

УДК 004.94

Е.И. Марченко¹, Н.А. Кузьмина², Н.Н. Еремин¹

**ЛОКАЛИЗАЦИЯ ПОЗИЦИЙ ПРИМЕСЕЙ УГЛЕРОДА
В КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУРАХ
ПОЛИМОРФНЫХ МОДИФИКАЦИЙ Nb₅Si₃
ПО ДАННЫМ АТОМИСТИЧЕСКОГО
КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ**

DOI: 10.18577/2307-6046-2017-0-3-4-4

Методом атомистического компьютерного моделирования разработана согласованная модель потенциалов межатомного взаимодействия, позволившая воспроизвести кристаллические структуры трех полиморфных модификаций силицида ниобия (α -Nb₅Si₃, β -Nb₅Si₃, γ -Nb₅Si₃) с ошибкой не более 0,6%. Для оценки энергетики вхождения примесных атомов углерода в структуры дополнительно разработаны парные потенциалы межатомного взаимодействия Si–C, Nb–C и C–C. Двумя независимыми методами (Мотта–Литтлтона и методом моделирования в сверхъячейках) впервые определены энергетически наиболее выгодные позиции для примесных атомов углерода в исследуемых структурах.

Ключевые слова: *ниобий-кремниевые естественные композиционные материалы, атомистическое компьютерное моделирование, потенциалы взаимодействия, диффузия, атомы внедрения.*

The method of atomistic computer modeling was developed consistent model of interatomic potentials, which allowed us to reproduce the crystal structures of three polymorphic modifications of niobium silicide (α -Nb₅Si₃, β -Nb₅Si₃, γ -Nb₅Si₃) with an error no more than 0,6%, as well as to calculate some physical properties. To assess the energy of the entering admixture of carbon atoms in the structure were further developed pair potentials interatomic Si–C, Nb–C and C–C. Two independent methods (Mott–Littleton and simulation in over the cell) first identified the energetically most favorable positions for the impurity atoms of carbon in the investigated structures.

Keywords: *niobium-silicon natural composite materials, atomistic computer simulations, interaction potentials, diffusion, atoms of implementation.*

¹Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова» [Federal State Budget Educational Institution of Higher Education M.V. Lomonosov Moscow State University]; e-mail: info@rector.msu.ru

²Федеральное государственное унитарное предприятие «Всероссийский научно-исследовательский институт авиационных материалов» Государственный научный центр Российской Федерации [Federal state unitary enterprise «All-Russian scientific research institute of aviation materials» State research center of the Russian Federation]; e-mail: admin@viam.ru

Введение

В настоящее время наблюдается высокая эффективность применения компьютерных технологий во всех областях науки и техники. Применение методов вычислительной математики не только позволяет избавить исследователя от рутинного «ручного» труда, но и найти факты и закономерности, не доступные современному эксперименту. Знание оптимального набора межатомных потенциалов позволяет корректно описать такие характеристики кристаллов, как энергия сцепления, механические, термодинамические и многие другие свойства. Ряд этих свойств не всегда может быть измерен экспериментально. В связи с этим атомистические расчеты с использованием

оптимизированных значений межатомных потенциалов востребованы для решения широкого круга задач материаловедения. Важно отметить, что в атомистическом моделировании достаточно часто (и успешно) применяется принцип «трансферабельности» межатомных потенциалов. Он заключается в том, что оптимизированный на некоторой простой и изученной структуре набор параметров потенциалов используется без существенных изменений для моделирования более сложных (часто даже гипотетических) соединений. Таким образом удается получить неизвестную из эксперимента информацию об их структуре и свойствах [1].

Исследование и разработка материалов с принципиально новыми свойствами на основе методов атомно-молекулярного конструирования (совместно с ведущими университетами) формирует научные подходы к созданию новых материалов, оптимизирует экспериментальные исследования, позволяет получить результат с существенной экономией ресурсов и времени, обеспечивая прогнозирование и планирование действий в области создания материалов [2].

Одной из приоритетных задач материаловедения является создание супержаропрочного материала с низкой плотностью $7,2\text{--}7,5\text{ г/см}^3$, работоспособного при температуре до 1350°C . В качестве альтернативного жаропрочного материала будущего, который должен заменить монокристаллические никелевые жаропрочные сплавы при производстве лопаток перспективных ГТД с повышенными эксплуатационными параметрами и надежностью, рассматривают высокотемпературный естественный композит на основе ниобия, упрочненный силицидом ниобия [3–7].

