

07,11,01

Кинетика ранних стадий распада в разбавленном ОЦК-сплаве Fe–Cu–Ni–Al: MC + MD-моделирование

© И.Н. Карькин¹, Л.Е. Карькина¹, Ю.Н. Горностырев^{1,2}, А.П. Коржавый^{1,3}

¹ Институт физики металлов УрО РАН,
Екатеринбург, Россия

² Институт квантового материаловедения,
Екатеринбург, Россия

³ Department of Materials Science and Engineering, KTH Royal Institute of Technology,
Stockholm, Sweden

E-mail: lidiakarkina@gmail.com

(Поступила в Редакцию 26 ноября 2018 г.

В окончательной редакции 26 ноября 2018 г.

Принята к публикации 11 декабря 2018 г.)

С использованием комбинированного подхода, включающего Монте–Карло и молекулярно-динамическое моделирование, исследована кинетика распада и образования выделений в многокомпонентном низколегированном сплаве Fe–1.5Cu–2Ni–1.5Al (at%). Показано, что формирование наночастиц Cu, поверхностно-обогащенных Ni и Al (co-precipitation режим), включает несколько стадий: (i) формирование кластеров, состоящие из нескольких атомов Cu, (ii) обогащение их атомами Ni и Al и (iii) перераспределение атомов Ni и Al с формированием приповерхностного слоя, обеспечивающего стабилизацию наночастиц Cu. Обсуждаются наблюдаемые особенности структуры выделений и их устойчивость в сплавах Fe–Cu–Ni–Al.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 18-12-00366).

DOI: 10.21883/FTT.2019.04.47420.326

1. Введение

Во многих случаях высокие свойства сплавов достигаются не в результате выделения равновесных продуктов фазовых превращений, а благодаря формированию тех или иных дисперсных метастабильных структур [1–4]. Поэтому все большее внимание исследователей привлекают физические процессы, определяющие ранние стадии распада сплавов и образования выделений, а также кинетические и термодинамические факторы, обеспечивающие стабильность нано-структурного состояния [1]. Существующие модельные представления о механизмах стабилизации дисперсных выделений указывают в качестве главных факторов упругие напряжения, обусловленные решеточным несоответствием между выделением и матрицей [1,2], зависимость состава выделений от их размера [3], образование стабилизирующей оболочки вследствие сегрегации одного из компонент сплава на поверхности выделения [4]. Однако вопрос о применимости развиваемых представлений к конкретным системам остается предметом дискуссий.

В последние десятилетия особое внимание привлекает система Fe–Cu, в которой высокие прочностные свойства при сохранении пластичности достигаются благодаря образованию наноразмерных выделений ОЦК–Cu в матрице α -Fe [5–10]. Кинетика распада пересыщенных твердых растворов Fe–Cu, Fe–Cu–Mn, Fe–Cu–Ni, Fe–Cu–Ni–Al исследовалась экспериментально во многих работах [10–16]. Низкоуглеродистые стали легированные Cu и дополнительно Ni, Al и Mn, после старения

при 500–550° в течение 1–2 часов позволяют получить очень высокую прочность, достигающую 1600 МПа [11]. В работах [12,13] проведен анализ микроструктуры сплавов Fe–Cu–Ni–Al–Mn с различным суммарным содержанием легирующих элементов от 6.3 до 12.4 at%. Во всех случаях прочностные свойства сложнолегированных сплавов были выше чем для бинарного Fe–Cu-сплава. При этом высокие прочностные свойства сплава с низким содержанием легирующих элементов обусловлены формированием частиц Cu, поверхность которых обогащена атомами Ni и Al (co-precipitation режим [15,16]). При повышении содержания легирующих элементов Ni, Al кинетика распада меняется и в результате старения формируются частицы выделений на основе Cu и интерметаллического соединения B2 NiAl. Переход от низко- к высоколегированным сплавам существенно зависит от содержания в них Ni и Al и от отношения Ni/Cu и Al/Cu [11,14–16]. В частности, показано, что при содержании Ni меньше ~ 2.5 at% частицы B2 NiAl не образуются.

Моделирование кинетики распада в сплаве Fe–Cu–Ni–Mn была проведено в [17] с использованием метода фазовых полей с параметризацией свободной энергии в рамках подхода CALPHAD. В результате были выяснены качественные особенности распада и показано, что на ранних стадиях Ni и Mn распределены внутри выделений Cu, а при увеличении времени перемещаются в область межфазной границы. Для выяснения закономерностей, определяющих зарождение и развитие фазовых

и структурных составляющих необходим переход на атомный уровень описания, последовательно учитывающего особенности межатомных взаимодействий в сплаве и кинетику перераспределения компонент. Распад и образование выделений в ОЦК-сплавах Fe–Cu–Ni и Fe–Cu–Mn исследован в [9,18] методом статистического термодинамического моделирования Монте–Карло с первопринципными эффективными межатомными взаимодействиями. Показано, что Ni содействует образованию выделений Cu и сегрегирует на межфазную поверхность Cu–Ni, в то время как Mn не оказывает существенного влияния на распад.

