

Оригинальная статья

УДК 538.911

DOI: 10.57070/2304-4497-2023-1(43)-17-23

**АТОМНЫЕ МЕХАНИЗМЫ МИГРАЦИИ ГРАНИЦ НАКЛОНА <100> И <111>
НА ПРИМЕРЕ НИКЕЛЯ**

© 2023 г. И. В. Зоря¹, Г. М. Полетаев²

¹Сибирский государственный индустриальный университет (Россия, 654007, Кемеровская обл. – Кузбасс, Новокузнецк, ул. Кирова, 42)

²Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова (Россия, 656038, Барнаул, пр. Ленина, 46)

Аннотация. Принципиальные разногласия в понимании механизма и в значениях энергии активации миграции формируют запрос на новые исследования этой научной проблемы посредством четко аттестованных границ зерен. Методом молекулярной динамики выполнен анализ динамики атомного механизма миграции малоугловых границ <100> и <111>, который показал, что парные зернограницные дислокации в процессе движения границы расщепляются со сменой дислокаций-партнеров. Миграция малоугловых границ наклона <100> реализуется посредством расщепления и смены дислокаций-партнеров, в результате работы данного механизма смещения атомов образуется сетка с квадратными ячейками. В случае миграции границ <111> присутствует также механизм совместного скольжения парных зернограницных дислокаций. В отличие от зернограницных дислокаций границ <100> парные дислокации границ <111> имеют общие плоскости скольжения, вдоль которых они могут скользить со сравнительно низкой энергией активации. При миграции границ <111> зафиксировано комбинированное действие обоих механизмов: совместное скольжение парных зернограницных дислокаций и их расщепление со сменой дислокаций-партнеров. В процессе миграции в зерне, куда двигалась граница, образуются симметричные участки, которые путем поворота «подстраиваются» под структуру другого зерна. Именно поэтому при миграции границ <111> ячейки сетки атомных смещений имеют гексагональную форму.

Ключевые слова: метод молекулярной динамики, миграция границ наклона, зернограницные дислокации, скорость миграции границы

Для цитирования: Зоря И.В., Полетаев Г.М. Атомные механизмы миграции границ наклона <100> и <111> на примере никеля // Вестник Сибирского государственного индустриального университета. 2023. № 1 (43). С. 17–23. [http://doi.org/10.57070/2304-4497-2023-1\(43\)-17-23](http://doi.org/10.57070/2304-4497-2023-1(43)-17-23)

Original article

**ATOMIC MECHANISMS OF <100> AND <111> TILT BOUNDARY MIGRATION
ON THE EXAMPLE OF NICKEL**

© 2023 I. V. Zorja¹, G. M. Poletaev²

¹Siberian State Industrial University (42 Kirova Str., Novokuznetsk, Kemerovo Region – Kuzbass, 654007, Russian Federation)

²Polzunov Altai State Technical University (46 Lenina Ave., Barnaul, Altai region, 656038, Russian Federation)

Abstract. Fundamental differences in the understanding of the mechanism and values of the energy of activation of migration form a request for new studies of this scientific problem through clearly certified grain boundaries. The molecular dynamics method was used to analyze the dynamics of the atomic mechanism of migration of small-angle boundaries <100> and <111>, which showed that paired grain-boundary dislocations split during

the boundary movement with the change of partner dislocations. The migration of small-angle slope boundaries $\langle 100 \rangle$ is realized by splitting and changing partner dislocations, as a result of the operation of this mechanism of displacement of atoms, a grid with square cells is formed. In the case of border migration $\langle 111 \rangle$, there is also a mechanism of joint sliding of paired grain-boundary dislocations. Paired dislocations of boundaries $\langle 111 \rangle$, unlike grain-boundary dislocations of boundaries $\langle 100 \rangle$, have common sliding planes along which they can slide with a relatively low activation energy. During the migration of borders $\langle 111 \rangle$, the combined action of both mechanisms was recorded: the joint sliding of paired grain-boundary dislocations and their splitting with the change of partner dislocations. In the process of migration, symmetrical sections are formed in the grain where the border was moving, which, by turning, "adjust" to the structure of another grain. Therefore, when migrating boundaries $\langle 111 \rangle$, the cells of the atomic displacement grid have a hexagonal shape.

