

**ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ
ПРОБЛЕМЫ
СОВРЕМЕННОГО
МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ**

Научный журнал
Издается с января 2004 г.

Том 14

Декабрь 2017 г.

№ 4

Учредитель:

Государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования "Алтайский государственный технический университет имени И.И. Ползунова"

Соучредители:

Государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования "Кузбасская государственная педагогическая академия"

Государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования "Барнаульский государственный педагогический университет"

Государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования "Сибирский государственный индустриальный университет"

Государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования "Томский государственный архитектурно-строительный университет"

Государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования "Уфимский государственный нефтяной технический университет"

Издатель:

Общество с ограниченной ответственностью "Научно-исследовательский центр "Системы управления"

Адрес издателя: Россия, 656038, Алтайский край, г. Барнаул, ул. Балтийская, д. 78а

Главный редактор: д.ф.-м.н., профессор Старостенков М.Д.

Тел.: +7 (385) 229-08-52 Факс: +7 (385) 236-78-64

E-mail: genphys@mail.ru

Зам. главного редактора (ответственный за выпуск): д.т.н., профессор Гурьев А.М.

Тел.: +7 (385) 229-08-63 Факс: +7 (385) 236-78-64

E-mail: gurievam@mail.ru

Зам. главного редактора (ответственный за online выпуск): д.ф.-м.н., профессор Полетаев Г.М.

Тел.: +7 (385) 229-08-52 Факс: +7 (385) 236-78-64

E-mail: gmpoletaev@mail.ru

Технический редактор: к.ф.-м.н., доцент Черных Е.В.

Тел.: +7 (385) 229-08-52 Факс: +7 (385) 236-78-64

E-mail: jane_5@mail.ru

Журнал включен в Перечень ВАК ведущих российских рецензируемых научных журналов и изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученых степеней доктора и кандидата наук (редакция от 02.02.2016 г.).

Журнал включен в каталог периодических изданий Ульрих  от 18.02.2015 г., в перечень журналов, вошедших в ядро РИНЦ и в список 650 российских журналов, вошедших в Russian Science Citation Index (RSCI), представленный на платформе Web of Science.

Журнал зарегистрирован в Министерстве Российской Федерации по делам печати, телерадиовещания и средств массовых коммуникаций.

Свидетельство: ГИ № 77-15722 от 20.06.2003 г.

Информация о подписке:

«Фундаментальные проблемы современного материаловедения» выходит раз в квартал. Индекс в каталоге Роспечати – 31038.

Цена годовой подписки через редакцию: 1200 руб. (300 руб. за номер).

Адрес редакции: Россия, 656038, Алтайский край, г. Барнаул, пр. Ленина, 46

Тел./факс (3852) 29-08-52

E-mail: genphys@mail.ru

Адрес в Internet: www.nsmds.ru/journal.html

Редакционная коллегия:

Старостенков М.Д. (д.ф.-м.н., профессор, зав. кафедрой физики АлтГТУ, г. Барнаул, Россия)

Глезер А.М. (д.ф.-м.н., профессор, директор ИМФМ ЦНИИЧермет им. И.П. Бардина, член совета РАН по физике конденсированного состояния, главный редактор журнала «Деформация и разрушения», зам. главного редактора журнала «Материаловедение» ЦНИИЧермет, г. Москва, Россия)

Громов В.Е. (д.ф.-м.н., профессор, зав. кафедрой физики СибГИУ, г. Новокузнецк, Россия)

Гурьев А.М. (д.т.н., профессор АлтГТУ, г. Барнаул, Россия)

Кашенко М.П. (д.ф.-м.н., профессор, зав. кафедрой физики УГЛТУ, г. Екатеринбург, Россия)

Кхаре А. (профессор, Институт Физики, г. Бхубанешвар, Индия)

Мулюков Р.Р. (д.ф.-м.н., профессор, директор ИПСМ РАН, г. Уфа, Россия)

Мэй Шунчи (профессор, декан УТУ, г. Ухань, Китай)

Темляницев М.В. (д.т.н., профессор, проректор по научной работе и инновациям СибГИУ, г. Новокузнецк, Россия)

Плотников В.А. (д.ф.-м.н., профессор, зав. кафедрой общей и экспериментальной физики АлтГУ, г. Барнаул, Россия)

Полетаев Г.М. (д.ф.-м.н., профессор, зав. кафедрой высшей математики и математического моделирования АлтГТУ, г. Барнаул, Россия)

Потекаев А.И. (д.ф.-м.н., профессор, директор СФТИ, главный редактор журнала «Известия вузов. Физика», г. Томск, Россия)

Пышнограй Г.В. (д.ф.-м.н., профессор, зав. кафедрой математического анализа и прикладной математики АлтГПУ, г. Барнаул, Россия)

Рубаник В.В. (д.т.н., член-корреспондент Национальной академии наук Беларуси, директор ГНУ "ИТА НАН Беларуси", г. Витебск, Беларусь)

Старенченко В.А. (д.ф.-м.н., профессор, декан общеобразовательного факультета ТГАСУ, г. Томск, Россия)

Лыгденов Б.Д. (д.т.н., профессор ВСГУТУ, г. Улан-Удэ, Россия)

Дмитриев С.В. (д.ф.-м.н., доцент, зав. лабораторией ИПСМ РАН, г. Уфа, Россия)

Котречко С.А. (д.ф.-м.н., зав. отделом ИМФ НАНУ, г. Киев, Украина)

Атучин В.В. (к.ф.-м.н., доцент, руководитель лаборатории «Оптические материалы и структуры» ИФП СО РАН, г. Новосибирск, Россия)

Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedenia (Basic Problems of Material Science (BPMS) Vol. 14 No.3 (2017))

International specialized scientific journal
Issued quarterly
Published since January 2004

Founders:

State Educational Institution of Higher Professional Education «I.I. Polzunov Altai State Technical University»
State Educational Institution of Higher Professional Education «Kuzbass State Pedagogical Academy»
State Educational Institution of Higher Professional Education «Barnaul State Pedagogical University»
State Educational Institution of Higher Professional Education «Siberian State Industrial University»
State Educational Institution of Higher Professional Education «Tomsk State University of Architecture and Building»
State Educational Institution of Higher Professional Education «Ufa State Petroleum Technological University»

Publisher:

ООО «Научно-исследовательский центр «Системы управления»
656067, Barnaul, st. Baltiyskaya, 78a

Editor in chief

PhD, Hab., Professor Starostenkov M.D.
Tel.: +7 (385) 229-08-52 Fax: +7 (385) 236-78-64
E-mail: genphys@mail.ru

Sub-Editors

PhD, Hab., Professor Guriev A.M.
Tel.: +7 (385) 229-08-63 Fax: +7 (385) 236-78-64
E-mail: gurievam@mail.ru

PhD, Hab., Professor Poletaev G.M.
Tel.: +7 (385) 229-08-52 Fax: +7 (385) 236-78-64
E-mail: gmpoletaev@mail.ru

Editorial board:

Starostenkov M.D., PhD, Hab., Professor, Head of Department, I.I. Polzunov Altai State Technical University, Barnaul, Russia
Glezer A.M., PhD, Hab., Professor, director, G.V. Kirdyumov Institute of Metals Science and Physics, State Research Center of the Russian Federation «I.P. Bardin Central Research Institute of Ferrous Metallurgy», Moscow, Russia
Gromov V.E., PhD, Hab., Professor, Head of Department, Siberian State Industrial University, Novokuznetsk, Russia
Guriev A.M., PhD, Hab., Professor, I.I. Polzunov Altai State Technical University, Barnaul, Russia
Kaschenko M.P., PhD, Hab., Professor, Head of Department, Ural State Forest Engineering University, Yekaterinburg, Russia
Khare Avinash, Professor, Institute of Physics, Bhubaneswar, India
Mihuykov R.R., PhD, Hab., Professor, director, Institute for Metals Superplasticity Problems of RAS, Ufa, Russia
Mei Shunqi, Professor, dean, Wuhan Textile University, Wuhan, China
Temlyantsev M.V., PhD, Hab., Professor, Siberian State Industrial University, Novokuznetsk, Russia
Plotnikov V.A., PhD, Hab., Professor, Head of Department, Altai State University, Barnaul, Russia
Poletaev G.M., PhD, Hab., Professor, Head of Department, I.I. Polzunov Altai State Technical University, Barnaul, Russia
Potekhaev A.I., PhD, Hab., Professor, director, V.D. Kuznetsov's Siberian Physical-Technical Institute, Tomsk, Russia
Pyshnograd G.V., PhD, Hab., Professor, Head of Department, Altai State Pedagogical University, Barnaul, Russia
Rubanik V.V., PhD, Hab., Corresponding Member of the National Academy of Sciences of Belarus, director of the State Scientific Institution «Institute of Technical Acoustics National Academy of Sciences of Belarus», Vitebsk, Republic of Belarus
Stavchenko V.A., PhD, Hab., Professor, Dean, Tomsk State University of Architecture and Building, Tomsk, Russia
Lygdenov B.D., PhD, Hab., Professor, East Siberia State University of Technology and Management, Ulan-Ude, Russia
Dmitriev S.V., PhD, Hab., Institute for Metals Superplasticity Problems of RAN, Ufa, Russia
Kotrechko S., PhD, Hab., Head of Department, G.V. Kirdyumov Institute for Metal Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine, Kiev, Ukraine
Atuchin V.V., PhD, Hab., Institute of Semiconductor Physics SB of RAS, Novosibirsk, Russia

Editorial

656038, Barnaul, Lenin st., 46 I.I. Polzunov Altai State Technical University, Russia
www.nsmds.ru/journal.html, e-mail: genphys@mail.ru
PhD Chernykh E.V.
Tel.: +7 (385) 229-08-52 Fax: +7 (385) 236-78-64
E-mail: jane_5@mail.ru