В настоящей работе с использованием комбинированного подхода, включающего Монте–Карло (MC) и молекулярно-динамическое (MD) моделирование, исследована кинетика формирования выделений в многокомпонентном низколегированном сплаве Fe–1.5 at%Cu–2.0 at%Ni–1.5 at%Al. Изучены структурные особенности и последовательные этапы формирования наночастиц Cu, обогащенных Ni и Al. Установлено, что перераспределение атомов Al и Ni в процессе отжига приводит к формированию слоя на поверхности наночастиц Cu, который стабилизирует выделения, препятствуя их росту.

2. Метод моделирования

Моделирование кинетики распада в разбавленном ОЦК-сплаве Fe–1.5 at%Cu–2.0 at%Ni–1.5 at%Al проводилось с использованием комбинированного подхода, сочетающего методы Монте–Карло и молекулярной динамики с использованием пакета LAMMPS [19]. Ключевым моментом при MC- и MD-моделировании является выбор потенциалов межатомного взаимодействия, адекватно описывающих свойства исследуемой системы. Нами были использованы многочастичные EAM-потенциалы межатомных взаимодействий, построенные на основе схемы, предложенной в [20]. Для чистых металлов Fe, Cu, Ni, Al, были использованы потенциалы, адаптированные под LAMMPS [21]. При построении функции $\Phi^{ab}(r)$ парных взаимодействий между атомами различных сортов a и b была использована модифицированная схема вычисления, предложенная в [20], а именно

$$\Phi^{ab}(r) = g \left[\frac{f^a(r)}{f^b(r)} \Phi^{aa}(r) + \frac{f^b(r)}{f^a(r)} \Phi^{bb}(r) \right], \quad (1)$$

где $\Phi^{aa}(r)$ и $\Phi^{bb}(r)$ — энергии парного взаимодействия между атомами сорта a и b , $f^a(r)$ и $f^b(r)$ — соответствующие электронные плотности. В работе [20] параметр g выбирался равным 1/2; в настоящей работе выбор параметра g проводился на основании сопоставления с результатами первопринципных расчетов [22] энергии взаимодействия примесных атомов, погруженных в матрицу α -Fe, и расположенных на расстоянии 1, 2 и т.д. до 8-ой координационных сфер друг от друга (см. табл. 1). При моделировании разбавленных сплавов именно эти взаимодействия определяют структуру частиц на ранних

Таблица 1. Значения параметра g в формуле (1)

Сорт атомов	Fe–Al	Fe–Cu	Fe–Ni	Ni–Al	Ni–Cu	Al–Cu
Параметр g	0.67	0.35	0.35	1.0	0.55	0.75

стадиях распада. В табл. 2 и табл. 3 приведено сопоставление результатов расчетов *ab initio* взаимодействий пар атомов в матрице α -Fe и расчетов с использованием EAM потенциалов межатомного взаимодействия для значений g , представленных в табл. 1.

Из табл. 2 и 3 видно, что качественно характер взаимодействия пар атомов, полученных из расчетов *ab initio*, и с использованием EAM потенциала совпадают, а именно: значительное притяжение между парами атомов Cu–Cu, Ni–Al и Al–Cu; более слабое притяжение для пар Ni–Cu и Ni–Ni; достаточно сильное отталкивание для пары Al–Al. Можно отметить, что *ab initio* взаимодействия [22] быстро убывают с увеличением расстояния между атомами и практически равны нулю на 3-ей координационной сфере. Взаимодействия, вычисленные с использованием EAM-потенциала, спадают значительно медленнее. В ряде случаев есть расхождение знака парных взаимодействий на 2-ой координационной сфере.

Моделирование комбинированным методом (MC + MD) проводилось на кристаллите размером $30 \times 30 \times 30$ параметров ОЦК-решетки α -Fe. В стартовой конфигурации атомы Ni, Cu и Al занимали случайные позиции, замещая атомы Fe в соответствии с заданной концентрацией сплава (1.5 at%Cu, 2.0 at%Ni, 1.5 at%Al). Использовались периодические граничные условия вдоль всех трех направлений. Расчеты проводились при температуре 775 K, которая является типичной при экспериментальном изучении процессов старения в рассматриваемых сталях. С целью выяснения роли выделений Cu в развитии процессов распада в Fe–Cu–Ni–Al MC моделирование производилось в два этапа. На первом этапе атомы Ni и Al оставались фиксированными в стартовых позициях, проводился обмен только между атомами Fe и Cu. На каждом шаге MC случайно выбирался атом типа 1 (Fe) и типа 2 (Cu) и проводился их последующий обмен при данной температуре в соответствии с алгоритмом Метрополиса [23]. Полное число MC-шагов на первом этапе составляло $4.0 \cdot 10^5$. На 2-ом этапе случайно выбирались пары атомов, и проводился обмен атомов Fe с примесными атомами в последовательности Al, Ni, Cu. Выбранная последовательность соответствует убыванию коэффициента диффузии соответствующих атомов в матрице Fe [8]. Число MC-шагов на 2-ом этапе составляло $\sim 7.0 \cdot 10^5$. MD-релаксация кристаллита рассматриваемого сплава осуществлялась через каждые 10^4 MC-шагов, что является достаточным, так как в ОЦК Fe-изменение энергии при MD-релаксации невелико [24].

