МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ / MATERIALS SCIENCE

УДК 621.039.53
DOI 10.17073/0368-0797-2024-3-311-317

CC BY

Оригинальная статья
Original article

Миграция границ зерен и изменение механических свойств сплава Fe – 10Ni – 20Cr при радиационном облучении

Д. С. Крыжевич, **А. В. Корчуганов**, **К. П. Зольников**

Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения РАН (Россия, 634055, Томск, пр. Академический, 2/4)

kryzhev@ispms.ru

Аннотация. Проведено молекулярно-динамическое изучение механизмов миграции наклонных симметричных границ ∑5(210)[001] и ∑5(310)[001] в бикристаллических образцах Fe – 10Ni – 20Cr при радиационном облучении. Плотность радиационных дефектов растет достаточно быстро вплоть до дозы ~0,02 сна и затем выходит на насыщение. Это обусловлено уравновешиванием скоростей генерации и аннигиляции радиационных дефектов. Показано, что на ранней стадии облучения границы зерен начинали стохастически отклоняться от исходных положений вследствие взаимодействия с каскадами атомных смещений и поглощения дефектов структуры. В процессе облучения область границ зерен утолщалась и становилась шероховатой. С ростом дозы облучения увеличивались размеры кластеров точечных дефектов (тетраэдов дефектов упаковки и дислокационных петель). Взаимодействие с крупными кластерами точечных дефектов привело к образованию изгибов на изначально плоских поверхностях границ зерен. При малых расстояниях между границами высокая движущая сила между изогнутыми поверхностями существенно увеличивала скорости сближения границ зерен. Показано, что средние скорости миграции границ зерен до их непосредственного взаимодействия друг с другом составляли примерно 0,8 м/с. В результате сближения границы зерен аннигилировали, потенциальная энергия образца скачкообразно уменьшилась, и зерна объединились. Для аннигиляции границ зерен ∑5(310)[001] потребовалась в два раза большая доза облучения по сравнению с границей зерен ∑5(210)[001]. Непосредственное взаимодействие границ зерен друг с другом скачкообразно увеличивает скорости их миграции из-за возникновения движущей силы со стороны изогнутых участков поверхностей границ зерен. Изучено влияние дозы радиационного облучения на особенности деформационного поведения образцов при одноосных растяжениях. Показано, что с ростом дозы облучения предел упругости быстро понижается и выходит на насыщение при дозе облучения ~0,01 сна.

Ключевые слова: молекулярная динамика, радиационные дефекты, дефект упаковки, облучение, одноосное растяжение, Fe – 10Ni – 20Cr, миграция межзеренных границ

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ № 23-29-0062.

Для цитирования: Крыжевич Д.С., Корчуганов А.В., Зольников К.П. Миграция границ зерен и изменение механических свойств сплава Fe – 10Ni – 20Cr при радиационном облучении. *Известия вузов. Черная металлургия*. 2024;67(3):311–317. https://doi.org/10.17073/0368-0797-2024-3-311-317

Grain boundary migration and mechanical properties altering in Fe – 10Ni – 20Cr alloy under irradiation

D. S. Kryzhevich, **A. V. Korchuganov**, **K. P. Zolnikov**

Institute of Strength Physics and Materials Science, Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences (2/4 Akademicheskii Ave., Tomsk 634021, Russian Federation)

kryzhev@ispms.ru

Abstract. Mechanisms of ∑5(210)[001] and ∑5(310)[001] symmetrical tilt grain boundaries migration in bicrystall Fe – 10Ni – 20Cr samples under irradiation were investigated by means of molecular dynamics method. The density of radiation defects grows quite quickly up to a dose of ~0.02 dpa and then reaches saturation. This is due to balancing of the radiation defects generation and annihilation rates. It is shown that at the early stage of irradiation, grain boundaries began to deviate stochastically from their initial positions due to interaction with cascades of atomic displacements and absorption of structural defects. During irradiation, the grain boundary region thickened and became rough. With an increase in the radiation dose, size of the clusters of point defects (tetrahedrons of stacking faults and dislocation loops) increased. Interaction with large clusters of point defects led to the formation of bends on initially flat surfaces of grain boundaries. At small distances between the boundaries, the high driving force between

© Д. С. Крыжевич, А. В. Корчуганов, К. П. Зольников, 2024

the curved surfaces of grain boundaries significantly increased the rates of their approach. The average migration rates of grain boundaries before their direct interaction with each other were approximately 0.8 m/s. As a result of their approach, the grain boundaries were annihilated, the potential energy of the sample decreased abruptly, and the grains merged. The annihilation of ∑5(310)[001] grain boundaries required twice the radiation dose compared to the ∑5(210)[001] grain boundaries. The direct interaction of grain boundaries with each other abruptly increased the velocity of their migration due to the emergence initiation of a driving force from the curved sections of the grain boundary surfaces. Influence of the radiation dose on deformation behavior features of the samples under uniaxial strains was studied. With an increase in the radiation dose, the elastic limit decreased rapidly and reached saturation at an irradiation dose of ~0.01 dpa.

