

ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

УДК 539.219.3: 004.94: 620.22-419

*А.Г. ЛИПНИЦКИЙ, И.В. НЕЛАСОВ, Е.В. ГОЛОСОВ, Ю.Р. КОЛОБОВ, Д.Н. МАРАДУДИН***МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИФФУЗИИ ПО ГРАНИЦАМ ЗЁРЕН НИОБИЯ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ РЕКРИСТАЛЛИЗАЦИИ НИОБИЯ В СИСТЕМЕ НИОБИЙ – МЕДЬ¹**

Развивается модель высокоугловых границ зерен общего типа и проводится исследование диффузии по границам зерен ниобия в системе Nb – Cu методом молекулярной динамики. Результаты прогноза влияния примеси меди на зернограничную самодиффузию ниобия сопоставляются с данными экспериментов по диффузионному отжигу многослойных композитов, включающих границы Cu/Nb. Экспериментально изучается рекристаллизация поликристаллического ниобия в условиях зернограничной диффузии меди.

Ключевые слова: зернограничная диффузия, молекулярная динамика, медь, ниобий, рекристаллизация.

Введение

Зернограничная сегрегация, оказывая влияние на параметры диффузии по границам зерен, во многом определяет ползуемость Кобла, рост зерен, выделение вторичных фаз и другие процессы, контролируемые зернограничной диффузией в поликристаллических материалах [1, 2]. Исследованию зависимости зернограничной диффузии от типа и концентрации компонентов в сплавах посвящено большое число работ (обзор [3]). Процессы сегрегации, формирования атомной структуры и диффузии в границах зерен составляют единое явление, понимание которого требует рассмотрения на масштабе толщины границы зерна, сопоставимой с ближайшими расстояниями между атомами в поликристалле. Уровень детальности информации, получаемой в современных диффузионных экспериментах, и упрощенная модель границы зерна как однородной фазы, используемая для их интерпретации, недостаточны для количественного описания этого явления и разработки метода прогноза развития процессов в поликристаллах, контролируемых зернограничной диффузией. Поэтому требуется дополнительная информация, которую в настоящее время можно получать с помощью компьютерного моделирования на атомном уровне благодаря достигнутой мощности вычислительной техники и развитию методов описания взаимодействия между атомами в рамках классических потенциалов.

Для моделирования границ зерен (ГЗ) в настоящее время широко используется модель бикристалла, построенная в рамках теории совпадающих узлов. При этом бикристалл содержит ГЗ специального типа с заданной обратной величиной плотности совпадающих узлов Σ [4, 5]. Корректность структуры ГЗ в модели достигается учетом относительного сдвига прилегающих зерен, релаксацией атомной структуры и оптимизацией свободного объема, минимизирующие энергию ГЗ. Наложение периодических граничных условий, при котором размеры бикристалла в плоскости границы зерна кратны периодам решетки совпадающих узлов, устраняет влияние свободных поверхностей на результаты моделирования процессов в ГЗ. С использованием этой модели установлено большинство свойств ГЗ методами компьютерного моделирования, включая исследования сегрегации атомов примесей [6] и механизмов зернограничной (ЗГ) самодиффузии в моноатомных системах [7]. Вместе с тем этот подход не позволяет исследовать ГЗ общего типа, которые преимущественно реализуются в поликристаллах. Другим ограничением модели является необходимость искусственного задания дефектов, реализующих диффузию в границе зерна (вакансий и межузельных атомов) [7]. До настоящего времени ГЗ общего типа моделировались как элемент структуры нанокристаллического материала, однако в этом случае существовала проблема разделения эффектов ГЗ и их тройных стыков [8], которая значительно усложняется при рассмотрении гетерогенных систем.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации по контрактам № 2.2437.2011 и 14.А18.21.0078. Один из авторов (Д.Н. Марадудин) поддержан в рамках гранта №14.740.11.1170.