Таблица 2. Энергии взаимодействия (eV) для пар атомов Ni–Ni, Cu–Cu и Al–Al в матрице α -Fe (выигрыш по сравнению с энергией атомов, расположенных на 8-ой координационной сфере)

№ кord. сферы	Ni–Ni (<i>ab initio</i>) FM, PM	Ni–Ni (EAM)	Al–Al (<i>ab initio</i>) FM, PM	Al–Al (EAM)	Cu–Cu (<i>ab initio</i>) FM, PM	Cu–Cu (EAM)
1	0.03 –0.02	–0.003	0.15 0.23	0.082	–0.17 –0.08	–0.13
2	–0.01 –0.01	–0.004	0.11 0.03	0.15	–0.08 –0.02	–0.11
3	0.03 0.0	–0.003	–0.02 –0.02	0.058	0.01 0	–0.02

Примечание. Для *ab initio* результатов приведены данные для ферромагнитного (FM) и парамагнитного (PM) состояний сплава.

Таблица 3. Энергии взаимодействия (eV) для пар атомов Ni–Cu, Al–Cu и Ni–Al в матрице α -Fe

№ кord. сферы	Ni–Cu (<i>ab initio</i>) FM, PM	Ni–Cu (EAM)	Al–Cu (<i>ab initio</i>) FM, PM	Al–Cu (EAM)	Ni–Al (<i>ab initio</i>) FM, PM	Ni–Al (EAM)
1	–0.09 –0.06	–0.072	–0.17 –0.04	–0.10	–0.13 –0.09	–0.07
2	–0.05 –0.02	–0.077	0.01 0.01	–0.084	0.05 0.01	–0.13
3	0.02 0	–0.013	0 0	–0.035	0.01 0.01	–0.06

3. Результаты моделирования

На рис. 1 показана зависимость потенциальной энергии в сплаве Fe–Cu–Ni–Al в зависимости от числа шагов МС при условии, что обмен происходит только между атомами Fe и Cu, а остальные атомы (Ni, Al) сохраняют свои начальные позиции в ОЦК-решетке. На кривой зависимости потенциальной энергии $E_{pot}(n_{MC})$ системы от числа шагов МС можно выделить три стадии; конфигурации частиц Cu на различных стадиях показаны на рис. 2. На стадии I начинают формироваться кластеры атомов Cu (рис. 2, a), которые не имеют четко выраженной границы, отделяющей частицу от матрицы, средняя по кластеру концентрация не превосходит (5–7) at%. Такие кластерные конфигурации не являются устойчивыми; в процессе моделирования распадаются в одном месте кристаллита и образуются в другом. При этом концентрация свободных атомов Cu в объеме также остается высокой.

На переходной стадии II концентрация отдельных атомов Cu в объеме матрицы значительно уменьшается. Мелкие кластеры могут распадаться и вновь образовываться не только на стадии II, но и на стадии III, однако их концентрация невелика (рис. 2, b). На переходной стадии II начинают формироваться устойчивые частицы размером 1–3 нм, состоящие преимущественно из атомов Cu. Центральное ядро таких частиц сохраняется в течение всей переходной стадии и последующей

стадии III. Группа таких частиц выделена пунктиром на рис. 2, b, c).

С момента образования ядра частицы происходит перестройка атомов Cu только вблизи ее поверхности. Это приводит к изменению конфигурации частицы без существенного смещения ее положения в матрице. На стадии III формирование частиц в основном заканчивается и можно достаточно хорошо выделить поверхность, разграничивающую внутреннюю часть частицы и матрицы. Поверхность часто имеет кристаллографическую

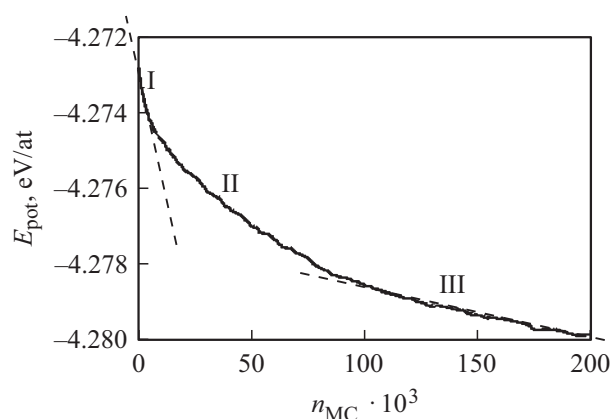


Рис. 1. Изменение потенциальной энергии системы в зависимости от числа шагов МС. Обмен происходит только между атомами Fe и Cu.

