

01,07

Молекулярно-динамическое исследование влияния размера зерен на температуру плавления нанокристаллического алюминия

© Г.М. Полетаев¹, А.А. Ситников¹, В.Ю. Филимонов^{1,2}, В.И. Яковлев¹, В.В. Коваленко³

¹ Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова, Барнаул, Россия

² Институт водных и экологических проблем СО РАН, Барнаул, Россия

³ Сибирский государственный индустриальный университет, Новокузнецк, Россия

E-mail: gmpoletaev@mail.ru

Поступила в Редакцию 12 февраля 2024 г.

В окончательной редакции 16 февраля 2024 г.

Принята к публикации 25 февраля 2024 г.

С помощью молекулярно-динамического моделирования проведено исследование влияния среднего размера зерна и избыточной энергии, обусловленной наличием границ зерен, на температуру плавления нанокристаллического алюминия. Показано, что в рассматриваемом диапазоне размеров зерен от 2.5 до 10 nm отличие температуры плавления от температуры плавления монокристалла обратно пропорционально среднему размеру зерна и линейно уменьшается с ростом избыточной энергии. Плавление протекало гетерогенно и начиналось в первую очередь от границ зерен. При исследовании рекристаллизации в нанокристаллическом алюминии было выяснено, что она протекает интенсивнее при приближении температуры к температуре плавления, а также при меньшем начальном размере зерен.

Ключевые слова: молекулярная динамика, плавление, нанокристаллическая структура, рекристаллизация.

DOI: 10.61011/FTT.2024.04.57781.25

1. Введение

В последние десятилетия большое внимание уделяется ультрамелкозернистым и особенно нанокристаллическим материалам, к которым относят поликристаллы со средним размером зерна менее 100 nm. Они обладают необычными физико-механическими свойствами, связанными главным образом с большой, по сравнению с обычным крупнозернистым состоянием, объемной долей границ зерен [1–4]. Их получают разными методами, включающими интенсивную пластическую деформацию, спекание нанопорошков, конденсацию из газовой фазы и т.д. Общим свойством нанокристаллических материалов является высокая степень неравновесности структуры и большие значения избыточной, или запасенной, энергии [1–4].

Одним из примеров проявления избыточной энергии в нанокристаллических материалах, по всей видимости, следует считать экспериментально наблюдаемое снижение температуры воспламенения реакции высокотемпературного синтеза при получении интерметаллидов после предварительной механоактивационной обработки исходной смеси порошков [5–10]. В результате такой обработки исходная смесь подвергается интенсивному механическому воздействию, в результате которого в металлах зачастую формируется нанокристаллическая структура с высокой концентрацией структурных дефектов [8–10]. В обычных условиях температура воспламенения совпадает с температурой плавления алю-

миния, однако после механоактивационной обработки она значительно снижается [5–10]. Среди основных причин такого снижения называют сравнительно высокие значения избыточной энергии из-за высокой концентрации границ зерен и других дефектов в смеси после механической активации, высокую диффузионную подвижность атомов в нанокристаллических материалах, а также возможное снижение температуры плавления нанокристаллического алюминия по сравнению с обычным крупнокристаллическим алюминием.

Что касается последнего, то в работах [11–15] с помощью компьютерного моделирования было показано, что плавление не является гомогенным процессом, оно начинается, как правило, со свободных поверхностей и границ зерен. При этом плавление структуры вблизи границ раздела начиналось в приведенных выше работах при меньших температурах, чем для монокристалла. Нанокристаллическая структура имеет сравнительно высокую долю неравновесных границ зерен, что, очевидно, должно отражаться на общем процессе плавления и температуре начала фазового перехода. При изучении фазовых переходов в наночастицах [16–18] нами, действительно, наблюдалось заметное снижение температуры плавления металлических частиц с нанокристаллической структурой.

Настоящая работа посвящена исследованию с помощью молекулярно-динамического моделирования влияния среднего размера зерна на температуру плавления нанокристаллического алюминия. Одной из основных

проблем решения данного вопроса является, как правило, удержание постоянным среднего размера зерна, особенно в случаях малых значений порядка нескольких нанометров [12,14,15], в течение всего моделирования нагревания нанокристалла. Чем меньше размер зерен, тем более интенсивно протекает рекристаллизация и рост среднего размера зерна при высоких температурах. В настоящей работе мы использовали специальный прием для удержания среднего размера постоянным, который подробно будет описан ниже. В работе также рассматривалось влияние избыточной энергии на температуру плавления. Кроме этого изучалось влияние температуры и размера зерен на интенсивность рекристаллизации.

2. Описание модели

Для описания межатомных взаимодействий в молекулярно-динамической модели использовался EAM-потенциал из работы [19], где он был получен на основе сопоставления с экспериментальными данными и *ab initio* расчетами различных свойств алюминия. Данный потенциал хорошо воспроизводит широкий спектр механических и структурно-энергетических свойств [19–21], он хорошо зарекомендовал себя при проведении различных молекулярно-динамических исследований и прошел успешную апробацию при моделировании различных процессов, включая процессы плавления, кристаллизации и самодиффузию в расплаве [19–22].

