

На правах рукописи



Кайгородова Валентина Михайловна

**ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРНО-ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ И
УСЛОВИЙ ФОРМИРОВАНИЯ ТРОЙНЫХ СТЫКОВ ГРАНИЦ ЗЕРЕН,
СОДЕРЖАЩИХ ИЗБЫТОЧНЫЙ СВОБОДНЫЙ ОБЪЕМ, В Ni**

Автореферат

диссертации на соискание ученой степени

кандидата физико-математических наук

Специальность 01.04.07 – физика конденсированного состояния

Барнаул – 2017

Работа выполнена в ФГБОУ ВО
«Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова»

Научный руководитель: **Полетаев Геннадий Михайлович**,
доктор физико-математических наук, профессор

Официальные
оппоненты: **Зольников Константин Петрович**,
доктор физико-математических наук, профессор,
главный научный сотрудник лаборатории компью-
терного конструирования материалов ФГБУН
«Институт физики прочности и материаловедения
СО РАН», г. Томск;

Захаров Павел Васильевич,
кандидат физико-математических наук, доцент,
ФГБОУ ВО «Алтайская государственная академия
образования имени В.М. Шукшина», доцент кафед-
ры математики, физики, информатики, г. Бийск.

Ведущая организация: **ФГБУН «Институт проблем сверхпластичности
металлов РАН»**, г. Уфа

Защита состоится «5» сентября 2017 г. в 11⁰⁰ часов на заседании диссертационного совета Д 212.004.04 при Алтайском государственном техническом университете им. И.И. Ползунова по адресу: 656038, г. Барнаул, пр. Ленина, 46.

e-mail: veronika_65@mail.ru

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке Алтайского государственного технического университета им. И.И. Ползунова.

<http://www.altstu.ru/structure/unit/odia/scienceevent/3287/>

Автореферат разослан « » _____ 2017 г.

Ученый секретарь диссертационного совета,
кандидат физико-математических наук,
доцент



Романенко В.В.

Примечание: отзывы на автореферат, заверенные гербовой печатью организации, просим присылать в 2-х экз. на адрес университета и e-mail: veronika_65@mail.ru

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность проблемы. Тройной стык зерен представляет собой линейный дефект, вдоль которого сопрягаются три границы зерен. Согласно экспериментальным данным, диффузия в области тройного стыка протекает значительно интенсивнее, чем вдоль самих границ [1], причем вклад тройных стыков в диффузию возрастает по мере уменьшения среднего размера зерна в материале. Кроме того, тройные стыки играют важную роль в процессах, связанных с пластической деформацией, генерацией дислокаций, рекристаллизацией [2]. Эксперименты в большинстве случаев свидетельствуют об относительно более «рыхлой» структуре, то есть с более высоким содержанием свободного объема, по сравнению с образующими этот стык границами зерен [1-3]. Вместе с тем, в работах [4-7], выполненных с помощью компьютерного моделирования, было получено, что диффузионная проницаемость тройного стыка одного порядка с проницаемостью границ зерен. Указанные противоречия экспериментальных данных и результатов компьютерного моделирования отчасти можно объяснить существованием в поликристаллах разных типов тройных стыков, отличающихся по структуре и свойствам. Так, согласно работе [8], тройные стыки следует разделять, по крайней мере, на два типа: ненапряженные (или равновесные), не содержащие избыточных дефектов и напряженные (неравновесные), содержащие избыточные дисклинации, частицы второй фазы и другие дефекты. Несмотря на экспериментальное подтверждение существования «структурно правильных» равновесных тройных стыков, доля неравновесных, имеющих сравнительно более рыхлую структуру, как правило, выше в поликристаллах [1-3].

В настоящее время остается много вопросов, касающихся как структуры и структурно-энергетических параметров тройных стыков, так и кинетики процессов, происходящих с их участием. Остается открытым вопрос относительно причин образования высокой доли тройных стыков, содержащих избыточный свободный объем, эффективного радиуса тройных стыков, знание которых дало бы представление о проницаемости «диффузионных каналов» в поликристаллах. Малоизученными являются также структурные трансформации вблизи тройных стыков на атомном уровне в условиях термоактивации, деформации.

Решение подобных вопросов с помощью реальных экспериментов в настоящее время весьма затруднительно, поскольку для этого необходимы исследования динамики структуры на атомном уровне. В данном случае наиболее эффективным является применение метода компьютерного моделирования, который позволяет с достаточной точностью в рамках модели учитывать и контролировать параметры исследуемого явления, изучать в динамике процессы, протекающие на атомном уровне с использованием различных наглядных визуализаторов структуры.

Цель работы заключается в исследовании с помощью метода молекулярной динамики структурно-энергетических свойств и условий формирования тройных стыков границ зерен, содержащих избыточный свободный объем, на примере никеля.

Научная новизна диссертационной работы заключается в том, что впервые с помощью метода молекулярной динамики проведено исследование причин формирования избыточного свободного объема в тройных стыках границ зерен. Изучены особенности формирования свободного объема в случаях стыка мало- и большеугловых границ наклона $<100>$ и $<111>$ в Ni. Определены энергетический и диффузионный радиусы рассматриваемых тройных стыков в зависимости от содержания избыточного свободного объема. Выполнен расчет энергии активации самодиффузии по рассматриваемым тройным стыкам. Выполнено исследование кристаллизации пленки Ni при наличии нескольких кристаллических зародышей. Изучены структурные трансформации в нанокристаллической тонкой пленке Ni под действием температуры и деформации.

Достоверность результатов обеспечивается применением известных и апробированных методик (метод молекулярной динамики, методика определения параметров потенциалов межатомного взаимодействия), их физической непротиворечивостью, сравнением результатов с данными других авторов.

Научная и практическая ценность работы состоит в том, что полученные результаты могут быть использованы для развития теоретических представлений о тройных стыках границ зерен, теории диффузии и процессов с ней связанных с участием тройных стыков, для создания математических моделей диффузии, учитывающих атомную структуру тройных стыков и закономерности, связанные с формированием в них избыточного свободного объема, обнаруженные в настоящей работе. Кроме того, результаты молекулярно-динамических исследований могут быть использованы в качестве демонстрационного материала для студентов физических специальностей, на их базе возможно создание работ для лабораторного практикума.

На защиту выносятся следующие положения:

1. Тройные стыки, содержащие избыточный свободный объем, образуются преимущественно в процессе кристаллизации в результате «запирания» плотности жидкой фазы при встрече трех фронтов кристаллизации и, как следствие, концентрирования избыточного свободного объема в тройном стыке после затвердевания.
2. Интенсивность диффузии вдоль тройных стыков, содержащих избыточный свободный объем, выше, чем вдоль стыков, образованных без дополнительного введения свободного объема при кристаллизации. Диффузионный радиус тройных стыков в первом случае также выше.
3. При концентрировании избыточного свободного объема в тройных стыках зачастую происходит формирование сравнительно небольшого кристаллического субзерна (от одного до нескольких нанометров в диаметре), имеющего отличную от стыкующихся зерен ориентацию, и находящегося в состоянии растяжения.

4. Пластическая деформация в нанокристаллическом Ni (с размером зерен порядка нескольких нанометров) осуществляется преимущественно посредством зернограничного проскальзывания без образования дислокаций в зернах и внутривзеренного скольжения.