Содержание

Новоселова Д.В., Полетаев Г.М., Коваленко В.В., Старостенков М.Д. <i>Особенности молекулярно-динамической модели миграции тройного стыка зерен в металлах</i>	423
Редель Л.В. <i>Компьютерный анализ проводимости соединений наночастиц газового сенсора на основе SnO₂</i>	430
Юрьев А.А., Громов В.Е., Гришунин В.А., Перегудов О.А., Иванов Ю.Ф., Никитина Е.Н., Бащенко Л.П. <i>Механизмы разрушения пластинчатого перлита дифференцированно закаленных рельсов при длительной эксплуатации</i>	438
Гринберг Б.А., Пушкин М.С., Танкеев А.П., Иноземцев А.В. <i>Фрактальный анализ сварных соединений (Cu-Ta, Cu-Ti)</i>	445
Плотников В.А., Макаров С.В. <i>Антифрикционные и упрочняющие свойства поверхности стали, обработанной кристаллами детонационного алмаза</i>	453
Дмитриев А.А., Поляков В.В., Колубаев Е.А. <i>Диагностика алюминиевых сплавов со сварными соединениями на основе анализа сигналов акустической эмиссии</i>	458
Логинова М.В., Яковлев В.И., Филимонов В.Ю., Ситников А.А., Собачкин А.В., Иванов С.Г., Градобоев А.В. <i>Морфология и структурные характеристики порошковых механокомпозитов Ti+Al после облучения</i>	464
Баранов М.А. <i>Показатели свойств кристаллов со сверхструктурой B2 в рамках модели электронных оболочек в виде размытых сфер</i>	470
Макаров С.В., Олимов М.Г., Плотников В.А., Орлова Ю.А., Евтушенко Е.Е., Шуткин А.А. <i>Формирование диффузионной зоны на границе раздела алюминий/титан</i>	475
Векман А.В., Агейкова Л.Н., Демьянов Б.Ф. <i>Базовые структурные элементы специальных границ зерен наклона с осью разориентации [110]</i>	480
Попов В.А. <i>Диффузия газа из пузырька в расплаве</i>	486
Ахунова А.Х., Валитов В.А. <i>Компьютерное моделирование процесса штамповки тонкостенной конической детали из стали ЭИ962-Ш</i>	491
Баимова Ю.А., Лисовенко Д.С., Городцов В.А., Мурзаев Р.Т., Дмитриев С.В. <i>Исследование металлических нанотрубок методом молекулярной динамики</i>	496
Балаева С.М., Козлов Г.В. <i>Агрегация углеродных нанотрубок в полимерных нанокомпозитах</i>	502
Галиева Э.В., Батаев Н.В., Валитов В.А., Лутфуллин Р.Я. <i>Твердофазная сварка разнородных никелевых сплавов ЭП741НП и ЭК61 с различной геометрией поверхности соединения</i>	507
Демьянов Б.Ф., Никифоров А.Г., Старостенко А.А., Цыганов А.С., Медведев А.М., Семенов Ю.И. <i>Микроструктура зоны расплава в нержавеющей стали после глубокого электронно-лучевого воздействия</i>	513
Сафин Э.В., Малышева С.П., Галеев Р.М. <i>Оценка механических свойств титанового сплава BT6 с субмикроструктурной и бимодальной субмикро-микроструктурой при статическом, динамическом и циклическом нагружении</i>	519
Мухаметрахимов М.Х., Лутфуллин Р.Я. <i>Влияние оксидной пленки на твердофазную свариваемость листа из титанового сплава BT6 при пониженных температурах</i>	523
Маркидонов А.В., Старостенков М.Д., Гришунин В.А., Бащенко Л.П. <i>Атомные механизмы миграции границы зерен кручения (110) под воздействием ударных послекасадных волн на примере никеля</i>	528
Шеменков В.М., Белая М.А., Обидина О.В., Липский А.Э. <i>Влияние обработки тлеющим разрядом на структуру, фазовый состав, твердость и износостойкость быстрорежущей стали Р9</i>	535
Гурьев А.М., Гурьев М.А., Иванов С.Г., Логинова М.В. <i>Эволюция фазового состава диффузионных покрытий стали Р6М5 при многокомпонентном насыщении бором, хромом и титаном</i>	542

УДК 538.911

Новоселова Д.В.¹, Полетаев Г.М.², Коваленко В.В.³, Старостенков М.Д.²

ОСОБЕННОСТИ МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ МИГРАЦИИ ТРОЙНОГО СТЫКА ЗЕРЕН В МЕТАЛЛАХ

Миграция тройных стыков и изменение их конфигурации играет важную роль при деформации поликристаллов с малым размером зерна, поэтому в настоящее время вопросу подвижности тройных стыков уделяется большое внимание. В настоящей работе рассматриваются особенности и ограничения молекулярно-динамической модели миграции тройного стыка в металлах. В частности, исследуются зависимости скорости миграции тройного стыка и двугранного угла в вершине тройного стыка от времени в модели Швиндлермана на примере никеля. Взаимодействия атомов никеля друг с другом в молекулярно-динамической модели описывались многочастичным потенциалом Клери-Розато.

В работе показано, что при моделировании миграции тройного стыка, перед измерением скорости его миграции, обязательно должно предшествовать дополнительное исследование зависимости скорости миграции от времени с целью определения участка с постоянной скоростью, знание которого необходимо для корректного вычисления характеристик миграции тройного стыка. На примере зависимостей скорости миграции тройного стыка $\langle 111 \rangle 30^\circ/20^\circ/10^\circ$ в никеле и двугранного угла в его вершине от времени в молекулярно-динамической модели Швиндлермана показано, что на полученных зависимостях можно выделить четыре разные области: I – начало миграции стыка сначала со сравнительно высокой скоростью, но затем скорость значительно снижается; II – резкий рост скорости миграции стыка до постоянного значения; III – миграция стыка с постоянной скоростью и углами между границами зерен (участок, на котором необходимо проводить измерение скорости миграции стыка и углов между границами); IV – постепенное уменьшение скорости миграции до нуля.

Ключевые слова: молекулярная динамика, тройной стык, граница зерен, миграция тройного стыка, граница наклона, компьютерное моделирование.

Novoselova D.V.¹, Poletaev G.M.², Kovalenko V.V.³, Starostenkov M.D.²

FEATURES OF THE MOLECULAR DYNAMICS MODEL OF MIGRATION OF THE TRIPLE JUNCTION OF GRAINS IN METALS

Migration of the triple junctions and a change in their configuration play an important role in the deformation of polycrystals with a small grain size, so at the present time much attention is paid to the mobility of the triple junctions. In this paper, we consider the features and limitations of the molecular dynamics model of the triple junction migration in metals. In particular, the dependence of the migration velocity of the triple junction and the dihedral angle at the top of the triple junction on time in the Shvindlerman model is investigated using the example of nickel. The interactions of nickel atoms with each other in the molecular dynamics model were described by the many-particle Clery-Rosato potential.

It is shown in the work that when modeling the migration of the triple junction, before measuring the velocity of its migration, a further study of the dependence of the migration velocity on time must be preceded with the aim of determining the section with a constant velocity, the knowledge of which is necessary for the correct calculation of the triple junction migration characteristics. On the example of the dependences of the migration velocity of $\langle 111 \rangle 30^\circ/20^\circ/10^\circ$ triple junction in nickel and the dihedral angle at its top on time in the Shvindlerman molecular dynamics model, it is shown that four different regions can be distinguished on the obtained dependences: I – the beginning of the migration with a relatively high velocity, but then the velocity is significantly reduced; II – a sharp increase in the migration velocity of the junction to a constant value; III – migration of the junction with constant velocity and angles between the grain boundaries (the area at which it is necessary to measure the migration velocity of the junction and the angles between the boundaries); IV – gradual decrease of migration velocity to zero.