Keywords: method of molecular dynamics, migration of inclination boundaries, grain boundary dislocations, migration rate of the boundary

For citation: Zorya I.V., Poletaev G.M. Atomic mechanisms of $\langle 100 \rangle$ and $\langle 111 \rangle$ tilt boundary migration on the example of nickel. *Bulletin of the Siberian State Industrial University*. 2023, no.1 (43), pp. 17–23. (In Russ.). [http://doi.org/10.57070/2304-4497-2023-1\(43\)-17-23](http://doi.org/10.57070/2304-4497-2023-1(43)-17-23)

Введение

Сильный интерес к проблеме миграции границ зерен хотя и продвинул ученых в понимании механизмов этого явления, однако не снял всех разногласий и не решил имеющихся противоречий. Существует мнение, что малоугловые границы наклона мигрируют посредством комбинированного действия механизмов скольжения и переползания зернограницных дислокаций [1]. Авторы работ [2, 3] на основе проведенных исследований приходят к выводу, что переползание зернограницных дислокаций служит основным механизмом миграции границ наклона. Границы наклона $\langle 111 \rangle$ обладают самой высокой подвижностью, а границы наклона $\langle 100 \rangle$ мигрируют значительно медленнее [1, 3 – 5], но плотность порогов на зернограницных дислокациях в границах $\langle 100 \rangle$ выше [6, 7], соответственно, переползание должно проходить интенсивнее, чем в границах $\langle 111 \rangle$. Механизмы миграции и причины такого значительного отличия подвижности границ $\langle 111 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$ до конца не установлены.

Известно [1, 4, 5, 8, 9], что малоугловые границы по сравнению с большеугловыми мигрируют медленнее, но в части энергии активации миграции границ до настоящего времени нет единого мнения. В работах [8, 9] утверждается, что с ростом угла разориентации в диапазоне малоугловых границ энергия активации фактически монотонно уменьшается. В то же время экспериментальные данные [3, 10] по миграции границ наклона свидетельствуют, что малоугловые границы с одной и той же осью разориентации обладают практически одинаковой энергией активации миграции в широком диапазоне углов разориентации. Это косвенно подтверждает одинаковый элементарный механизм миграции этих границ.

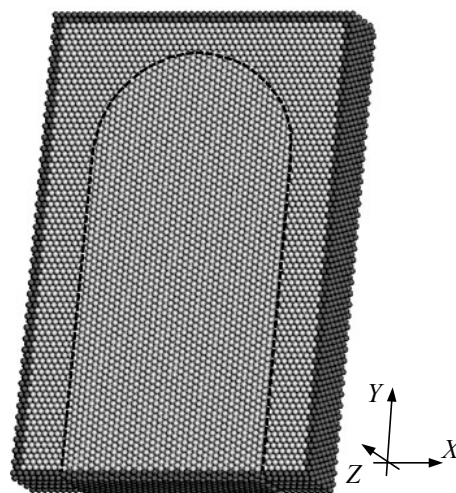


Рис. 1. Схема расчетного блока для моделирования миграции границы наклона $\langle 111 \rangle$ 30° (темно-серые атомы по краям расчетного блока неподвижны при компьютерном эксперименте – жесткие граничные условия)

Fig. 1. Scheme of the calculation unit for modeling the migration of the slope boundary $\langle 111 \rangle$ of 30° (dark gray atoms along the edges of the calculation unit are stationary in a computer experiment – hard boundary conditions)

Такие принципиальные разногласия в понимании механизма и значениях энергии активации миграции формируют запрос на новые исследования этой научной проблемы посредством четко аттестованных границ зерен.