Расчетная ячейка имела форму параллелепипеда и содержала от 80000 до 340000 атомов в зависимости от размера зерен. Нанокристаллическая структура создавалась следующим образом. В изначально идеальном ГЦК-кристалле алюминия в зависимости от заданного среднего размера зерен d определялись центры будущих зерен, расположенные в объеме расчетной ячейки аналогично узлам ГПУ-решетки (не атомы, а центры зерен) с расстоянием между ближайшими узлами, центрами зерен, равном d . Структура вокруг каждого центра в сферах диаметром 0.8 от размера зерен (ближайшего расстояния между центрами) поворачивалась в пространстве на случайные углы. При зафиксированной структуре внутри сфер остальная структура подвергалась плавлению и затем моделированию кристаллизации при выдерживании в течение 500 ps при температуре 700 К. На заключительном этапе структура охлаждалась до 0 К.

Для предотвращения влияния на результаты рекристаллизации и роста зерен в течение моделирования, особенно для зерен малого размера, структура в центрах зерен в сферах диаметром 0.3 от среднего размера зерен оставалась в течение всего моделирования зафиксированной. Для сравнения все компьютерные эксперименты были проведены также без использования фиксации структуры в центрах зерен. Плавление, как будет показано ниже, начиналось от границ зерен, и фиксация структуры в областях данного размера (0.3 от

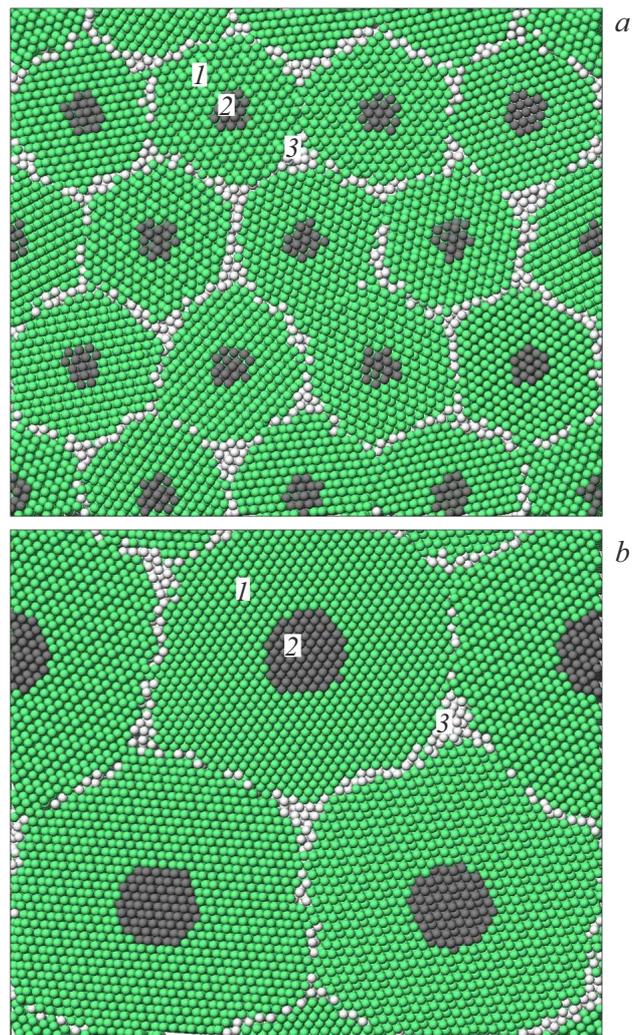


Рис. 1. Сечения расчетных ячеек нанокристаллического алюминия со средним размером зерен: а) 4 nm; б) 8 nm. 1 — атомы, ближайшее окружение которых соответствует ГЦК кристаллической решетке; 2 — атомы, которые оставались неподвижными в течение моделирования; 3 — кристаллическая решетка не идентифицирована.

диаметра) практически не оказывало влияние на значение температуры, при которой начиналось плавление.

Рассматривались зерна размером от 2.5 до 10 nm. Для зерен меньшего размера сложно было определить температуру начала плавления нанокристаллического алюминия. С ростом размера зерен его влияние на температуру плавления снижалось. На рис. 1 с помощью визуализатора кристаллических фаз на основе метода CNA (Common Neighbor Analysis) [23] изображены сечения расчетных ячеек с зернами размером 4 и 8 nm. Синие атомы — атомы, ближайшее окружение которых соответствует ГЦК кристаллической структуре, белые атомы — кристаллическая решетка не определена или соответствуют аморфной структуре, серые атомы — атомы, которые оставались неподвижными в течение

моделирования. Зерна, как видно из рис. 1, в сечении имели форму правильных шестиугольников.

В модели использовались периодические граничные условия и NPT канонический ансамбль с термостатом Ноэ-Гувера. В течение моделирования давление поддерживалось постоянным и равным нулю, в связи с чем расчетная ячейка свободно могла изменять объем в течение нагревания и плавления. При изменении температуры тепловое расширение учитывалось в том числе и для фиксированных областей в центре зерен. Шаг интегрирования по времени был равен 2 fs.