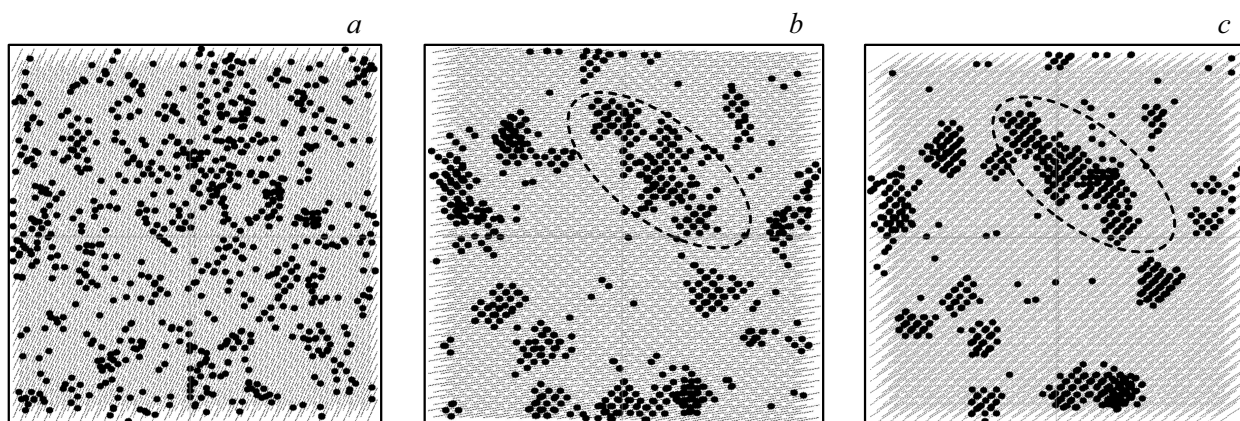


Рис. 2. Конфигурации частиц Cu на различных стадиях их образования. *a* — стадия I, *b* — стадия II, *c* — стадия III. Обозначения стадий показаны на рис. 1. Мелкие точки — атомы Fe, крупные точки — атомы Cu.

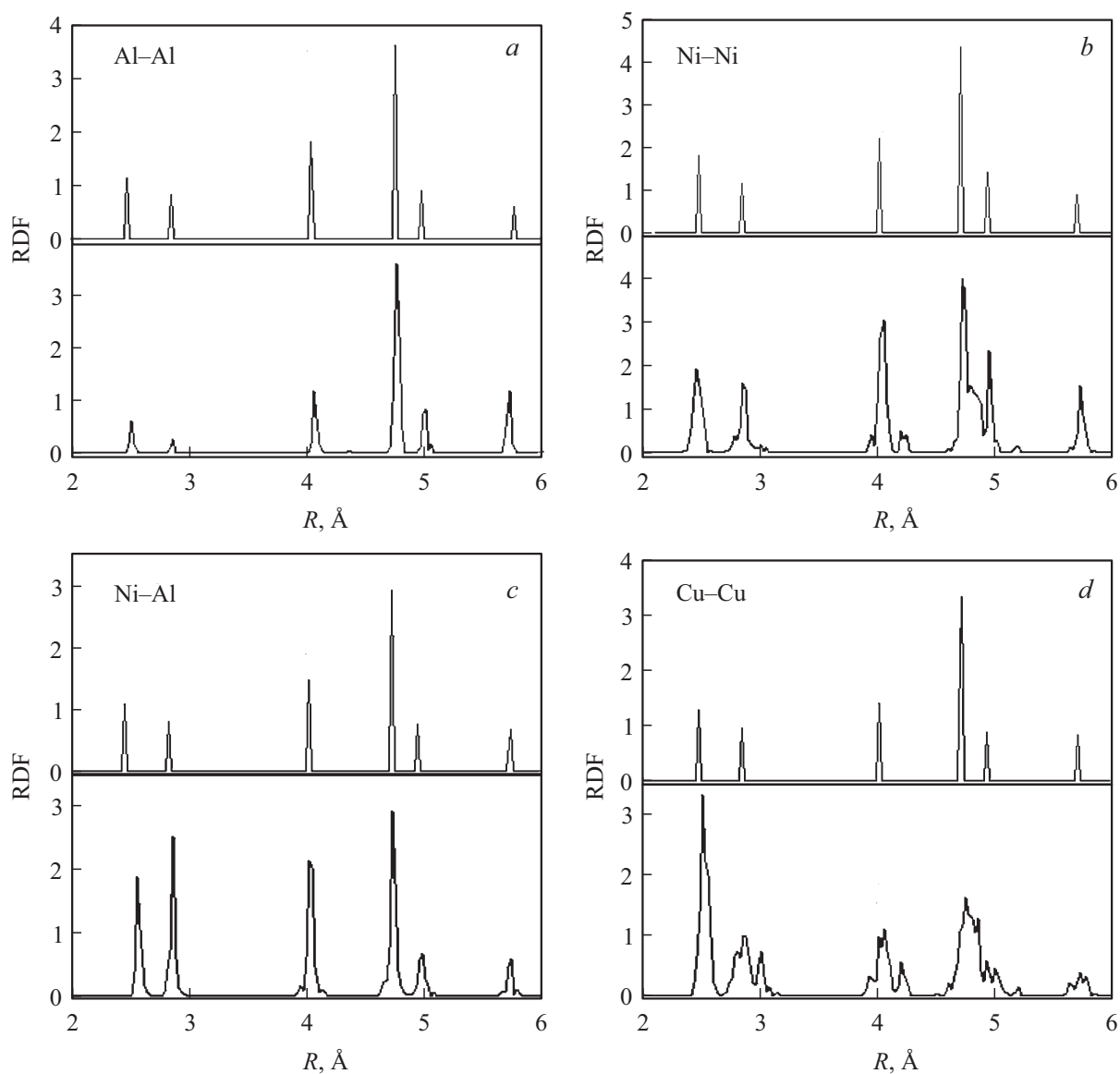


Рис. 3. Радиальные функции распределения для пар атомов Al–Al (*a*), Ni–Ni (*b*), Ni–Al (*c*), Cu–Cu (*d*). На каждом из графиков верхняя кривая (тонкая линия) соответствует стартовой конфигурации, нижняя кривая (жирная линия) — после 104 шагов MC + MD.