Апробация работы. Результаты работы доложены на международных и российских конференциях: Научные чтения им. И.А. Одингa «Механические свойства современных конструкционных материалов», Москва (2014); VIII Международная конференция «Фазовые превращения и прочность кристаллов», посвященная памяти акад. Г.В. Курдюмова, и Первая всероссийская молодежная школа «Структура и свойства перспективных материалов», Черноголовка (2014); II Российско-Казахстанская молодежная научно-техническая конференция «Новые материалы и технологии», Барнаул (2014); Международная конференция «Влияние внешних воздействий на прочность и пластичность металлов и сплавов», Барнаул (2015); II Всероссийская научная конференция молодых ученых с международным участием «Перспективные материалы в технике и строительстве», Томск (2015); Третья Азиатская школа-конференция по физике и технологии наноструктурированных материалов (ASCO-NANOMAT 2015); XIV международная школа-семинар «Эволюция дефектных структур в конденсированных средах», Барнаул (2016); IV Российско-Казахстанская молодежная научно-техническая конференция «Новые материалы и технологии», Барнаул (2016).

Публикации. Результаты диссертационной работы опубликованы в 16 статьях, из которых 7 публикаций в журналах, рекомендованных ВАК Минобрнауки РФ, 2 – в журналах, индексируемых в Web of Science и Scopus.

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения и списка литературы из 188 наименований. Работа изложена на 142 страницах машинописного текста, содержит 2 таблицы и 37 рисунков.

Работа выполнена в рамках научного проекта №166 программы Минобрнауки РФ «Формирование государственных заданий высшим учебным заведениям в части проведения научно-исследовательских работ» и при финансовой поддержке грантов РФФИ №13-02-00301-а, №14-02-98000-р_сибирь_а, №14-08-90416-Укр_а, №16-48-190182-р_а.

Работа выполнена в коллективе научной школы заслуженного деятеля науки РФ, д.ф.-м.н., профессора М.Д. Старостенкова.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обосновывается актуальность исследуемой проблемы, сформулирована цель диссертационной работы, описаны научная новизна, научная и практическая ценность, основные защищаемые положения. Дается краткое содержание работы по главам.

В первой главе диссертации проводится обзор экспериментальных и теоретических данных о структуре и свойствах тройных стыков границ зерен. Рассматриваются современные представления о диффузии вдоль тройных стыков. В конце первой главы сделана постановка задачи.

Ранее, в работах [6, 7] Дмитриенко Д.В., Полетаева Г.М. и Старостенкова М.Д., предшествующих настоящему исследованию, было проведено изучение с помощью компьютерного моделирования атомной структуры и энергетических характеристик тройных стыков границ наклона и смешанного типа в никеле. Было получено, что ненапряженный тройной стык (то есть не содержащий избыточных дефектов) имеет диффузионную проницаемость того же порядка, что и проницаемость образующих этот стык границ зерен, а его энергия образования, найденная как избыток по отношению к системе с границами зерен, близка к нулю. Т.е. тройные стыки, полученные в компьютерной модели, не обладали структурными или энергетическими особенностями, выделяющими их как самостоятельные дефекты на фоне образующих эти стыки границ зерен.

Выводы, касающиеся структуры и энергии тройных стыков, сделанные в нашем научном коллективе ранее [6, 7], согласуются с работами других авторов, выполненными также с помощью компьютерного моделирования [4,5,9,10], однако, вместе с тем, не вполне соответствуют реальной картине. Согласно многочисленным экспериментальным данным, энергия тройных стыков выше, чем границ зерен, а их структура, как правило, характеризуется более высоким содержанием свободного объема по сравнению с границами. Например, в работе [3], где содержание свободного объема в железе оценивали методом аннигиляции позитронов, однозначно показано, что тройные стыки содержат свободного объема больше, чем границы зерен. В [11] говорится, что тройные стыки в некоторых случаях даже содержат включения аморфной фазы. Другим косвенным подтверждением более «рыхлой» структуры тройных стыков, по сравнению с границами зерен, является их более высокая диффузионная проницаемость: экспериментально во многих работах, например [12, 13], показано, что диффузия вдоль тройных стыков протекает гораздо быстрее, чем вдоль границ зерен, тройные стыки являются местами преимущественной коррозии [1].

Вторая глава посвящена проблеме моделирования тройных стыков в металлах. В начале главы приведено описание методов компьютерного моделирования, большее внимание уделено методу молекулярной динамики. Рассмотрены основные аспекты и проблемы, возникающие при использовании метода молекулярной динамики. Приведено обоснование выбора потенциала межатомного взаимодействия.

В настоящей работе для рассмотрения был выбран типичный ГЦК металл - Ni. В качестве объектов исследования были выбраны тройные стыки границ наклона с осями разориентации $\langle 111 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$. Выбор границ наклона данной ориентации обусловлен тем, что, как известно, плоскости границ зерен с малыми индексами являются наиболее распространенными.

Для описания межатомных взаимодействий в настоящей работе преимущественно использовался многочастичный потенциал Клери-Розато (Cleri, Rosato) [14], построенный в приближении сильной связи. Энергия i -го атома в этом случае находится с помощью выражения

$$U_i = \sum_j A \exp \left(-p \left(\frac{r_{ij}}{r_0} - 1 \right) \right) - \sqrt{\sum_j \xi^2 \exp \left(-2q \left(\frac{r_{ij}}{r_0} - 1 \right) \right)}. \quad (1)$$

Здесь A , p , q , ξ , r_0 – параметры потенциала; r_{ij} – расстояние между i -м и j -м атомами. Параметры потенциала Клери-Розато были взяты из работы [14]. Данный потенциал неоднократно использовался в молекулярно-динамических моделях и прошел апробацию по большому числу характеристик. Опыт его применения показывает, что с его помощью удастся описать разнообразные свойства металлов и сплавов.

Третья глава диссертации посвящена исследованию методом молекулярной динамики причин формирования в тройных стыках избыточного свободного объема.

Рассматривалось несколько версий формирования в реальных поликристаллах высокой доли тройных стыков, имеющих высокое содержание избыточного свободного объема: преимущественное дефектообразование в области стыка в процессе кристаллизации (исследование проводилось на примере двумерной и трехмерной моделей), проверка моделей Боллмана и Кинга (моделей, прогнозирующих наличие в стыках геометрически необходимых дисклинаций), повышение свободного объема в области стыка в результате пластической деформации.

В трехмерной молекулярно-динамической модели тройной стык создавался в центре расчетного блока путем сопряжения трех зерен, разориентированных относительно друг друга с помощью поворота вокруг оси параллельной линии тройного стыка. Углы между границами в стыке задавались 120° . Радиус цилиндрического блока варьировался от 60 до 100 Å, длина – от 20 до 50 Å. Пример получающегося в результате вышеописанных процедур расчетного блока радиусом 80 Å изображен на рис.1. На границы расчетного блока вдоль оси наклона всех зерен, то есть вдоль линии тройного стыка, налагались периодические граничные условия (имитировалось бесконечное повторение цилиндрического расчетного блока вдоль оси Z). На боковую поверхность цилиндра были наложены жесткие условия, - атомы вблизи боковой поверхности в процессе компьютерного эксперимента оставались неподвижными (на рис.1 жестко закрепленные атомы окрашены в темно-серый цвет).

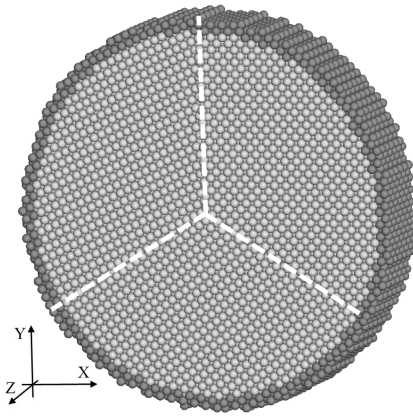


Рис.1. Пример цилиндрического расчетного блока, содержащего тройной стык границ наклона $\langle 100 \rangle$ с углами разориентации 10° , 10° , 20° , радиусом 80 Å. Границы зерен обозначены белыми пунктирными линиями.