Для определения температуры плавления использовался метод постепенного нагревания с построением зависимости средней потенциальной энергии атомов от температуры, который часто используется в подобных задачах [12,16–18,24]. Нагревание проводилось со скоростью 10^{12} K/s. Чем ниже скорость нагревания, тем, очевидно, точнее определение температуры начала фазового перехода. Но, с другой стороны, чем дольше компьютерный эксперимент, тем выше влияние рекристаллизации и трансформации структуры зерен на получаемые результаты. Скорость 10^{12} K/s оказалась в данном случае оптимальной.

3. Результаты и обсуждение

На рис. 2 показаны зависимости средней энергии атомов от температуры для нанокристаллического алюминия со средним размером зерна 4 nm (рис. 2, *a*) и 8 nm (рис. 2, *b*) при нагревании с постоянной скоростью 10^{12} K/s в условиях фиксации структуры в центральных областях зерен (кривые 2) и без фиксации (кривые 3). Для сравнения приведены кривые (обозначены цифрой 1), полученные при нагревании идеального кристалла, не содержащего каких-либо дефектов и свободной поверхности. В последнем случае температура плавления оказалась значительно выше (1180 K) температур плавления, найденных для нанокристаллической структуры. При среднем размере зерна 4 nm плавление начиналось уже при температуре 780 K, при размере 8 nm — 920 K. В случае монокристаллического алюминия, не содержащего каких-либо дефектов и свободной поверхности, процесс плавления протекал гомогенно, то есть почти одновременно во всем объеме расчетной ячейки, в связи с чем рост энергии атомов в момент плавления (кривые 1) выглядит на рис. 2 более резким по сравнению с кривыми 2 и 3.

При наличии в расчетной ячейке границ зерен плавление начиналось на них, после чего межфазная граница жидкость-кристалл двигалась от границ в остальной объем. То есть плавление в этом случае происходило по гетерогенному механизму, при котором фронт кристалл-жидкость движется с конечной скоростью, которая зависит от температуры и, как правило, составляет несколько десятков метров в секунду [25,26]. Наличие неподвижного фронта кристалл-жидкость нами не наблюдалось,

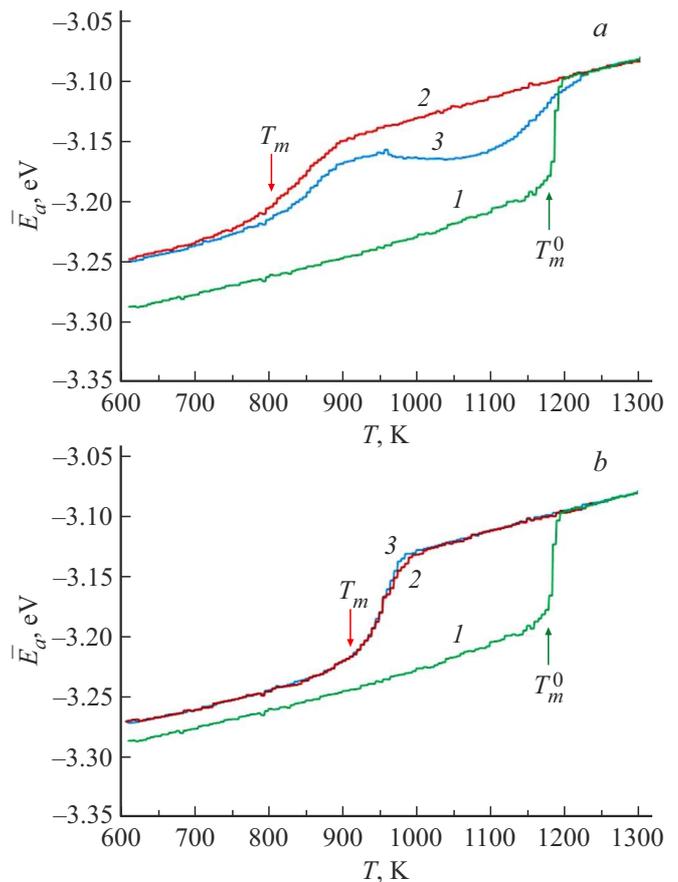


Рис. 2. Зависимости средней потенциальной энергии атомов от температуры при нагревании со скоростью 10^{12} K/s для идеального кристалла (кривые 1) и нанокристаллического алюминия (кривая 2 — без фиксации структуры в центрах зерен, кривая 3 — с фиксацией) со средним размером зерна 4 nm (*a*) и 8 nm (*b*).

образовавшись, он обычно двигался до тех пор, пока не происходило плавление всей расчетной ячейки. В связи с этим мы определяли температуру плавления по моменту начала фазового перехода (показаны стрелками на рис. 2), который, в свою очередь, определяли по пересечению аппроксимационных прямых до и после начала плавления.