В настоящей работе предложена новая модель ГЗ, основанная на построении модельных поликристаллов с произвольными ориентациями зерен. Модель тестируется из расчетов параметров самодиффузии по ГЗ общего типа в меди. Апробация модели для прогноза влияния сегрегации на ЗГ-диффузию проводится на примере ГЗ ниобия в условиях примеси меди. Система Cu–Nb является наиболее изученным примером многослойных композитов металлов с ограниченной взаимной растворимостью, обладающих большой перспективой в практических приложениях (работы [10, 11] и ссылки в них). При этом механизм разрушения слоистой структуры таких материалов может включать диффузию одного элемента по ГЗ второго элемента [12]. Результаты прогноза, которые показали увеличение скорости самодиффузии в ГЗ ниобия, подтверждены данными экспериментов по изучению рекристаллизации ниобия в многослойном композите медь – ниобий – сплав титан/ниобий. Взаимодействие между атомами в системе Cu–Nb задается полуэмпирическими потенциалами [11]. К настоящему времени эти потенциалы хорошо апробированы при исследовании специальных границ зерен в меди [7], нанокристаллической меди [8] и при изучении межфазных границ Cu/Nb [11, 13].

Построение модельных образцов

На рис. 1 иллюстрируется модельный образец поликристаллического ниобия, содержащий восемь высокоугловых границ зерен общего типа без образования тройных стыков. Методика построения таких модельных образцов состоит из следующих операций. 1) Построение поликристалла из нескольких параллельных слоев материала с идеальной кристаллической решеткой и формой прямоугольного параллелепипеда. Кристаллографическая ориентация каждого слоя задается случайным образом при наложении дополнительного условия, согласно которому угол разориентации соседних кристаллитов должен превышать 15° , чтобы исключить появление малоугловых ГЗ. 2) Наложение периодических граничных условий в плоскости ГЗ и перпендикулярном к этой плоскости направлении с удалением одного из атомов в каждой паре атомов на границах параллелепипедов, расстояние между которыми меньше 0,9 ближайшего расстояния в идеальной решетке. При этом, благодаря периодическим граничным условиям, появляются нежелательные плоскости из дефектных областей, перпендикулярных ГЗ. Однако эти области не являются границами зерен, поскольку разделяют кристаллиты с одинаковой кристаллографической ориентацией. 3) Молекулярно-динамическое (МД) моделирование построенной системы атомов при высоких гомологических температурах, при котором нежелательные области частично мигрируют в ГЗ и оставшиеся части эволюционируют в набор дефектов вакансионного типа. 4) Поиск вакансий в объеме зерен и помещение атома в каждый обнаруженный вакантный узел. 5) Последовательное

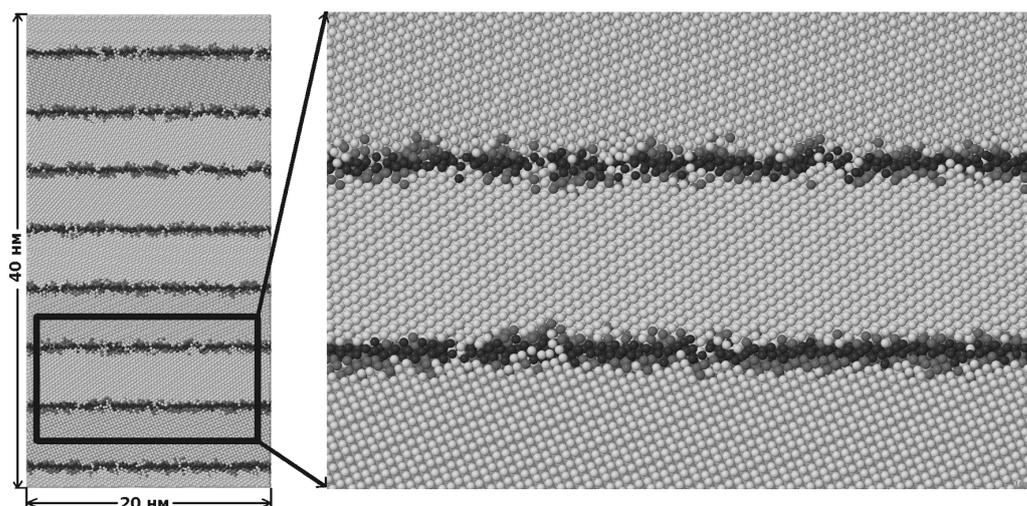


Рис. 1. Модельный образец поликристаллического ниобия после МД-моделирования в течение 0,51 нс при температуре 1150 К. Образец содержит восемь различных границ зерен общего типа без тройных стыков и не ограничен свободными поверхностями благодаря периодическим граничным условиям. Промежуточным оттенком серого цвета выделены атомы ниобия с локальным окружением, нарушающим ОЦК-упаковку в исходном состоянии образца; 10 % этих атомов были заменены атомами меди (выделены черным цветом) перед началом модельного МД-эксперимента. Остальные атомы в образце представляют зерна с ОЦК-упаковкой атомов ниобия