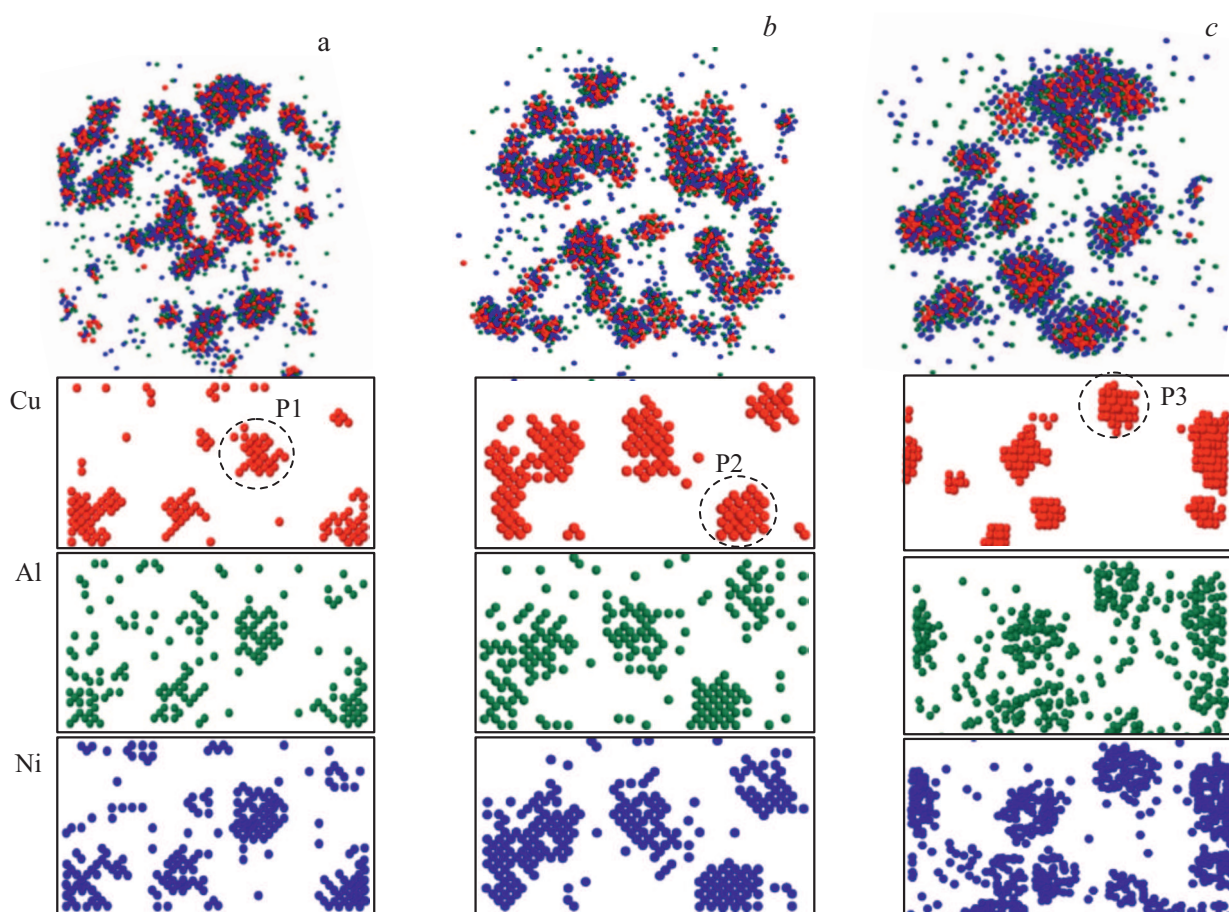


Рис. 4. Конфигурации частиц Cu–Ni–Al на конечных стадиях их образования для различных стартовых конфигураций, отвечающих *a* — I стадии; *b* — II стадии; *c* — III стадии (на рис. 2, *a*). Представлены распределение частиц всех атомов в кристаллите (верхний рисунок) и распределение отдельных элементов Cu, Al и Ni в фрагменте кристаллита размером $40 \times 20 \times 20$ параметров решетки.

огранку плоскостями $\{110\}$ и $\{100\}$. Дальнейший рост частиц, изменение их формы происходит преимущественно за счет присоединения или обмена атомов, расположенных на поверхности частиц.

На рис. 3 представлены радиальные функции распределения для пар атомов Al–Al (*a*), Ni–Ni (*b*), Ni–Al (*c*) и Cu–Cu (*d*) в стартовой конфигурации и после первых 10^4 шагов МС. В начальном состоянии пары примесных атомов преимущественно расположены на расстоянии 4-ой координационной сферы друг от друга, что соответствует случайному их распределению в ОЦК-решетке Fe. Первые 10^4 МС шагов соответствуют обмену атомами Fe–Al (как отмечалось в разделе 2, Al имеет самый высокий коэффициент диффузии в ОЦК Fe). На нижней части рис. 3, *a*) приведена радиальная функция распределения (RDF) пары атомов Al–Al после первых 10^4 шагов МС. Хотя пики на графике зависимости $RDF(R)$ несколько уширяются, атомы Al остаются преимущественно на прежнем расстоянии друг относительно друга, то есть случайное их распределение в решетке Fe сохраняется. Аналогичная картина наблюдается и для распределения атомов Ni–Ni (ниж-