Основные результаты

В основе исследований миграции границ зерен наклона лежит методика, разработанная и получившая развитие в работах [1, 11]. Следуя методике, создается четко аттестованная граница, имеющая форму петли или арки (рис. 1, черная пунктирная линия). Причиной направленного перемещения границы в сторону уменьшения

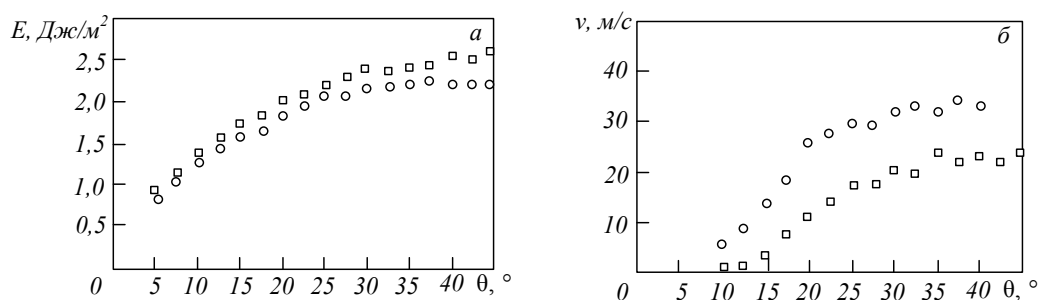


Рис. 2. Энергия (а) и скорость миграции (б) границ наклона $\langle 100 \rangle$ (Δ) и $\langle 111 \rangle$ ($\circ$) при температуре 1700 К в зависимости от угла разориентации θ в никеле

Fig. 2. The energy (a) of the slope boundaries $\langle 100 \rangle$ (Δ) and $\langle 111 \rangle$ ($\circ$) and the rate of their migration (б) at a temperature of 1700 K depending on the angle of θ in Ni

ее площади служит сила натяжения границы, которая, по аналогии с поверхностным натяжением, возникает вследствие стремления границы минимизировать свою энергию. В рассматриваемой модели сила, приводящая к миграции, и скорость миграции границы постоянны в течение всего процесса движения границы и плавно уменьшаются лишь к концу компьютерного эксперимента.

В работах [12 – 14] аналогичная модель использована для моделирования миграции тройного стыка границ зерен посредством метода молекулярной динамики. В работах [13, 14] моделирование реализовано в двумерной модели. В части механизма миграции границ зерен, в частности, малоугловых, двумерная и трехмерная модели отличаются принципиально. В двумерной модели зернограницные краевые дислокации не имеют порогов, периодически расположенных вдоль ядер дислокаций. В то время как именно они играют важную роль в зернограницных процессах, в частности, диффузии [7]. В связи с этим был разработан трехмерный расчетный блок в молекулярно-динамической модели в форме пластины толщиной 12 атомных плоскостей (рис. 1). Такой толщины достаточно для возникновения эффектов, вызванных порогами на зернограницных дислокациях. Расчетный блок никеля для границ наклона $\langle 111 \rangle$ имел высоту 18,0 нм, ширину 12,0 нм и толщину 2,4 нм, а для границ наклона $\langle 100 \rangle$ 18,2 нм, 12,1 нм и 2,2 нм соответственно. Блоки содержали порядка 50 000 атомов. Вдоль оси Z (рис. 1) имитируется бесконечное повторение структуры, заданы периодические граничные условия. На краю расчетного блока границы зерен зафиксированы, это является условием сохранения ориентации кристаллической решетки двух разных зерен на границе блока. По осям X и Y границы блока (рис. 1, выделены темно-серым цветом) жестко закреплены для фиксации заданной разориентации зерен.

На рис. 2 представлены зависимости энергии границ зерен наклона $\langle 100 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$ и скорости их миграции в никеле при температуре 1700 К в зависимости от угла разориентации.

Энергию границ зерен определяли как отношение разности энергий расчетного блока с границей и такого же количества атомов в идеальном кристалле к площади границы. Перед расчетом энергии проводилась релаксация структуры.

Натяжение границ зерен пропорционально их энергии. Из рис. 2 видно, что с ростом угла разориентации увеличиваются энергия и натяжение. Для большеугловых границ энергия примерно одинакова, это, по данным ряда исследователей, характерно для широкого класса большеугловых границ и границ смешанного типа. В связи с этим большинство углов между границами в тройных стыках близки к 120° [15, 16].

Определение скорости миграции границ зерен проведено при температуре 1700 К, близкой к температуре плавления никеля. Миграция границ с углом разориентации выше 10° происходила с высокой скоростью, достаточной для измерения в молекулярно-динамической модели. Скорость миграции в процессе моделирования оставалась фактически постоянной. Это обеспечивало ее определение как отношения перемещения верхней части границы (рис. 1) ко времени молекулярно-динамического эксперимента.