повторение операций (3) и (4) до тех пор, пока не останутся только ГЗ в качестве дефектных областей. 6) Релаксация атомной структуры границ зерен и оптимизация их свободного объема к минимуму энтальпии при 0 К. После релаксации сила, действующая на каждый атом, не превышала $5 \text{ мэВ}/\text{Å}$, а абсолютные значения компонентов тензора напряжений не превышали 10^{-4} ГПа. Размеры расчетной ячейки в плоскости ГЗ для каждого образца составили 20×20 и 40 нм в нормальном направлении к этой плоскости. Расчетная ячейка меди содержала 1280 тыс. атомов, ячейка ниобия – 830 тыс. атомов.

Выбор бинарной системы Cu–Nb, компоненты которой нерастворимы в равновесных решетках друг друга, позволили не рассматривать влияние температуры на ЗГ-сегрегацию и ограничиться предположением, что примесные атомы меди поступают в ниобий только благодаря диффузии по ГЗ. Для моделирования процесса диффузии меди в ниобии и влияния этого процесса на ЗГ-самодиффузию ниобия в ГЗ модельных образцов ниобия помещались атомы меди в результате следующей последовательности операций. 1) На основании анализа локального окружения атомов выделялись атомы ниобия, расположенные в области ГЗ, как атомы с локальным нарушением ОЦК-упаковки. 2) Выделенные атомы подразделялись на группы, соответствующие различным ГЗ. Для каждой группы определялась средняя координата атомов z_{av} . При этом ось z была направлена по нормали к плоскости ГЗ. 3) На плоскость каждой ГЗ накладывалась квадратная сетка точек с периодом d (равным 2,5, 5, 10 и 20 Å в разных образцах) и координатами z точек равными z_{av} . 4) Тип каждого атома, ближе других атомов расположенный к точке сетки, менялся на тип атома примеси замещения. Средняя концентрация примесей в ГЗ определялась как отношение числа атомов примеси к числу атомов хозяина, находящихся в ГЗ, и составляла 0,6; 2,5; 10 и 39 %.

Методика моделирования зернограничной диффузии

Методика обработки результатов и детали молекулярно-динамического (МД) моделирования для получения диффузионных характеристик ГЗ подробно описана в [2, 8]. Использовался алгоритм Верлета в скоростной форме для решения системы уравнений движения атомов при шаге МД 3 фс. Приведение модельных образцов к заданной температуре осуществлялось моделированием в течение 60 пс при постоянной температуре в рамках термостата Ноузэ – Хувера и при поддержании давления 1 атм методом Берендсена (более детальное описание и ссылки на используемые методы представлены в работе [2]). Затем для устранения искусственного воздействия на модельные образцы проводилось МД-моделирование при постоянном объеме, полной энергии и числе частиц (NVE-ансамбль) в течение 90 пс с контролем сохранения средней температуры и давления в модельных образцах. Далее проводилось NVE-моделирование в течение 360 пс для получения данных о диффузионных смещениях атомов, необходимых при расчетах диффузионных характеристик. Сумма квадратов диффузионных смещений атомов усреднялась по 20 диффузионным экспериментам, начальные моменты времени которых выбирались в интервале от 0 до 60 пс (с шагом 3 пс).

Угол наклона зависимости суммы квадратов диффузионных смещений атомов от времени $(\Delta Z/t)$ рассчитывался методом наименьших квадратов. Для определения угла наклона использовались времена моделирования t после 150 пс, где указанная зависимость с хорошей точностью являлась линейной. Наклон $(\Delta Z/t)$ нормировался на суммарную площадь ГЗ в образце A для получения удельной суммы квадратов смещений атомов, приведенной на единицу площади границ зерен $\zeta_{GB} = (\Delta Z/t)/A$. С эффективным коэффициентом диффузии D_{GB} , определяемым из реальных экспериментов в рамках полуэмпирической модели, характеристика ЗГ диффузии ζ_{GB} связана соотношением [8] $(D_{GB} - D_V)\delta = (\Omega/6)\zeta_{GB}$, где D_V – коэффициент объемной диффузии ($D_V = 0$ в рассматриваемом случае, поскольку по построению модельных образцов вакансии в объеме зерен отсутствовали), δ – эффективная толщина границы зерна и Ω – объем на атом. Построив зависимость $\ln(D_{GB}\delta)$ от $1/k_B T$, где k_B – постоянная Больцмана, методом наименьших квадратов определялась энергия активации ΔE_{GB} и предэкспоненциальный множитель P_0 в уравнении аррениусовского вида $D_{GB}\delta = P_0 \exp(-\Delta E_{GB}/k_B T)$. При этом дисперсия использовалась в качестве меры ошибки рассчитанных величин.