Keywords: molecular dynamics, triple junction, grain boundary, triple junction migration, tilt boundary, computer simulation.

Введение

Классические теории роста зерна в обычных крупнозернистых поликристаллах, как правило, предполагают, что тройные стыки обладают бесконечной подвижностью, и рост зерна реализуется посредством миграции границ зерен [1]. В рамках данных предположений кривизна границ зерен служит главной движущей силой для процесса роста зерен, причем тройные стыки границ зерен характеризуются равновесными углами (120°) во время такого процесса. Однако эти предположения, лежащие в основе классических теорий роста зерна, являются дискуссионными, особенно для случая нанокристаллических материалов. Так, эксперименты [2-4] и результаты компьютерного моделирования роста зерен [5-8] показали, что подвижность тройных стыков границ зерен является конечной величиной. В работах [2-8] отмечается, что существует два температурных участка движения системы границ с тройным стыком в металлах: при низких температурах стык оказывает тормозящее влияние на подвижность системы (стыковая кинетика) – его подвижность меньше, чем границ зерен; при высоких температурах подвижность системы определяется подвижностью границ зерен (граничная кинетика), то есть при высоких температурах стык становится более подвижным, чем границы. Для различных материалов и типов границ зерен существует различная температура перехода от стыковой к граничной кинетике.

В общем случае данный эффект тройных стыков приводит к снижению скорости структурных трансформаций в процессе роста зерна [8]. Более того, согласно компьютерному моделированию, проведенному в работе [8], при определенных низких значениях подвижности тройных стыков, их тормозящий эффект полностью подавляет рост зерен в двумерном поликристалле. Результаты компьютерного моделирования [5, 7] показывают, что тормозящий эффект тройных стыков на рост зерен в двумерных поликристаллах усиливается с уменьшением среднего размера зерна и температуры. В частности, ожидается, что тормозящий эффект тройных стыков радикально влияет на рост зерен в нанокристаллических материалах, в которых плотность тройных стыков чрезвычайно высока. Согласно теоретическим оценкам [9], тормозящий эффект тройных стыков

способен полностью подавить рост зерен в двумерных нанокристаллических структурах. Эти теоретические результаты интересны для интерпретации экспериментальных данных о высокой структурной устойчивости некоторых нанокристаллических материалов [10, 11]. В частности, представления о тормозящем эффекте тройных стыков на рост зерен в нанокристаллических материалах согласуются с данными эксперимента [10], в котором наблюдалось повышение структурной устойчивости нанокристаллических образцов Au и Cu с уменьшением среднего размера зерен (и, таким образом, увеличением плотности ансамбля тройных стыков) в таких образцах.

Работы Швиндлермана Л.С. с соавторами [2-8], выполненные с помощью прямых экспериментов и компьютерного моделирования, внесли существенный вклад в развитие представлений о подвижности тройных стыков границ зерен в металлах. Тем не менее, серьезные исследования в этом направлении начались сравнительно недавно, и в настоящее время остается ряд открытых вопросов. В первую очередь, это накопление численных данных, связанных со структурными и энергетическими характеристиками миграции тройных стыков для разных металлов в зависимости от различных внешних и внутренних факторов; исследование влияния на подвижность стыков примесей, дефектов кристаллической решетки (особенно вакансий и дислокаций), свободного объема. Кроме этого, важным вопросом является выяснение ведущих атомных механизмов процессов перестройки и миграции тройных стыков границ разного типа. В настоящей работе рассматриваются особенности и ограничения молекулярно-динамической модели миграции тройного стыка в металлах. В частности, исследуется зависимость скорости миграции тройного стыка от времени в модели Швиндлермана для определения участка с постоянными характеристиками миграции стыка для корректного их измерения.

1. Описание модели

В настоящей работе за основу была взята конфигурация стыка и модель, предложенная и развитая в работах Швиндлермана Л.С. с соавторами [2-8]. На рис.1 схематически изображен стационарно движущийся тройной стык. Одна из границ расположена вдоль движения трой-

ного стыка, в результате чего в процессе движения ее длина увеличивается. Другие две границы движутся к центру кривизны с постоянной скоростью.

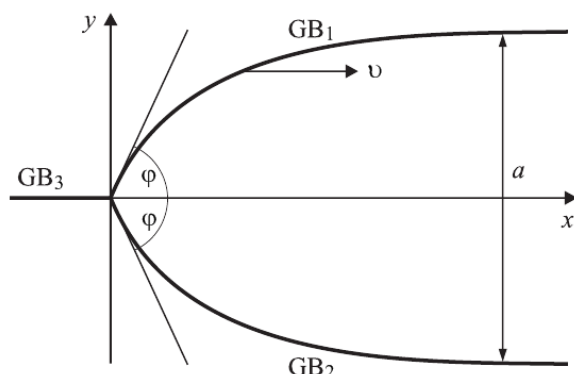


Рис.1. Конфигурация границ зерен при стационарном движении тройного стыка в модели Швиндлермана

Скорость движения системы границ зерен с тройным стыком (рис.1), согласно [2, 3], определяется в соответствии с выражением

$$v = \frac{2\phi m_b \sigma}{a}, \quad (1)$$

где ϕ – двугранный угол в вершине тройного стыка, m_b – подвижность границ зерен 1 и 2; σ – поверхностное натяжение границ 1 и 2 (предполагается, что границы 1 и 2 имеют равные натяжения); a – ширина уменьшающегося зерна.