Keywords: molecular dynamics, radiation defects, stacking fault, irradiation, uniaxial tension, Fe–10Ni–20Cr, grain boundary migration

Acknowledgements: The work was supported by the Russian Science Foundation, grant No. 23-29-0062.

For citation: Kryzhevich D.S., Korchuganov A.V., Zolnikov K.P. Grain boundary migration and mechanical properties altering in Fe–10Ni–20Cr alloy under irradiation. *Izvestiya. Ferrous Metallurgy*. 2024;67(3):311–317. https://doi.org/10.17073/0368-0797-2024-3-311-317

Введение

Формирование различного рода интерфейсов является одним из эффективных способов повышения радиационной стойкости материалов [1 – 3]. Такие интерфейсы, как границы зерен, способны аккумулировать в себе значительную часть дефектов, генерируемых в процессе облучения. Облучение нанокристаллических образцов Ni и Cu показало, что границы зерен в них являются основным стоком радиационных дефектов, что существенно уменьшает плотность структурных дефектов по сравнению с крупнозернистыми аналогами [4]. В работе [5] в рамках молекулярно-динамического подхода было показано, что границы зерен активно поглощают межузельные атомы, генерируемые каскадами атомных смещений, а большое количество вакансий остается в теле зерен. В последующем избыточные межузельные атомы покидают границы зерен, возвращаясь в тела зерен, где усиливают процесс рекомбинации с вакансиями. Экспериментальное изучение поведения нанокристаллического золота при ионном облучении выявило термическую нестабильность генерируемых дефектов, что было связано с высокой плотностью границ зерен [6]. Особенности взаимодействия границ зерен с радиационно-индуцируемыми дефектами на микроскопическом уровне исследовались в работах [7; 8]. Отмечено, что границы зерен сегрегируют в своей области собственные межузельные атомы, которые характеризуются большей подвижностью по сравнению с вакансиями и порами. Однако вопросы, связанные с поглощением границами зерен дефектов с малой подвижностью, требуют дополнительных исследований.

Высокотемпературный разогрев материалов в зоне атомного реактора существенно ускоряет процесс рекристаллизации, в основе которого лежит миграция границ [9; 10]. Для сдерживания этого процесса важное значение имеет изучение механизмов взаимодействия радиационно-индуцируемых дефектов структуры с движущимися границами зерен. Миграция границ зерен контролирует эволюцию микроструктуры материалов. Движущие силы миграции границ зерен могут иметь различную физическую природу, которая может быть связана с анизотропией упругой энергии, неоднородной плотностью дефектов и примесей, градиентом температуры, а также изогнутостью поверхности границ зерен [11]. Эти движущие силы часто рассматриваются в экспериментальных и численных исследованиях процессов миграции границ зерен и процесса рекристаллизации в поликристаллических материалах [12 – 14].

Бикристаллические образцы являются разумной альтернативой для исследования особенностей поведения отдельных границ зерен при различных видах внешнего воздействия как в экспериментах, так и в моделировании [15 – 18]. При отсутствии внешних воздействий и внутренних градиентов энергии миграция границ зерен носит характер случайных блужданий [18]. Влияние радиационного облучения на подвижность границ зерен является открытой научной задачей, решение которой представляет интерес для выявления механизмов радиационно-стимулированного роста зерен.

В настоящей работе исследованы механизмы миграции границ зерен в бикристаллических образцах Fe–10Ni–20Cr с наклонными симметричными границами зерен ∑5(210)[001] и ∑5(310)[001] в процессе облучения и влияние дозы облучения на зарождение и развитие пластичности в данных образцах при одноосном растяжении.