Для приведения стартовой структуры расчетного блока в равновесное состояние (в данных условиях) проводилась динамическая релаксация структуры. Шаг интегрирования по времени в методе молекулярной динамики был равен 5 фс.

При исследовании кристаллизации из расплава на примере двумерной модели никеля никакого преимущественного расположения дефектов вблизи тройных стыков не наблюдалось. Впоследствии было выяснено, что избыточный свободный объем не образовывался в тройных стыках в двумерной модели по причине чрезмерно высокой скорости движения фронта кристаллизации, соизмеримой в двумерных молекулярно-

динамических моделях со скоростью звука.

При исследовании возможности реализации моделей Боллмана и Кинга (моделей, прогнозирующих наличие в стыках геометрически необходимых дисклинаций), было выяснено, что данные модели не объясняют наличие напряженных тройных стыков в поликристаллах, содержащих избыточный свободный объем, более того, их реализация была поставлена под сомнение, не говоря уже о том, что обе эти модели имеют отношение только к малоугловым границам зерен.

При изучении протекания пластической деформации в области тройного стыка в компьютерной модели не было выявлено формирования каких-либо дополнительных пластических сдвигов или дефектов в области тройного стыка, пластические сдвиги в равной степени инициировались от границ зерен и тройного стыка. То есть, пластическая деформация не показала себя как однозначная причина образования в поликристаллах высокой доли напряженных тройных стыков. Хотя с другой стороны, рассматриваемая модель (рис.1) не позволяет моделировать зернограницное проскальзывание и соответствующее накопление вектора Бюргерса в тройном стыке.

Причина образования в поликристаллах большого количества тройных стыков, имеющих сравнительно «рыхлую» структуру с высокой долей свободного объема, была выяснена при исследовании кристаллизации в трехмерной модели. Моделирование кристаллизации проводилось следующим образом. Расчетный блок нагревался до температуры, значительно превышающей температуру плавления. После того как моделируемый поликристалл становился жидким (рис.2а), включался термостат и проводилось выдерживание при посто-

янной температуре ниже температуры плавления. Жесткие границы (т.е. жестко закрепленные атомы на боковой поверхности цилиндрического расчетного блока) имитировали в данном случае фронты кристаллизации от трех центров кристаллизации. В трехмерной модели скорость движения фронта кристаллизации на порядок ниже, чем в двумерной модели, поэтому дефекты не «замораживаются» там, где они есть, как в двумерной модели, а формируются в последнюю очередь – в месте сопряжения кристаллических фаз с разной ориентацией, т.е. в области границ зерен и тройных стыков. Причем именно тройные стыки кристаллизуются в последнюю очередь – это то место, где встречаются три фронта кристаллизации (рис.2).

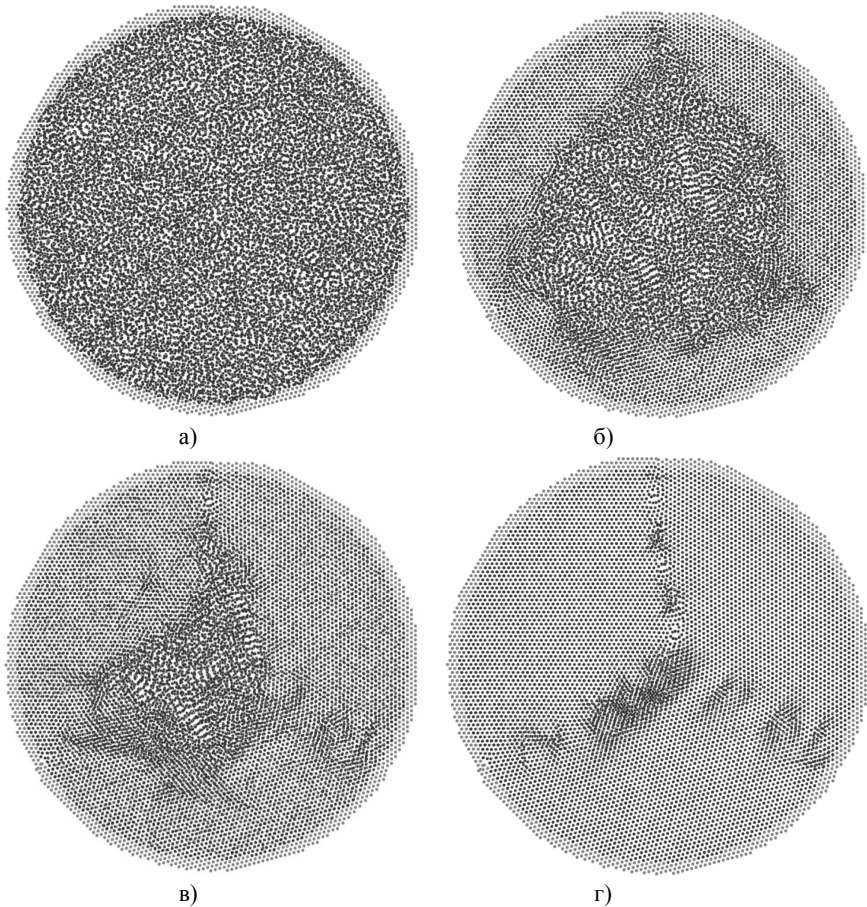


Рис.2. Кристаллизация в области тройного стыка $\langle 111 \rangle 15^\circ/15^\circ/30^\circ$ при температуре 800 К в условиях недостатка 120 атомов (наличия 120 условных вакансий в расчетном блоке диаметром 13 нм): а) стартовое жидкое состояние с «жесткими» стенками; б) после 10 пс при температуре 800 К; в) 20 пс; г) 100 пс.

При этом важным обстоятельством является наличие избыточного свободного объема в области тройного стыка. Дело в том, что при встрече трех фронтов кристаллизации (от трех центров кристаллизации) происходит «запирание» плотности в области тройного стыка – плотность оставшейся в области стыка жидкой фазы, которая еще не успела кристаллизироваться, ниже, чем плотность кристаллической фазы. Этот недостаток атомов для формирования «идеального» тройного стыка приводит к появлению избыточного свободного объема, который концентрируется в процессе кристаллизации преимущественно в тройном стыке (рис.2г).

Процентное соотношение кристаллической и жидкой фаз в момент встречи фронтов кристаллизации определяется преимущественно способом заполнения пространства кристаллической и жидкой фазами, и при этом не зависит от размера кристаллических зерен в этот момент. В общем случае концентрацию условных вакансий, т.е. долю «недостающих» атомов в результате «запирания» свободного объема при кристаллизации, можно рассчитать по формуле

$$c_v = \gamma \left(1 - \frac{\rho_{жс}}{\rho_{тв}} \right), \quad (2)$$

где γ – доля жидкой фазы в момент встречи фронтов кристаллизации; $\rho_{жс}$ и $\rho_{тв}$ – плотности жидкого и кристаллического никеля: 7,77 и 8,9 г/см³ соответственно [15]. Параметр γ может варьироваться в широком диапазоне в зависимости от заполнения пространства твердой и жидкой фазами. Для случая встречи трех фронтов кристаллизации в форме окружностей, как это изображено на рис.3, $\gamma=0,154$. Тогда концентрация условных вакансий равна 1,96%, а число атомов, которое нужно удалить из расчетного блока, содержащего равновесный тройной стык и 30000 атомов, составит 587 атомов. Следует, однако, учитывать, что

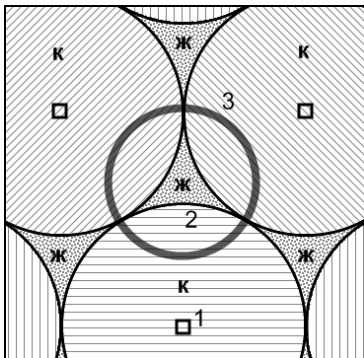


Рис.3. Схематическое изображение структуры поликристалла в процессе кристаллизации в момент встречи фронтов кристаллизации и «запирания» плотности жидкой фазы: к – кристаллическая фаза, ж – жидкая фаза, 1 – центр кристаллизации, 2 – фронт кристаллизации, 3 – границы расчетного блока (рис.2).

