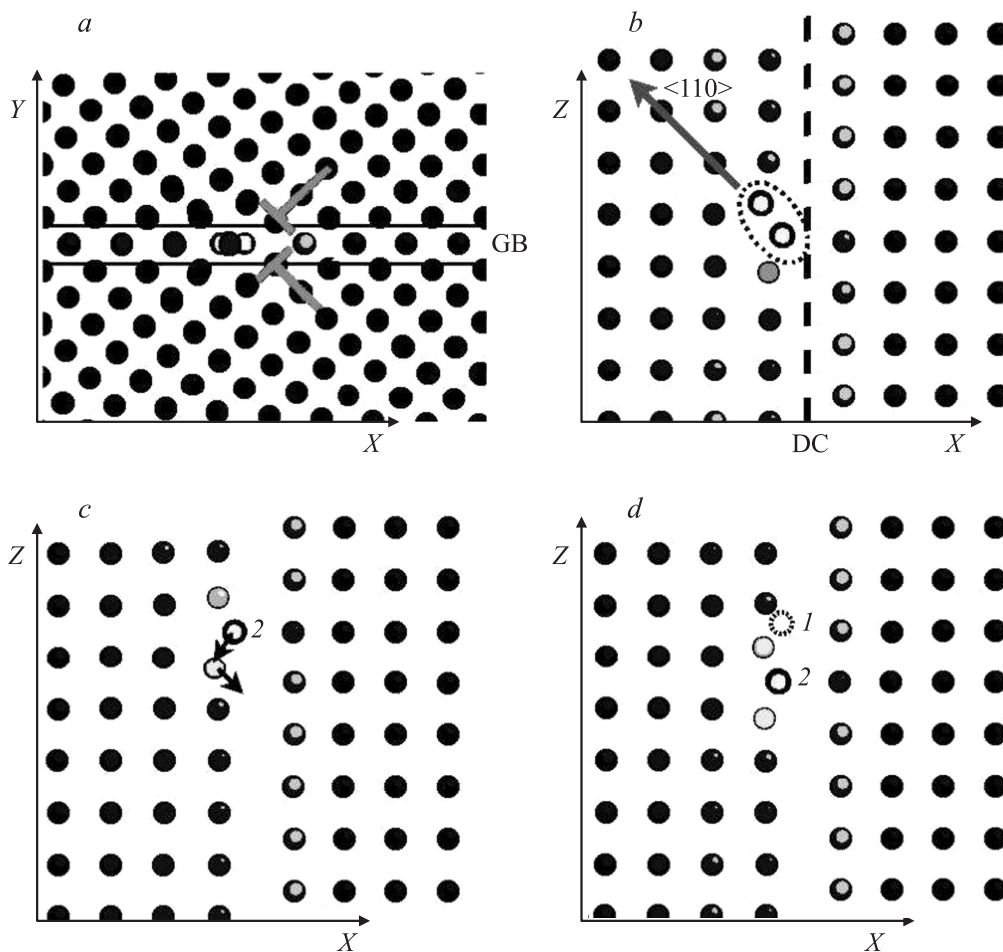
На рис. 5, b изображена структура дефекта до смещения — гантель, направленная вдоль  $\langle 110 \rangle$ . Атомы, образующие гантель, заключены в пунктирный овал. Смещению гантели предшествует перераспределение потенциальной энергии между атомами, образующими дефект, и их соседями. Это может трактоваться как поворот гантели на 90° либо как переход дефекта в симметричную конфигурацию. После поворота происходит сдвиг атомов в направлениях, показанных стрелками, что приводит к смещению гантели вдоль ядра дислокации. На рис. 5, d положение центрального атома дефекта до и после скачка отмечено 1 и 2 соответственно.

Важно подчеркнуть, что симметричная конфигурация дефекта, представленная на рис. 5, c и d, неустойчива и реализуется только во время скачка. Большую часть времени дефект имеет структуру, представленную на рис. 5, b.

**5.2. Высокоугловые границы.  $\Sigma 5(210)$  и  $\Sigma 5(310)$ .**  $\Sigma 5(310)$  и  $\Sigma 5(210)$  — высокоугловые МЗГ с углами разориентации кристаллитов около 37 и 51° соответственно.

На  $\Sigma 5(210)$  возможно образование двух типов дефектов: краудион [001] либо гантель [001] (рис. 6, b и c). В данном случае термин „краудион“ не совсем точно характеризует наблюдаемую структуру, поскольку центральный атом дефекта не лежит на одной прямой со своими ближайшими соседями. Однако, как и в краудионе, боковые атомы смещены симметрично относительно центрального, кроме того, механизм перемещения такого дефекта схож с краудионным механизмом диффузии в объеме кристалла.

