

**ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ
ПРОБЛЕМЫ
СОВРЕМЕННОГО
МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ**

Научный журнал
Издается с января 2004 г.

Том 14

Сентябрь 2017 г.

№ 3

Фундаментальные проблемы современного материаловедения

том 14 №3 2017 г.

Международный специализированный научный журнал
Выходит ежеквартально
Издается с января 2004 года

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: ПИ № 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)
- Темлянец 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 materialovedeniya (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 «Nauchno-issledovatel'skiy center «Sistemy upravleniya»
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.

Тел.: +7 (385) 229-08-63 Fax: +7 (385) 236-78-64
E-mail: gurievam@mail.ru

PhD, Hab., Professor Poletaev G.M.

Тел.: +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. Kurdjumov 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
Mulyukov 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
Potekaev A.I., PhD, Hab., Professor, director, V.D. Kuznetsov's Siberian Physical-Technical Institute, Tomsk, Russia
Pyshnograï 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
Starenchenko 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. Kurdjumov 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.nsmdu.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

ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ ПРОБЛЕМЫ СОВРЕМЕННОГО МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ

НА ГЛАВНУЮ ЖУРНАЛА

НА САЙТ НАУЧНОЙ ШКОЛЫ



Фундаментальные проблемы современного материаловедения, 2017, том 14, №3

Содержание

<i>Бачурина О.В., Мурзаев Р.Т., Дмитриев С.В.</i> <i>Исследование плоской колебательной моды в ГЦК металле никеля в плоскости [111]</i>	283
<i>Бакушев С.В.</i> <i>Оценка коэффициента поперечной деформации геометрически и физически нелинейной сплошной среды</i>	288
<i>Иванов Ю.Ф., Громов В.Е., Юрьев А.А., Перегудов О.А., Коновалов С.В., Морозов К.В., Гришунин В.А.</i> <i>Градиенты структуры и свойств поверхностных слоев дифференцированно закаленных рельсов после длительной эксплуатации</i>	297
<i>Редель Л.В.</i> <i>Расчет восприимчивости сенсора на основе наночастиц SnO₂ по отношению к угарному газу</i>	306
<i>Гордиенок Н.И., Загвоздин И.Н., Копытов А.В., Педиков В.М.</i> <i>Анизотропия распространения упругих волн в тетрагональных AgInS₂, AgInSe₂, AgAlS₂, AgAlSe₂</i>	316
<i>Ахунова А.Х., Валеева А.Х., Валеев И.Ш.</i> <i>Расчет параметра поврежденности при равноканальном угловом прессовании баббита Б83 с использованием компьютерного моделирования</i>	322
<i>Сливак Л.В., Сосунов А.В.</i> <i>Влияние температурной обработки на морфологию поверхности аморфного сплава на основе железа</i>	327
<i>Кузнецов А.Е., Пышнограй Г.В., Черлакова Н.А.</i> <i>Влияние числа Вайсенберга на структуру течений полимерных расплавов в каналах с внезапным сужением</i>	332

Сарычев В.Д., Грановский А.Ю., Невский С.А., Громов В.Е., Темляцев М.В. Модель формирования гетерогенного плазменного потока при электрическом взрыве проводников в плазменном ускорителе с коаксиальным расположением электродов	337
Чунг Н.Т.Ч., Фуонг Х.С.М., Старостенков М.Д., Романенко В.В., Черных Е.В. Исследование некоторых характеристик интерметаллида NiAl методом молекулярной динамики в приближении EAM потенциалов	347
Гурьев М.А., Иванов С.Г., Гурьев А.М., Мэй Шунчи, Янь Сяюй, Вэй Шунъюн Упрочнение поверхности стальных изделий бором совместно с металлами	357
Бачурина О.В., Мурзаев Р.Т., Дмитриев С.В. Моделирование линейного дискретного бризера в никеле	363
Новоселова Д.В., Полетаев Г.М., Коваленко В.В., Старостенков М.Д. Определение отношения натяжений границ зерен в тройном стыке методом молекулярной динамики	368
Черпакова Н.А., Кузнецов А.Е., Пышнограй Г.В. Моделирование нелинейной вязкоупругости полимерных материалов при их больших периодических деформациях	376
Старостенков М.Д., Яшин О.В., Яшин А.В. Исследование особенностей перераспределения атомов водорода между порами различного типа в нановолокне ГЦК Ni под действием деформации растяжения	381
Безносюк С.А., Терентьева Ю.В., Никольский С.Н. Компьютерное моделирование устойчивости нанозлектромеханических чипов полупроводниковых соединений переменного состава $Al_xGa_{1-x}As$	388
Векман А.В., Демьянов Б.Ф. Базовые структурные элементы границ зерен наклона с осью разориентации [100]	393
Олимов М.Г., Макаров С.В., Плотников В.А. Обширная диффузионная зона интерметаллических покрытий на алюминии и его сплавах	398
Протопопов Е.А., Трофимова Ю.В., Протопопов А.А., Вальтер А.И., Маленко П.И. О связи твердости и прочности металла с обобщенными степенями металличности и ковалентности межатомной связи	403