С другой стороны, на тройной стык действует сила, если поверхностные натяжения, действующие на него, не равны нулю:

$$v = m_{ij} (2\sigma \cos \phi - \sigma_3), \quad (2)$$

где σ_3 – поверхностное натяжение границы 3, m_{ij} – подвижность тройного стыка. Так как границы и тройной стык движутся согласованно, выражения (1) и (2) можно приравнять. Тогда величина равновесного угла ϕ связана выражением

$$\frac{2\phi}{2\cos \phi - \sigma_3/\sigma} = \frac{m_{ij} a}{m_b} = \Lambda, \quad (3)$$

В [2, 3] было показано, что для рассматриваемой конфигурации границ зерен с тройным стыком (рис.1) могут существовать два кинетических режима движения, на одном из которых подвижность системы определяется подвижностью тройного стыка, на другом – подвижностью границ, а безразмерный параметр Λ служит критерием перехода от одной кинетики к другой. При $\Lambda \ll 1$ угол $\phi \rightarrow 0$ и скорость движе-

ния системы контролируется подвижностью тройного стыка в соответствии с (1) (режим стыковой кинетики). Для $\Lambda \gg 1$ угол ϕ стремится к своему равновесному значению, характерному для неподвижной системы границ. Скорость движения системы границ зерен с тройным стыком в этом случае не зависит от подвижности тройного стыка и определяется лишь свойствами границ (уравнение (2), режим граничной кинетики).

В зависимости от того, что определяет подвижность системы: тройной стык или границы зерен, – подвижность рассматриваемой системы границ с тройным стыком может быть определена с помощью выражений [2, 3]

$$A_{ij} = \frac{va}{2\cos \phi - \sigma_3/\sigma} = m_{ij} \sigma a = A_{0ij} \exp\left(-\frac{H_{ij}}{kT}\right), \quad (4)$$

$$A_b = \frac{va}{2\phi} = m_b \sigma = A_{0b} \exp\left(-\frac{H_b}{kT}\right), \quad (5)$$

где A_{ij} и A_b – приведенные подвижности тройного стыка и границ зерен, H_{ij} и H_b – энергии активации их миграции.

В экспериментальных работах [2-4] и работах, выполненных с помощью компьютерного моделирования [5-8], к сожалению, не затронут вопрос относительно постоянства скорости миграции и угла ϕ в процессе движения тройного стыка в рассматриваемой модели. Тем не менее, этот вопрос важен для корректного измерения всех основных характеристик миграции стыка.

В настоящей работе исследование проводилось на примере тройных стыков границ наклона с осями разориентации $\langle 111 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$ в никеле. Расчетный блок создавался в виде пластины толщиной в 6 атомных плоскостей (рис.2). В случае стыка границ наклона $\langle 111 \rangle$ расчетный блок имел высоту 25,9 нм, ширину 17,2 нм и толщину 1,2 нм. Для стыка границ $\langle 100 \rangle$ размеры составляли 26,4 нм, 17,6 нм и 1,1 нм соответственно. Блоки содержали примерно 50000 атомов. Вдоль оси Z (рис.2) имитировалось бесконечное повторение структуры, т.е. были наложены периодические граничные условия. По осям X и Y границы блока были жестко закреплены для фиксации заданной разориентации зерен. Сила, приводящая к миграции стыка, создается за счет натяжения границ 1 и 2, которые, натягиваясь, тянут вниз границу 3, в результате чего увеличивается ее длина, а длина границ 1 и 2 сокращается.

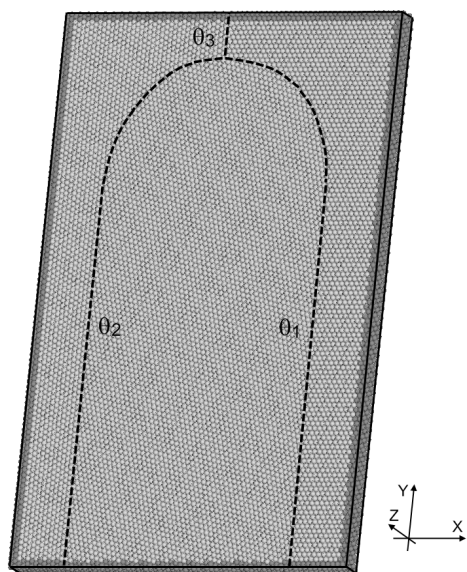


Рис.2. Расчетный блок для моделирования миграции тройного стыка $\langle 111 \rangle 15^\circ/15^\circ/30^\circ$. Темно-серые атомы на краю расчетного блока в процессе компьютерного эксперимента оставались неподвижными (жесткие граничные условия). $\theta_1, \theta_2, \theta_3$ – углы разориентации границ зерен

Рассматривались различные сочетания углов разориентации зерен, но большинство результатов было получено для стыков с углами разориентации $\theta_1=30^\circ$, $\theta_2=20^\circ$ и $\theta_3=10^\circ$ (в работе для краткости использовалось обозначение $\langle 111 \rangle 30^\circ/20^\circ/10^\circ$ или $\langle 100 \rangle 30^\circ/20^\circ/10^\circ$ в зависимости от направления оси разориентации границ наклона). Это было связано с высокой скоростью миграции данных стыков в модели, что облегчало исследование зависимости скорости миграции от времени. Тройные стыки с углами разориентации зерен $15^\circ/15^\circ/30^\circ$, например, мигрировали в модели существенно медленнее, чем стыки $30^\circ/20^\circ/10^\circ$. При этом стыки границ $\langle 100 \rangle$ при других равных условиях мигрировали медленнее, чем стыки границ $\langle 111 \rangle$. Первое, т.е. значительное отличие подвижности стыков $15^\circ/15^\circ/30^\circ$ и $30^\circ/20^\circ/10^\circ$, было вызвано двумя причинами. Во-первых, это было связано с отношением натяжений границ в стыке. Очевидно, что чем ниже натяжение границы 3, которая удлиняется в результате миграции стыка, по сравнению с натяжениями границ 1 и 2 (рис.2), тем быстрее должен мигрировать тройной стык. Во-вторых, на подвижность тройного стыка оказывает влияние подвижность самих границ. Известно, что малоугловые границы мигрируют медленнее

большеуголовых. Например, стыки $\langle 111 \rangle 5^\circ/5^\circ/10^\circ$ и $\langle 100 \rangle 5^\circ/5^\circ/10^\circ$ почти не сдвинулись с места при температуре 1700 К в течение сравнительно длительного по меркам молекулярной динамики моделирования – 4000 пс.