Направления смещения атомов в плоскости YZ во время диффузионного скачка показаны на рис. 6, b–d стрелками, пунктиром показаны положения дефектов после скачка.



**Рис. 5.** Механизм диффузии на малоугловых границах:  $\Sigma 1(100)$ . *a* — проекция бикристалла на плоскость  $XY$ : GB — положение границы зерен; T-образные символы — краевые дислокации, образующие зернограницную; черные горизонтальные линии соответствуют плоскостям среза, представленного на частях *b–d*; *b* — структура дефекта; DC — ядро зернограницной дислокации; пунктирным овалом обведен дефект; *c* — положение атомов до скачка; *d* — положение атомов после скачка: 1 — центр дефекта до скачка. Светлые области на кружках отражают повышение потенциальной энергии атомов. Чем выше энергия, тем больше и светлее области. На частях *c* и *d* 2 — центральный атом дефекта.

Краудион, как правило, перемещается вдоль одной цепочки атомов, однако, возможен также и переход дефекта между соседними цепочками. В целом, прослеживается аналогия с диффузией краудиона в объеме кристалла, где при низких температурах наблюдаются одномерные смещения дефекта, а при повышении температуры увеличивается вероятность поворота краудиона, диффузия становится трехмерной. На границах зерен вместо поворота происходит переход краудиона в соседнюю цепочку атомов.

Механизм перемещения гантели отражен на рис. 6, *c*: исходная гантель (атомы 1, 2, образующие дефект, соединены пунктирной перемычкой) встраивается в кристаллит, вызывая смещение одного из атомов решетки. Если смещение происходит вдоль  $\langle 100 \rangle$ , то из кристаллита в область ядра дислокации вытесняется пара атомов (отмечены черными точками, соединенными пунктиром), что приводит к образованию смещенной гантели.

На межзеренной границе гантель и краудион могут легко переходить друг в друга (см. 6, *d*), аналогичное поведение наблюдается для гантели и краудиона  $\langle 111 \rangle$  в объеме кристалла. При встраивании гантели  $[100]$  в кристаллит, один из атомов решетки смещается вдоль  $\langle 111 \rangle$  в область ядра дислокации, образуя краудион  $[100]$  (положение центра краудиона показано пунктирной окружностью на рис. 6, *d*).

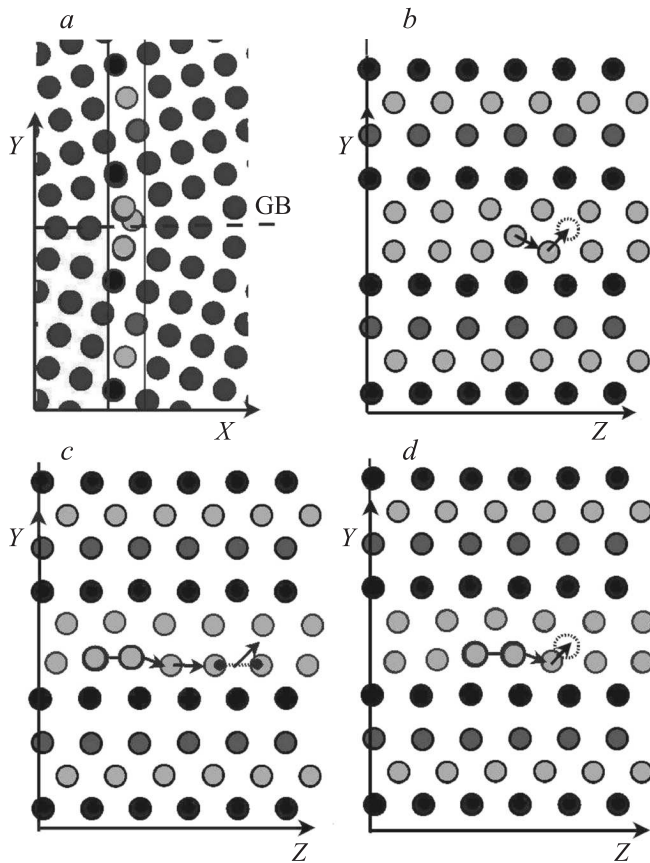
На  $\Sigma 5(310)$  добавочный атом не образует комплексов ни с одним из соседей. Механизм диффузии такого междоузлия аналогичен краудионному механизму на  $\Sigma 5(210)$ . Однако, в отличие от краудиона, междоузельный атом может с равной вероятностью встроиться в любую из соседних цепочек атомов, что приведет к вытеснению атома этой цепочки в ядро дислокации.