Силициды ниобия являются армирующей фазой в естественно композиционных материалах на основе легированной системы Nb–Si. Жаропрочность таких композитов при высоких температурах в интервале $1200\text{--}1350^\circ\text{C}$ определяется свойствами силицидов. Известны три полиморфных модификации Nb_5Si_3 , кристаллизующиеся в различных структурных типах (табл. 1).

Таблица 1

Характеристики исследуемых полиморфных модификаций Nb_5Si_3

Модификация, пространственная группа симметрии	Параметры элементарной ячейки, нм	Структурный тип
α , $I4/mcm$ [8]	$a=0,6570$; $c=1,1884$	Cr_5B_3
β , $I4/mcm$ [9]	$a=1,0018$; $c=0,5072$	Mo_5Si_3
γ , $P6_3/mcm$ [10, 11]	$a=0,7536$; $c=0,5249$	Mn_5Si_3

Для исследования структурных особенностей каждой полиморфной модификации построены структурные модели α -, β - и γ -модификаций силицидов Nb_5Si_3 [12]. В предыдущих работах авторов данной статьи [13, 14] методами компьютерного моделирования проведено объемное сканирование элементарных ячеек модификаций для оценки имеющихся в кристаллических структурах пустот (пор). Определены координаты расположения всех возможных пустот в α -, β - и γ -модификациях Nb_5Si_3 . Проведенный геометрический кристаллохимический анализ для трех модификаций силицида ниобия Nb_5Si_3 , основанный на данных об атомных радиусах элементов, позволил выявить наиболее вероятные позиции для внедрения примесных атомов C, B, N и O.

Для определения наиболее прочных связей атомов-примесей с Nb и Si для всех возможных позиций C, N, O и B, в работах [13, 14] проанализированы полиэдры Воронова–Дирихле (ПВД) пустот в α -, β - и γ -модификациях. Проведенный анализ возможных положений атомов-примесей, обладающих наиболее сильными связями с Nb и Si, показал, что для $\alpha\text{-Nb}_5\text{Si}_3$ модификации все 5 рассмотренных позиций являются потенциально возможными, для $\beta\text{-Nb}_5\text{Si}_3$ только 4 из 8 позиций обладают сильными связями, для $\gamma\text{-Nb}_5\text{Si}_3$ – только 5 из 12.

На основании проведенного объемного сканирования элементарных ячеек сделан вывод о возможных путях диффузии атомов внедрения бора, углерода, азота и кислорода для каждой из модификаций Nb_5Si_3 , оценены изоморфные емкости этих модификаций. Отмечена значительная диффузионная проницаемость структуры гексагонального силицида ниобия в направлении кристаллографической оси C по сравнению с α - и β -модификациями.

Цель данной работы – уточнение геометрической формы окружения и определение наиболее энергетически предпочтительных позиций для внедрения атомов углерода в трех структурных модификациях силицидов Nb_5Si_3 с использованием потенциалов межатомного взаимодействия. Для решения поставленной задачи:

- разработана модель парных потенциалов межатомного взаимодействия, способная с одним и тем же набором параметров воспроизвести структуры всех трех полиморфных модификаций Nb_5Si_3 , а также SiC , Nb_6C_5 и Nb_4SiC_3 (согласованная модель);
- полученная согласованная модель парных потенциалов применена для энергетической оценки вхождения атомов углерода в выявленные ранее возможные позиции;
- выявлены искажения структуры (конечной геометрической формы) и впервые определены энергетически наиболее выгодные позиции для примесных атомов углерода в исследуемых структурах.

Материалы и методы

Атомистическое компьютерное моделирование осуществляли с использованием программы GULP 4.0 [15]. С учетом сильно выраженного ковалентного характера межатомного взаимодействия в изучаемых структурах в используемой модели потенциалов для описания химического связывания использовался короткодействующий потенциал вида Морзе:

$$V(r)=D \cdot [\exp(-2\sigma(r-r_0))-2\exp(-\sigma(r-r_0))],$$

где r – расстояние между атомами, нм; D – энергия разрыва связи между атомами, эВ; σ – параметр мягкости, нм^{-1} ; r_0 – длина связи между атомами, нм.

Первичные расчеты проводили при температуре 273 К и без давления. Заряды на атомах считались нулевыми, так как разность значений электроотрицательности для Nb (1,6 эВ) и Si (1,9 эВ) мала, а связи в структуре Nb_5Si_3 являются существенно ковалентными, поэтому можно считать заряды атомов нулевыми и использовать для расчетов атомные радиусы Слэйтера.