УДК 538.911

*Новоселова Д.В.¹, Полетаев Г.М.², Коваленко В.В.³, Старостенков М.Д.²***ОПРЕДЕЛЕНИЕ ОТНОШЕНИЯ НАТЯЖЕНИЙ ГРАНИЦ ЗЕРЕН В ТРОЙНОМ СТЫКЕ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ**

В настоящей работе рассмотрены два метода определения натяжений границ зерен в тройном стыке с помощью метода молекулярной динамики на примере никеля. Первый метод заключался в поиске равновесного соотношения углов между границами в стыке путем компьютерного моделирования и определения отношения натяжений границ через соотношение Янга. Второй метод заключался в нахождении отношения энергий границ зерен. Согласно полученным данным, согласие между двумя методами оказалось достаточно хорошее.

При моделировании миграции стыка границ наклона $\langle 111 \rangle$ было отмечено, что границы $\langle 111 \rangle$ мигрируют существенно быстрее границ $\langle 100 \rangle$. Вместе с тем механизм удлинения малоугловой границы $\langle 111 \rangle$ при миграции тройного стыка был аналогичен механизму удлинения границы $\langle 100 \rangle$. При удлинении малоугловой границы наклона появление новой геометрически необходимой зернограницной дислокации происходило в уже существующем ядре дислокации или в области тройного стыка. При этом вектор Бюргерса изменялся скачкообразно, в связи с чем скачкообразно изменялась скорость миграции стыка и удлинение малоугловой границы. Наблюдалось замедление миграции перед образованием новой зернограницной дислокации и ускорение после. После возникновения новой дислокации в ядре существующей эти две дислокации отталкивались друг от друга и расходились вдоль своих плоскостей скольжения, образуя зигзагообразные смещения атомов. Данный механизм удлинения малоугловой границы наклона при миграции тройного стыка оказался обратим – при сокращении длины малоугловой границы происходил обратный процесс: две дислокации соединялись в одну с последующим скачкообразным уменьшением вектора Бюргерса.

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

*Novoselova D.V.¹, Poletaev G.M.², Kovalenko V.V.³, Starostenkov M.D.²***DETERMINATION OF THE RATIO OF GRAIN BOUNDARY TENSIONS IN A TRIPLE JUNCTION BY THE MOLECULAR DYNAMICS METHOD**

In the paper we consider two methods for determining the grain boundary tension in a triple junction using the molecular dynamics method on the example of nickel. The first method consisted in the search of an equilibrium relation of the angles between the boundaries in the junction by the computer simulation and the determination of the ratio of the tension of the boundaries through the Yang relation. The second method consisted in finding the ratio of grain boundary energies. According to the obtained data, the agreement between the two methods turned out to be quite good.

When modeling the migration of the junction of the tilt $\langle 111 \rangle$ boundaries it was noted that the $\langle 111 \rangle$ boundaries migrate significantly faster than the $\langle 100 \rangle$ boundaries. At the same time, the mechanism of elongation of the low-angle $\langle 111 \rangle$ boundary during the migration of the triple junction was similar to the mechanism of elongation of the $\langle 100 \rangle$ boundary. With an elongation of the low-angle tilt boundary, the appearance of a new geometrically necessary grain boundary dislocation occurred in the already existing dislocation core or in the area of the triple junction. Wherein the Burgers vector changed jumpwise and, as a result, the velocity of junction migration and the elongation of the low-angle boundary changed stepwise. Migration slowed down before the formation of a new grain boundary dislocation and acceleration after. After the appearance of the new dislocation in the core of the existing one, these two dislocations repelled from each other and dispersed along their slip planes forming zigzag displacements of the atoms. This mechanism of the low-angle tilt boundary elongation during the migration of the triple junction turned out to be reversible – with a shortening of the length of the low-angle boundary, the reverse process took place: two dislocations merged into one with a subsequent jumpwise decrease in the Burgers vector.