Моделирование зернограничной самодиффузии в моноатомных образцах меди и ниобия

Моделирование самодиффузии в ГЗ меди проводилось для серии температур в интервале от 700 до 1200 К с шагом 50 К. Нижний предел температур определялся ограничением метода МД,

верхний предел выбирался ниже известной температуры плавления меди 1354 К. Рассчитанные величины $\Delta E_{GB} = (0,71 \pm 0,01)$ и $P_0 = (3,5 \pm 0,1) \cdot 10^{-16} \text{ м}^3/\text{с}$ хорошо согласуются с данными диффузионных экспериментов в высокочистой меди $\Delta E_{GB} = 0,75 \text{ эВ/атом}$ и $P_0 = 3,89 \cdot 10^{-16}$ [9] и совпадают с результатами моделирования нанокристаллической меди $\Delta E_{GB} = (0,73 \pm 0,02) \text{ эВ/атом}$ и $P_0 = (3,4 \pm 0,9) \cdot 10^{-16}$ [2, 8] в пределах погрешностей. Это позволяет сделать вывод об адекватности предложенной методики генерации модельных образцов для исследования диффузионных процессов в ГЗ общего типа. При этом структура ГЗ общего типа является самодостаточной для реализации ЗГ-диффузии и не требует специального задания дополнительных дефектов, как, например, вакансий и межузельных атомов в случае ГЗ специального типа [4].

Моделирование самодиффузии в ГЗ ниобия проводилось для серии температур в интервале от 950 до 1150 К с шагом 50 К. Этот интервал температур примерно совпадает с интервалом 973–1123 К, в котором проводились реальные эксперименты по диффузионному отжигу. Результаты МД-моделирования представлены на рис. 2. Рассчитанное значение энергии активации ЗГ-самодиффузии в ниобии $\Delta E_{GB} = (0,91 \pm 0,04) \text{ эВ/атом}$ и предэкспоненциальный множитель $P_0 = (4 \pm 2) \cdot 10^{18} \text{ м}^3/\text{с}$. Соответствующие экспериментальные значения для ЗГ-самодиффузии в ниобии в настоящее время не установлены. Причины этого обусловлены, прежде всего, ростом зёрен в течение диффузионного эксперимента и обсуждены в работе [14].