это максимальное значение. Очевидно, что свободный объем в результате различных процессов (диффузии, распределения свободного объема в границах зерен, зернограничного проскальзывания и т.д.) в действительности меньше найденной величины. В настоящем разделе при дальнейших исследованиях из расчетных блоков, содержащих 30000 атомов, удалялось 300 атомов.

На рис.4 изображены распределения свободного объема в области тройных стыков мало- и большеугловых границ наклона $\langle 111 \rangle$, полученные в результате кристаллизации при введении в стартовый расчетный блок 300 условных вакансий (1%).

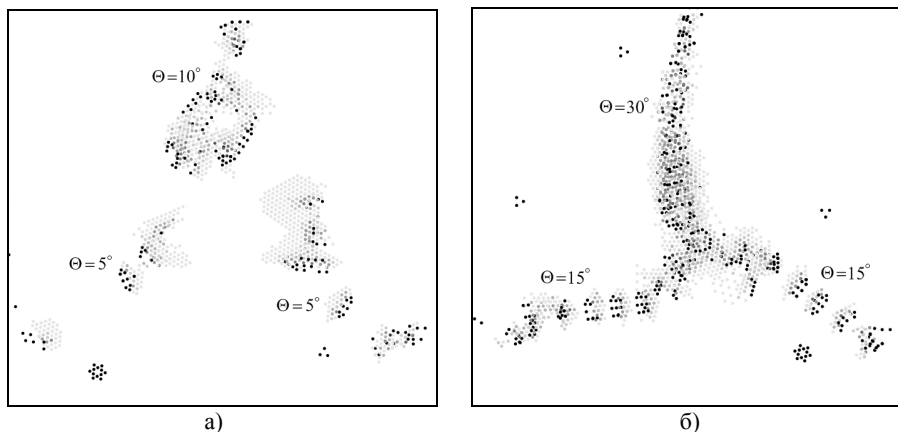


Рис.4. Распределение свободного объема в области тройного стыка границ наклона $\langle 111 \rangle$ с углами разориентации: а) 5° , 5° , 10° ; б) 15° , 15° , 30° . Атомы окрашены в различные оттенки серого цвета в зависимости от свободного объема вблизи них. Кристаллизация моделировалась при температуре термостата 800 К. Из стартового расчетного блока был удален 1% атомов.

При сравнении формирования избыточного свободного объема в тройных стыках мало- и большеугловых границ зерен было отмечено, что в случае стыка малоугловых границ свободный объем скапливается в области ядер зернограницных дислокаций, причем, чем ближе дислокация к месту стыка границ, тем больше она содержит избыточного свободного объема. Для стыков большеугловых границ характерно более равномерное распределение свободного объема. При сравнении стыков границ наклона $\langle 100 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$ было отмечено, что в границах $\langle 100 \rangle$ и образованных ими стыках свободный объем при кристаллизации рассеивается эффективнее, чем в стыках, образованных границами $\langle 111 \rangle$.

Для подтверждения вывода относительно причины формирования избыточного свободного объема в тройных стыках при кристаллизации было проведено дополнительное исследование кристаллизации трехмерной металлической пленки, содержащей несколько введенных центров кристаллизации. Проводилось моделирование кристаллизации при содержании в расчетном блоке 4 и 12 кристаллических затравок (зародышей кристаллизации). На рис.5(а) изображен пример расчетного блока, содержащего 4 кристаллические затравки. Расчетные блоки содержали 30–40 тысяч атомов. Толщина расчетных блоков вдоль оси Z составляла 4–5 параметров решетки (15–20 Å). Рассматривались расчетные блоки, плоскость XY которых соответствовала кристаллографическим плоскостям (111) и (100). Граничные условия вдоль осей X и Z задавались периодические, вдоль Y – свободные, чтобы расчетный блок имел возможность менять объем в процессе кристаллизации и изменения температуры.

Молекулярно-динамический эксперимент проводился по следующей схеме. Сначала расчетный блок плавился путем нагревания до температуры 3000 К. Затем постепенно охлаждался, при этом температура ступенчато изменялась с

1500 К до 800 К. При каждой температуре расчет проводился от нескольких десятков до нескольких сотен пикосекунд. При задании той или иной температуры все межатомные расстояния в расчетном блоке изменялись в соответствии с коэффициентом теплового расширения.

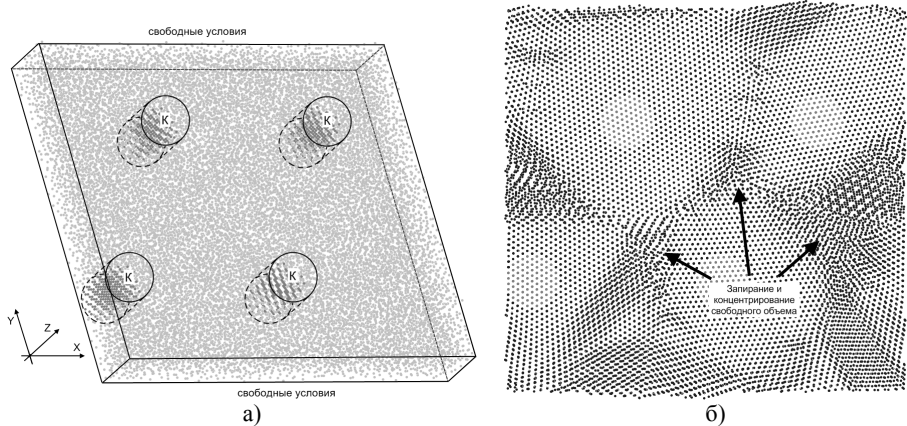


Рис.5. Моделирование кристаллизации при наличии 4 кристаллических затравок. а) Пример расчетного блока для моделирования кристаллизации. Кристаллические затравки (кристаллические зародыши) выделены в виде цилиндрических областей и отмечены буквой «К». б) Изображение расчетного блока в плоскости XY, которая в данном случае соответствует плоскости (111), после моделирования кристаллизации в течение 2000 пс.

Проведенные компьютерные исследования однозначно показали, что в большинстве случаев свободный объем, действительно, запирается в области тройных стыков, причем в большей степени, чем в области границ зерен.

При концентрировании избыточного свободного объема в тройных стыках зачастую происходило формирование сравнительно небольшого кристаллического субзерна (от одного до нескольких нанометров в диаметре), имеющего отличную от стыкующихся зерен ориентацию, и находящегося в состоянии растяжения (рис.5б).

Четвертая глава посвящена исследованию энергетических и диффузионных свойств тройных стыков границ наклона в зависимости от содержания в стыке свободного объема.

Радиус тройного стыка можно определить по распределению в пространстве того или иного локального свойства (распределению потенциальной энергии, диффузионной проницаемости и т.д.), выделяющего дефектную область на фоне чистого кристалла. Под энергетическим радиусом в настоящей работе подразумевается радиус тройного стыка, найденный по распределению потенциальной энергии.