Описание метода исследования

Моделируемые образцы сплава Fe–10Ni–20Cr содержали две наклонные симметричные границы зерен ∑5(210)[001] или ∑5(310)[001] и имели форму параллелепипеда с размерами ребер 12×24×12 нм. Для определения оптимальной конфигурации границы зерна использовался алгоритм минимизации по гамма-поверхности [19]. Исходная температура в образцах составляла 950 К. Межатомное взаимодействие в материале описывалось многочастичным потенциалом, позволяющим корректно моделировать каскады атомных смещений в образце [20]. Распределение скоростей атомов в исходных образцах соответствовало распределению Максвелла, а их начальное направление задавалось с помощью генератора случайных чисел. Для ускорения расчёта шаг интегрирования менялся динамически,

при этом максимальное смещение атома не превышало 0,5 пм. Для заданных условий нагружения и температуры шаг интегрирования варьировался в интервале от $2 \cdot 10^{-18}$ до $3 \cdot 10^{-16}$ с. Для моделирования облучения в образцах генерировалась последовательность каскадов атомных смещений с энергией первично выбитого атома 10 кэВ. Выбор первично выбитого атома и начальное направление его смещения задавались генератором случайных чисел. Первичный выбитый атом всегда был атомом железа. Для оценки накопленной дозы облучения в приближении NRT теории пороговая энергия смещения задавалась равной 40 эВ, которая обычно используется для железа и сплавов на его основе [21]. После генерации каскада атомных смещений система релаксировалась в течение 10 пс и охлаждалась термостатом до исходной температуры в течение 5 пс перед генерацией следующего каскада атомных смещений. Механическое нагружение задавалось растяжением перпендикулярно плоскости границы зерен с постоянной скоростью 5 м/с путем масштабирования координат атомов и размера моделируемой ячейки. В остальных направлениях система деформировалась таким образом, чтобы поддерживалось нулевое давление в этом направлении. Во всех направлениях моделировались периодические граничные условия. Моделирование проводилось с помощью вычислительного пакета LAMMPS [22]. Для идентификации локальных структурных изменений в нагружаемом образце использовался алгоритм анализа по общим соседям для каждого атома [23]. Для визуализации структуры моделируемых кристаллитов использовался пакет OVITO [24].

Результаты расчета

С началом облучения в моделируемом образце происходит накопление радиационных повреждений структуры. Количество радиационных дефектов растет достаточно быстро вплоть до дозы ~0,02 сна, при которой плотность радиационных дефектов выходит на постоянную величину. В процессе облучения рост потенциальной энергии межатомного взаимодействия постепенно замедляется (рис. 1). При дозах более 0,02 сна скорости генерации и аннигиляции радиационных дефектов становятся одинаковыми и кривые на рис. 1 выходят на насыщение. В процессе облучения толщины границ зерен увеличиваются, появляются шероховатости и изгибы на их изначально плоских поверхностях. Результаты расчетов положения границ зерен в моделируемых бикристаллах представлены на рис. 2, где хорошо видно, что движение границ зерен носит скачкообразный характер. Кроме того, на кривых, представленных на рис. 2, имеются интервалы облучения, когда границы зерен двигались как навстречу друг другу, так и в обратном направлении. В то же время хорошо прослеживается тенденция к их взаимному сближению. Данные особенности обусловлены влиянием на миграцию границ зерен таких процессов, как зарождение и развитие каскадов атомных смещений, удаленность каскадов от границ зерен, термоактивируемая диффузия дефектов и взаимодействие границ зерен с различными радиационными дефектами структуры [25].

Эволюция необлученного образца в течение более 200 нс при температуре 950 К показывает, что границы зерен не смещаются. Это свидетельствует о том факте, что скорость термоактивируемой миграции границ зерен в образце существенно ниже радиационно-стимулированной. Облучение образца приводит к возникновению радиационно-стимулированной миграции границ зерен, в процессе которой происходят изменения их структуры, что хорошо видно на рис. 3. Изменения в структуре границ зерен обусловлены взаимодействием и поглощением различных радиационных дефектов. На рис. 3 показана структура границ зерен и крупные кластеры при различных дозах облучения.