5.3. Границы, с углом разориентации близким к  $90^\circ$ . Угол разориентации кристаллитов для  $\Sigma 1(110)$  равен  $85^\circ$ . Положение дефекта до скачка приведено на рис. 7, *b*. Центр дефекта 1 находится в ядре

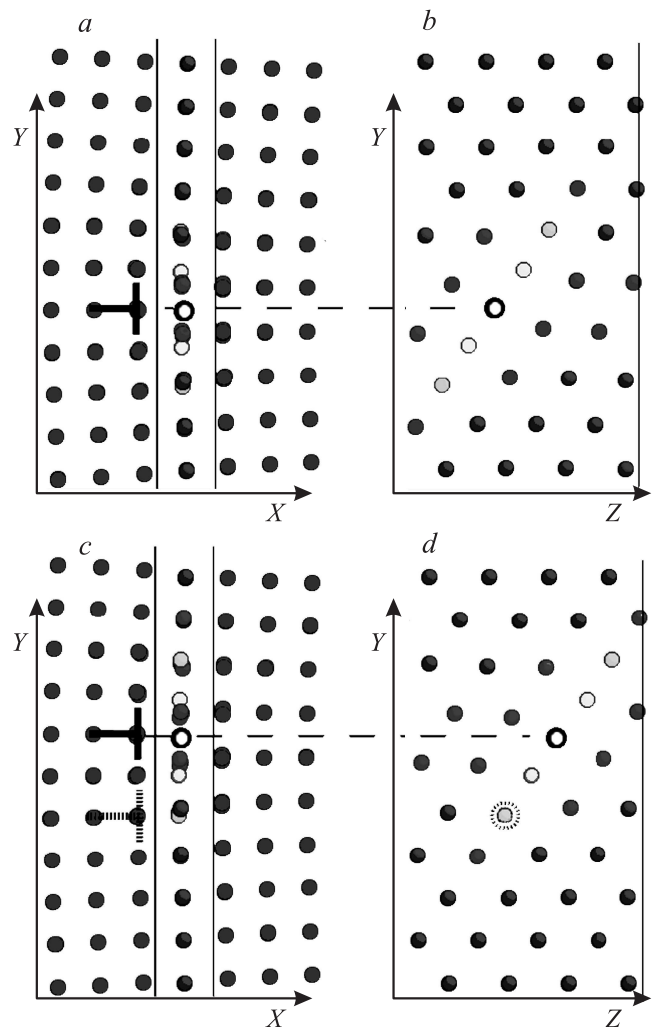
дислокации. Соответствие положения дислокации и краудииона отражено горизонтальным пунктиром. Смещение краудииона, как и в объеме кристалла, происходит вдоль  $\langle 111 \rangle$ , но сопровождается скольжением дислокации в плоскости (110) таким образом, чтобы центр дефекта все время находился в ядре дислокации.

На рис. 7, *c, d* представлен краудиион после скачка. Сплошной линией выделено ядро дислокации и центр краудииона, пунктиром обведены их положения до смещения.

Важно отметить, что в отличие от диффузии в объеме кристалла, на  $\Sigma 1(110)$  из-за связи краудииона с дислокацией одномерный характер диффузии сохраняется и при температурах около 1000 К. В свою очередь из-за связи дислокации с межзеренной границей, смещение комплекса краудиион-дислокация от МЗГ возможно только на небольшие расстояния. При увеличении размера кристаллитов вдоль оси  $Y$ , расстояние не меняется.



**Рис. 6.** Механизм диффузии краудииона на высокоугловых границах:  $\Sigma 5(210)$ . *a* — проекция бикристалла на плоскость  $XY$ , горизонтальной штриховой линией GB обозначено положение плоскости МЗГ, *b* — структура краудииона; *c* — структура гантели; атомы, образующие дефект до диффузионного скачка, соединены перемычкой, пунктирной линией соединены атомы, образующие гантель после скачка; *d* — переход гантели (атомы соединены перемычкой) в краудиион (показан пунктирной окружностью). На частях *b-d* оттенки серого цвета характеризуют координату атомов по оси  $X$  (только для атомов в срезе).



**Рис. 7.** Механизм диффузии на границах с углом разориентации, близким к  $90^\circ$ :  $\Sigma 1(110)$ . *a* и *c* — проекция бикристалла на плоскость  $XY$  до и после смещения дефекта, вертикальные сплошные линии — плоскости среза, показанного на частях *b* и *d*; Т-образные символы — положение ядер дислокаций (пунктирный символ на части *c* — положение дислокации до смещения дефекта). *b, d* — краудиион до и после скачка;  $I$  — центр дефекта; пунктирная окружность на части *d* — положение центра дефекта до скачка. Горизонтальные штриховые линии иллюстрируют соответствие положения центра дефекта и дислокации. На частях *b-d* атомы с большей потенциальной энергией обозначены более светлыми кружками.