При сравнении зависимостей, полученных для среднего размера зерна 4 nm (рис. 2, *a*) и 8 nm (рис. 2, *b*), можно выделить четыре основных отличия. Во-первых, плавление нанокристаллического алюминия с меньшим средним размером зерен начинается при меньшей температуре (примерно 780 K для 4 nm и 920 K для 8 nm). То есть влияние среднего размера зерен на температуру плавления действительно имеет место. Во-вторых, для размера зерен 4 nm рекристаллизация протекала гораздо интенсивнее, что видно по отличию зависимостей 2 и 3 в этом случае. При отсутствии фиксации центров зерен (кривая 3) после образования фронта плавления и соответствующего роста потенциальной энергии атомов

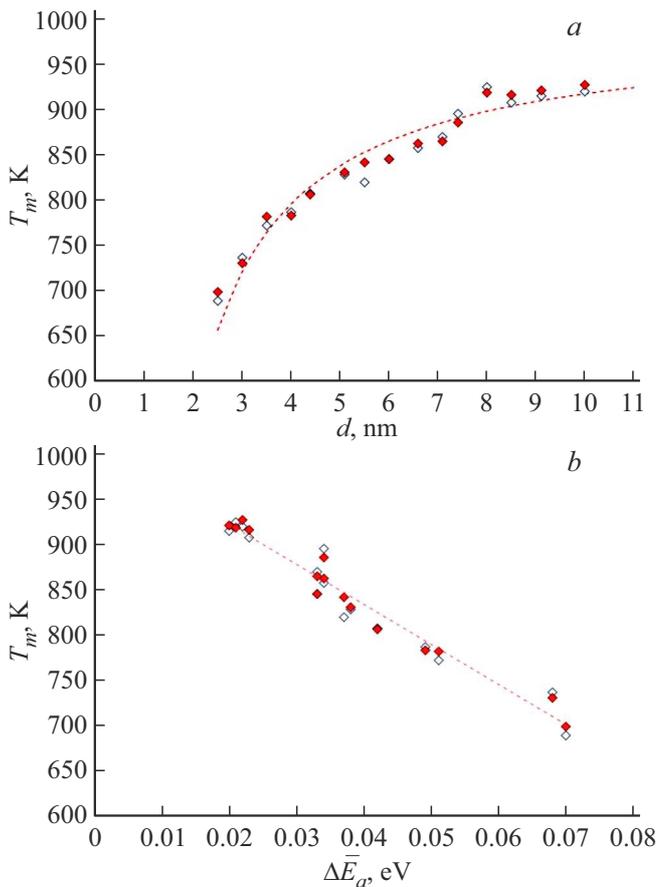


Рис. 3. Зависимости температуры плавления нанокристаллического алюминия от: *a)* среднего размера зерна; *b)* величины избыточной энергии, приходящейся на один атом. Маркеры — результаты модели, пунктирные линии — аппроксимация.

произошло последующее падение энергии, обусловленное протеканием рекристаллизации. При среднем размере зерен 8 нм кривые 2 и 3 почти совпали, что говорит о слабом вкладе рекристаллизации в данном случае. В-третьих, при меньшем размере зерен рост потенциальной энергии атомов при движении фронта плавления происходит медленнее. Четвертое отличие заключается в большей разнице начальных значений средней энергии атомов для нанокристаллической и монокристаллической структур для среднего размера 4 нм, что объясняется, очевидно, большей плотностью границ в случае меньшего размера зерен.

На рис. 3, *a* изображена зависимость температуры плавления нанокристаллического алюминия в зависимости от среднего размера зерна. Значения, полученные при фиксации структуры в центрах зерен, показаны закрашенными маркерами, без фиксации — незакрашенными. Во втором случае температура плавления определялась по первому изгибу зависимости средней энергии атомов от температуры (например, как в случае кривой 3 на рис. 2, *a*), независимо от дальнейшего падения энергии вследствие рекристаллизации.

Плавление с границ зерен начинается по причине сравнительно более легкого разрушения кристаллической структуры вблизи них из-за того, что атомы в дефектах находятся в менее глубоких потенциальных ямах по сравнению с идеальным кристаллом и им легче их покинуть в результате тепловых колебаний. Атомы вблизи фронта кристалл-жидкость со стороны кристаллической фазы также находятся в сравнительно менее глубоких потенциальных ямах, чем в объеме кристалла, из-за более беспорядочного расположения атомов со стороны расплава. Кроме того, в расплаве более интенсивная самодиффузия и больше свободного объема по сравнению с кристаллом, что также является причиной более легкого разрушения кристалла вблизи фронта кристалл-жидкость, чем внутри объема кристалла, и причиной движения фронта.

Механизм снижения температуры плавления нанокристаллических материалов близок к механизму снижения температуры плавления наночастиц, где плавление начинается от поверхности и распространяется вглубь частиц. Для математического описания влияния свободной поверхности наночастиц на их температуру плавления часто используют простую формулу, основанную на предположении, что изменение температуры фазового перехода по сравнению с массивным образцом пропорционально отношению площади поверхности частицы к ее объему [27–33]. Т.е. для круглой частицы это изменение должно быть обратно пропорционально диаметру частицы. Мы использовали это же предположение для описания зависимости температуры плавления нанокристаллической структуры от среднего размера зерна, добавив поправку δ , учитывающую конечную толщину границ зерен

$$T_m(d) = T_m^0 \left(1 - \frac{\alpha}{d - \delta} \right). \quad (1)$$

Здесь T_m и T_m^0 — температуры плавления нанокристаллической структуры и монокристалла; α — параметр, отвечающий за степень влияния границ зерен на температуру плавления.