Угол разориентации зерен θ варьировался от 10° до 45° (максимальный угол разориентации) для границ $\langle 100 \rangle$ и до 40° для границ $\langle 111 \rangle$.

Границы $\langle 100 \rangle$ мигрируют медленнее границ $\langle 111 \rangle$ (рис. 2, б). Скорость их миграции при тех же условиях примерно в 1,5 – 2 раза меньше скорости миграции границ $\langle 111 \rangle$.

На рис. 3 представлены примеры атомных смещений в процессе миграции границ $\langle 100 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$ с углом разориентации 20° . Смещения (более 0,1 нм) показаны в виде отрезков, соединяющих начальные и конечные положения атомов. Атомные смещения при миграции рассматриваемых границ имеют характерные вид и

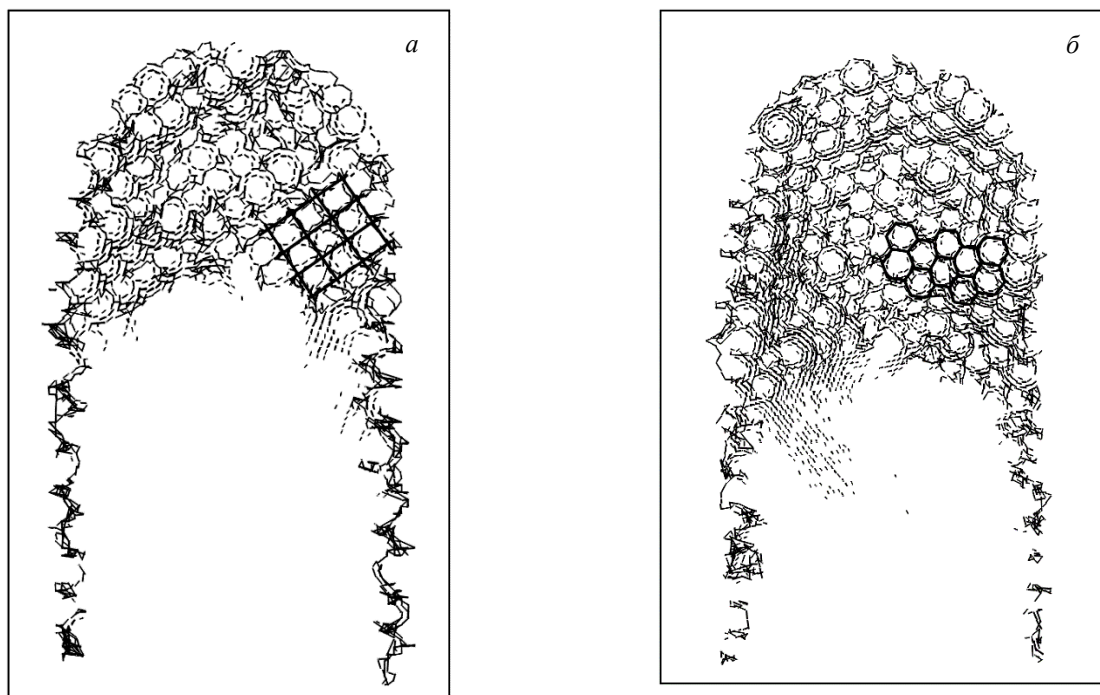


Рис. 3. Атомные смещения (больше 0,1 нм) в процессе миграции границ наклона $\langle 100 \rangle$ 20° (в течение 540 пс) (а) и $\langle 111 \rangle$ 20° (в течение 300 пс) (б) в никеле при температуре 1700 К

Fig. 3. Atomic displacements (greater than 0.1 nm) during the migration of inclination boundaries $\langle 100 \rangle$ of 20° (within 540 ps) (a) and $\langle 111 \rangle$ 20° (within 300 ps) (b) in Ni at a temperature of 1700 K

форму: для границ $\langle 100 \rangle$ – сетка с квадратными ячейками, для границ $\langle 111 \rangle$ – сетка с шестиугольными ячейками. Несмотря на относительно большой угол разориентации, достигающий 20° , характерный для большеугловых границ (в которых не выделяют отдельные зернограницные дислокации), при миграции малоугловых границ смещения атомов имели такой же вид, но отличались большим размером ячеек, который уменьшался с увеличением угла разориентации. При углах выше $25 - 30^\circ$ рассмотреть упорядоченную сетку атомных смещений становилось затруднительно.