Для анализа эффективного энергетического радиуса тройных стыков использовалась величина $\varepsilon(R) = \frac{\Delta E}{4\pi R^2}$, где ΔE – энергия образования заданной

структуры в расчетном блоке (разность потенциальной энергии расчетного блока и чистого кристалла, содержащего такое же количество атомов); l – длина цилиндрического расчетного блока; R – радиус цилиндрической расчетной области при определении величины ΔE (рис.6) (ось цилиндра расчетной области приблизительно совпадает с линией тройного стыка).

Делая допущение, что избыток энергии пропорционален объему дефектной области (внутри границ зерен и их стыков): $\Delta E = \alpha V$, где α – коэффициент пропорциональности, было найдено выражение для величины ε :

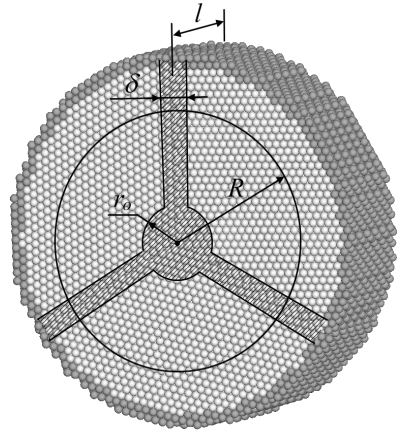


Рис.6. К расчету энергетического радиуса тройного стыка.

$$\varepsilon = \frac{\Delta E}{lR} \approx \begin{cases} \alpha\pi R, & R \leq r_0; \\ (\pi r_0 - 3\delta) \frac{\alpha r_0}{R} + 3\alpha\delta, & R > r_0. \end{cases} \quad (3)$$

Здесь δ – ширина границы зерен, r_0 – радиус тройного стыка. Согласно выражению (3), зависимость $\varepsilon(R)$ должна быть возрастающей, причем сначала линейной при $R \leq r_0$, а затем, при $R \geq r_0$, асимптотически стремящейся с ростом R к постоянной величине $3\alpha\delta$.

На рис.7 приведены зависимости $\varepsilon(R)$, полученные в молекулярно-динамической модели для тройных стыков границ наклона $\langle 100 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$ при введении разного количества вакансий в расчетный блок. Зависимости получены после охлаждения расчетных блоков до 0 К.

В целом, полученные зависимости имеют вид, согласующийся с формулой (3). При этом линейные части во всех случаях похожи, что свидетельствует, в первую очередь, в пользу сделанного предположения, что избыток энергии на единицу объема дефектной области примерно одинаков для разных большеугловых границ зерен и ими образованных тройных стыков. В случае стыка границ $\langle 111 \rangle$ энергия выше, чем границ $\langle 100 \rangle$, причем графики даже выгибаются кверху, что свидетельствует о более высоком содержании дефектов в области тройного стыка границ $\langle 111 \rangle$ по сравнению со стыком границ $\langle 100 \rangle$. То есть в первом случае свободный объем рассеивается менее эффективно, чем во втором, что уже отмечалось выше. Линейная часть на полученных зависимостях выделяется четко, однако граница между двумя областями, линейной и нелинейной, и, соответственно, эффективный радиус тройного стыка, точно определить сложно. Радиус тройного стыка границ $\langle 100 \rangle$ с ростом введенного свободного объема изменяется слабо: от 5 до 6 Å, тогда как энергетический радиус

стыка границ $\langle 111 \rangle$ при введении 2% условных вакансий может достигать, согласно рис.7 (б), примерно 14 Å.

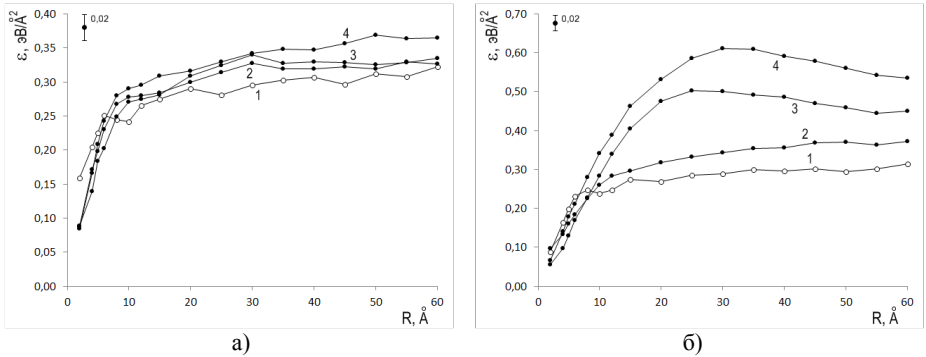


Рис.7. Зависимости величины ε от радиуса расчетной области R : а) для тройных стыков границ наклона $\langle 100 \rangle$ с углами разориентации 18°, 18°, 36°; б) для тройных стыков границ наклона $\langle 111 \rangle$ с углами разориентации 15°, 15°, 30°. 1 – в расчетный блок не вводились вакансии, была проведена только структурная релаксация без предварительного плавления расчетного блока; 2 – вакансии не вводились, но тройной стык создавался путем кристаллизации из расплавленного состояния; 3 – было введено 300 условных вакансий (1%); 4 – было введено 600 условных вакансий (2%).

Для исследования диффузионного радиуса тройных стыков были получены значения коэффициента самодиффузии вдоль стыков в зависимости от радиуса расчетной области. Для тройных стыков, с учетом того, что диффузионный поток происходил вдоль оси цилиндрического расчетного блока, оценка производилась по коэффициенту самодиффузии вдоль оси Z :

$$D_z = \frac{\sum_{i=1}^N (z_{0i} - z_i)^2}{2Nt} . \quad (4)$$

Здесь z_{0i} и z_i – координаты начального и конечного положений (в момент времени t) i -го атома; N – число атомов в расчетном блоке.

Расчетная область при определении коэффициента диффузии вдоль тройного стыка имела форму цилиндра радиусом R и длиной в расчетный блок (рис.6). В компьютерной программе имелась возможность совмещать центр расчетной области (ось цилиндра) с линией тройного стыка, опираясь на полученную в процессе моделирования картину атомных смещений. На рис.8 приведены зависимости коэффициента самодиффузии D_z вдоль рассматриваемых тройных стыков от радиуса R расчетной области при температуре 1500 К.

Как видно на рис.8, по мере уменьшения радиуса R коэффициент самодиффузии увеличивался. Это говорит о том, что диффузионный поток сконцентрирован в сравнительно узкой области, расположенной вдоль линии стыка. При этом, чем более высоких значений достигает коэффициент диффузии D_z при уменьшении R , тем более узким является диффузионный канал.

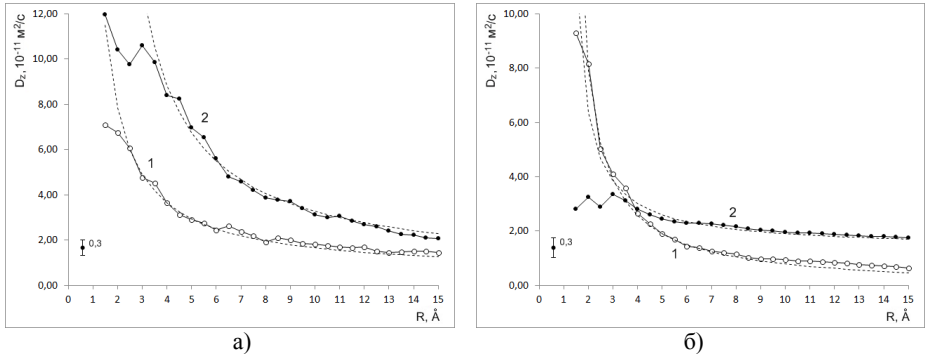


Рис.8. Зависимости коэффициента самодиффузии вдоль тройных стыков границ наклона $\langle 100 \rangle$ $18^\circ/18^\circ/36^\circ$ (а) и $\langle 111 \rangle$ $15^\circ/15^\circ/30^\circ$ (б) от радиуса R расчетной области при температуре 1500 К. 1 – дополнительные вакансии не вводились; 2 – было введено 2% условных вакансий. Пунктирная линия – аппроксимация вида $c_1/(R+c_2)+c_3$.