Аппроксимационная кривая, найденная с помощью формулы (1), показана в виде пунктирной линии на рис. 3, *a*. Как можно видеть, значения, полученные в модели (круглые маркеры на рисунке) достаточно хорошо совпадают с аппроксимационной кривой, что подтверждает ведущую роль границ зерен в процессе плавления нанокристаллической структуры. Значения величин для формулы (1): $T_m^0 = 990$ К, $\alpha = 0.71$ нм, $\delta = 0.4$ нм. Следует заметить, что T_m^0 совпала со значением температуры плавления кристалла алюминия в условиях наличия свободной поверхности, найденным нами в [22] с использованием того же потенциала. Величина δ , имеющая смысл средней ширины границ зерен, оказалась близка к ширине, определяемой при измерении зернограницной диффузии (0.5–0.6 нм) [34,35]. Найденная зависимость близка к зависимостям, получаемым для температуры плавления круглых наночастиц от их диаметра [27–33]. Причем рассчитанная для

Среднее число атомов в зерне \bar{N}_g , отношение площади границ зерен к объему расчетной ячейки S/V , избыточная энергия $\Delta\bar{E}_a$, температуры плавления без фиксации T_m^0 и с фиксацией T_m^f структуры в центрах зерен в зависимости от среднего размера зерен d

d, nm	\bar{N}_g	$S/V, \text{nm}^{-1}$	\bar{E}_a, eV	T_m^0, K	T_m^f, K
2.5	702	0.788	0.070	689	699
3	1103	0.764	0.068	737	730
3.5	1824	0.592	0.051	772	782
4	2744	0.550	0.049	786	783
4.4	3450	0.491	0.042	807	806
5.1	5616	0.433	0.038	828	830
5.5	6979	0.411	0.037	820	842
6	9261	0.370	0.033	845	845
6.6	12167	0.369	0.034	857	862
7.1	15625	0.342	0.033	870	865
7.4	17576	0.319	0.034	895	885
8	21952	0.269	0.021	924	918
8.5	26108	0.262	0.023	907	916
9.1	32768	0.239	0.020	915	921
10	42875	0.221	0.022	920	927
монокристалл	—	0	0	990	990

нанокристаллической структуры величина α (0.71 nm) попадает в диапазон значений, приведенных в разных источниках для алюминиевых наночастиц в вакууме: в зависимости от подхода и межатомного потенциала α составляет от 0.6 до 1.2 nm [31–33].

Кроме зависимости от среднего размера зерна d , мы построили зависимость температуры плавления от избыточной энергии, приходящейся на один атом, $\Delta\bar{E}_a$ (рис. 3, *b*). Избыточная энергия определялась как разность средних значений потенциальной энергии атома в рассматриваемой структуре перед моделированием нагревания и в идеальном кристалле: $\Delta\bar{E}_a = \bar{E}_a - \bar{E}_a^0$. Полученная зависимость, в рамках рассматриваемого диапазона значений $\Delta\bar{E}_a$, оказалась близка к линейной с уравнением аппроксимационной линии $T_m = -4425\Delta\bar{E}_a + 1010$ (показана пунктиром).

В таблице приведены данные, полученные в модели. Кроме упомянутых, в таблице приведены значения среднего числа атомов в зернах \bar{N}_g и отношения площади границ зерен к объему расчетной ячейки S/V . В последнем случае, как можно видеть, значения S/V линейно коррелируют с избыточной энергией $\Delta\bar{E}_a$, что свидетельствует о том, что избыточная энергия в данной модели определяется в основном долей границ зерен в объеме ячейки.

На рис. 4 изображены, с использованием визуализатора кристаллических фаз, сечения расчетной ячейки с нанокристаллической структурой со средним размером зерна 8.5 nm в разные моменты плавления. Фиксация структуры в центрах зерен в данном случае не использовалась. На рисунке хорошо видно, что плавление начинается на границах зерен, то есть там, где атомы находятся в менее глубоких потенциальных ямах по сравнению с идеальным кристаллом. Далее фронт кристалл-жидкость движется от границ в центр зерен, которые, как видно на рис. 4, *c*, плавятся последними.

Следует заметить, что не все границы зерен в равной степени выступали в качестве мест инициации плавления. Это зависит от энергии образования границы, то есть опять же от избыточной энергии. Плавление от границ с низкой энергией образования, например, малугловых, специальных границ с высокой плотностью совпадающих узлов и особенно двойников, начиналось при более высоких температурах, чем в случае большеугловых границ.

При моделировании нагревания, как уже говорилось выше, наблюдалась интенсивная рекристаллизация особенно в случае малых размеров зерен. В течение рекристаллизации происходило снижение концентрации дефектов и рост зерен. Мы провели дополнительное исследование влияния размера зерен и температуры на величину снижения средней потенциальной энергии атома в течение релаксации. Фиксация структуры в центрах зерен при этом не использовалась. На рис. 5, *a* изображена зависимость изменения средней энергии атома от размера зерен в процессе релаксации при постоянной температуре 700 K в течение 300 ps. Изменение средней потенциальной энергии атома рассчитывалось как разность средних энергий в начале компьютерного эксперимента и после 300 ps: $\bar{E}_a^r = \bar{E}_a(t_0) - \bar{E}_a(t)$. Как можно видеть, по мере уменьшения размера зерен рекристаллизация протекала более интенсивно, изменение средней энергии атомов в этом случае было выше. Наиболее интенсивно рекристаллизация происходила в случае размера зерен ниже 4 nm.