Моделирование примесных дефектов в структурах осуществляли двумя независимыми способами:

- с использованием процедуры расчета точечных дефектов методом Мотта–Литтлтона или модели «вложенных сфер» [16];
- методом моделирования в сверхъячейках.

Первый метод позволяет рассчитать энергии образования различных нульмерных дефектов: изолированных примесей, вакансий, интерстиций и их ассоциатов. Особенность данного метода заключается в том, что точечный дефект кристаллической структуры и область вокруг дефекта участвуют в нормальной процедуре минимизации энергии межатомного взаимодействия в результате смещений всех ионов в пределах заданной области, при этом никаких требований на электронейтральность области вокруг дефекта не накладывается. Внешняя область, где влияние смещений вокруг дефекта ничтожно, рассматривается как поляризуемый диэлектрический континуум.

В данных расчетах первая и вторая сферы действия потенциалов составили 0,85 и 1,85 нм соответственно.

Второй метод моделирования в сверхъячейках позволяет моделировать электро-нейтральные дефекты, дает возможность учитывать дальнейшее взаимодействие, но требует значительных компьютерных мощностей и времени по сравнению с методом Мотта–Литтлтона.

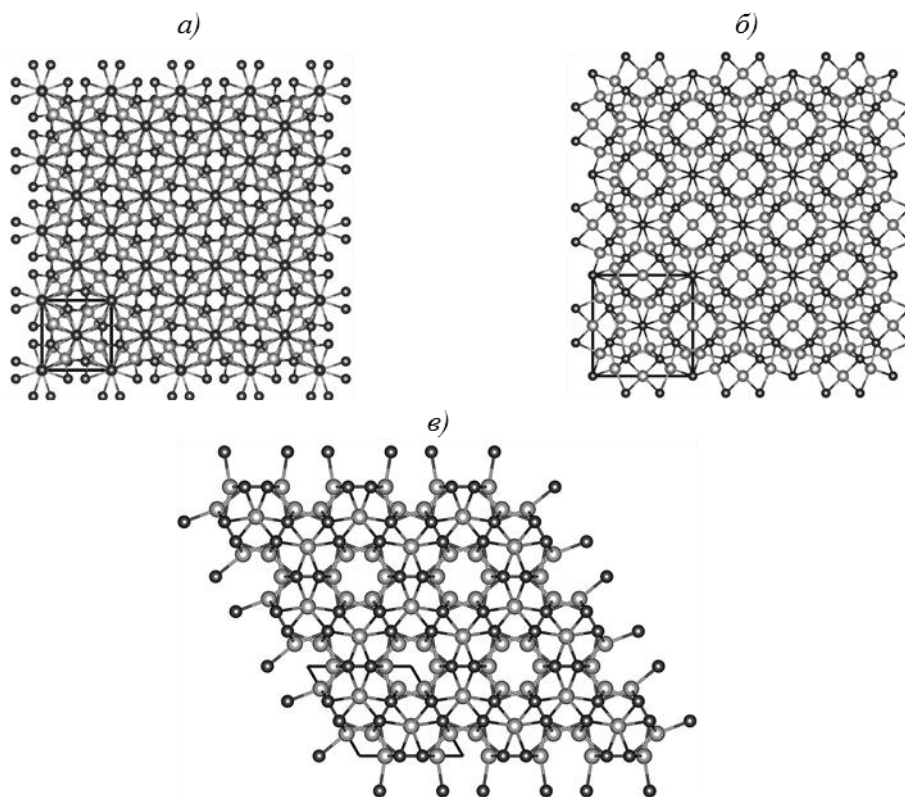


Рис. 1. Сверхъячейки $4 \times 4 \times 3$ (768 атомов) для модификации $\alpha\text{-Nb}_5\text{Si}_3$ (а), $3 \times 3 \times 5$ (720 атомов) для модификаций $\beta\text{-Nb}_5\text{Si}_3$ (б) и $\gamma\text{-Nb}_5\text{Si}_3$ (в) (проекция в плоскости ab ; темным цветом показаны атомы Nb, светлым – атомы Si)

Для моделирования вхождения атомов углерода в структуры Nb_5Si_3 сконструированы сверхъячейки: $4 \times 4 \times 3$ (768 атомов) – для модификации $\alpha\text{-Nb}_5\text{Si}_3$, $3 \times 3 \times 5$ (720 атомов) – для модификаций $\beta\text{-Nb}_5\text{Si}_3$ и $\gamma\text{-Nb}_5\text{Si}_3$ (рис. 1), содержащие приблизительно равное число атомов и имеющие похожие параметры a , b и c . Визуализацию сверхъячеек кристаллических структур осуществляли с использованием компьютерной программы VESTA [17].