няя кривая на рис. 3(*b*)). Изменение относительной высоты пиков после 10^4 МС-шагов (рис. 3, *c*) указывает на тенденцию к образованию Ni–Al-пар в положении вторых соседей. Иная ситуация наблюдается для пар атомов Cu–Cu (рис. 3, *d*); существенно увеличивается число пар атомов на 1-ой и 2-ой координационных сферах, что соответствует зарождению кластеров Cu, а число пар атомов Cu–Cu на 4-ой сфере заметно уменьшается. Это же видно и из визуальной картинке атомной конфигурации атомов Cu (см. рис. 4, *a*). Таким образом, после 10^4 МС-шагов можно говорить о формировании определенного ближнего порядка в сплаве и образовании кластеров атомов Cu. В то же время атомы Ni (как и атомы Al) после завершения первых 10^4 шагов МС остаются преимущественно в твердом растворе. Аналогичная ситуация наблюдается и при увеличении продолжительности стартовых МС-шагов. Таким образом, перераспределение атомов Ni и Al в сплаве рассматриваемого состава начинается только после формирования кластеров или частиц Cu.

Для исследования влияния нановыделений Cu на кинетику распада в сплаве Fe–Cu–Ni–Al проводилось

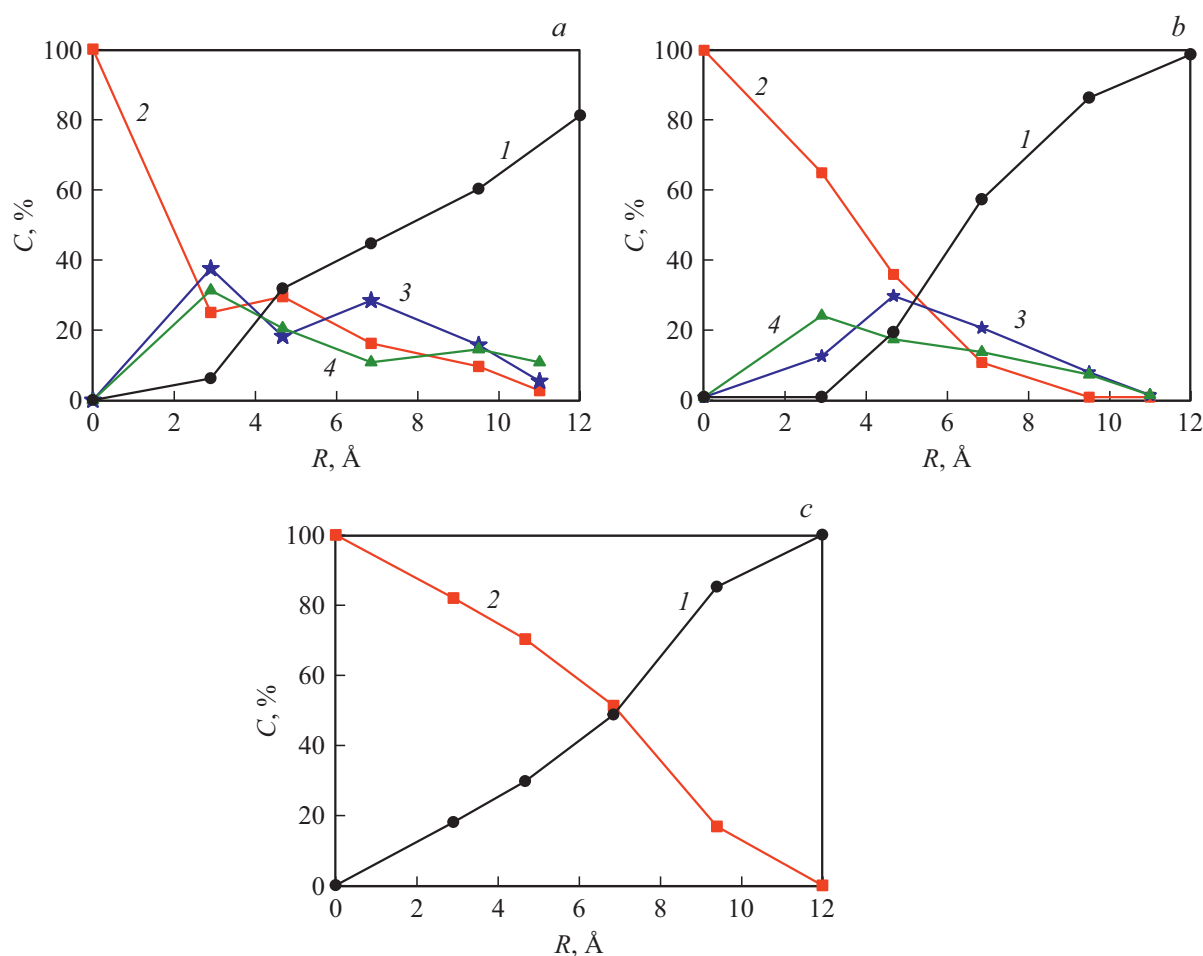


Рис. 5. Распределение по радиусу атомов различных сортов Fe (кривая 1), Cu (кривая 2), Ni (кривая 3) и Al (кривая 4), в частицах P1 (a), P2 (b) и в частице бинарного сплава Fe–Cu (c).