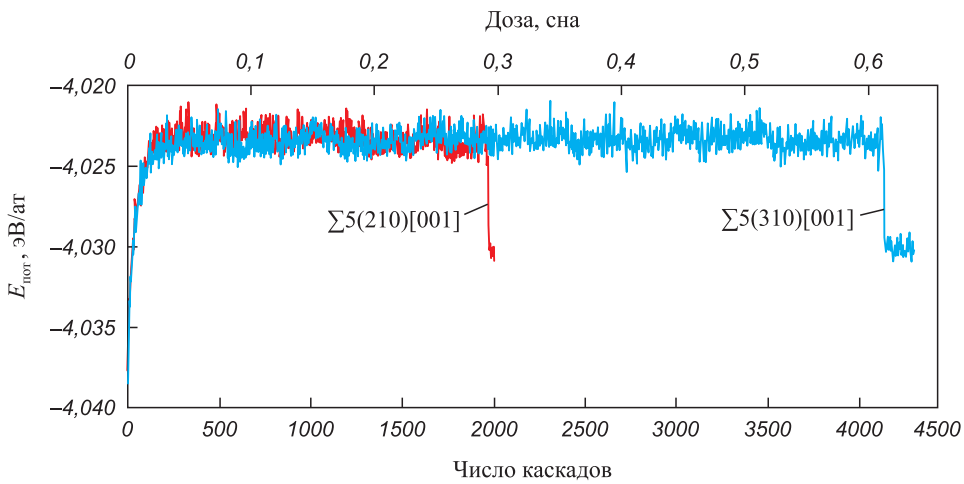

Рис. 1. Изменение потенциальной энергии образцов с различными границами зерен в зависимости от дозы облучения

Fig. 1. Potential energy vs radiation dose for the samples with different grain boundaries

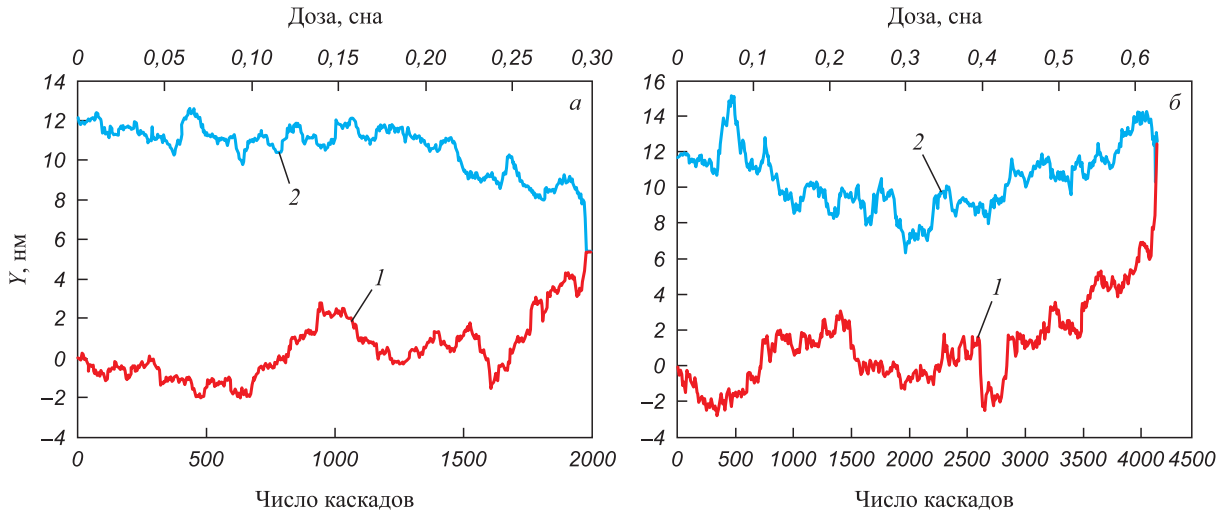

Рис. 2. Изменение положения границ зерен ∑5[210](001) (*1*) и ∑5(310)[001] (*2*) в зависимости от дозы облучения

Fig. 2. ∑5[210](001) (*1*) and ∑5[310](001) (*2*) grain boundary location vs radiation dose