Результаты

Разработанная согласованная модель потенциалов межатомного взаимодействия для пар атомов Nb–Nb, Nb–Si и Si–Si (табл. 2) позволила воспроизвести параметры элементарных ячеек исследуемых модификаций Nb_5Si_3 с ошибкой не более 0,6% (табл. 3). Согласованность потенциалов дает возможность использовать их в дальнейшем при моделировании структур при различных значениях давления и температуры, а также при конструировании твердых растворов замещения.

Для моделирования вхождения атомов углерода в исследуемые структуры дополнительно разработаны потенциалы Морзе для пар атомов Nb–C, Si–C и C–C (табл. 2) на основе структур Nb_6C_5 [18], SiC [19] и Nb_4SiC_3 [20] с последующим уточнением значений параметров на структурах Nb_5Si_3 .

Таблица 2

**Параметры потенциалов Морзе межатомного взаимодействия,
используемые при расчетах**

Пара атомов	D , эВ	σ , нм ⁻¹	r_0 , нм
Nb–Nb	0,3501	0,10706	0,3556
Nb–Si	0,535195	0,2575885	0,2688328
Si–Si	0,233629	0,1679402	0,2350483
Nb–C	0,040515	0,2238074	0,2330894
Si–C	0,255152	0,1181991	0,2695635
C–C	0,341557	0,1924411	0,1112259

Таблица 3

**Рассчитанные параметры элементарных ячеек структур с указанием отклонения
от начальных значений для модификаций Nb₅Si₃**

Параметр*, единица измерения	Начальное значение	Конечное значение	Разность конечного и начального значений	Отклонение, %
Модификация α -Nb ₅ Si ₃				
V , нм ³	0,51297	0,51346	0,00049	0,10
a , нм	0,657	0,658	0,001	0,04
b , нм	0,657	0,657	0	0
c , нм	1,188	1,188	0	0
α , град	90	90	0	0
β , град	90	90	0	0
γ , град	90	90	0	0
Модификация β -Nb ₅ Si ₃				
V , нм ³	0,509028	0,50969	0,00066	0,13
a , нм	1,002	1,002	0	0
b , нм	1,002	1,002	0	0
c , нм	0,507	0,507	0	0
α , град	90	90	0	0
β , град	90	90	0	0
γ , град	90	90	0	0
Модификация γ -Nb ₅ Si ₃				
V , нм ³	0,25816	0,25725	-0,00091	-0,35
a , нм	0,754	0,754	0	0
b , нм	0,754	0,754	0	0
c , нм	0,525	0,522	-0,003	-0,58
α , град	90	90	0	0
β , град	90	90	0	0
γ , град	120	120	0	0

* V – объем элементарной ячейки; a , b , c , α , β , γ – параметры элементарных ячеек.

В результате расчетов методом Мотта–Литтлтона вычислены энергии конфигураций областей дефектов для потенциально возможных позиций атомов внедрения углерода (табл. 4), равные разности энергий бездефектной структуры и структуры с дефектом.