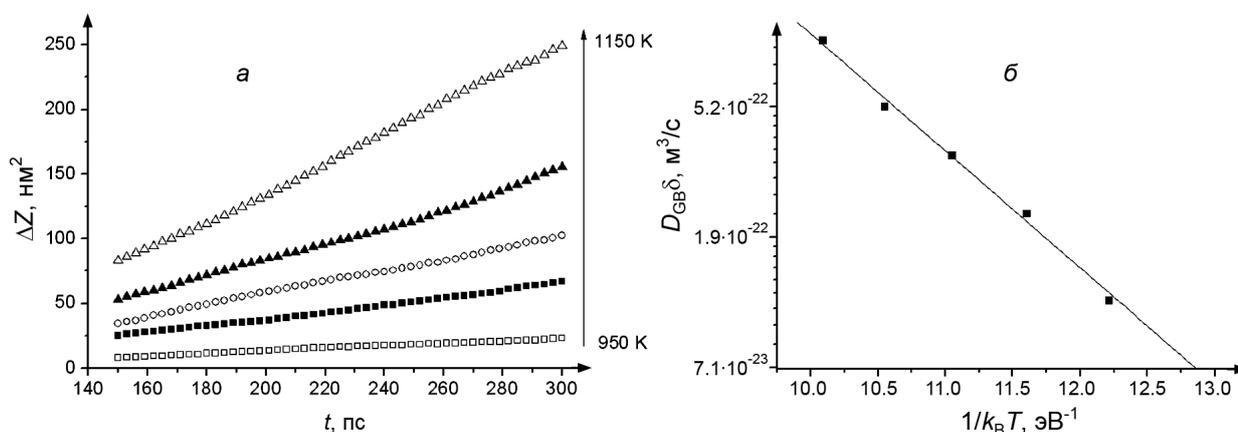


Рис. 2. Результаты расчетов характеристик самодиффузии по границам зерен ниобия: *a* – сумма квадратов диффузионных смещений атомов ΔZ в модельном образце ниобия как функция времени МД-моделирования t при различных температурах в интервале от 950 до 1150 К; *б* – график зависимости $\ln(D_{GB}\delta)$ от $1/k_B T$, точки которого получены из линейной интерполяции методом наименьших квадратов графиков зависимостей на части рисунка (*a*)

Диффузия по границам зёрен ниобия при различных концентрациях примеси атомов меди

После окончания МД-имитации отжига модельных образцов ниобия проводилась визуализация положений атомов примеси в ГЗ. Как видно из рис. 3, атомы меди с увеличением ее концентрации в ГЗ ниобия имеют тенденцию к образованию кластеров. Образование кластеров из примесных атомов в системе медь – ниобий энергетически выгодно по сравнению с изотропным распределением, что было показано на основании расчётов «из первых принципов» [15].

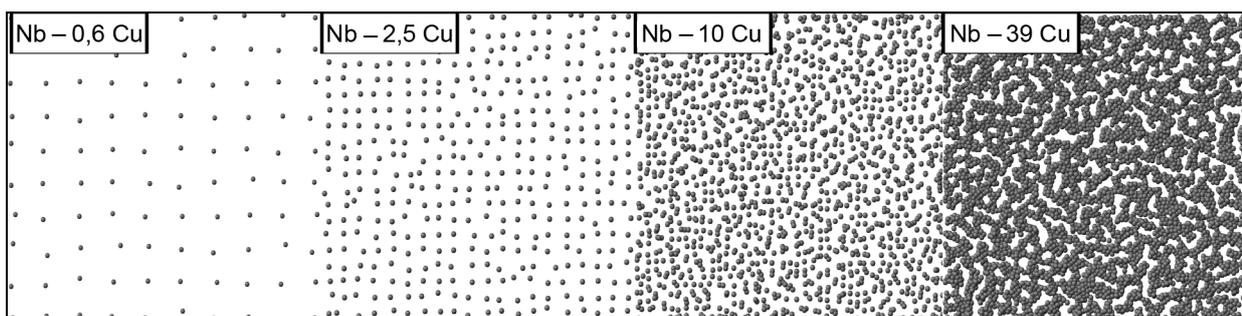


Рис. 3. Пример расположения атомов меди в границе зерна ниобия (атомы ниобия не показаны) при увеличении концентрации меди в ряду 0,6; 2,5; 10 и 39 %

На рис. 1 иллюстрируется структура модельного образца ниобия при концентрации меди от 0,6 до 39 % в ГЗ после завершения МД-моделирования при температуре 1150 К. Данная структура наблюдалась для всех температур моделирования. Как видно из рис. 1, несмотря на реализацию диффузионного процесса, атомы меди остались в центральной части ГЗ. Это указывает на то, что диффузия меди из области ГЗ в объем зерен за время моделирования не происходила и оправдывает принятое предположение о проникновении атомов меди в поликристалл ниобия только по ГЗ.

Рассчитанные энергии активации и предэкспоненциальные множители зависимости Аррениуса для ЗГ-самодиффузии ниобия в присутствии примеси атомов меди и диффузии меди представлены в таблице.

Рассчитанные параметры зависимости Аррениуса для ЗГ-самодиффузии ниобия и диффузии меди при различных концентрациях примеси меди в ГЗ ниобия

Моделируемая система	ΔE_{GB} , эВ/атом	P_0 , м ³ /с
ЗГ-самодиффузия ниобия		
Nb (100 %)	0,91±0,04	(4±2)·10 ⁻¹⁸
Nb – 0,6 % Cu	0,80±0,05	(3±2)·10 ⁻¹⁸
Nb – 2,5 % Cu	0,84±0,04	(5,1±2)·10 ⁻¹⁸
Nb – 10 % Cu	0,78±0,05	(5,6±2)·10 ⁻¹⁸
Nb – 39 % Cu	0,81±0,01	(6,7±0,4)·10 ⁻¹⁷
ЗГ-диффузия меди		
Cu (100 %) в Cu	0,71±0,01	(2,0±0,1)·10 ⁻¹⁸
Cu 0,6 % в Nb	1,2±0,3	(0,5 ⁺⁹ _{-0,4})·10 ⁻¹⁷
Cu 2,5 % в Nb	0,9±0,1	(2 ⁺² _{-0,5})·10 ⁻¹⁹
Cu 10 % в Nb	0,69±0,07	(2 ⁺² _{-0,3})·10 ⁻²⁰
Cu 39 % в Nb	0,81±0,01	(5,1±0,4)·10 ⁻¹⁹