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

Введение

Тройной стык границ зерен (или тройная линия) (triple junction, triple line – в англоязычной литературе) представляет собой линейный дефект, вдоль которого сопрягаются три различно ориентированных зерна или три зернограницных поверхности. Взаимные углы, под которыми располагаются границы зерен в тройном стыке, определяются, как правило, энергией границ и их относительным натяжением [1]. В большинстве случаев углы между границами в стыках близки к 120° , что свидетельствует о примерно одинаковом натяжении (и, соответственно, энергии) многих границ [1, 2]. Тем не менее, для таких границ, как малоугловые или специальные, натяжение значительно меньше, чем для большеугловых границ, – углы между границами в тройных стыках с участием таких границ могут существенно отличаться от 120° [1, 3, 4]. Связь энергии границ с углами между ними в тройном стыке описывает уравнение Херринга (Herring) [5, 6]:

$$\sum_{i=1}^3 \left(\sigma_i \vec{b}_i + \left(\frac{\partial \sigma_i}{\partial \phi_i} \right) \vec{n}_i \right) = 0, \quad (1)$$

где σ_i – энергия i -й границы зерен; \vec{n}_i – единичный вектор, нормальный к i -й границе; \vec{b}_i – единичный вектор, направленный от стыка вдоль i -й границы; ϕ_i – угол, характеризующий ориентацию i -й границы в пространстве (рис. 1).

Первое слагаемое в уравнении (1) описывает взаимное расположение границ зерен, отвечающее состоянию равновесия. Второе – равновесие по отношению к повороту вокруг оси вдоль линии стыка. Вращение стыка может происходить не только на стадии его формирования, но и в процессе рекристаллизации и деформации [1].

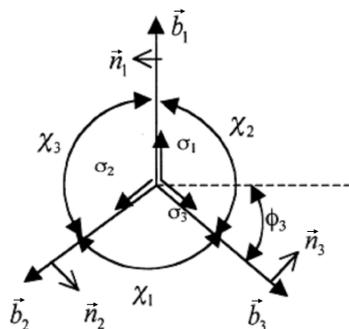


Рис.1. Геометрические параметры тройного стыка к уравнению Херринга. Рисунок взят из [5]

В случае равновесия тройного стыка, когда его конфигурация остается неизменной, вторым слагаемым в уравнении Херринга (1) можно пренебречь. Тогда для углов между границами зерен можно записать соотношение Янга (Young) [5-7]:

$$\frac{\sigma_1}{\sin \chi_1} = \frac{\sigma_2}{\sin \chi_2} = \frac{\sigma_3}{\sin \chi_3}. \quad (2)$$

Уравнения Херринга и Янга используются для определения относительной энергии границ зерен по углам между ними в тройных стыках. В работах [3, 4], например, показано, что специальные границы, обладая относительно небольшой энергией, могут примыкать к стыку даже под углом, близким к 90° . Кроме того, в работе [3] говорится, что натяжение большеугловых границ и границ смешанного типа примерно одинаковое.

Стыки, как и границы зерен, могут мигрировать. 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. 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. В рамках данных предположений кривизна границ зерен служит главной движущей силой для процесса роста зерен, причем тройные стыки границ зерен характеризуются равновесными углами во время такого процесса. Однако, предположение, лежащее в основе классических теорий роста зерна являются дискуссионными особенно для случая нанокристаллических материалов [8]. Так, эксперименты [9-13] и результаты компьютерного моделирования роста зерен [14, 15] показали, что подвижность тройных стыков границ зерен является конечной величиной. В работах [9-15] 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 (границная 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 модели Швиндлермана Л.С. [9-11] рассматривается миграция тройного стыка вследствие натяжения границ 1 и 2 (имеющих приблизительно равные натяжения), которые «тянут на себя» границу 3. Движение тройного стыка при этом происходит вдоль линии границы 3, а сама граница 3 удлиняется в процессе миграции. Согласно работам Швиндлермана Л.С. с соавторами [9-11], критерием перехода от граничной кинетики к стыковой при миграции тройного стыка является параметр Λ :

$$\Lambda = \frac{2\varphi}{2\cos\varphi - \sigma_3/\sigma}, \quad (3)$$

где φ – двугранный угол в вершине тройного стыка (половина угла между границами 1 и 2), σ – поверхностное натяжение границ 1 и 2 (в модели Швиндлермана Л.С. предполагается, что границы 1 и 2 имеют равные натяжения), σ_3 – поверхностное натяжение границы 3. При $\Lambda \ll 1$ угол $\varphi \rightarrow 0$ и скорость движения системы контролируется подвижностью тройного стыка (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 (режим граничной кинетики). При стыковой кинетике приведенная подвижность тройного стыка по Швиндлерману Л.С. [9-11] определяется по формуле

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

где v – скорость миграции тройного стыка, a – расстояние между границами 1 и 2 в модели Швиндлермана Л.С., A_{0ij} – предэкспоненциальный множитель, H_{ij} – энергия активации миграции стыка, k – постоянная Больцмана, T – температура.