Значения коэффициента диффузии вдоль тройных стыков, содержащих избыточный свободный объем (зависимости 2 на рис.8), во всех случаях были выше значений, полученных в случае, когда дополнительные вакансии не вводились, кроме значений, найденных при малых радиусах расчетной области для стыков границ $\langle 111 \rangle$. Последнее объясняется относительно большей «размытостью» как самого стыка границ $\langle 111 \rangle$, так и диффузионного канала.

Диффузионный канал тройного стыка не имеет четкой границы, поэтому для определения его радиуса полученные кривые были дополнены теоретическими зависимостями при допущении, что вся диффузия осуществляется вдоль бесконечно узких границ зерен и тройного стыка. В таком случае расхождение кривых, - аппроксимационной и полученной в модели, - даст возможность оценить эффективный радиус тройных стыков. В качестве аппроксимационных кривых использовались кривые вида $c_1/(R+c_2)+c_3$, где c_1 , c_2 , c_3 – константы.

Согласно зависимостям, приведенным на рис.8, диффузионный радиус рассматриваемых стыков границ наклона $\langle 100 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$, не содержащих специально введенный свободный объем, сравнительно небольшой и равен 2-2,5 Å. Стыки, полученные при введении 2% дополнительных вакансий, имеют больший диффузионный радиус. Стыки границ $\langle 100 \rangle$ - примерно 3,5 Å, а стыки границ $\langle 111 \rangle$ - 4-5 Å. Следует заметить, что эти результаты не зависят от того, для какой температуры были получены – найденные значения диффузионных радиусов стыков одинаковы для 1200 и 1500 К.

Для рассматриваемых тройных стыков были получены аррениусовские зависимости $\ln D_2$ от T^{-1} , с помощью которых были определены соответствующие энергии активации самодиффузии Q и предэкспоненциальные множители D_0 . Коэффициенты диффузии вдоль тройных стыков определялись в цилиндрической области радиусом 5 Å. Результаты приведены в таблице 1.

Таблица 1. Энергия активации самодиффузии Q и предэкспоненциальный множитель D_0 для рассматриваемых тройных стыков

	Тройной стык	Q , эВ	D_0 , м ² /с
Дополнительный свободный объемом не вводился	<100> 18°/18°/36°	0,59	$1,6 \cdot 10^{-9}$
	<111> 15°/15°/30°	0,59	$2,6 \cdot 10^{-9}$
Было введено 2% вакансий	<100> 18°/18°/36°	0,41	$1,1 \cdot 10^{-9}$
	<111> 15°/15°/30°	0,43	$1,0 \cdot 10^{-9}$

Для тройных стыков, содержащих избыточный свободный объем, энергия активации самодиффузии оказалась ниже по сравнению со стыками без дополнительного свободного объема: 0,41 эВ для стыков границ <100> 18°/18°/36° и 0,43 эВ для стыков границ <111> 15°/15°/30°. Без введения дополнительного свободного объема тройные стыки имели равную энергию активации - 0,59 эВ. Близкие значения энергии активации диффузии для стыков границ <100> и <111>, по всей видимости, объясняются тем, что аморфноподобная структура в дефектной области стыков, а также в большеугловых границах зерен и границах смешанного типа, имеет примерно равную диффузионную проницаемость, что подтверждалось, например, ранее в [7].

Для тройных стыков сведений по диффузионным характеристикам в литературе очень мало. Для сравнения, в работе Фролова Т. и Мишина Ю. [4] для тройного стыка, созданного без дополнительного введения свободного объема, в меди с помощью молекулярной динамики была получена энергия активации самодиффузии - 0,47 эВ.

В пятой главе приведены результаты исследования структурных трансформаций в нанокристаллической тонкой пленке Ni под действием температуры и деформации. В качестве исходных моделей рассматривались нанокристаллические структуры, полученные в третьей главе (например, рис.5).

При изучении трансформации структуры на примере поликристалла с ориентацией XY (100) был замечен эффект локального плавления и увеличения ширины границы зерен смешанного типа с ростом температуры. Особенно это было заметно при приближении температуры к температуре плавления никеля. При моделировании трансформации структуры с участием малоугловых границ (в случае ориентации XY (111) угол разориентации границ примерно был равен 10°) такого эффекта не наблюдалось – при любой температуре до температуры плавления структура границ наклона оставалась упорядоченной без наличия аморфного слоя.

В случае ориентации XY (100) указанный эффект наблюдался на примере границы смешанного типа, изображенной на рис.9. Левое зерно имело ориентацию XY (100), правое – почти XY (110) и, кроме того, зерна были повернуты вокруг оси Z. Расчетный блок выдерживался при заданной температуре 10 пс (при большей продолжительности на расширение границы зерен накладывалась

ее миграция, что искажало результат), затем проводилось сверхбыстрое охлаждение со скоростью, недостаточной для кристаллизации. Охлаждение проводилось для получения более четких изображений структуры, исключающих тепловые смещения атомов. Аморфную и кристаллическую фазы в этом случае легко было отличить визуально.

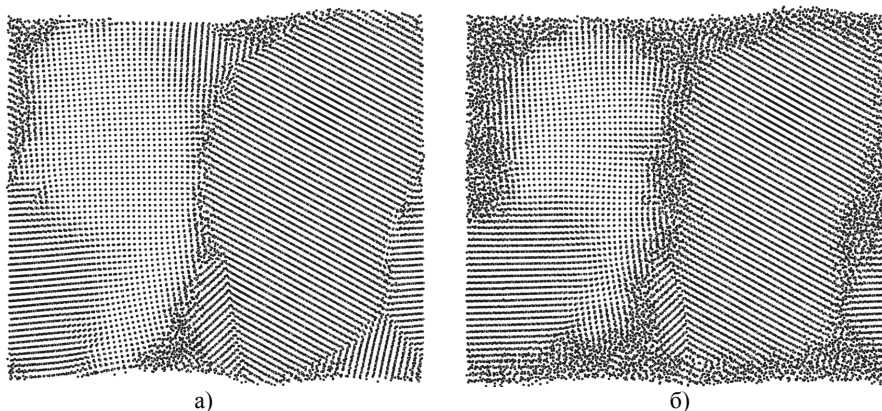


Рис.9. Граница зерен смешанного типа при различной температуре: а) 1400 К, б) 1600 К. Изображения атомной структуры получены при выдерживании 10 пс при рассматриваемой температуре и последующего сверхбыстрого охлаждения.

Полученный результат, помимо прочего, является свидетельством еще одного важного результата, заключающегося в том, что не все границы зерен имеют упорядоченную структуру и могут быть представлены в виде набора чередующихся структурных элементов. Рассмотренная и изображенная на рис.9 граница при высоких температурах представляет собой жидкую прослойку, значительно, по всей видимости, облегчающую процесс зернограничного проскальзывания, что отмечается для большинства металлов при температурах выше $0,7 \cdot T_{пл}$ [16].

Следует также обратить внимание на то, что локальное плавление с ростом температуры происходило интенсивнее вблизи выхода границы зерен на свободную поверхность, что связано, очевидно, со сравнительно большей потенциальной энергией атомов, находящихся в данных областях.