Для обоснования механизма возникновения сеток атомных смещений при миграции малоугловых границ наклона рассмотрим дислокации в границах $\langle 100 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$. Краевые зернограницные дислокации в них отличаются от обычных, внутризеренных. В первую очередь они парные (рис. 4). На малоугловых границах обрываются атомные плоскости, принадлежащие кристаллическим решеткам с разной ориентацией. Этим, принадлежащим разным зернам оборванным атомным полуплоскостям энергетически выгодно объединение в один дефект, представляющий собой зернограницную дислокацию. В отличие от обычных зернограницные дислокации в границах наклона $\langle 100 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$ имеют высокую плотность изломов, зависящую от ориентации плоскости границы и направления оси разориентации. Для рассматриваемого случая важно пер-

вое обстоятельство и способность парных дислокаций расщепляться. В границах $\langle 111 \rangle$ дислокации могут расщепляться с реакцией $1/2[1\bar{1}0] \rightarrow 1/6[2\bar{1}\bar{1}] + 1/6[1\bar{2}1]$, а в границах $\langle 100 \rangle$ – $1[0\bar{1}0] \rightarrow 1/2[0\bar{1}1] + 1/2[0\bar{1}\bar{1}]$ [6, 7].

Анализ динамики атомного механизма миграции малоугловых границ $\langle 100 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$ показал, что парные зернограницные дислокации в процессе движения границы расщепляются со сменой дислокаций-партнеров. В результате возникают зигзагообразные смещения атомов, например, на боковых границах (рис. 3), причем расщепленные дислокации скользят, фактов переползания не установлено.

Миграция малоугловых границ реализуется посредством расщепления и смены дислокаций-партнеров. При миграции малоугловых границ наклона $\langle 100 \rangle$ в результате работы данного механизма смещения атомов образуется сетка с квадратными ячейками (рис. 4, а). В случае миграции границ $\langle 111 \rangle$ помимо указанного присутствует механизм совместного скольжения парных зернограницных дислокаций (рис. 4, б). Парные дислокации границ $\langle 111 \rangle$, в отличие от зернограницных дислокаций границ $\langle 100 \rangle$, имеют общие плоскости скольжения, вдоль которых они могут скользить со сравнительно низкой энергией активации. При миграции границ $\langle 111 \rangle$ зафиксировано комбинированное действие обоих механизмов: совместное скольжение парных зернограницных дислокаций и их

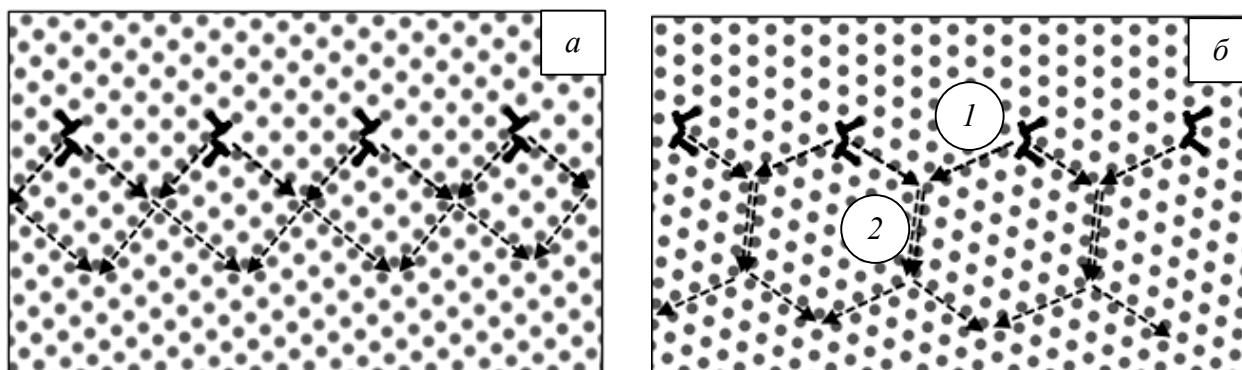


Рис. 4. Схема механизма миграции малоугловых границ наклона $\langle 100 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$ в моноатомной плоскости: а – граница $\langle 100 \rangle$, 10° – смена дислокаций-партнеров; б – граница $\langle 111 \rangle$ 7° – смена дислокаций-партнеров;