Как видно, в формулах (3) и (4), необходимых для определения относительной подвижности тройных стыков, используется отношение натяжений границ в стыке σ_3/σ . Для применения математической модели миграции тройного стыка при компьютерном моделировании возникает необходимость проведения дополнительных исследований с целью определения отношения σ_3/σ . Настоящая работа посвящена

вычислению отношения σ_3/σ с применением метода молекулярной динамики.

1. Описание модели

Исследование проводилось на примере тройных стыков границ наклона с осями разориентации $\langle 111 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$ в никеле. Отношение натяжений границ в стыке σ_3/σ было найдено двумя методами: с помощью соотношения Янга (уравнение 2) и по значениям энергии стыкующихся границ.

В первом случае проводилось моделирование с помощью метода молекулярной динамики установления равновесного соотношения углов между границами в стыке (рис.2) и определения отношения σ_3/σ через соотношение Янга [5-7]:

$$\frac{\sigma_3}{\sigma} = \frac{\sin\chi_3}{\sin\chi}, \quad (5)$$

где χ_3 – угол между границами 1 и 2 ($\chi_3=2\varphi$), χ – среднее арифметическое углов χ_1 и χ_2 (в модели Швиндлермана предполагается, что углы χ_1 и χ_2 равны) (рис.3).

Расчетный блок создавался в виде цилиндра (рис.2) достаточно большого диаметра для установления равновесных углов между границами. Диаметр расчетных блоков был равен примерно 260 Å. Блоки содержали от 55000 до 59000 атомов. Толщина цилиндрических блоков, напротив, подбиралась небольшой – 6 атомных плоскостей, что позволяло при том же количестве атомов подбирать блоки большего диаметра. Для границ наклона $\langle 111 \rangle$ толщина составляла 12,2 Å, для границ $\langle 100 \rangle$ – 10,6 Å. Всего рассматривалось 8 тройных стыков: для осей разориентации $\langle 111 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$ по 4 различных набора стыкующихся границ: $15^\circ/15^\circ/30^\circ$, $30^\circ/25^\circ/5^\circ$, $30^\circ/20^\circ/10^\circ$, $5^\circ/5^\circ/10^\circ$. Боковая поверхность цилиндрических блоков в процессе компьютерного эксперимента была жестко закреплена (жесткие граничные условия). Вдоль оси Z были наложены периодические граничные условия.

Взаимодействия атомов никеля друг с другом в молекулярно-динамической модели описывались многочастичным потенциалом Клерри-Розато [16]. Данный потенциал хорошо зарекомендовал себя в ряде расчетов структурно-энергетических характеристик металлов, выполненных методом молекулярной динамики [17-31]. Шаг интегрирования по времени в методе молекулярной динамики был равен 5 фс.

Температура в модели задавалась через начальные скорости атомов согласно распределению Максвелла.

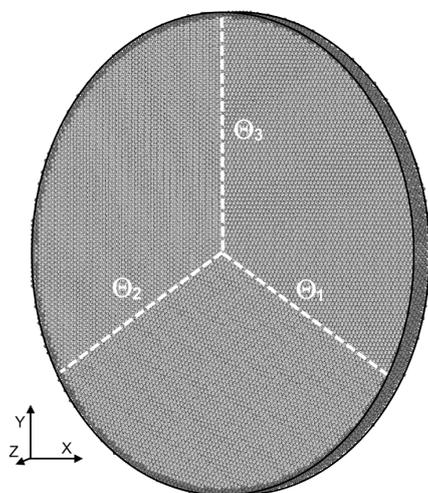


Рис.2. Расчетный блок со стартовой конфигурацией границ в стыке для определения равновесных углов между границами зерен в стыке. Θ_1 , Θ_2 , Θ_3 – углы разориентации зерен

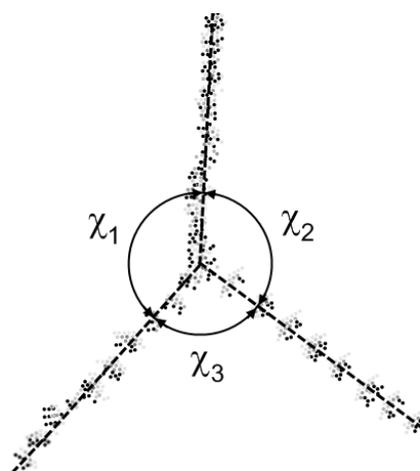


Рис.3. Положение границ определялось с помощью визуализатора средних расстояний до ближайших атомов. На рисунке изображен стык $\langle 111 \rangle$ $15^\circ/15^\circ/30^\circ$ после компьютерного эксперимента в течение 2000 пс при температуре 1700 К

Моделирование проводилось при температуре 1700 К в течение 2000 пс. Этой продолжительности компьютерного эксперимента было достаточно, чтобы при данной температуре установилась равновесная конфигурация границ в тройном стыке. По завершению каждого эксперимента расчетный блок охлаждался до 0 К для изучения конечной структуры и смещений атомов в процессе миграции границ зерен.