MC + MD моделирования при учете обмена атомов Fe со всеми примесными атомами в последовательности Al, Ni, Cu. При этом, в качестве стартовой использовались 3 различные конфигурации, отвечающие I–III стадиям формирования частиц Cu в матрице (см. рис. 2, a–c). Для каждого из отдельных вариантов обмена Fe ↔ Al, Fe ↔ Ni или Fe ↔ Cu длительность процедуры MC после формирования стартовой конфигурации составляла $2 \cdot 10^4$ шагов с последующей MD-релаксацией. На рис. 4 показаны конфигурации выделений в кристаллите после завершения $6 \cdot 10^5$ шагов MC + MD. На верхнем фрагменте показано распределение частиц для всех атомов в кристаллите. На нижних фрагментах в выделенном объеме представлено распределение атомов Cu, Al и Ni в выделенном объеме кристаллита. На рисунках выделены частицы P1, P2, P3, типичные по размеру для каждого из рассматриваемых вариантов. Видно, что размер частиц в последовательности от (a) к (c) возрастает, при этом каждый из элементов Al и Ni повторяют пространственное распределение атомов Cu. Анализ атомной структуры частиц обнаруживает цепочки упорядоченных Al–Ni-атомов, что указывает на

существование ближнего порядка с преобладанием вторых соседей в расположении атомов Ni и Al в переходном слое. Различие с экспериментальными наблюдениями [25], где в переходном слое наблюдалось упорядочение атомов Ni и Al типа B2, обусловлено особенностями использованного здесь Ni–Al межатомного потенциала, предсказывающего энергетическую предпочтительность атомов Ni и Al в положении вторых соседей (см. табл. 3). Тем не менее, мы полагаем, полученные результаты правильно воспроизводят основные особенности формирования выделений в сплаве Fe–Cu–Ni–Al с низкой концентрацией легирующих элементов.

На рис. 5 для частиц P1, P2 и частиц Cu в бинарном сплаве представлено распределение каждого из сортов атомов в зависимости от расстояния до центра частицы. Распределения соответствуют одинаковому числу шагов MC, начиная со стартовой конфигурации. Видно, что во всех случаях атомы Cu в центре частицы расположены компактно, при этом атомы Fe, Ni и Al находятся преимущественно на периферии частицы, а максимальное значение концентрации Ni и Al достигается преимущественно на границе между частицей и матрицей.

Можно условно принять за радиус частицы размер области вблизи ее центра, в которой концентрация атомов Cu превосходит 50%. Тогда для частицы P1 радиус области, занятой Cu составляет примерно 2 Å, для частицы P2 — 4 Å, для частицы P3 — 7 Å. Указанные размеры частиц практически совпадают с размером выделений, формирующихся в бинарном сплаве Fe–Cu к концу стадий I, II и III (рис. 2). Таким образом можно заключить, что для рассматриваемого сплава Fe–Cu–Ni–Al формирование оболочки из атомов Ni и Al (co-precipitation) предотвращает рост частиц Cu, образовавшихся на предшествующей стадии.

4. Обсуждение результатов

Кинетика формирования выделений в многокомпонентном низколегированном сплаве Fe–1.5 at%Cu–2.0 at%Ni–1.5 at%Al изучена с использованием атомистического моделирования методом MC + MD. Последовательные этапы формирования наночастиц рассмотрены на стадии образования кластеров Cu, формирования устойчивых зародышей и первичного роста обогащенных Cu-частиц. Указанные стадии соответствуют областям I–III на кривой изменения потенциальной энергии системы от числа MC-шагов (см. рис. 2). Показано, что для низколегированного сплава прежде всего формируются кластеры, состоящие из нескольких (не более 1–2 десятков) атомов Cu. Хотя атомы Al и Ni имеют более высокий коэффициент диффузии в матрице ОЦК Fe, формирования кластеров, обогащенных атомами Ni и Al, не происходит. Это наблюдение является прямым подтверждением широко обсуждаемого в литературе [9,13–15] факта образования независимых зародышей частиц NiAl только в сплавах с существенно более высоким содержанием Ni. В общем случае, кинетика распада определяется движущей силой образования выделений, концентрацией легирующих элементов и их диффузионной подвижностью. Для сплавов Fe–Cu–Ni–Al с близким содержанием Cu, Ni и Al решающим фактором в процессе зарождения частиц является, по-видимому, энергия взаимодействия между атомами Cu, которая существенно превосходит другие типы взаимодействия (табл. 2,3). При повышении концентрации Ni определяющими становятся кинетические факторы, что приводит к смене механизма распада.