Как видно из данных, приведенных в таблице, наблюдается тенденция к уменьшению энергии активации ЗГ-диффузии и самодиффузии с увеличением концентрации меди, что естественно связать с появлением в ГЗ ниобия атомов металла с более низкой температурой плавления. При достижении концентрации меди в границах зерен 39 % энергии активации диффузии атомов примеси и атомов хозяина сравниваются. Более наглядно зависимость скорости ЗГ-диффузии от концентрации примеси и температуры можно увидеть из графического представления результатов компьютерных экспериментов. На рис. 4 в виде точек на зависимостях $D_{GB}\delta$ от $1/k_B T$ отражены характеристики ЗГ-самодиффузии ниобия и ЗГ-диффузии меди.

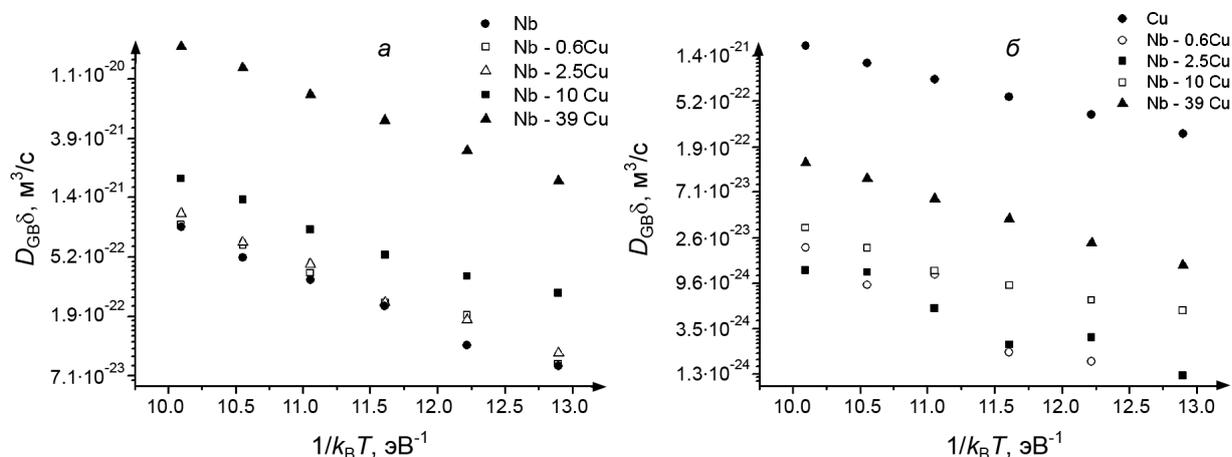


Рис. 4. Рассчитанные характеристики ЗГ-диффузии $\ln(D_{GB}\delta)$ как функции $1/k_B T$ в рассмотренных ГЗ ниобия с различными концентрациями примеси меди: а – самодиффузия ниобия; б – диффузия меди по ГЗ ниобия и ЗГ-самодиффузия меди

Как видно из графических данных на рис. 4, *а*, скорость самодиффузии ниобия по границам зерен (характеризуемая величиной $D_{GB\delta}$) возрастает с увеличением концентрации примеси меди при всех рассмотренных температурах, увеличиваясь более чем на порядок, при достижении концентрации примеси 39 %. Из графика на рис. 4, *б* видно, что скорость диффузии меди по ГЗ ниобия общего типа также возрастает с увеличением ее концентрации, однако оставаясь значительно ниже скорости ЗГ-самодиффузии в чистой меди.

Экспериментальное исследование процесса рекристаллизации ниобия в многослойном композите Cu/Nb/сплав Ti–Nb/Nb

При проведении экспериментальных исследований многослойного композита системы медь – ниобий сплав – титан/ниобий происходит проникновение меди по ГЗ ниобия, выступающего в структуре композита в качестве диффузионного барьера между медью и титаном, входящим в титан-ниобиевый сплав (рис. 5).