2. Результаты и обсуждение

При проведении компьютерных экспериментов были обнаружены интересные особенности, связанные с атомным механизмом изменения длины малоугловой границы 3 – границы, которая удлиняется в результате миграции тройного стыка (вертикальная граница вверху на рисунках 2 и 3). Зарождение и исчезновение зернограницных дислокаций сопровождалось образованием зигзагообразных смещений атомов. На рис.4 изображен пример образования новой зернограницной дислокации при удлинении малоугловой границы 5° в результате миграции большеугловых границ 30° (справа) и 25° (слева). Появление новой дислокации является геометрически необходимым. При постепенном удлинении границы (за счет сокращения большеугловых границ 1 и 2) появление новой оборванной атомной полуплоскости, т.е. краевой дислокации, происходит не в чистом кристалле, а в области другого дефекта: другой дислокации или большугловой границы. На примере, изображенном на рис.4, удвоение вектора Бюргера произошло в существующей зернограницной дислокации. После этого дислокации оттолкнулись друг от друга и разошлись вдоль плоскостей скольжения с образованием зигзагообразных атомных смещений (рис.4б).

Увеличение вектора Бюргера происходило скачкообразно, в связи с чем скачкообразно изменялась скорость миграции стыка и удлинение границы 3. Наблюдалось замедление миграции перед образованием новой зернограницной дислокации и ускорение после.

При моделировании миграции стыка границ наклона $\langle 111 \rangle$ было замечено, что границы с такой осью разориентации мигрируют существенно быстрее границ $\langle 100 \rangle$, что связано, по всей видимости, с отличием энергии образования зернограницных дислокаций в рассматриваемых границах. Вместе с тем механизм удлинения малоугловой границы $\langle 111 \rangle$ был аналогичен механизму удлинения границы $\langle 100 \rangle$. Более того, данный механизм оказался обратим – при сокращении длины малоугловой границы происходил обратный процесс: две дислокации соединялись в одну с последующим скачкообразным уменьшением вектора Бюргера. На рис.5 изображен пример зигзагообразных атомных смещений при сокращении малоугловой границы $\langle 111 \rangle$ 10° при миграции тройного стыка $\langle 111 \rangle$ $5^\circ/5^\circ/10^\circ$.