На рис. 5, *b* изображены зависимости изменения средней потенциальной энергии атомов от температуры в течение релаксации продолжительностью 300 ps. Температура при проведении данных опытов удерживалась постоянной. Зависимости были получены для четырех значений среднего размера зерен: 2, 4, 6 и 8 nm. С ростом температуры, особенно при приближении к тем-

пературе плавления, рекристаллизация протекала более интенсивно. Зависимости близки к экспоненциальным, что обусловлено, по всей видимости, определяющими ролями в процессе рекристаллизации самодиффузии и

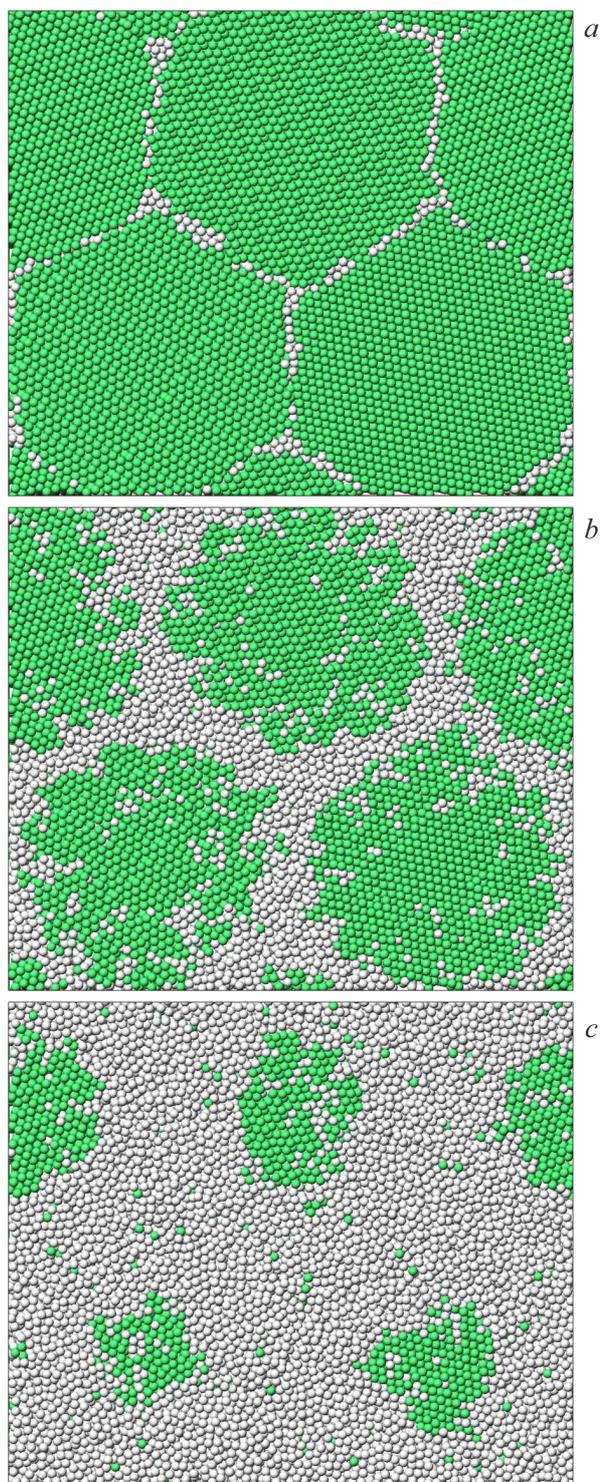


Рис. 4. Плавление от границ зерен в расчетной ячейке со средним размером зерна 8.5 nm в процессе нагревания со скоростью 10^{12} K/s: *a*) начальная структура; *b*) при достижении температуры 950 K; *c*) при достижении температуры 985 K.