При моделировании деформации рассматриваемых нанокристаллических пленок Ni деформация сжатия или растяжения задавалась путем изменения межатомных расстояний вдоль оси X (рис.10а). Границы, как на рис.5(а), вдоль осей X и Z задавались периодические, вдоль Y – свободные, чтобы расчетный блок имел возможность менять объем и ориентацию кристаллической структуры в процессе пластической деформации. Основное внимание уделялось изучению механизма пластической деформации с участием границ зерен и тройных стыков. Решались следующие вопросы: что преимущественно является инициатором пластических сдвигов – поверхность или граница, имеются ли проявле-

ния самоорганизации в этом случае, генерируются ли дислокации (т.е. внутризеренное скольжение) или механизм пластической деформации в случае нанокристаллической структуры в основном связан с зернограницным проскальзыванием.

На рис.10 приведены изображения стартового расчетного блока с ориентацией XY (111) и примеры картин атомных смещений в процессе деформации растяжения и сжатия. Деформация задавалась достаточной для инициации пластических трансформаций в моделируемом поликристалле – в случаях, представленных на рис.10, она составляла 3%. Деформация проводилась при начальной температуре 0 К. В течение структурных трансформаций, обусловленных пластической деформацией, температура повышалась. Изображения, приведенные на рис.10, получены после заключительного охлаждения.

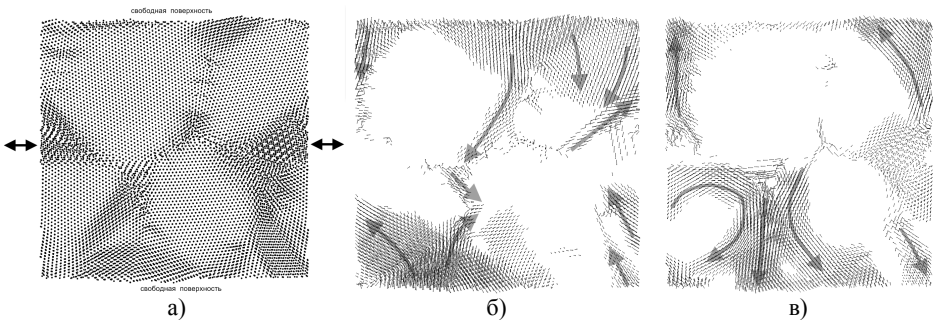


Рис.10. Изображения в плоскости XY стартового расчетного блока (а) и примеры картин атомных смещений (показаны только смещения больше 1,3Å): б) при деформации растяжения 3% вдоль оси X; в) при деформации сжатия -3%. Плоскость XY соответствует ориентации (111).

В процессе пластической деформации, в связи с очень малым размером кристаллических зерен, образование дислокаций в зернах и внутризеренное скольжение не наблюдались. Пластическая деформация в рассматриваемых поликристаллах осуществлялась преимущественно посредством зернограницного проскальзывания. Данный результат согласуется с экспериментальными результатами, касающимися явления сверхпластичности в ультрамелкозернистых материалах [16]. Кроме того, на полученных картинах атомных смещений присутствуют сразу все механизмы, обуславливающие, согласно работам Гуткина М.Ю. и Овидько И.А. [2], пластичность ультрамелкозернистых материалов: зернограницное проскальзывание, диффузия по границам зерен и тройным стыкам, ротационная пластическая деформация зерен (поворот зерен).

При непосредственном наблюдении атомных смещений в процессе компьютерного эксперимента было выяснено, что смещения атомов в первую очередь возникали от свободных поверхностей. Причем, в случае растяжения смещения были направлены от поверхности вглубь расчетного блока, в случае сжатия – наоборот, в сторону поверхности.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Тройные стыки, содержащие избыточный свободный объем, образуются преимущественно в процессе кристаллизации в результате «запирания» плотности жидкой фазы при встрече трех фронтов кристаллизации и, как следствие, концентрирования избыточного свободного объема в тройном стыке после затвердевания. Концентрация условных вакансий (т.е. доля недостающих атомов по сравнению с равновесными тройными стыками) может достигать в области стыка в этом случае 2%.
2. В случае стыка малоугловых границ наклона свободный объем скапливается вблизи ядер зернограницных дислокаций, причем, чем ближе дислокация к месту стыка границ, тем больше она содержит избыточного свободного объема. Для стыка большеуговых границ характерно более равномерное распределение свободного объема.
3. В границах наклона $\langle 100 \rangle$ и образованных ими стыках свободный объем при кристаллизации рассеивается эффективнее, чем в стыках, образованных границами $\langle 111 \rangle$. По этой же причине эффективный энергетический радиус тройного стыка границ $\langle 100 \rangle$ с ростом введенного свободного объема изменяется слабо: от 5 до 6 Å, тогда как радиус стыка границ $\langle 111 \rangle$ при введении 2% условных вакансий до кристаллизации может достигать 14 Å.
4. Интенсивность диффузии вдоль тройных стыков, содержащих избыточный свободный объем, выше, чем вдоль стыков, образованных без дополнительного введения свободного объема при кристаллизации. Диффузионный радиус тройных стыков в первом случае также выше: примерно 3,5 Å для стыков большеуговых границ наклона $\langle 100 \rangle$ и 4-5 Å для стыков границ $\langle 111 \rangle$ при введении 2% условных вакансий до кристаллизации (для стыков, не содержащих специально введенный свободный объем, диффузионный радиус примерно равен 2-2,5 Å).
5. Для тройных стыков, содержащих избыточный свободный объем (2% условных вакансий), энергия активации самодиффузии, найденная по аррениусовским зависимостям, ниже по сравнению со «структурно правильными» стыками: 0,41 эВ для стыков границ $\langle 100 \rangle$ $18^\circ/18^\circ/36^\circ$ и 0,43 эВ для стыков границ $\langle 111 \rangle$ $15^\circ/15^\circ/30^\circ$. Без введения дополнительных вакансий до кристаллизации энергия активации самодиффузии для тех же стыков имеет значение 0,59 эВ.
6. При концентрировании избыточного свободного объема в тройных стыках зачастую происходит формирование сравнительно небольшого кристаллического субзерна (от одного до нескольких нанометров в диаметре), имеющего отличную от стыкующихся зерен ориентацию, и находящегося в состоянии растяжения.
7. При температурах, близких к температуре плавления, происходит локальное плавление и увеличение ширины границ смешанного типа с образованием аморфного слоя. В случае малоугловых границ подобный эффект не наблюдается – они имеют упорядоченную структуру вплоть до температуры плавления.