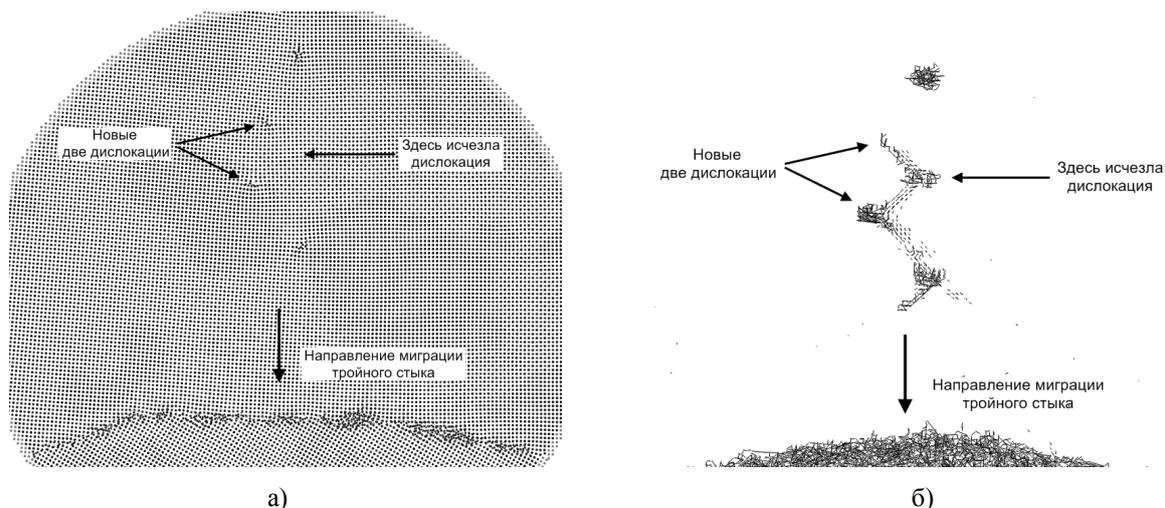


Рис.4. Механизм образования новой зернограничной дислокации при удлинении малоугловой границы наклона $\langle 100 \rangle 5^\circ$ в результате миграции большеугловых границ $\langle 100 \rangle 30^\circ$ (справа) и $\langle 100 \rangle 25^\circ$ (слева): а) часть расчетного блока в проекции на плоскость XY; б) визуализация атомных смещений в той же части расчетного блока

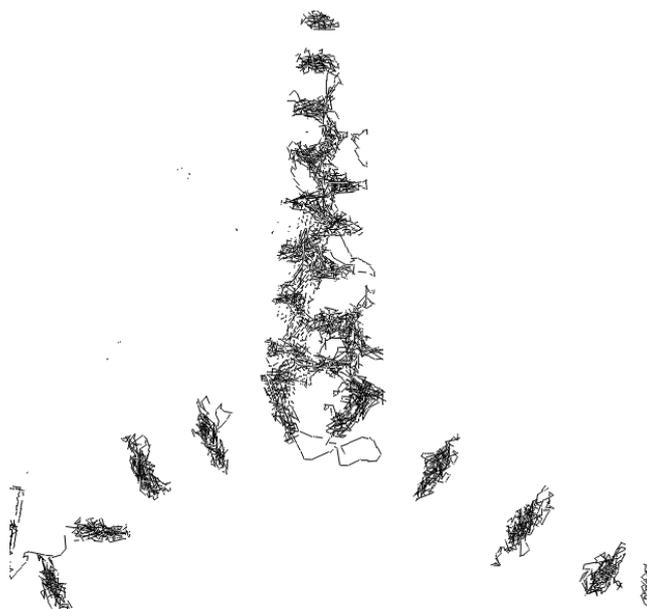


Рис.5. Зигзагообразные атомные смещения при сокращении малоугловой границы $\langle 111 \rangle 10^\circ$ (вертикальная граница сверху) при миграции тройного стыка $\langle 111 \rangle 5^\circ/5^\circ/10^\circ$

Второй метод определения отношения натяжений границ в тройном стыке σ_3/σ заключался в нахождении отношения энергий границ зерен. При этом считалось, что натяжение границы пропорционально ее энергии. Значения энергии границ были взяты из работы [31], где они были рассчитаны с использованием того же потенциала межатомных взаимодействий, что и в настоящей работе. На рис.6 приведены графики зависимостей энергии границ наклона

$\langle 111 \rangle$ (а) и $\langle 100 \rangle$ (б) для металлов Ni, Cu, Al, взятые из работы [31-39].

Данный метод определения отношения σ_3/σ , с нашей точки зрения, является более точным, поскольку в первом методе потенциально возможно больше погрешностей. Тем не менее, как оказалось, согласие между двумя методами достаточно хорошее. В таблице приведены полученные с помощью обоих методов значения отношения σ_3/σ для рассматриваемых тройных стыков.

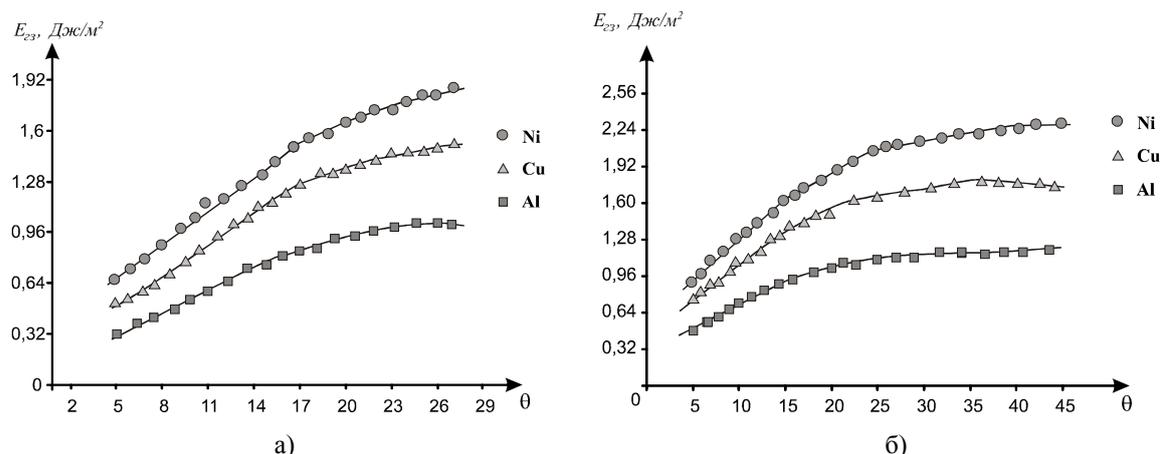


Рис.6. Графики зависимостей энергии границ наклона <111> (а) и <100> (б) от угла разориентации для металлов Ni, Cu, Al, взятые из работы [31]