Таким образом, при всех рассматриваемых температурах диффузия сводится к одномерным колебаниям краудииона вдоль  $\langle 111 \rangle$  в окрестности межзеренной границы, поэтому перенос вещества, равно как и рост среднеквадратичного отклонения атомов, на  $\Sigma 1(110)$  не наблюдался.

## 6. Заключение

В данной работе проведено исследование механизмов диффузии точечных дефектов вдоль межзеренных гра-

ниц в молибдене, из полученных результатов можно выделить несколько наиболее значимых.

1. Сравнение полученных значений энергий образования дефектов на МЗГ и в объеме кристалла свидетельствует о том, что междоузлия сильнее связываются с межзеренной границей, чем вакансии.

2. На границах  $\Sigma 1(100)$  с углом разориентации кристаллитов  $\alpha \approx 5^\circ$  междоузлие имеет структуру гантель  $\langle 110 \rangle$ , миграция дефекта происходит посредством его поворота вокруг того или иного атома гантели.

3. На  $\Sigma 5(210)$  ( $\alpha \approx 36^\circ$ ) наблюдается гантель  $[001]$  и краудион (с центральным атомом, вытесненным в область ядра дислокации). Механизм миграции таких дефектов схож с механизмом краудионной диффузии в объеме кристалла.

4. На  $\Sigma 5(210)$  ( $\alpha \approx 52^\circ$ ) междоузельный атом образует структуру, не похожую на дефекты в объеме кристалла. Однако, в качестве переходного состояния при миграции дефекта можно выделить гантель  $[001]$ .

5. При приближении  $\alpha$  к  $90^\circ$ , структуры дефекта на границе зерен и в объеме начинают совпадать. Так, при  $\alpha \approx 85^\circ$  ( $\Sigma 1(110)$ ), междоузлие имеет структуру краудиона  $\langle 111 \rangle$ , причем центр дефекта связан с ядром дислокации, что подавляет диффузию на границах данного типа.

## Список литературы

- [1] E.G. Fu, A. Misra, H. Wang, L. Shao, X. Zhang. *J. Nucl. Mater.* **407**, 178 (2010).
- [2] M. Lia, M.A. Kirk, P.M. Baldob, D. Xu, B.D. Wirth. *Phil. Mag.* **92**, 2048 (2012).
- [3] M. Li, M. Eldrup, T.S. Byun, N. Hashimoto, L.L. Snead, S.J. Zinkle. *J. Nucl. Mater.* **376**, 11 (2008).
- [4] K. Tai, R.S. Averback, P. Bellon, Y. Ashkenazy, B. Stumphy. *J. Nucl. Mater.* **422**, 8 (2012).
- [5] R.L. Coble. *J. Appl. Phys.* **34**, 1679 (1963).
- [6] S.V. Starikov, Z. Insepov, J. Rest, A.Yu. Kuksin, G.E. Norman, V.V. Stegailov, A.V. Yanilkin. *Phys. Rev. B.* **84**, 104 109 (2011).
- [7] M.S. Daw, S.M. Foiles, M.I. Baskes. *Mater. Sci. Rep.* **9**, 251 (1992).
- [8] S.J. Plimpton. *J. Comp. Phys.* **117**, 1 (1995).
- [9] J. Wang, I.J. Beyerlein. *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.* **20**, 024 002 (2012).
- [10] J.W. Cahl, Y. Mishin, A. Suzuki. *Acta Mater.* **54**, 4953 (2006).
- [11] R. Janisch. Segregation of Interstitial Impurities at Grain Boundaries in Transition Metals. Electronic Structure Calculations. PhD thesis. Max-Planck-Institut für Metallforschung (2003).
- [12] M.A. Tschopp, D.L. McDowell. *Scr. Mater.* **64**, 908 (2011).
- [13] D. Wolf. *Phil. Mag. A* **62**, 447 (1990).
- [14] M. Bacia, J. Morillo, J.M. Penisson, V. Pontiks. *Phil. Mag. A* **76**, 945 (1997).
- [15] F. Sinclair. *Phil. Mag. A* **50**, 45 (1984).
- [16] G.B. Ackland, R. Thetford. *Phil. Mag. A* **56**, 15 (1987).
- [17] S. Han, L.A. Zepeda-Ruiz, G.J. Ackland, R. Car, D.J. Srolovitz. *Phys. Rev. B* **66**, 220 101 (2002).
- [18] R. Janisch, C. Elsasser. *Phys. Rev. B* **67**, 224 101 (2003).