Таблица 4

**Характеристики параметров пустот до и после энергетической оптимизации
по методу «вложенных сфер»**

Условный номер пустот	До оптимизации структуры		После оптимизации структуры				
	Координата атома внедрения углерода	Объем полиэдра, нм ³	Координата атома внедрения углерода	Атомная пара	Расстояния в полиэдре*, нм	Объем полиэдра, нм ³	E, эВ
Модификация γ-Nb ₅ Si ₃							
1	0; 0; 0	0,01614	0; 0; 0	C–Nb	0,2310 (6)	0,01642	0 (0)
2	0,6; 0; 0,5	0,00258	0,470; 0,154; 0,003	C–Nb C–Si C–Si C–Nb C–Nb	0,1934 (1) 0,2133 (1) 0,2147 (1) 0,1871 (1) 0,1860 (1)	0,00639	1,14 (1,63)
3	0,6; 0; 0,4	0,00258	0,468; 0,154; 0,607	C–Nb C–Si C–Nb C–Si C–Nb	0,1934 (1) 0,2146 (1) 0,1860 (1) 0,2132 (1) 0,1871 (1)	0,00639	1,14 (1,63)
4	0,6; 0,05; 0,55	0,00258	0,546; 0; 0,609	C–Si	0,2310 (6)	0,01642	0 (0)
5	0,6; 0,05; 0,75	0,00258	0,558; 0,006; 0,914	C–Si C–Nb C–Nb C–Nb	0,1831 (1) 0,2568 (2) 0,2562 (2) 0,1652 (1)	0,01247	2,97 (3,33)
Модификация α-Nb ₅ Si ₃							
1	0,35; 0,70; 0,10	0,00267	0,032; 0,054; 0,309	C–Nb C–Si C–Nb C–Nb C–Si	0,1810 (1) 0,2100 (1) 0,1968 (1) 0,1970 (1) 0,2260 (1)	0,00628	0,74 (3,97)
2	0,80; 0,70; 0,10	0,00284	0,969; 0,891; 0,467	C–Nb C–Nb C–Nb	0,1945 (2) 0,2315 (1) 0,1891 (1)	0,00397	0 (0)
3	0,85; 0; 0,40	0,00565	0,806; 0,257; 0,633	C–Si C–Nb C–Nb C–Si C–Nb	0,2260 (1) 0,1968 (1) 0,1971 (1) 0,2100 (1) 0,1811 (1)	0,00628	0,74 (3,97)
4	0,20; 0; 0,50	0,00267	0,229; 0,348; 0,942	C–Nb C–Nb C–Si C–Nb	0,1581 (1) 0,2414 (2) 0,1719 (1) 0,2400 (2)	0,01225	3,36 (5,09)
5	0,50; 0; 0,50	0,00852	0,286; 0; 0,942	C–Nb C–Si	0,2189 (4) 0,1683 (2)	0,01068	5,39 (7,71)
Модификация β-Nb ₅ Si ₃							
1	0,15; 0; 0	0,00523	0,200; 0,346; 0	C–Si C–Nb C–Nb C–Nb	0,170823 (1) 0,157556 (1) 0,242360 (2) 0,241720 (2)	0,01226	3,18 (0,84)
2	0,50; 0,10; 0,25	0,00573	0,286; 0; 0,971	C–Nb C–Nb	0,1988 (2) 0,1987 (2)	0,00402	0 (0)
3	0,65; 0,05; 0,30	0,00287	0,287; 0; 0,971	C–Nb	0,1988 (4)	0,00402	0 (0)
4	0,90; 0,40; 0,30	0,00298	0,573; 0,286; 0,971	C–Nb	0,1988 (4)	0,00402	0 (0)

* Параметры связей указаны между соответствующими парами атомов с указанием длины связи и количества связей (в скобках).

** E – энергия конфигурации области дефекта относительно наилучшего значения (в скобках указана величина, полученная методом моделирования в сверхъядерках).