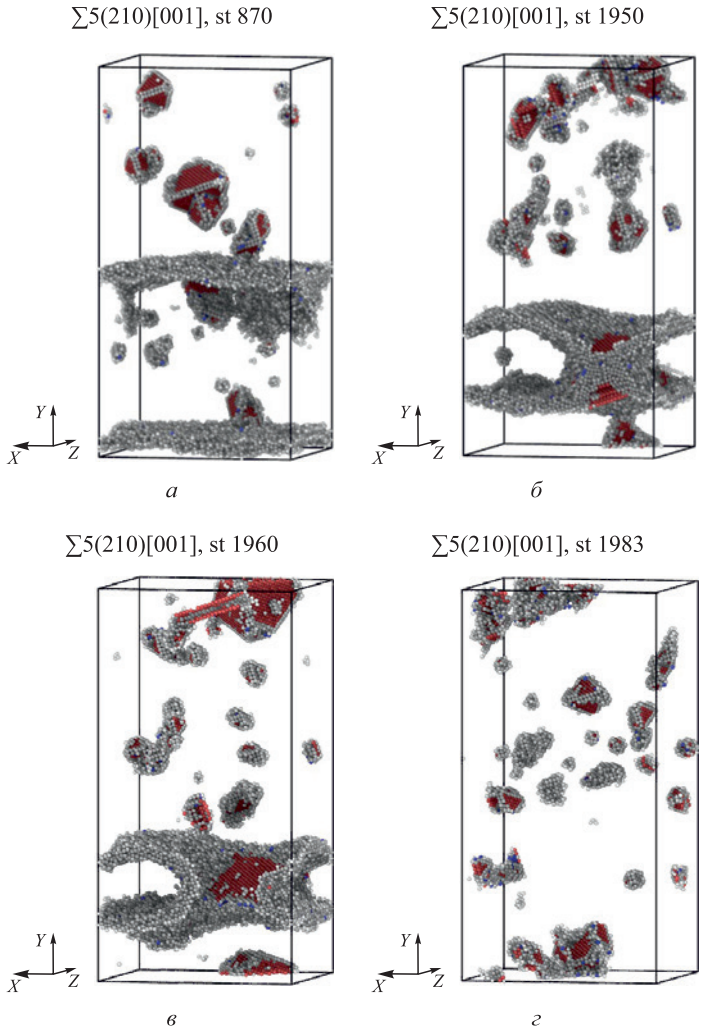

Рис. 3. Границы зерен ∑5(210)[001] и радиационные дефекты для различных доз облучения (красным и серым цветами показаны атомы с ГПУ и неопределенной структурой ближайшего окружения соответственно, остальные атомы невидимы)

Fig. 3. ∑5[210](001) grain boundary and radiation defects for different radiation doses (atoms with hcp and uncertain local structure are marked in red and grey, respectively; other atoms are invisible)

Основная доля крупных кластеров представляет собой тетраэдры дефектов упаковки. При дозе облучения 0,129 сна (рис. 3, *а*) границы зерен еще незначительно сместились из начального положения, но их исходно плоские поверхности локально изогнулись вследствие взаимодействия с расположенными вблизи крупными кластерами. Как видно из рис. 2, *а*, расстояние между границами в процессе облучения могло как увеличиваться, так и уменьшаться. Направление смещения границ зерен определялось притяжением к крупным кластерам, которые формировались случайным образом то по одну, то по другую сторону от поверхности границ зерен. Отметим, что взаимное притяжение между кластерами точечных дефектов и межзеренными границами обуславливается действующими между ними упругими силами [26]. При дозе облучения 0,290 сна поверхности границ зерен локально изогнулись навстречу друг другу из-за совместного притяжения к крупному кластеру, сформировавшемуся в области между границами зерен (рис. 3, *б*). Расстояние между изогнутыми поверхностями стало достаточным для того, чтобы границы зерен стали взаимодействовать и быстро сближаться (рис. 3, *в*). Расчеты показали, что средние скорости миграции границ зерен до их непосредственного взаимодействия друг с другом составляли примерно 0,8 м/с. Взаимодействие искривленных участков поверхностей увеличило скорость миграции границ зерен примерно на порядок. В результате сближения и последующего слияния границ зерен произошла их аннигиляция (рис. 3, *г*), которая вызвала скачкообразное уменьшение потенциальной энергии моделируемого образца (рис. 1).

Расчеты показали, что механизмы миграции границ зерен менялись в процессе облучения. Так, на ранней стадии примерно до облучения ~0,01 сна границы зерен увеличивали свою подвижность по сравнению с необлученными за счет взаимодействия с каскадами атомных смещений и поглощения радиационных дефектов. На этой стадии миграция имела характер хаотических колебаний поверхностей границ зерен. С ростом дозы облучения в образце стали формироваться все более крупные кластеры, взаимодействие с которыми привело к ускорению миграции границ зерен. При этом возросла скорость миграции границ зерен и они дальше сместились относительно исходных положений. Для этого интервала доз облучения характер миграции границ зерен перешел от хаотических колебаний локальных участков поверхностей к смещению их как целого. В результате этого границы зерен существенно отклонились от своих исходных положений. Когда расстояние между границами зерен стало менее 4 нм, они начали непосредственно взаимодействовать друг с другом. При этом скорость их миграции скачкообразно возросла из-за высокой движущей силы со стороны изогнутых поверхностей границ зерен. Похожим образом ведет себя при облучении бикристалл с границей зерен ∑5(310)[001]. Однако в этом случае для аннигиляции границ зерен потребовалась в два раза большая доза облучения (рис. 2).