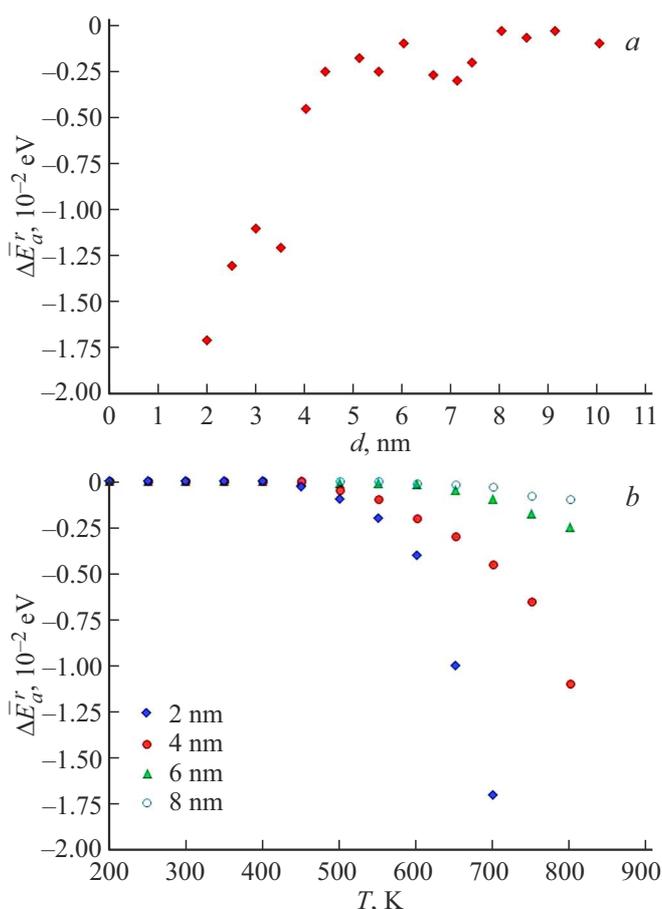


Рис. 5. Зависимости изменения средней потенциальной энергии изменения атома в процессе релаксации при постоянной температуре в течение 300 ps: *a*) от среднего размера зерна при температуре 700 K; *b*) от температуры для четырех значений среднего размера зерен: 2, 4, 6 и 8 nm.

миграции границ зерен, интенсивности которых, как известно, имеют экспоненциальную (аррениусовскую) зависимость от температуры. По мере уменьшения размера зерен перестройка структуры в течение релаксации при той же температуре, как уже было показано с помощью зависимости на рис. 5, *a*, происходила интенсивнее.

4. Заключение

С помощью молекулярно-динамического моделирования проведено исследование влияния среднего размера зерна и избыточной энергии на температуру плавления нанокристаллического алюминия. Показано, что чем меньше средний размер зерна и больше избыточная энергия, обусловленная наличием границ зерен, тем ниже температура плавления. При этом в рассматриваемом диапазоне размеров зерен от 2.5 до 10 nm отличие температуры плавления от температуры плавления монокристалла обратно пропорционально среднему разме-

ру зерна и линейно уменьшается с ростом избыточной энергии.

В моделируемом поликристалле плавление протекало гетерогенно и начиналось в первую очередь от границ зерен, после чего фронт плавления двигался в сторону остального объема. В идеальном кристалле, не содержащем каких-либо дефектов и свободной поверхности, плавление в модели протекало гомогенно, то есть сразу по всему объему, и начиналось при температуре существенно выше, чем в случае наличия границ зерен (более чем на 250 К по сравнению, например, с нанокристаллом со средним размером зерна 10 nm).

При исследовании рекристаллизации в нанокристаллическом алюминии было выяснено, что она протекает интенсивнее при приближении температуры к температуре плавления, а также при меньшем начальном размере зерен, то есть при большей плотности границ зерен.

Финансирование работы

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (FZMM-2023-0003).