1 – смена дислокаций-партнеров; 2 – совместное скольжение парных дислокаций

Fig. 4. Scheme of the mechanism of migration of small-angle boundaries of inclination $\langle 100 \rangle$ and $\langle 111 \rangle$ in the monoatomic plane (a) boundary $\langle 100 \rangle$ of 10° – change of dislocations-partners; (b) $\langle 111 \rangle$ boundary 7° :

1 – change of dislocations-partners; 2 – joint sliding of paired dislocations

расщепление со сменой дислокаций-партнеров. В процессе миграции в зерне, куда двигалась граница, образуются симметричные участки, которые путем поворота «подстраиваются» под структуру другого зерна. Поэтому при миграции границ $\langle 111 \rangle$ ячейки сетки атомных смещений имеют гексагональную форму.

Выводы

Миграция границ $\langle 100 \rangle$ осуществляется посредством расщепления парных зернограницных дислокаций с последующей сменой дислокаций-партнеров. При смене дислокаций-партнеров наблюдалось скольжение расщепленных дислокаций, переползания замечено не было. В случае миграции малоугловых границ наклона $\langle 111 \rangle$ наблюдалось комбинированное действие двух механизмов: описанного выше и механизма, заключающегося в совместном скольжении парных зернограницных дислокаций, которые, в отличие от зернограницных дислокаций в границах $\langle 100 \rangle$, имеют общие плоскости скольжения. Второй механизм имеет сравнительно низкую энергию активации, в результате чего границы $\langle 111 \rangle$ подвижнее границ $\langle 100 \rangle$.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Gottstein G., Shvindlerman L.S. Grain Boundary Migration in Metals: Thermo-dynamics, Kinetics, Applications. Second Edition. 2009. Boca Raton: CRC Press: 2009. 711 p.
- Balluffi R.W., Cahn J.W. Mechanism for diffusion induced grain boundary migration // *Acta Metallurgica*. 1981. Vol. 29. P. 493–500.
- Winning M., Rollett A.D., Gottstein G., Srolovitz D.J., Lim A., Shvindlerman L.S. Mobility of low-angle grain boundaries in pure metals // *Philosophical Magazine*. 2010. Vol. 90. P. 3107–3128.
- Huang Y., Humphreys F.J. Measurements of grain boundary mobility during recrystallization of a single-phase aluminium alloy // *Acta Materialia*. 1999. Vol. 47. P. 2259–2268.
- Huang Y., Humphreys F.J. The effect of solutes on grain boundary mobility during recrystallization and grain growth in some single-phase aluminium alloys // *Materials Chemistry and Physics*. 2012. Vol. 132. P. 166–174. <https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2011.11.018>
- Полетаев Г.М. Атомные механизмы структурно-энергетических превращений в объеме кристаллов и вблизи границ зерен наклона в ГЦК металлах. Диссертация на соискание ученой степени доктора физ.-мат. наук. Барнаул. 2008, 356 с.
- Атомные механизмы структурно-энергетических превращений вблизи границ зерен наклона в ГЦК металлах и интерметаллиде Ni3Al / Г.М. Полетаев и др. Новокузнецк: СибГИУ. 2008. 160 с.
- Кайбышев О.А., Валиев Р.З. Границы зерен и свойства металлов. Москва: Металлургия, 1987. 216 с.
- Gottstein G., Molodov D.A., Shvindlerman L.S. Grain boundary migration in metals: recent developments // *Interface Science*. 1998. No. 6. P. 7–22.
- Molodov D.A., Ivanov V.A., Gottstein G. Low angle tilt boundary migration coupled to shear deformation // *Acta Materialia*. 2007. Vol. 55 (5). P. 1843–1848.
- Протасова С.Г., Сурсаева В.Г., Шvindlerman Л.С. Исследование движения индивидуальных тройных стыков в алюминии // *Физика твердого тела*. 2003. Т. 45. № 8. С. 1402–1405.