Таблица. Значения отношения σ_3/σ для рассматриваемых тройных стыков

Ось и углы разориентации стыкующихся границ	$\frac{\chi_3}{\chi}$, модель (I)	$\frac{\sigma_3}{\sigma}$, модель (I)	$\frac{\sigma_3}{\sigma}$, теор. (II)
<111> 15°/15°/30°	94 / 133	1,36	1,32
<100> 15°/15°/30°	112 / 124	1,12	1,29
<111> 30°/25°/5°	155 / 102,5	0,43	0,37
<100> 30°/25°/5°	161 / 99,5	0,33	0,44
<111> 30°/20°/10°	138 / 111	0,71	0,67
<100> 30°/20°/10°	144 / 108	0,62	0,64
<111> 5°/5°/10°	112 / 124	1,12	1,53
<100> 5°/5°/10°	114 / 123	1,09	1,37

Заключение

В настоящей работе рассмотрены два метода определения натяжений границ зерен в тройном стыке с помощью метода молекулярной динамики на примере никеля. Первый метод заключался в поиске равновесного соотношения углов между границами в стыке путем компьютерного моделирования и определения отношения натяжений границ через соотношение Янга. Второй метод заключался в нахождении отношения энергий границ зерен. При этом считалось, что натяжение границы пропорционально ее энергии. Второй метод определения отношения натяжений границ в стыке является более точным, тем не менее, согласие между двумя методами оказалось достаточно хорошее.

При моделировании миграции стыка границ наклона <111> было замечено, что границы с такой осью разориентации мигрируют существенно быстрее границ <100>, что связано, по всей видимости, с отличием энергии образования зернограницных дислокаций в рассматри-

ваемых границах. Вместе с тем механизм удлинения малоугловой границы <111> при миграции тройного стыка был аналогичен механизму удлинения границы <100>. При удлинении малоугловой границы наклона появление новой геометрически необходимой зернограницной дислокации происходило в уже существующем ядре дислокации или в области тройного стыка. При этом вектор Бюргерса изменялся скачкообразно, в связи с чем скачкообразно изменялась скорость миграции стыка и удлинение малоугловой границы. Наблюдалось замедление миграции перед образованием новой зернограницной дислокации и ускорение после. После возникновения новой дислокации в ядре существующей эти две дислокации отталкивались друг от друга и расходились вдоль своих плоскостей скольжения, образуя зигзагообразные смещения атомов.

Данный механизм удлинения малоугловой границы наклона при миграции тройного стыка оказался обратим – при сокращении длины малоугловой границы происходил обратный про-

цесс: две дислокации соединялись в одну с последующим скачкообразным уменьшением вектора Бюргерса.

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 р_а.