Взаимодействия атомов никеля друг с другом в молекулярно-динамической модели описывались многочастичным потенциалом Клери-Розато [12]. Данный потенциал хорошо зарекомендовал себя в ряде расчетов структурно-энергетических характеристик металлов, выполненных методом молекулярной динамики [13–29]. Шаг интегрирования по времени в методе молекулярной динамики был равен 5 фс. Температура в модели задавалась через начальные скорости атомов согласно распределению Максвелла.

2. Результаты и обсуждение

При изучении изменения геометрии стыкующихся границ зерен в процессе миграции тройного стыка было замечено, что в рассматриваемой модели (рис.2) сначала происходит «натяжение» границ 1 и 2. Сам стык при этом движется относительно медленно или вообще остается на месте. Только после того, как границы 1 и 2 натягиваются, они начинают «тянуть» стык и границу 3 вниз. Из этого становится очевидно, что в начале и в конце движения тройного стыка движущая сила, приводящая его в движение, будет иметь отличное значение от того, которое она будет иметь в середине, когда скорость движения стыка, согласно [2, 3], постоянна. Также очевидно, что скорость миграции стыка необходимо измерять только на том участке, когда движущая сила и сама скорость постоянны.

Для определения участка с постоянными значениями силы и скорости движения стыка были построены зависимости скорости стыка и двугранного угла в стыке от времени $v(t)$ и $\phi(t)$ для случая движения тройного стыка $\langle 111 \rangle 30^\circ/20^\circ/10^\circ$ при температуре 1700 К (рис.3а и 3б).

Зависимости $v(t)$ и $\phi(t)$, приведенные на рисунках 3а и 3б, были качественно аналогичны для всех рассматриваемых тройных стыков, кроме стыков $\langle 111 \rangle 5^\circ/5^\circ/10^\circ$ и $\langle 100 \rangle 5^\circ/5^\circ/10^\circ$. Последние были убраны из рассмотрения в связи с чрезвычайно низкой подвижностью.

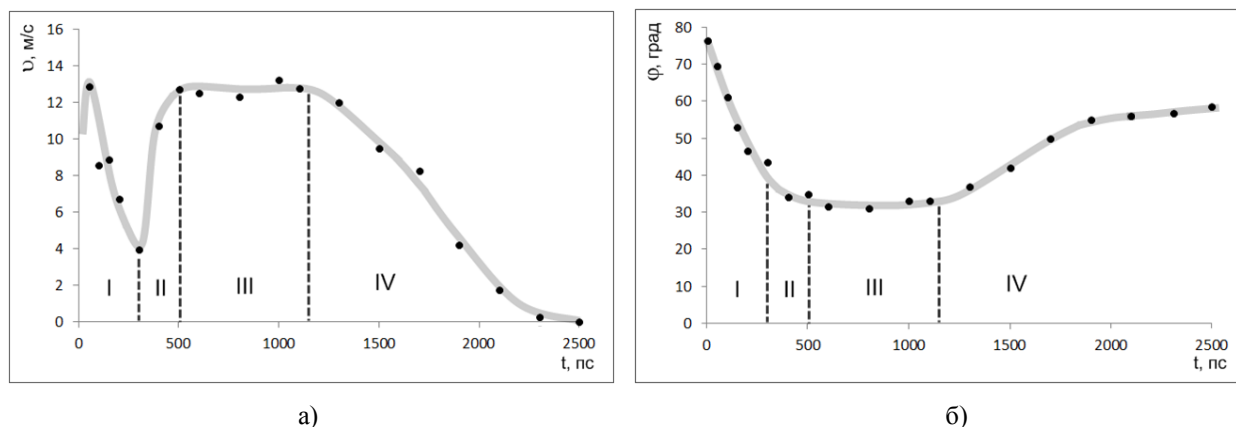


Рис.3. Зависимости скорости миграции тройного стыка $\langle 111 \rangle 30^\circ/20^\circ/10^\circ$ (а) и угла ϕ (б) от времени при температуре 1700 К

Как видно из рисунков 3а и 3б, скорость миграции тройного стыка не постоянна на протяжении моделирования его движения. Более того, участок, на котором скорость имеет постоянное значение, довольно небольшой. На приведенных зависимостях четко выделяются четыре области: I – старт миграции стыка сначала со сравнительно высокой скоростью, но затем скорость значительно снижается, угол ϕ при этом резко уменьшается; II – резкий рост скорости миграции стыка до постоянного значения;

III – миграция стыка с постоянными скоростью и углом ϕ (очевидно, что измерение скорости стыка v и угла ϕ следует проводить на этом отрезке); IV – постепенное уменьшение скорости миграции до нуля, угол ϕ при этом также плавно повышается до некоторого стабильного значения, соответствующего равновесному значению для данного стыка. Ниже приведен рис.4, иллюстрирующий причину такого поведения скорости v и угла ϕ в зависимости от времени.