12. Gottstein G., Sursaeva V., Shvindlerman L. The effect of triple junctions on grain boundary motion and grain microstructure evolution // *Interface Science*. 1999. № 7. С. 273–283. <https://doi.org/10.1023/A:1008721426104>
13. Upmanyu M., Srolovitz D.J., Shvindlerman L.S., Gottstein G. Triple junction mobility: a molecular dynamics study // *Interface Science*. 1999. No. 7. P. 307–319.
14. Upmanyu M., Srolovitz D.J., Shvindlerman L.S., Gottstein G. Molecular dynamics simulation of triple junction migration // *Acta Materialia*. 2002. Vol. 50. P. 1405–1420.
15. Fortes M.A., Deus A.M. Effects of triple grain junctions on equilibrium boundary angles and grain growth kinetics // *Materials Science Forum*. 2004. Vol. 455–456. P. 648–652.
16. Perevalova O.B., Konovalova E.V., Koneva N.A., Kozlov E.V. Energy of grain boundaries of different types in fcc solid solutions, ordered alloys and intermetallics with L12 superstructure // *Journal of Materials Science and Technology*. 2003. Vol. 19. No. 6. P. 593–596.
17. Bulatov V.V., Reed B.W., Kumar M. Grain boundary energy function for FCC metals // *Acta Materialia*. 2014. Vol. 65. P. 161–175. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2013.10.057>
18. Olmsted D.L., Foiles S.M., Holm E.A. Survey of computed grain boundary properties in face-centered cubic metals: I. Grain boundary energy // *Acta Materialia*. 2009. Vol. 57. P. 3694–3703. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2009.04.007>
19. Masahashi N., Takasugi T., Izumi O. High-temperature strength and ductility of L12-type Ni₃Al–Ni₃Mn intermetallic compound // *Journal of Materials Science*. 1987. Vol. 22. P. 2599–2608.
20. Ramesh R., Pathiraj B., Kolster B.H. Crystal structure changes in Ni₃Al and its anomalous temperature dependence of strength. *Journal of Materials Processing Technology*. 1996. Vol. 56. P. 78–87.
4. Huang Y., Humphreys F.J. Measurements of grain boundary mobility during recrystallization of a single-phase aluminium alloy. *Acta Materialia*. 1999, vol. 47, pp. 2259–2268.
5. Huang Y., Humphreys F.J. The effect of solutes on grain boundary mobility during recrystallization and grain growth in some single-phase aluminium alloys. *Materials Chemistry and Physics*. 2012, vol. 132, pp. 166–174. <https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2011.11.018>
6. Poletaev G.M. *Atomic mechanisms of structural-energetic transformations in the bulk of crystals and near tilt grain boundaries in FCC metals*. Dissertation for the degree of doctor of fiz.-mat. Sciences. Barnaul, 2008, 356 p. (In Russ.).
7. Poletaev G.M. *Atomic Mechanisms of Structural-Energy Transformations Near Tilt Grain Boundaries in FCC Metals and Ni₃Al Intermetallic*. Novokuznetsk: SibGIU, 2008. 160 p. (In Russ.).
8. Kajbyshev O.A., Valiev R.Z. *Grain boundaries and properties of metals*. Moscow: Metallurgy, 1987. 216 p. (In Russ.).
9. Gottstein G., Molodov D.A., Shvindlerman L.S. Grain boundary migration in metals: recent developments. *Interface Science*. 1998, no. 6, pp. 7–22.
10. Molodov D.A., Ivanov V.A., Gottstein G. Low angle tilt boundary migration coupled to shear deformation. *Acta Materialia*. 2007, vol. 55 (5), pp. 1843–1848.
11. Protasova S.G., Sursaeva V.G., Shvindlerman L.S. Study of the movement of individual triple joints in aluminum. *Solid state physics*. 2003, vol. 45, no. 8, pp. 1402–1405. (In Russ.).
12. Gottstein G., Sursaeva V., Shvindlerman L. The effect of triple junctions on grain boundary motion and grain microstructure evolution. *Interface Science*. 1999, no. 7, pp. 273–283. <https://doi.org/10.1023/A:1008721426104>
13. Upmanyu M., Srolovitz D.J., Shvindlerman L.S., Gottstein G. Triple junction mobility: a molecular dynamics study. *Interface Science*. 1999, no. 7, pp. 307–319.
14. Upmanyu M., Srolovitz D.J., Shvindlerman L.S., Gottstein G. Molecular dynamics simulation of triple junction migration. *Acta Materialia*. 2002, vol. 50, pp. 1405–1420.
15. Fortes M.A., Deus A.M. Effects of triple grain junctions on equilibrium boundary angles and grain growth kinetics. *Materials Science Forum*. 2004, vol. 455–456, pp. 648–652.
16. Perevalova O.B., Konovalova E.V., Koneva N.A., Kozlov E.V. Energy of grain boundaries of different types in fcc solid solutions, ordered