Список используемой литературы

1. Штремель М.А. Прочность сплавов. - Ч 1. - Дефекты решетки. - М.: Металлургия, 1982. 280 с.
2. Fortes M.A., Deus A.M. Effects of triple grain junctions on equilibrium boundary angles and grain growth kinetics // *Materials Science Forum*. 2004. V.455-456. P. 648-652.
3. Максимова Е.Л., Страумал Б.Б., Швиндлерман Л.С. Поверхностное натяжение границ наклона [001] в олове в окрестности перехода специальных границ $\Sigma 17$ в границы общего типа // *Физика твердого тела*. 1986. т.28. №10. С. 3059-3065.
4. Perevalova O.B., Konovalova E.V., Koneva N.A., Kozlov E.V. Energy of grain boundaries of different types in fcc solid solutions, ordered alloys and intermetallics with $L1_2$ superstructure // *Journal of Materials Science and Technology*. 2003. V.19. No.6. P. 593-596.
5. Yang C.C., Rollett A.D., Mullins W.W. Measuring relative grain boundary energies and mobilities in an aluminum foil from triple junction geometry // *Scripta Materialia*. - 2001. - V.44. - P. 2735-2740.
6. Rollett A.D., Yang C.C., Mullins W.W. and al. Grain boundary property determination through measurement of triple junction geometry and crystallography // *Int. Conf. on Grain Growth and Recrystallization, Aachen, Germany*. 2001. P. 165-176.
7. Kamachali R.D. Grain boundary motion in polycrystalline materials. Dissertation zur Erlangung des Grades Doktor-Ingenieur, Bochum, Germany, 2012. 119 p.
8. Овидько И.А. Теории роста зерен и методы его подавления в нанокристаллических и поликристаллических материалах // *Физика и механика материалов*. 2009. т.8. С. 174-198.
9. 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.
10. 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.
11. Сурсаева В.Г., Швиндлерман Л.С., Готтштайн Г. Особенности миграции тройных стыков различной конфигурации // *Известия РАН. Серия физическая*. 2007. т.71. №12. С. 1740-1744.
12. Czubayko 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.
13. Gottstein G., Ma Y., Shvindlerman L.S. Triple junction motion and grain microstructure evolution // *Acta Materialia*. 2005. V.53. P. 1535-1544.
14. 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.
15. Gottstein G., Ma Y., Shvindlerman L.S. Triple junction motion and grain microstructure evolution // *Acta Materialia*. 2005. V.53. P. 1535-1544.
16. Cleri F., Rosato V. Tight-binding potentials for transition metals and alloys // *Physical Review B*. 1993. V.48. No.1. P. 22-33.
17. 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.
18. Кулабухова Н.А., Полетаев Г.М., Старостенков М.Д. Взаимодействие атома водорода с краевой дислокацией в Pd и Ni // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2014. т.11. №1. С. 99-104.
19. 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.
20. 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.
21. 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.
22. Полетаев Г.М., Старостенков М.Д. Определение температуры плавления и температурного коэффициента линейного расширения мето-

- дом молекулярной динамики // Фундаментальные проблемы современного материаловедения, 2004. т.1. №1. С. 81-85.
23. 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.
24. 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.
25. 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.
26. Краснов В.Ю., Полетаев Г.М., Старостенков М.Д. Исследование структуры аморфного никеля // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2006. №4. С. 37-45.
27. 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.
28. 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.
29. 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.
30. 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.
31. Полетаев Г.М., Юрьев А.Б., Громов В.Е., Старостенков М.Д. Атомные механизмы структурно-энергетических превращений вблизи границ зерен наклона в ГЦК металлах и интерметаллиде Ni₃Al. – Новокузнецк: изд-во СибГИУ, 2008. 160 с.
32. Захаров П.В., Старостенков М.Д., Медведев Н.Н., Ерёмин А.М., Маркидонов А.В. Антисимметричный дискретный бризер в кристалле Pt₃Al // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2014. т.11. №3. С. 388-392.
33. Потекаев А.И., Дудник Е.А., Старостенков М.Д., Попова Л.А. Термоактивируемые перестройки структуры бинарного сплава Cu₃Au при отклонении от стехиометрического состава // Известия высших учебных заведений. Физика. 2008. т.51. №10. С. 53-63.
34. Потекаев А.И., Дудник Е.А., Старостенков М.Д., Кулагина В.В., Мясниченко В.С. Термоактивируемые перестройки структуры бинарного сплава CuAu при отклонении от стехиометрического состава // Известия высших учебных заведений. Физика. 2010. т.53. №3. С. 3-13.
35. Полетаев Г.М., Старостенков М.Д., Пацева Ю.В. Ведущие механизмы самодиффузии в двумерных металлах // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2004. т.1. №2. С. 124-129.
36. Полетаев Г.М., Старостенков М.Д., Пацева Ю.В. Исследование механизма самодиффузии в двумерных металлах // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2004. т.1. №1. С. 147-151.
37. Санников А.В., Полетаев Г.М., Сосков А.А., Старостенков М.Д. Взаимодействие точечных дефектов с когерентными межфазными границами Ni-Al (100) и (111) // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2014. т.11. №3. С. 317-321.
38. Безносюк С.А., Потекаев А.И., Старостенков М.Д. Теоретические основы компьютерного наноинжиниринга биомиметических наносистем: монография / М. С. Жуковский [и др.] ; Алтайский гос. ун-т [и др.]. Томск, 2011. 236 с.
39. Полетаев Г.М., Дмитриенко Д.В., Старостенков М.Д. Атомная структура тройных стыков границ наклона в никеле // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2012. т.9. №3. С. 344-348.

¹Кузбасский институт ФСИН России, Новокузнецк, Россия.

²Алтайский государственный технический университет, Барнаул, Россия.

³Сибирский государственный индустриальный университет, Новокузнецк, Россия.

Подписано в печать 24.08.17.

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