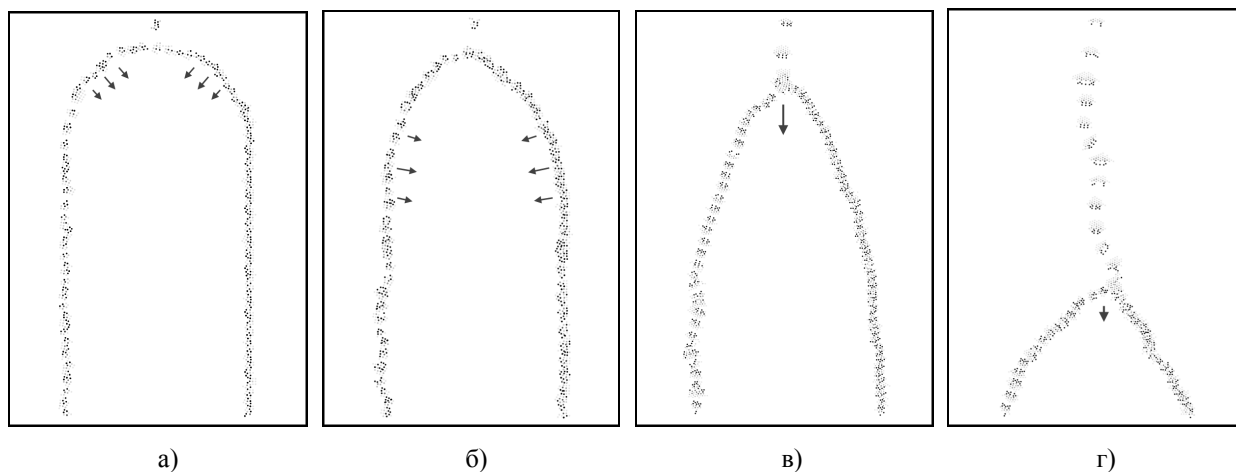


Рис.4. Положения тройного стыка $\langle 111 \rangle 30^\circ/20^\circ/10^\circ$ в разные моменты времени в процессе компьютерного эксперимента при температуре 1700 К: а) 0 пс; б) 100 пс; в) 400 пс; г) 1500 пс

Изображения, приведенные на рис.4, получены с помощью визуализатора средних расстояний между соседними атомами. Визуализация осуществлялась путем расчета среднего расстояния от каждого атома до ближайших атомов. Если среднее расстояние незначительно отличалось от расстояния, соответствующего идеальному кристаллу, атом не изображался.

В противном случае атом закрашивался в тот или иной оттенок серого цвета.

Как видно из рис.4, вначале происходит миграция границ 1 и 2 (боковые границы) вблизи стыка, как показано на рис.4а. В связи с этим угол ϕ стремительно уменьшается, а сила, провоцирующая миграцию стыка, увеличивается. На участке II углы в стыке стабилизируются и сила резко уменьшается. Для ее появления

необходимо натяжение границ. На втором рисунке (рис.4б) сила минимальна – стык мигрирует с небольшой скоростью, происходит «донатяжение» границ 1 и 2. Рис.4в соответствует участку III с постоянными значениями скорости миграции стыка и угла ϕ . При приближении стыка к своему равновесному положению в расчетном блоке, очевидно, происходит замедление скорости (рис.4г) вследствие изменения направлений векторов натяжений границ 1 и 2 (участок IV). Угол ϕ постепенно принимает значение, соответствующее равновесной конфигурации (рис.3б).

Заключение

Таким образом, в настоящей работе показано, что при моделировании миграции тройного стыка, перед измерением скорости его миграции, обязательно должно предшествовать дополнительное исследование зависимости скорости миграции от времени с целью определения участка с постоянной скоростью, знание которого необходимо для корректного вычисления характеристик миграции тройного стыка.

В настоящей работе на примере зависимостей скорости миграции тройного стыка $\langle 111 \rangle 30^\circ/20^\circ/10^\circ$ в никеле и двугранного угла в вершине тройного стыка от времени в молекулярно-динамической модели Швиндлермана показано, что на полученных зависимостях можно выделить четыре области: I – старт миграции стыка сначала со сравнительно высокой скоростью, но затем скорость значительно снижается; II – резкий рост скорости миграции стыка до постоянного значения; III – миграция стыка с постоянными скоростью и углами между границами зерен (участок, на котором необходимо проводить измерение скорости миграции стыка и углов между границами); IV – постепенное уменьшение скорости миграции до нуля.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ в рамках базовой части государственного задания (проект № 3.4820.2017/БЧ) и гранта РФФИ №16-48-190182 p_a.

Список используемой литературы

1. Овидько И.А. Теории роста зерен и методы его подавления в нанокристаллических и поли-

кристаллических материалах // Физика и механика материалов. 2009. т.8. С. 174-198.

2. Gottstein G., Sursaeva V., Shvindlerman L. The effect of triple junctions on grain boundary motion and grain microstructure evolution // Interface Science. 1999. V.7. P. 273-283.

3. Протасова С.Г., Сурсаева В.Г., Швиндлерман Л.С. Исследование движения индивидуальных тройных стыков в алюминии // Физика твердого тела. 2003. т.45. №8. С. 1402-1405.

4. Czubyko U., Gottstein G., Sursaeva V.G., Shvindlerman L.S. Influence of triple junctions on grain boundary motion // Acta Materialia. 1998. т.46. №16. С. 5863-5871.

5. Gottstein G., Ma Y., Shvindlerman L.S. Triple junction motion and grain microstructure evolution // Acta Materialia. 2005. V.53. P. 1535-1544.

6. Upmanyu M., Srolovitz D.J., Shvindlerman L.S., Gottstein G. Triple junction mobility: a molecular dynamics study // Interface Science. 1999. V.7. P. 307-319.

7. Upmanyu M., Srolovitz D.J., Shvindlerman L.S., Gottstein G. Molecular dynamics simulation of triple junction migration // Acta Materialia. 2002. V.50. P. 1405-1420.

8. Gottstein G., Shvindlerman L.S., King A.H. Effect of triple-junction drag on grain growth // Acta Materialia. 2000. V.48. No.2. P. 397-403.