REFERENCES

1. Gottstein G., Shvindlerman L.S. *Grain Boundary Migration in Metals: Thermodynamics, Kinetics, Applications. Second Edition*. 2009. Boca Raton: CRC Press: 2009, 711 p.
2. Balluffi R.W., Cahn J.W. Mechanism for diffusion induced grain boundary migration. *Acta Metallurgica*. 1981, vol. 29, pp. 493–500.
3. Winning M., Rollett A.D., Gottstein G., Srolovitz D.J., Lim A., Shvindlerman L.S. Mobility of low-angle grain boundaries in pure metals. *Philosophical Magazine*. 2010, vol. 90, pp. 3107–3128.

- alloys and intermetallics with L12 superstructure. *Journal of Materials Science and Technology*. 2003, vol. 19, no. 6, pp. 593–596.
17. Bulatov V.V., Reed B.W., Kumar M. Grain boundary energy function for FCC metals. *Acta Materialia*. 2014, vol. 65, pp. 161–175. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2013.10.057>
 18. Olmsted D.L., Foiles S.M., Holm E.A. Survey of computed grain boundary properties in face-centered cubic metals: I. Grain boundary energy. *Acta Materialia*. 2009, vol. 57, pp. 3694–3703. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2009.04.007>
 19. Masahashi N., Takasugi T., Izumi O. High-temperature strength and ductility of L12-type Ni₃Al–Ni₃Mn intermetallic compound. *Journal of Materials Science*. 1987, vol. 22, pp. 2599–2608.
 20. Ramesh R., Pathiraj B., Kolster B.H. Crystal structure changes in Ni₃Al and its anomalous temperature dependence of strength. *Journal of Materials Processing Technology*. 1996, vol. 56, pp. 78–87.

Сведения об авторах

Ирина Васильевна Зоря, д.ф.-м.н., доцент, заведующий кафедрой теплогазоводоснабжения, водоотведения и вентиляции, Сибирский государственный индустриальный университет
E-mail: zorya.i@mail.ru
ORCID: 0000-0001-5748-813X

Геннадий Михайлович Поletaев, д.ф.-м.н., профессор, заведующий кафедрой высшей математики, Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова
E-mail: gmpoletaev@mail.ru
ORCID: 0000-0002-5252-2455

Information about the authors

Irina V. Zorya, Dr. Sci. (Phys.-Math.), Asist. Prof., Head of the Department of Heat and Gas Supply, Water Disposal and Ventilation, Siberian State Industrial University
E-mail: zorya.i@mail.ru
ORCID: 0000-0001-5748-813X

Gennady M. Poletaev, Dr. Sci. (Phys.-Math.), Professor, Head of the Department of Higher Mathematics, Altai State Technical University named after I.I. Polzunov
E-mail: gmpoletaev@mail.ru
ORCID: 0000-0002-5252-2455

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

The authors declare that there is no conflict of interest.

Поступила в редакцию 09.03.2023

После доработки 14.03.2023

Принята к публикации 17.03.2023

Received 09.03.2023

Revised 14.03.2023

Accepted 17.03.2023