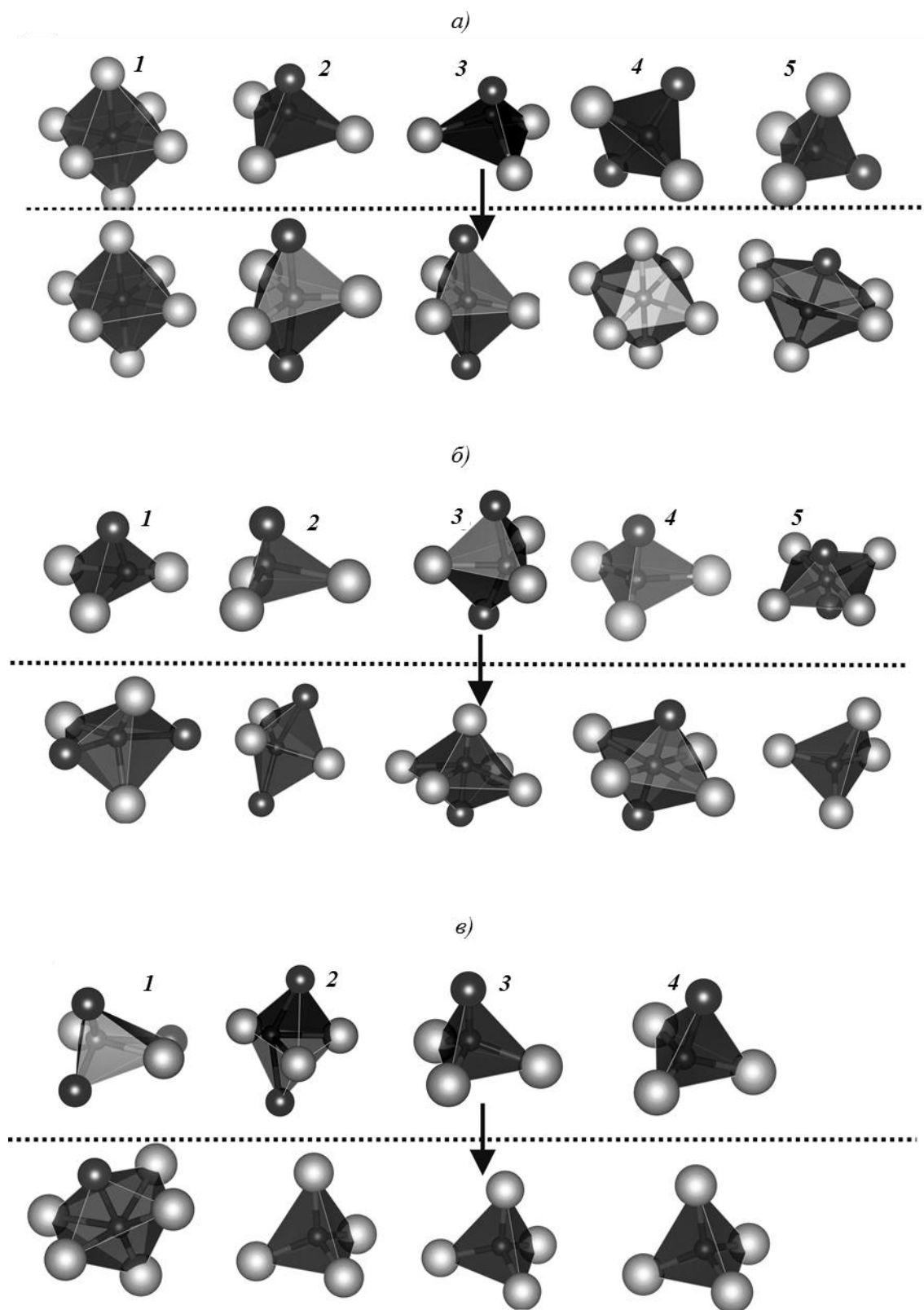


Рис. 2. Координационные полиэдры атомов внедрения углерода до энергетической оптимизации (вверху) и после (внизу) для модификаций γ -Nb₅Si₃ (а), α -Nb₅Si₃ (б) и β -Nb₅Si₃ (в) (светлые шары – атомы Nb, темные шары – атомы Si, 1–5 – номера пустот согласно табл. 4)

Рассмотрено изменение геометрической формы окружения атома-примеси после энергетической оптимизации. Как видно из данных табл. 4, атом углерода со стартовыми координатами (x ; y ; z) не меняет в результате энергетической оптимизации своей позиции и геометрической формы окружения (правильный октаэдр) в гексагональной модификации $\gamma\text{-Nb}_5\text{Si}_3$ также не меняются (0; 0; 0), что подтверждает предпочтительную позицию для атомов углерода в этом бесконечном канале структуры. Во всех остальных случаях конфигурация области дефекта происходит с существенным изменением начальных координат позиции примесного атома и его окружения, вплоть до смены координационного числа (рис. 2).

Обсуждение результатов

Методами атомистического моделирования впервые определены энергетически наиболее выгодные позиции для примесных атомов углерода в исследуемых структурах:

- для модификации $\gamma\text{-Nb}_5\text{Si}_3$ – позиция атома углерода (0; 0; 0) в октаэдрическом окружении шести атомов Nb с длиной связи Nb–C, равной 0,231 нм;
- для модификации $\alpha\text{-Nb}_5\text{Si}_3$ – позиция атома углерода (0,979; 0,891; 0,467) в окружении атомов Nb, образующих искаженный тетраэдр с межатомными расстояниями для пары C–Nb: 0,2316 и 0,1891 нм (по одной связи); 0,1945 (две связи);
- для модификации $\beta\text{-Nb}_5\text{Si}_3$ – позиция атома углерода (0,0286; 0; 0,0971) в тетраэдрическом окружении четырех атомов Nb с длиной связи C–Nb, равной 0,1988 нм.

На основании вычисленных энергий дефектов, можно сделать вывод о том, что в модификации $\gamma\text{-Nb}_5\text{Si}_3$ имеется всего три вместо пяти геометрически возможных форм типов пустот [13], подходящих для вхождения атомов углерода в позиции с координатами (0; 0; 0), (0,470; 0,154; 0,003) и (0,558; 0,006; 0,914); для модификации $\alpha\text{-Nb}_5\text{Si}_3$ – четыре типа пустот в позиции с координатами (0,032; 0,054; 0,309), (0,969; 0,891; 0,467), (0,229; 0,348; 0,942) и (0,286; 0; 0,942) из пяти возможных, а для модификации $\beta\text{-Nb}_5\text{Si}_3$ – только два типа пустот в позиции с координатами (0,200; 0,346; 0) и (0,286; 0; 0,971) из четырех геометрически возможных форм. В гексагональной структуре пустоты с координатами центра (0; 0; 0) формируют бесконечные каналы вдоль кристаллографической оси C , остальные выявленные позиции изолированы.