9. Pande C.S., Masumura R.A. Grain growth and deformation in nanocrystalline materials // Materials Science and Engineering A. 2005. V.409. P. 125-130.

10. Okuda S., Kobiyama M., Inami T., Takamura S. Thermal stability of nanocrystalline gold and copper prepared by gas deposition method // Scripta Materialia. 2001. V.44. P. 2009-2012.

11. Zhou F., Lee J., Lavernia E.J. Grain growth kinetics of a mechanically milled nanocrystalline Al // Scripta Materialia. 2001. V.44. P. 2013-2017.

12. Cleri F., Rosato V. Tight-binding potentials for transition metals and alloys // Physical Review B. 1993. V.48. No.1. P. 22-33.

13. Полетаев Г.М., Новоселова Д.В., Кайгородова В.М., Старостенков М.Д. Особенности образования свободного объема в тройных стыках границ наклона $\langle 111 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$ в Ni при кристаллизации // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2015. т.12. №2. С. 253-258.

14. Кулабухова Н.А., Полетаев Г.М., Старостенков М.Д. Взаимодействие атома водорода с краевой дислокацией в Pd и Ni // Фундамен-

- тальные проблемы современного материаловедения. 2014. т.11. №1. С. 99-104.
15. Poletaev G.M., Novoselova D.V., Kaygorodova V.M. The causes of formation of the triple junctions of grain boundaries containing excess free volume in fcc metals at crystallization // *Solid State Phenomena*. 2016. V.249. P. 3-8.
 16. Маркидонов А.В., Старостенков М.Д., Сосков А.А., Полетаев Г.М. Изучение структурных трансформаций нанопор цилиндрической формы в золоте методом молекулярной динамики в условиях термоактивации и воздействия звуковых и ударных волн // *Физика твердого тела*. 2015. т.57. №8. С. 1521-1524.
 17. Полетаев Г.М., Кулабухова Н.А., Старостенков М.Д. Потенциалы межатомного взаимодействия в системах Pd-H и Ni-H // *Химическая физика и мезоскопия*. 2011. т.13. №3. С. 411-418.
 18. Полетаев Г.М., Старостенков М.Д. Определение температуры плавления и температурного коэффициента линейного расширения методом молекулярной динамики // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2004. №1. С. 81-85.
 19. Полетаев Г.М., Дмитриенко Д.В., Санников А.В., Старостенков М.Д. Определение диффузионного радиуса и диффузионной проницаемости ненапряженных тройных стыков границ зерен в никеле в условиях деформации // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2014. т.11. №1. С. 17-21.
 20. Полетаев Г.М., Старостенков М.Д. Структурные изменения тетраэдров дефектов упаковки при поглощении точечных дефектов // *Письма в ЖТФ*. 2009. т.35. №1. С. 3-10.
 21. Полетаев Г.М., Новоселова Д.В., Старостенков М.Д., Мартынова Е.В., Кайгородова В.М. Исследование условий формирования напряженных тройных стыков границ зерен в никеле // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2014. т.11. №4. С. 495-500.
 22. Краснов В.Ю., Полетаев Г.М., Старостенков М.Д. Исследование структуры аморфного никеля // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2006. т.3. №4. С. 37-45.
 23. Poletaev G.M., Sannikov A.V., Berdychenko A.A., Starostenkov M.D. Molecular dynamics study of plastic deformation mechanisms near the interphase boundary in two-dimensional bimetallic systems // *Materials Physics and Mechanics*. 2015. V.22. No.1. P. 15-19.
 24. Кулабухова Н.А., Полетаев Г.М., Старостенков М.Д. Молекулярно-динамическое исследование взаимодействия водорода с наночастицами Pd и Ni // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2014. т.11. №2. С. 235-240.
 25. Poletaev G.M., Starostenkov M.D., Dmitriev S.V. Interatomic potentials in the systems Pd-H and Ni-H // *Materials Physics and Mechanics*. 2016. V.27. No.1. P. 53-59.
 26. Кулабухова Н.А., Полетаев Г.М. Молекулярно-динамическое исследование сорбционных свойств точечных дефектов по отношению к водороду в Pd и Ni // *Химическая физика и мезоскопия*. 2013. т.15. №2. С. 231-235.
 27. Царегородцев А., Горлов Н., Демьянов Б.Ф., Старостенков М.Д. Атомная структура АФГ и ее влияние на состояние решетки вблизи дислокации в упорядоченных сплавах со сверхструктурой $L1_2$ // *Физика металлов и материаловедение*. 1984. т.58. №2. С. 336.
 28. Starostenkov M.D., Chaplygin P.A., Chaplygina A.A., Potekaev A.I. Investigation of growth ordered phases in the alloy NiAl equiatomic composition during stepwise cooling // *Procedia IUTAM*. 2017. V.23. P. 78-83.
 29. Starostenkov M.D., Tabakov P.Ya., Romanenko V.V., Chernykh E.V. Regularities of coordination spheres in the crystal lattice of the cubic symmetry // *Procedia IUTAM*. 2017. V.23. P. 167-176.

¹Кузбасский институт ФСИН России, Новокузнецк, Россия.

²Алтайский государственный технический университет, Барнаул, Россия.

³Сибирский государственный индустриальный университет, Новокузнецк, Россия.

Подписано в печать 24.11.17.

Сведения об авторах

Новоселова Дарья Викторовна, к.ф.-м.н., докторант АлтГТУ, gmpoletaev@mail.ru
 Полетаев Геннадий Михайлович, д.ф.-м.н., профессор, зав. кафедрой АлтГТУ, gmpoletaev@mail.ru
 Коваленко Виктор Викторович, д.ф.-м.н., профессор СибГИУ, gmpoletaev@mail.ru
 Старостенков Михаил Дмитриевич, д.ф.-м.н., профессор, зав. кафедрой АлтГТУ, genphys@mail.ru