В работе проведено изучение особенностей поведения облученных до разных доз образцов при одноосном растяжении. Расчеты показали, что механические свойства образца существенно зависят от дозы облучения, которая определяет степень радиационной поврежденности образца. Общая тенденция деформационного поведения заключалась в том, что с ростом дозы облучения происходило достаточно быстрое уменьшение предела упругости образцов (рис. 4, *а*), значение которого выходило на плато при дозах более 0,01 сна (рис. 4, *б*). При данной дозе облучения плотность и размеры сфор-

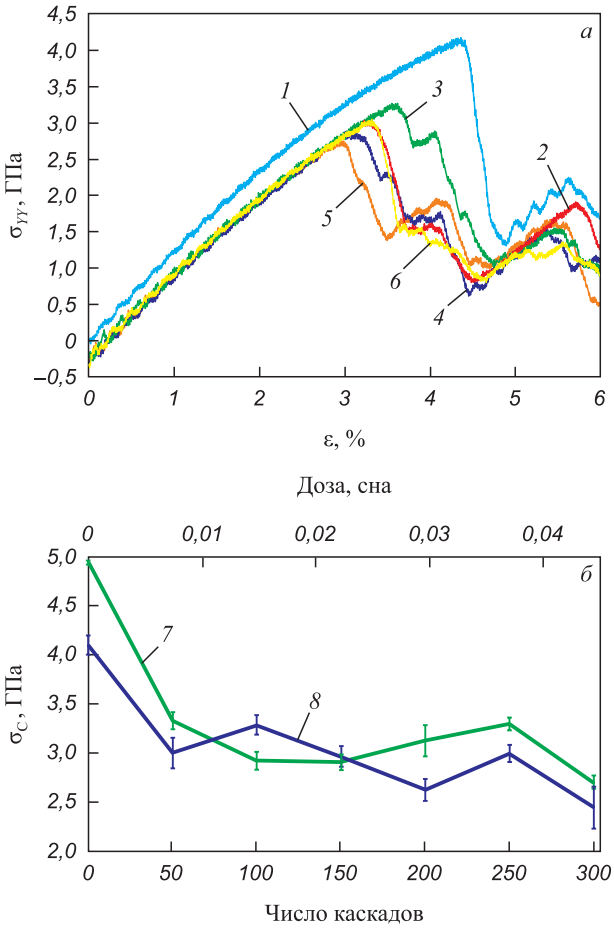

Рис. 4. Зависимости напряжений от величины деформации при одноосном растяжении для различных доз облучения образцов с границами зерен ∑5(210)[001] (*а*); зависимость предела упругости от дозы облучения для образцов с различными границами зерен (*б*):
1 – до облучения;
2 – 6 – 10, 50, 100, 150 и 250 каскадов соответственно;
7 – ∑5(310)[001] ; *8* – ∑5(210)[001]

Fig. 4. Stress-strain dependence under uniaxial tension for different radiation doses for the sample with the ∑5(210)[001] grain boundary (*a*). Elastic limits vs radiation dose for samples with different types of grain boundaries (*б*):
1 – before radiation;
2 – 6 – 10, 50, 100, 150 and 250 cascades, respectively;
7 – ∑5(310)[001] ; *8* – ∑5(210)[001]

мированных радиационных дефектов минимизировали величину энергетических барьеров для зарождения и распространения дефектов упаковки – основных носителей пластической деформации в моделируемом материале. Отметим, что предел упругости выходит на плато при более низкой дозе облучения, чем происходит уравновешивание процессов генерации и аннигиляции радиационных дефектов. Отклонения от среднего значения предела упругости при более высоких дозах облучения были вызваны особенностями изменения внутренней структуры, прежде всего, связанными с изменениями конфигурации и распределения в объеме наиболее крупных кластеров и дислокационных петель. Данные изменения дефектной системы носили стохастический характер (рис. 4, *б*).

Выводы

Результаты моделирования показали, что механизмы миграции симметричных наклонных границ зерен в бикристалле Fe–10Ni–20Cr меняются в процессе радиационного облучения. При малых дозах облучения миграция границ зерен носит характер стохастических отклонений от исходных положений. Это обусловлено взаимодействием границ зерен с каскадами атомных смещений и поглощением подвижных дефектов структуры. При более высоких дозах облучения формируются крупные кластеры, взаимодействие с которыми увеличивает скорость миграции границ зерен и локальную изогнутость их поверхности. Движущей силой миграции границ зерен является их упругое взаимодействие с крупными кластерами. С дальнейшим ростом дозы облучения проявляется общая тенденция границ зерен к еще большему сближению, которая заканчивается их аннигиляцией. Скорость миграции при взаимодействии границ друг с другом скачкообразно возрастает. Движущая сила миграция обусловлена сильным взаимным притяжением между близ расположенными изогнутыми участками границ зерен.