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] H. Gleiter. *Acta Mater.* **48**, 1, 1 (2000). [https://doi.org/10.1016/S1359-6454\(99\)00285-2](https://doi.org/10.1016/S1359-6454(99)00285-2)
- [2] M.A. Meyers, A. Mishra, D.J. Benson. *Prog. Mater. Sci.* **51**, 427 (2006). <https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2005.08.003>
- [3] K.S. Kumar, H. Van Swygenhoven, S. Suresh. *Acta Mater.* **51**, 5743 (2003). <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2003.08.032>
- [4] T.D. Thangadurai, N. Manjubaashini, S. Thomas, H.J. Maria. *Nanostructured Materials*. Springer (2020). 221 p.
- [5] N.F. Shkodich, A.S. Rogachev, S.G. Vadchenko, N.V. Sachkova, R. Chassagnon. *Int. J. Self-Propag. High-Temp. Synth.* **21**, 104 (2012). <https://doi.org/10.3103/S1061386212020100>
- [6] F. Maglia, C. Milanese, U. Anselmi-Tamburini, S. Doppiu, G. Cocco, Z.A. Munir. *J. Alloys Compd.* **385**, 269 (2004). <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2004.03.142>
- [7] F. Maglia, C. Milanese, U. Anselmi-Tamburini. *J. Mater. Res.* **17**, 8, 1992 (2002). <https://doi.org/10.1557/JMR.2002.0295>
- [8] A.S. Rogachev, N.F. Shkodich, S.G. Vadchenko, F. Baras, D.Yu. Kovalev, S. Rouvimov, A.A. Nepapushev, A.S. Mukasyan. *J. Alloys Compd.* **577**, 600 (2013). <http://dx.doi.org/10.1016/j.jallcom.2013.06.114>
- [9] V.Y. Filimonov, M.V. Loginova, S.G. Ivanov, A.A. Sitnikov, V.I. Yakovlev, A.V. Sobachkin, A.Z. Negodyaev, A.Y. Myasnikov. *Combust. Sci. Technol.* **192**, 3, 457 (2020). <https://doi.org/10.1080/00102202.2019.1571053>
- [10] M.V. Loginova, V.I. Yakovlev, V.Yu. Filimonov, A.A. Sitnikov, A.V. Sobachkin, S.G. Ivanov, A.V. Gradoboev. *Lett. Mater.* **8**, 2, 129 (2018). <https://doi.org/10.22226/2410-3535-2018-2-129-134>
- [11] S.R. Phillpot, J.F. Lutsko, D. Wolf, S. Yip. *Phys. Rev. B* **40**, 2831 (1989). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.40.2831>
- [12] S. Xiao, W. Hu, J. Yang. *J. Phys. Chem. B* **109**, 43, 20339 (2005). <https://doi.org/10.1021/jp054551t>
- [13] S. Xiao, W. Hu, J. Yang. *J. Chem. Phys.* **125**, 18, 184504 (2006). <https://doi.org/10.1063/1.2371112>
- [14] T. Wejrzanowski, M. Lewandowska, K. Sikorski, K.J. Kurzydowski. *J. Appl. Phys.* **116**, 16, 164302 (2014). <https://doi.org/10.1063/1.4899240>
- [15] Z. Noori, M. Panjepour, M. Ahmadian. *J. Mater. Res.* **30**, 1648 (2015). <https://doi.org/10.1557/jmr.2015.109>
- [16] G.M. Poletaev, Y.V. Bebikhov, A.S. Semenov. *Mater. Chem. Phys.* **309**, 128358 (2023). <https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2023.128358>
- [17] G. Poletaev, Y. Gafner, S. Gafner, Y. Bebikhov, A. Semenov. *Metals* **13**, 10, 1664 (2023). <https://doi.org/10.3390/met13101664>
- [18] G.M. Poletaev, Y.Y. Gafner, S.L. Gafner. *Lett. Mater.* **13**, 4, 298 (2023). <https://doi.org/10.22226/2410-3535-2023-4-298-303>
- [19] R.R. Zope, Y. Mishin. *Phys. Rev. B* **68**, 024102 (2003). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.68.024102>
- [20] Y.-K. Kim, H.-K. Kim, W.-S. Jung, B.-J. Lee. *Comput. Mater. Sci.* **119**, 1 (2016). <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2016.03.038>
- [21] Q.-X. Pei, M.H. Jhon, S.S. Quek, Z. Wu. *Comput. Mater. Sci.* **188**, 110239 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2020.110239>
- [22] Г.М. Полетаев, Р.Ю. Ракитин. *ФТТ* **64**, 4, 412 (2022). <https://doi.org/10.21883/FTT.2022.04.52180.247>
- [23] H. Tsuzuki, P.S. Branicio, J.P. Rino. *Comput. Phys. Commun.* **177**, 518 (2007). <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2007.05.018>
- [24] T.D. Nguyen, C.C. Nguyen, V.H. Tran. *RSC Advances* **7**, 25406 (2017). <https://doi.org/10.1039/C6RA27841H>
- [25] W.-L. Chan, R.S. Averbach, D.G. Cahill, Y. Ashkenazy. *Phys. Rev. Lett.* **102**, 095701 (2009). <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.102.095701>
- [26] H.Y. Zhang, F. Liu, Y. Yang, D.Y. Sun. *Sci. Rep.* **7**, 10241 (2017). <https://doi.org/10.1038/s41598-017-10662-x>
- [27] Y. Qi, T. Cagin, W.L. Johnson, W.A. Goddard III. *J. Chem. Phys.* **115**, 385 (2001). <https://doi.org/10.1063/1.1373664>
- [28] A. Safaci, M. Attarian Shandiz, S. Sanjabi, Z.H. Barber. *J. Phys. Chem. C* **112**, 99 (2008). <https://doi.org/10.1021/jp0744681>
- [29] S. Xiong, W. Qi, Y. Cheng, B. Huang, M. Wang, Y. Li. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **13**, 22, 10652 (2011). <https://doi.org/10.1039/c0cp90161j>
- [30] В.М. Самсонов, С.А. Васильев, А.Г. Бембель. *ФММ* **117**, 8, 775 (2016). <https://doi.org/10.7868/S0015323016080131>
- [31] K.K. Nanda. *Phys. Lett. A* **376**, 19, 1647 (2012). <https://doi.org/10.1016/j.physleta.2012.03.055>
- [32] G. Guisbiers, M. Kazan, O. Van Overschelde, M. Wautelet, S. Pereira. *J. Phys. Chem. C* **112**, 4097 (2008). <https://doi.org/10.1021/jp077371n>
- [33] Г.М. Полетаев, А.А. Ситников, В.И. Яковлев, В.Ю. Филимонов. *ЖЭТФ* **161**, 2, 221 (2022). <https://doi.org/10.31857/S0044451022020079>
- [34] D. Prokoshkina, V.A. Esin, G. Wilde, S.V. Divinski. *Acta Mater.* **61**, 14, 5188 (2013). <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2013.05.010>
- [35] A.L. Petelin, A.A. Novikov, I.V. Apykhtina. *Mater. Sci. Eng.* **4**, 1, 9 (2020). <https://doi.org/10.15406/mseij.2020.04.00119>

Редактор Ю.Э. Кумаев