8. Пластическая деформация в нанокристаллической пленке Ni (с размером зерен порядка нескольких нанометров) осуществляется преимущественно посредством зернограницного проскальзывания без образования дислокаций в зернах и внутризеренного скольжения.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Palumbo G., Aust K.T.* A coincident axial direction (CAD) approach to the structure of triple junctions in polycrystalline materials // *Scripta Metallurgica et Materialia*. - 1990. - V.24. - P. 1771-1776.
2. *Гуткин М.Ю., Овидько И.А.* Предел текучести и пластическая деформация нанокристаллических материалов // *Успехи механики*. - 2003. - №1. - С. 68-125.
3. *Schaefer H.E., Wurschum R, Birringer R., Gleiter H.* Structure of nanometer-sized polycrystalline iron investigated by positron lifetime spectroscopy // *Physical Review B*. - 1988. - V.38. - P.9545.
4. *Frolov T., Mishin Y.* Molecular dynamics modeling of self-diffusion along a triple junction // *Physical Review B*. - 2009. - V.79. - 174110.
5. *Lipnitskii A.G., Nelasov I.V., Kolobov Yu.R.* Self-Diffusion Parameters of Grain Boundaries and Triple Junctions in Nanocrystalline Materials // *Defect and Diffusion Forum*. - 2011. - V. 309-310. - P. 45-50.
6. *Поletaев Г.М., Дмитриенко Д.В., Старостенков М.Д.* Атомная структура тройных стыков границ наклона в никеле // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. - 2012. - Т.9, №3. - С. 344-348.
7. *Поletaев Г.М., Дмитриенко Д.В., Дябденков В.В., Микрюков В.Р., Старостенков М.Д.* Молекулярно-динамическое исследование диффузионной проницаемости тройных стыков границ наклона и границ смешанного типа в никеле // *Физика твердого тела*. - 2013. - Т.55, №9. - С. 1804-1808.
8. *Козлов Э.В., Конева Н.А., Попова Н.А.* Зеренная структура, геометрически необходимые дислокации и частицы вторых фаз в поликристаллах микро- и мезоуровня // *Физическая мезомеханика*. - 2009. - Т.12, №4. - С. 93-106.
9. *Nazarov A.A., Bachurin D.V., Shenderova O.A., Brenner D.W.* On the origin and energy of triple junction defects due to the finite length of grain boundaries // *Interface Science*. - 2003. - V.11, №4. - P. 417-424.
10. *Caro A., Van Swygenhoven H.* Grain boundary and triple junction enthalpies in nanocrystalline metals // *Physical Review B*. - 2001. - V.63. - P. 4101-4105.
11. *Rodriguez P., Sundararaman D., Divakar R., Raghunathan V.S.* Structure of grain boundaries in nanocrystalline and quasicrystalline materials // *Chemistry for Sustainable Development*. - 2000. - V.8. - P. 69-72.
12. *Bokstein B., Ivanov V., Oreshina O., Peteline A., Peteline S.* Direct experimental observation of accelerated Zn diffusion along triple junctions in Al // *Materials Science and Engineering: A*. - 2001. - V. 302, №1. - P. 151-153.
13. *Гулевский С.А.* Жидкометаллическое травление тройных стыков зерен в системе Cu-Bi. Автореферат диссертации на соискание ученой степени к.ф.-м.н. - Москва, 2008. - 24 с.
14. *Cleri F., Rosato V.* Tight-binding potentials for transition metals and alloys // *Physical Review B*. - 1993. - V.48., №1 - P. 22-33.
15. *Смитлз К.Дж.* Металлы: Справ. - М.: Металлургия, 1980. - 447 с.
16. *Кайбышев О.А., Валиев Р.З.* Границы зерен и свойства металлов. - М: Металлургия, 1987. - 216 с.

Основные результаты диссертации изложены в следующих работах:

Статьи, опубликованные в журналах, рекомендованных ВАК Минобрнауки РФ, и/или индексируемых в Web of Science или Scopus:

1. Полетаев Г.М., Новоселова Д.В., Старостенков М.Д., Мартынова Е.В., Кайгородова В.М. Исследование условий формирования напряженных тройных стыков границ зерен в никеле // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. - 2014. - Т.11, №4. - С. 495-500.
2. Poletaev G.M., Kaygorodova V.M., Elli G.A., Uzhakina O.M., Baimova J.A. Diffusion of the atomic clusters over the (111) and (100) surfaces in Ni crystal // Письма о материалах. - 2014. - Т.4, №4. - С. 218-221.
3. Полетаев Г.М., Новоселова Д.В., Кайгородова В.М., Старостенков М.Д. Особенности образования свободного объема в тройных стыках границ наклона $\langle 111 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$ в Ni при кристаллизации // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. - 2015. - Т.12, №2. - С. 253-258.
4. Poletaev G., Novoselova D., Kaygorodova V., Starostenkov M. The formation of excess free volume in triple junctions of $\langle 111 \rangle$ and $\langle 100 \rangle$ tilt boundaries in Ni at crystallization // AIP Conference Proceedings. - 2016. - V. 1698. - 040005.
5. Poletaev G.M., Novoselova D.V., Kaygorodova V.M. The causes of formation of the triple junctions of grain boundaries containing excess free volume in fcc metals at crystallization // Solid State Phenomena. - 2016. - V. 249. - P. 3-8.
6. Полетаев Г.М., Новоселова Д.В., Кайгородова В.М., Зоря И.В., Старостенков М.Д. Эффективный энергетический радиус тройных стыков границ наклона в Ni // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. - 2016. - Т.13, №2. - С. 238-244.
7. Новоселова Д.В., Полетаев Г.М., Кайгородова В.М., Медведева Е.С., Старостенков М.Д. Исследование методом компьютерного моделирования формирования избыточного свободного объема в тройных стыках границ наклона в никеле при кристаллизации // Вестник Тамбовского университета. Серия: Естественные и технические науки. - 2016. - Т.21. - №3. - С. 1191-1194.
8. Полетаев Г.М., Новоселова Д.В., Кайгородова В.М., Зоря И.В., Старостенков М.Д. Диффузионный радиус тройных стыков границ наклона в Ni // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. - 2016. - Т.13, №3. - С.348-354.
9. Полетаев Г.М., Новоселова Д.В., Кайгородова В.М., Зоря И.В., Старостенков М.Д., Пал С. Структурные трансформации в нанокристаллическом Ni под действием деформации // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. - 2016. - Т.13, №4. - С. 449-455.

Другие публикации:

10. Полетаев Г.М., Мартынова Е.В., Кайгородова В.М. Компьютерное моделирование структурных превращений, сопровождающих кристаллизацию металла // Сборник материалов научных чтений им. И.А. Одингса «Механические

свойства современных конструкционных материалов», Москва. - 2014. - С. 237-238.

11. *Полетаев Г.М., Кайгородова В.М., Элли Г.А., Ужакина О.М., Старостенков М.Д.* Исследование диффузии кластеров атомов по поверхностям (111) и (100) кристалла Ni // Сборник научных статей II Российско-Казахстанской молодежной научно-технической конференции «Новые материалы и технологии», Барнаул. - 2014. - С. 17-21.

12. *Poletaev G.M., Novoselova D.V., Kaygorodova V.M., Starostenkov M.D.* The study of conditions of formation of the triple junctions containing excess free volume at crystallization // Effect of external influences on the strength and plasticity of metals and alloys: Book of the International seminar articles / Ed. M.D. Starostenkov. – Barnaul: AltSTU Publ., 2015. – P. 111-112.

13. *Полетаев Г.М., Новоселова Д.В., Кайгородова В.М., Старостенков М.Д.* Формирование избыточного свободного объема в тройных стыках границ зерен в металлах при кристаллизации // Материалы II всероссийской научной конференции молодых ученых с международным участием «Перспективные материалы в технике и строительстве». - Томск: Изд-во ТГАСУ, 2015. - С. 192-195.

14. *Полетаев Г.М., Новоселова Д.В., Старостенков М.Д., Кайгородова В.М.* Причины формирования тройных стыков границ зерен, содержащих избыточный свободный объем, в ГЦК-металлах при кристаллизации // Наноинженерия. - 2015. - №6. - С. 36-40.

15. *Полетаев Г.М., Новоселова Д.В., Кайгородова В.М., Старостенков М.Д.* Энергетический и диффузионный радиусы тройных стыков границ наклона в Ni // Сборник трудов XIV Международной школы-семинара «Эволюция дефектных структур в конденсированных средах». – Барнаул : Изд-во АлтГТУ, 2016. С. 135-137.

16. *Полетаев Г.М., Новоселова Д.В., Кайгородова В.М., Зоря И.В., Старостенков М.Д.* Компьютерное моделирование диффузии вдоль тройных стыков границ наклона в Ni, содержащих избыточный свободный объем // Сборник научных статей IV Российско-Казахстанской молодежной научно-технической конференции «Новые материалы и технологии». – Барнаул. Изд-во АлтГУ, 2016. С. 44-51.