Расчеты показали, что предел упругости моделируемого сплава достаточно быстро уменьшается с ростом дозы облучения до 0,01 сна и затем выходит на плато. При дальнейшем облучении предел упругости незначительно отклоняется от среднего значения. Обнаружено, что предел упругости выходит на плато при меньшей дозе облучения, чем происходит выход на насыщение плотности выживших радиационных дефектов. Это обусловлено тем, что при более низкой дозе облучения происходит минимизация величины энергетических барьеров, необходимых для зарождения и развития пластической деформации в исследуемом материале.

Список литературы / References

1. Zhang X., Hattar K., Chen Y., Shao L., Li J., Sun C., Yu K., Li N., Taheri M.L., Wang H., Wang J., Nastasi M. Radiation damage in nanostructured materials. *Progress in Materials Science*. 2018;96:217–321. https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2018.03.002
2. Grimes R.W., Konings R.J.M., Edwards L. Greater tolerance for nuclear materials. *Nature Materials*. 2008;7:683–685. https://doi.org/10.1038/nmat2266
3. Ackland G. Controlling radiation damage. *Science*. 2010; 327(5973):1587–1588. https://doi.org/10.1126/science.1188088
4. Nita N., Schaeublin R., Victoria M. Impact of irradiation on the microstructure of nanocrystalline materials. *Journal of Nuclear Materials*. 2004;329–333B:953–957. https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2004.04.058
5. Bai X.-M., Voter A.F., Hoagland R.G., Nastasi M., Uberuaga B.P. Efficient annealing of radiation damage near grain boundaries via interstitial emission. *Science*. 2010; 327(5973):1631–1634. https://doi.org/10.1126/science.1183723
6. Chimi Y., Iwase A., Ishikawa N., Kobiyama M., Inami T., Okuda S. Accumulation and recovery of defects in ion-irradiated nanocrystalline gold. *Journal of Nuclear Materials*. 2001;297(3):355–357. https://doi.org/10.1016/S0022-3115(01)00629-8
7. Bai X.-M., Uberuaga B.P. The influence of grain boundaries on radiation-induced point defect production in materials: A review of atomistic studies. *JOM*. 2013;65:360–373. https://doi.org/10.1007/s11837-012-0544-5
8. Beyerlein I.J., Demkowicz M.J., Misra A., Uberuaga B.P. Defect-interface interactions. *Progress in Materials Science*. 2015;74:125–210. https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2015.02.001
9. Li Y.H., Wang L., Li B., E J.C., Zhao F.P., Zhu J., Luo S.N. Thermally driven grain boundary migration and melting in Cu. *The Journal of Chemical Physics*. 2015;142(5):054706. https://doi.org/10.1063/1.4907272
10. Chen K., Han J., Srolovitz D.J. On the temperature dependence of grain boundary mobility. *Acta Materialia*. 2020; 194:412–421. https://doi.org/10.1016/j.actamat.2020.04.057
11. Gottstein G., Shvindlerman L.S. Grain Boundary Migration in Metals. CRC Press; 2009:711. https://doi.org/10.1201/9781420054361
12. Rupert T.J., Gianola D.S., Gan Y., Hemker K.J. Experimental observations of stress-driven grain boundary migration. *Science*. 2009;326(5960):1686–1690. https://doi.org/10.1126/science.1178226
13. Zhang H., Upmanyu M., Srolovitz D.J. Curvature driven grain boundary migration in aluminum: molecular dynamics simulations. *Acta Materialia*. 2005;53(1):79–86. https://doi.org/10.1016/j.actamat.2004.09.004
14. Tonks M., Millett P., Cai W., Wolf D. Analysis of the elastic strain energy driving force for grain boundary migration using phase field simulation. *Scripta Materialia*. 2010; 63(11):1049–1052. https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2010.07.034
15. Cahn J.W., Mishin Y., Suzuki A. Coupling grain boundary motion to shear deformation. *Acta Materialia*. 2006; 54(19):4953–4975. https://doi.org/10.1016/j.actamat.2006.08.004
16. Zhang H., Mendelev M.I., Srolovitz D.J. Computer simulation of the elastically driven migration of a flat grain boundary. *Acta Materialia*. 2004;52(9):2569–2576. https://doi.org/10.1016/j.actamat.2004.02.005