Расчеты величины энергий дефекта методом сверхъячеек коррелируют с расчетами методом «вложенных сфер» и с их помощью можно предсказать в качестве наилучших одни и те же позиции (табл. 4). Так, для сверхъячейки $3\times3\times5$ модификации $\gamma\text{-Nb}_5\text{Si}_3$ позиции 2 и 3 хуже по энергии, чем позиции 1 и 4 – на 1,63 эВ (1,14 эВ – по методу Мотта–Литтлтона), а позиция 5 – на 3,33 эВ (2,97 эВ). Для сверхъячейки $4\times4\times3$ модификации $\alpha\text{-Nb}_5\text{Si}_3$ ячейки энергии дефектов 1 и 3 хуже на 3,97 эВ (0,74 эВ – по методу Мотта–Литтлтона), позиция 4 – на 5,09 эВ (3,36 эВ), а позиция 5 – на 7,71 эВ (5,39 эВ), чем энергия позиции 2 соответственно. Для сверхъячейки $3\times3\times5$ модификации $\beta\text{-Nb}_5\text{Si}_3$ позиции 2, 3 и 4 на 0,84 эВ выгоднее, чем позиция 1 (3,18 эВ – по методу Мотта–Литтлтона).

Заключения

1. Разработана согласованная модель потенциалов межатомного взаимодействия, которая позволила воспроизвести структурные особенности модификаций Nb_5Si_3 с высокой точностью (отклонение от экспериментальных значений параметров элементарных ячеек не превышает 0,6%) и осуществить моделирование вхождения атомов углерода в исследуемые кристаллические структуры.

2. Двумя независимыми методами (методом Мотта–Литтлтона и методом моделирования в сверхъячейках: $4\times4\times3$ (768 атомов) – для модификации $\alpha\text{-Nb}_5\text{Si}_3$, $3\times3\times5$ (720 атомов) – для модификаций $\beta\text{-Nb}_5\text{Si}_3$ и $\gamma\text{-Nb}_5\text{Si}_3$) оценена энергетика вхождения

атомов углерода в возможные кристаллографические позиции (пустоты) модификаций Nb_5Si_3 .

3. Полуэмпирические расчеты величин энергий конфигураций областей дефектов показали, что вхождение углерода в структуры Nb_5Si_3 практически во всех случаях сопровождается существенным изменением начальной геометрической формы окружения атома-примеси вплоть до смены первого координационного числа. Наиболее энергетически выгодной позицией для вхождения атома углерода в модификацию $\alpha\text{-Nb}_5\text{Si}_3$ является искаженный тетраэдр в позиции с координатами (0,97; 0,89; 0,47), в модификацию $\beta\text{-Nb}_5\text{Si}_3$ – тетраэдр в позиции с координатами (0,29; 0; 0,97), в модификацию $\gamma\text{-Nb}_5\text{Si}_3$ – октаэдр с центром в начале координат, формирующий бесконечные каналы структуры вдоль кристаллографической оси C , обеспечивая ускоренную диффузию элемента внедрения в этом направлении.

Благодарности

Авторы признательны профессору, доктору технических наук Игорю Леонидовичу Светлову за полезную дискуссию при обсуждении диффузионных процессов в структуре силицида и результатов данного исследования.

Работа выполнена в рамках реализации комплексного научного направления 9.4. «Композиты на основе Nb–Si с повышенной стойкостью к окислению и коррозии» («Стратегические направления развития материалов и технологий их переработки на период до 2030 года») [3] и при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований: гранты №15-05-06742 и №15-05-04575.