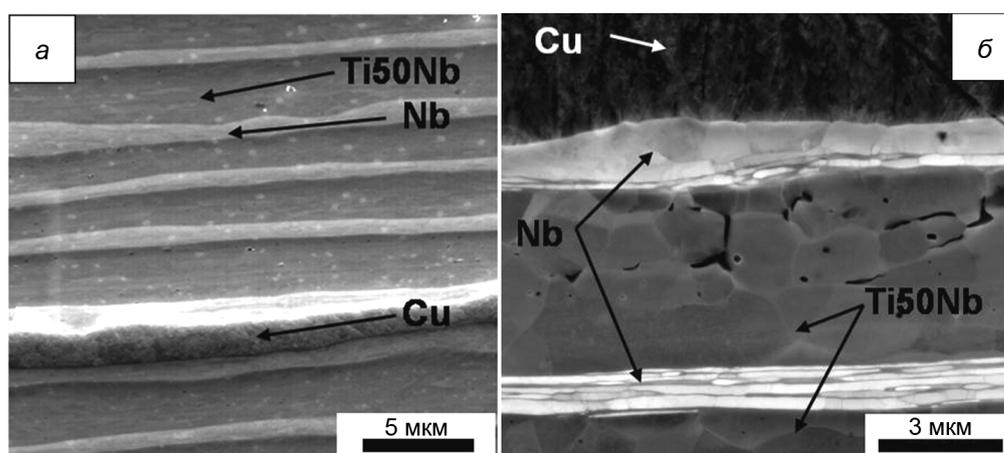


Рис. 5. Структура многослойного композита системы медь – ниобий – сплав титан/ниобий в исходном состоянии (*а*) и после часового отжига при температуре 1023 К (*б*). На части рисунка (*б*) черными стрелками указаны два слоя ниобия, только один из которых (верхний на рисунке) контактирует с медью, и в нем наблюдается рост зерен со стороны меди. Во втором слое ниобия такой рост отсутствует

После проведения диффузионных отжигов в температурном интервале 973–1123 К в течение 20, 25, 40 и 60 мин в ходе электронно-микроскопического исследования микроструктуры слоев ниобия после отжигов обнаружено увеличение размеров зёрен ниобия в процесс рекристаллизации. Подтверждением тому, что данный процесс обусловлен зернограничной диффузией меди по ГЗ ниобия, является появление интерметаллидов Cu/Ti на противоположной стороне барьерного слоя ниобия и отсутствие рекристаллизации зёрен ниобия после отжига в течение указанных времён в слое, не контактирующем с медью. Полученные данные говорят о возможности инициированной зернограничной диффузией рекристаллизации [1], для системы медь – ниобий экспериментально наблюдавшейся нами впервые.

Развитие рекристаллизации можно объяснить обнаруженным при проведении диффузионного эксперимента методом МД увеличением коэффициента ЗГ-самодиффузии ниобия в присутствии атомов меди в качестве примеси, что может снижать температуру рекристаллизации ниобия. В интервале рассмотренных температур коэффициент ЗГ-самодиффузии ниобия увеличивается примерно в 20 раз по сравнению с его величиной в ниобии без примеси меди при концентрации меди в ГЗ ~ 10 % (согласно результатам моделирования, представленным в таблице и на рис. 4).

Определённая из эксперимента при различных температурах и временах отжига ширина интерметаллидного слоя Cu/Ti, которая контролируется ЗГ-диффузией меди по ГЗ ниобия, позволила оценить энергию активации данного диффузионного процесса. Полученная энергия активации ЗГ-диффузии меди по ГЗ ниобия ($1,7 \pm 0,1$) эВ/атом сопоставима с рассчитанной величиной ($1,2 \pm 0,3$) эВ/атом, полученной из компьютерных экспериментов для малых концентраций меди.