При MC + MD-моделировании установлено, что в рассматриваемом сплаве Fe–Cu–Ni–Al образуются частицы меди, поверхность которых обогащена атомами Ni и Al (рис. 4). Формирование оболочки из атомов Ni и Al предотвращает рост частиц Cu, образовавшихся на предшествующей стадии. В результате, в сплаве Fe–Cu–Ni–Al формируются наночастицы Cu значительно меньшего размера, чем в бинарном сплаве (ср. рис. 5, a, b и 5, c). Таким образом, легирование сплава Fe–Cu даже небольшим количеством Ni и Al замедляет рост частиц меди и реализацию цепочки структурных

превращений частиц Cu, расширяя, тем самым, интервал времени старения, для которого сохраняются высокие механические свойства сплава. Отметим, что на изученных стадиях формирования выделений, в том числе и на стадии роста частиц (область III), медное ядро наночастиц существенно обогащено другими элементами, присутствующими в сплаве и не вполне сформирован слой, разделяющий ядро частицы и матрицу (рис. 5). Перераспределение компонент внутри выделений и увеличение концентрации Cu в ядре наночастиц будет, по-видимому, в значительной степени зависеть от скорости диффузии Ni и Al в матрице ОЦК Cu, что требует дальнейшего изучения.

5. Заключение

С использованием комбинированного подхода, включающего Монте–Карло и молекулярно-динамическое моделирование, исследована кинетика формирования выделений в многокомпонентном низколегированном сплаве Fe–1.5Cu–2Ni–1.5Al (at%). Установлено, что процесс образования выделений включает несколько этапов: образование кластеров Cu, формирование устойчивых зародышей и первичный рост обогащенных Cu частиц. Показано, что атомы Ni и Al обогащают поверхность уже сформированных частиц Cu, предотвращая укрупнение выделений.

Список литературы

- [1] Yu.N. Gornostyrev, M.I. Katsnelson. Phys. Chem. Chem. Phys. **17**, 27249 (2015).
- [2] Q. Jiang, C.C. Yang. Curr. Nanosci. **4**, 179 (2008).
- [3] M. Bonvalet, T. Philippe, X. Sauvage, D. Blavette. Phil. Mag. **94**, 2956 (2014).
- [4] S.B. Kadambi, S. Patala. Phys. Rev. Mater. **1**, 043604 (2017).
- [5] S. Vaynman, R.S. Guico, M.E. Fine, S.J. Maganello. Met. Trans. **28A**, 1274 (1997).
- [6] D. Isheim, R.P. Kolli, M.E. Fine, D.N. Seidman. Scr. Mater. **55**, 35 (2006).
- [7] M.E. Fine, J.Z. Liu, M.D. Asta. Mater. Sci. Eng. A **463**, 271 (2007).
- [8] O.I. Gorbatov, I.K. Razumov, Yu.N. Gornostyrev, V.I. Razumovskiy, P.A. Korzhavyy, A.V. Ruban. Phys. Rev. B **88**, 174113 (2013).
- [9] O.I. Gorbatov, Yu.N. Gornostyrev, P.A. Korzhavyy, A.V. Ruban. Scripta Mater. **102**, 11 (2015).
- [10] S. Jiang, H. Wang, Y. Wu, X. Liu, H. Chen, M. Yao, B. Gault, D. Ponge, D. Raabe, A. Hirata, M. Chen, Y. Wang, Z. Lu. Nature **544**, 460 (2017).
- [11] M. Kapoor, D. Isheim, G. Ghosh, S. Vaynman, M.E. Fine, Yip-Wah Chung. Acta Mater. **73**, 56 (2014).
- [12] M. Kapoor, D. Isheim, S. Vaynman, M.E. Fine, Y.-W. Chung. Acta Mater. **104**, 166 (2016).
- [13] Z.B. Jiao, J.H. Luan, M.K. Miller, C.T. Liu. Acta Mater. **97**, 58 (2015).
- [14] Z.B. Jiao, J.H. Luan, M.K. Miller, C.Y. Yu, C.T. Liu. Sci. Rep. **6**, 21364 (2016).

- [15] Z.B. Jiao, J.H. Luan, W. Guo, J.D. Poplawsky, C.T. Liu. *Mater. Res. Lett.* **5**, 562 (2017).
- [16] Z.B. Jiao, J.H. Luan, M.K. Miller, Y.W. Chung, C.T. Liu. *Mater. Today* **20**, 142 (2017).
- [17] C. Zhang, M. Enomoto. *Acta Mater.* **54**, 4183 (2006).
- [18] E. Vincent, C.S. Becquart, C. Domain. *J. Nucl. Mater.* **351**, 88 (2006).
- [19] <http://lammmps.sandia.gov/index.html>
- [20] X.W. Zhou, R.A. Johnson, H.N.G. Wadley. *Phys. Rev. B* **69**, 144113 (2004).
- [21] <http://www.ctcms.nist.gov/potentials/>
- [22] O.I. Gorbatov, A. Hosseinzadeh Delandar, Yu.N. Gornostyrev, A.V. Ruban, P.A. Korzhavyi. *J. Nucl. Mater.* **475**, 140 (2016).
- [23] Applications of the Monte Carlo method in statistical physics / Ed. K. Binder. Springer, Berlin (1984). 311 p.
- [24] И.Н. Карькин, Л.Е. Карькина, П.А. Коржавый, Ю.Н. Горностырев. *ФТТ* **59**, 103 (2017).
- [25] Z. Zhang, C.T. Liu, M.K. Miller, X.-L. Wang, Y. Wen, T. Fujita, A. Hirata, M. Chen, G. Chen, B.A. Chin. *Sci. Rep.* **3**, 1327 (2013).

Редактор Т.Н. Василевская