ЛИТЕРАТУРА

1. Урусов В.С., Еремин Н.Н. Атомистическое компьютерное моделирование структуры и свойств неорганических кристаллов и минералов, их дефектов и твердых растворов. М.: ГЕОС, 2012. 428 с.
2. Каблов Е.Н. О настоящем и будущем ВИАМ и отечественного материаловедения: интервью. URL: <http://www.ras.ru/news/shownews.aspx?id=824e2453-383e-4d9e-b78d-87c9f7bf16ee> (дата обращения: 31.01.2017).
3. Каблов Е.Н. Инновационные разработки ФГУП «ВИАМ» ГНЦ РФ по реализации «Стратегических направлений развития материалов и технологий их переработки на период до 2030 года» // Авиационные материалы и технологии. 2015. №1 (34). С. 3–33. DOI: 10.18577/2071-9140-2015-0-1-3-33.
4. Каблов Е.Н., Светлов И.Л., Ефимочкин И.Ю. Высокотемпературные Nb–Si-композиты // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер.: Машиностроение. 2011. №SP2. С. 164–173.
5. Тимофеева О.Б., Колодочкина В.Г., Шванова Н.Ф., Нейман А.В. Исследование микроструктуры высокотемпературного естественно композиционного материала на основе ниобия, упрочненного интерметаллидами силицида ниобия // Авиационные материалы и технологии. 2015. №1 (34). С. 60–64. DOI: 10.18577/2071-9140-2015-0-1-60-64.
6. Щетанов Б.В., Ефимочкин И.Ю., Паэгле С.В., Карачевцев Ф.Н. Исследование высокотемпературной прочности *in-situ*-композитов на основе Nb, армированных монокристаллическими волокнами $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ // Авиационные материалы и технологии. 2016. №3 (42). С. 53–59. DOI: 10.18577/2071-9140-2016-0-3-53-59.
7. Каблов Е.Н., Мубояджян С.А. Жаростойкие и теплозащитные покрытия для лопаток турбины высокого давления перспективных ГТД // Авиационные материалы и технологии. 2012. №S. С. 60–70.
8. Кочержинский Ю.А., Юпко Л.М., Шишкин Е.А. Диаграмма состояния Nb–Si // Изв. АН СССР. Металлы. 1980. №1. С. 206–211.
9. Aronsson B. The crystal structure of Mo_5Si_3 and W_5Si_3 // Acta Chemica Scandinavica. 1955. No. 9. P. 1107–1110.

10. Schachner H., Cerwenka E., Nowotny H.N. Neue Silizide vom M_5Si_3 -Typ mit D 88-Struktur // Journal of the American Ceramic Society. 1982. Vol. 65. P. 260–265.
11. Schachner H., Cerwenka E., Nowotny H. Neue Silizide vom M_5Si_3 -Typ mit D 88-Struktur // Monatshefte fuer Chemie und verwandte Teile anderer Wissenschaften. 1954. Vol. 85. P. 245.
12. Каблов Е.Н., Кузьмина Н.А., Еремин Н.Н., Светлов И.Л., Нейман А.В. Атомные модели структуры силицидов ниобия в *in-situ* композитах Nb–Si // Журнал структурной химии. 2017. №3. Т. 58. С. 564–570.
13. Кузьмина Н.А., Еремин Н.Н., Марченко Е.И., Светлов И.Л. и др. Пути диффузии примесей внедрения в силициде ниобия Nb_5Si_3 различных полиморфных модификаций // Кристаллография. 2017. №4 (в печати).
14. Муромцев Н.А., Кузьмина Н.А., Марченко Е.И., Еремин Н.Н., Якушев Д.А. Теоретический кристаллохимический анализ пустот в кристаллических структурах полиморфных модификаций Nb_5Si_3 // Минералы: строение, свойства, методы исследования: сб. тез. докл. VIII Всерос. молодежной научной конференции, Екатеринбург. 2016. С. 100–101.
15. Gale G.D., Gale J.D. GULP: A computer program for the symmetry adapted simulation. Journal of the Chemical Society // Faraday Transactions. 1997. Vol. 93. P. 629–637. DOI: 10.1039/A606455H.
16. Mott N.F., Littleton M.J. Conduction in polar crystals. I. Electrolytic conduction in solid salts // Transactions of the Faraday Society. 1938. Vol. 34. P. 485–495.
17. Momma and Izumi F. VESTA 3 for three-dimensional visualization of crystal, volumetric and morphology data // Journal of Applied Crystallography. 2011. Vol. 44. P. 1272–1276.
18. Khaenko B.V., Sivak O.P. Structure of the ordering of niobium monocarbide // Soviet Physics, Crystallography = Kristallografiya. 1990. Vol. 35. P. 653–655.
19. Merz K.M., Adamsky R.F. Synthesis of the wurtzite form of silicon carbide. Reference // Journal of the American Chemical Society. 1959. Vol. 81 (1). P. 250–251.
20. Li C.L., Kuo J.L., Wang B.A. et al. A new layer compound Nb_4SiC_3 predicted from first-principles theory // Journal of Physics D Applied Physics. 2009. Vol. 42. No. 7. P. 075404–075409.