17. Yu W.S., Demkowicz M.J. Non-coherent Cu grain boundaries driven by continuous vacancy loading. *Journal of Materials Science*. 2015;50:4047–4065. https://doi.org/10.1007/s10853-015-8961-9
18. Olmsted D.L., Holm E.A., Foiles S.M. Survey of computed grain boundary properties in face-centered cubic metals – II: Grain boundary mobility. *Acta Materialia*. 2009; 57(13):3704–3713. https://doi.org/10.1016/j.actamat.2009.04.015
19. Mishin Y., Farkas D. Atomistic simulation of [001] symmetrical tilt grain boundaries in NiAl. *Philosophical Magazine A*. 1998;78(1):29–56. https://doi.org/10.1080/014186198253679
20. Béland L.K., Tamm A., Mu S., Samolyuk G.D., Osetsky Y.N., Aabloo A., Klintenberg M., Caro A., Stoller R.E. Accurate classical short-range forces for the study of collision cascades in Fe–Ni–Cr. *Computer Physics Communication*. 2017;219:11–19. https://doi.org/10.1016/j.cpc.2017.05.001
21. Stoller R.E., Toloczko M.B., Was G.S., Certain A.G., Dwaraknath S., Garner F.A. On the use of SRIM for computing radiation damage exposure. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. Section B*. 2013;310:75–80. https://doi.org/10.1016/j.nimb.2013.05.008
22. Plimpton S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics. *Journal of Computational Physics*. 1995; 117(1):1–19. https://doi.org/10.1006/jcph.1995.1039
23. Honeycutt J.D., Andersen H.C. Molecular dynamics study of melting and freezing of small Lennard-Jones clusters. *Journal of Physical Chemistry*. 1987;91(19):4950–4963. https://doi.org/10.1021/j100303a014
24. Stukowski A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO – the Open Visualization Tool. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. 2010;18:015012. https://doi.org/10.1088/0965-0393/18/1/015012
25. Jin M., Cao P., Short M.P. Mechanisms of grain boundary migration and growth in nanocrystalline metals under irradiation. *Scripta Materialia*. 2019;163:66–70. https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2018.12.038
26. Jin M., Cao P., Yip S., Short M.P. Radiation damage reduction by grain-boundary biased defect migration in nanocrystalline Cu. *Acta Materialia*. 2018;155:410–417. https://doi.org/10.1016/j.actamat.2018.05.071

Сведения об авторах / Information about the Authors

Дмитрий Сергеевич Крыжевич, *к.ф.-м.н., научный сотрудник лаборатории компьютерного конструирования материалов,* Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения РАН
ORCID: 0000-0002-1423-3724
E-mail: kryzhev@ispms.ru

Александр Вячеславович Корчуганов, *к.ф.-м.н., научный сотрудник лаборатории компьютерного конструирования материалов,* Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения РАН
ORCID: 0000-0002-3765-5911
E-mail: avkor@ispms.ru

Константин Петрович Зольников, *д.ф.-м.н., главный научный сотрудник лаборатории компьютерного конструирования материалов,* Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения РАН
ORCID: 0000-0001-8988-1040
E-mail: kost@ispms.ru

Dmitrii S. Kryzhevich, *Cand. Sci. (Phys.-Math.), Research Associate of the Laboratory of Computer-Aided Design of Materials,* Institute of Strength Physics and Materials Science, Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences
ORCID: 0000-0002-1423-3724
E-mail: kryzhev@ispms.ru

Aleksandr V. Korchuganov, *Cand. Sci. (Phys.-Math.), Research Associate of the Laboratory of Computer-Aided Design of Materials,* Institute of Strength Physics and Materials Science, Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences
ORCID: 0000-0002-3765-5911
E-mail: avkor@ispms.ru

Konstantin P. Zolnikov, *Dr. Sci. (Phys.-Math.), Chief Researcher of the Laboratory of Computer-Aided Design of Materials,* Institute of Strength Physics and Materials Science, Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences
ORCID: 0000-0001-8988-1040
E-mail: kost@ispms.ru

Вклад авторов / Contribution of the Authors

Д. С. Крыжевич – написание основного текста статьи, планирование и проведение экспериментов.
А. В. Корчуганов – написание введения, описание методов исследования, проведение экспериментов.
К. П. Зольников – написание основного текста статьи, планирование экспериментов, анализ и подбор литературных источников.

D. S. Kryzhevich – writing the text, planning and performing experiments.
A. V. Korchuganov – writing of the sections Introduction and Methods, performing experiments.
K. P. Zolnikov – writing the text, planning experiments, analysis and selection of literary sources.

Поступила в редакцию 15.11.2023
После доработки 18.11.2023
Принята к публикации 28.03.2024

Received 15.11.2023
Revised 18.11.2023
Accepted 28.03.2024