Заключение

Предложена новая модель для исследования границ зерна общего типа методом молекулярной динамики. Модель включает систему плоских границ зерен без образования тройных стыков и исключает влияние свободных поверхностей на результаты моделирования благодаря наложению периодических граничных условий. На примере самодиффузии по границам зерен меди показано, что, в отличие от известной модели границ зерен специального типа, атомная структура границ зерен в предложенной модели обеспечивает реализацию зернограничной диффузии без искусственного введения вакансий и межузельных атомов в хорошем согласии с экспериментальными данными. Использование модели позволило впервые методами компьютерного моделирования установить диффузионные характеристики высокоугловых границ зерна общего типа в условиях сегрегации атомов примеси на примере границ зерен ниобия в бинарной системе Nb–Cu. Получен прогноз влияния меди на ускорение самодиффузии в границах зерен ниобия. Прогноз подтвержден в экспериментах по диффузионному отжигу многослойного композита, содержащего границы раздела Cu/Nb. Экспериментально показано развитие рекристаллизации ниобия в условиях зернограничной диффузии меди и отсутствие этой рекристаллизации в областях поликристаллического ниобия без контакта со слоями меди при одних и тех же температурах.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Колобов Ю.Р. Диффузионно-контролируемые процессы на границах зёрен и пластичность металлических поликристаллов. – Новосибирск: Наука, 1998. – 184 с.
2. Колобов Ю.Р., Липницкий А.Г., Неласов И.В., Грабовецкая Г.П. // Изв. вузов. Физика. – 2008. – Т. 51. – № 4. – С. 47–60.
3. Gupta D. Diffusion processes in advanced technological materials. – New York: Springer, 2005. – 532 p.
4. Sorensen M.R., Mishin Yu., and Voter A.F. // Phys. Rev. B. – 2000. – V. B62. – No. 6. – P. 3658–3673.
5. Липницкий А.Г., Иванов А.В., Колобов Ю.Р. // ФММ. – 2006. – Т. 101. – Вып. 3. – С. 330–336.
6. Foiles S.M. // Phys. Rev. B. – 1989. – V. 40. – No. 17. – P. 11502–11506.
7. Suzuki A. and Mishin Yu. // Interface Science. – 2003. – V. 11. – P. 131–148.
8. Lipnitskii A.G., Nelasov I.V., and Kolobov Y.R. // Defect Diffus. Forum. – 2011. – V. 309–310. – P. 45–50.
9. Surholt T. and Herzig Chr. // Acta Mater. – 1997. – V. 45. – No. 9. – P. 3817–3823.
10. Demkowicz M.J., Hoagland R.G., and Hirth J.P. // Phys. Rev. Lett. – 2008. – No. 100. – P. 136102(1)–136102(4).
11. Неласов И.В., Липницкий А.Г., Колобов Ю.Р. // Изв. вузов. Физика. – 2009. – Т. 52. – № 11. – С. 73–78.
12. Lee K.H. and Hong S.I. // Mater. Sci. Forums. – 2006. – V. 503–504. – P. 907–912.
13. Липницкий А.Г., Марадудин Д.Н., Картамышев А.И., Неласов И.В. // Научные ведомости Белгородского государственного университета. Сер. Математика. Физика. – 2012. – Т. 27. – № 11. – С. 160–167.
14. Koppers M., Mishin Yu., and Herzig Chr. // Acta Metal. Mater. – 1994. – V. 42. – No. 8. – P. 2859–2868.
15. Неласов И.В., Липницкий А.Г., Дат В.З. // Научные ведомости Белгородского государственного университета. Сер. Математика. Физика. – 2011. – Т. 23. – № 11. – С. 17–23.

Белгородский государственный национальный исследовательский университет,
г. Белгород, Россия
E-mail: lipnitskii@bsu.edu.ru

Поступила в редакцию 05.10.12,
после доработки – 06.02.13.

Липницкий Алексей Геннадьевич, д.ф.-м.н., зав. лаб. теоретических исследований компьютерного моделирования научно-образовательного и инновационного центра «Наноструктурные материалы и нанотехнологии»;
Неласов Иван Викторович, к.ф.-м.н., науч. сотр. лаб. теоретических исследований компьютерного моделирования научно-образовательного и инновационного центра «Наноструктурные материалы и нанотехнологии»;
Голосов Евгений Витальевич, к.ф.-м.н., науч. сотр. лаб. перспективных материалов научно-образовательного и инновационного центра «Наноструктурные материалы и нанотехнологии»;
Колобов Юрий Романович, д.ф.-м.н., руководитель научно-образовательного и инновационного центра «Наноструктурные материалы и нанотехнологии»;
Марадудин Денис Николаевич, аспирант каф. материаловедения и нанотехнологий.