

**ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ
ПРОБЛЕМЫ
СОВРЕМЕННОГО
МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ**

Научный журнал
Издается с января 2004 г.

Том 16

Сентябрь 2019 г.

№ 3

Фундаментальные проблемы современного материаловедения

том 16 №3 2019 г.

Международный специализированный научный журнал
Выходит ежеквартально
Издается с января 2004 года

Учредитель:

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова»

Соучредители:

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Алтайский государственный педагогический университет»

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Сибирский государственный индустриальный университет»

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Томский государственный архитектурно-строительный университет»

Издатель:

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова»

Адрес издателя: 656038, Алтайский край, г. Барнаул, пр-т Ленина, д. 46

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 Федеральной службе по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций.

Свидетельство о регистрации средства массовой информации: ПИ № ФС77-75026 от 01.02.2019 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: 656038, Алтайский край, г. Барнаул, пр-т Ленина, д. 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, главный научный сотрудник Национального исследовательского технологического университета «МИСиС», 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, зав. кафедрой начертательной геометрии и графики АлтГТУ, г. Барнаул, Россия)

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

Кхаре А.В. (профессор, Индийский институт науки образования и исследований, г. Пуна, Индия)

Мулюков Р.Р. (член корр. РАН, 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, декан факультета математики и информационных технологий АлтГУ, 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)

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. 16 No.3 (2019))

International specialized scientific journal
Issued quarterly
Published since January 2004

Founders:

Federal State Budget Educational Institution of Higher Education «Polzunov Altai State Technical University»
Federal State Budget Educational Institution of Higher Education «Altai State Pedagogical University»
Federal State Budget Educational Institution of Higher Education «Siberian State Industrial University»
Federal State Budget Educational Institution of Higher Education «Tomsk State University of Architecture and Building»

Publisher:

Federal State Budget Educational Institution of Higher Education «Polzunov Altai State Technical University»
Lenin Pr., 46, Barnaul, 656038, Russia

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: guriavam@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, Chief Researcher of the National Research Technological University «MISIS», 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, Head of Department, 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 A.V., PhD, Hab., Professor, Indian Institute of Science Education and Research, Pune, India
Mulyukov R.R., member corr. of RAS, 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, dean, Altai State 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 RAS, Ufa, Russia
Atuchin V.V., PhD, Hab., Institute of Semiconductor Physics SB of RAS, Novosibirsk, Russia

Editorial

Polzunov Altai State Technical University, Lenin Pr., 46, Barnaul, 656038, Russia
www.nsmads.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

Предисловие.....	289
 И.В. Зоря, Г.М. Полетаев, М.Д. Старостенков Энергия связи и миграции примесных атомов углерода, азота и кислорода в кристаллических решетках никеля, серебра и алюминия.....	 291
 И.А. Гармаева, Ш. Мэй, К. Чжэн, Я. Чжан, Б.С. Цыдыпов, Ж.В. Самаев, Б.Д. Лыгденов, А.М. Гурьев Структура и свойства диффузионного слоя при насыщении поверхности среднеуглеродистой стали в смеси, содержащей бор аморфный.....	 298
 Ю.Ф. Иванов, В.Е. Громов, А.М. Глезер, А.А. Юрьев, О.А. Перегудов Механизмы упрочнения поверхности рельсов при мегапластической деформации.....	 303
 В.И. Данилов, В.В. Горбатенко, Д.В. Орлова, Л.В. Данилова Автоволны переключения локализованной пластичности в условиях сверхэластичности.....	 309
 В.Д. Сарычев, А.Ю. Газарин, С.А. Невский, А.Ю. Грановский Моделирование воздействия электрического тока на пластическую деформацию материалов.....	 315
 Л.Б. Зуев Автоволновая природа упругопластического инварианта деформации.....	 323
 С.В. Панин, Нгуен Дык Ань, С.А. Бочкарева, Л.А. Корниенко, Л.Р. Иванова Оптимизация состава композиций на основе полиэфирэфиркетона (ПЭЭК) с заданными трибомеханическими свойствами.....	 331
 Г.С. Партин, Н.А. Кочетова, И.Е. Анимица Оптимизация функциональных свойств кислород-ионного проводника $\text{La}_2\text{Mo}_2\text{O}_9$ методом гетерогенного допирования.....	 339
 И.А. Комиссарова, К.А. Осинцев, Е.Д. Крюкова, С.В. Коновалов, Ю.В. Никитина Влияние электрического потенциала малой величины на микротвердость технически чистого титана.....	 344
 А.В. Маркидонов, В.В. Коваленко, М.Д. Старостенков Компьютерное моделирование процесса укрупнения зерен ГЦК кристаллов при внешних энергетических воздействиях.....	 349
 В.А. Федоров, М.В. Бойцова, Т.Н. Плужникова, Г.В. Новиков, С.В. Васильева Влияние потока β -частиц и УФ излучения на свойства сплавов, находящихся в неравновесном состоянии.....	 355

Д.А. Романов, С.В. Московский, К.В. Соснин, А.Д. Филяков, Е.В. Протопопов Влияние электронно-пучковой обработки на структуру и электроэрозионную стойкость электровзрывных покрытий системы CuO-Ag.....	361
В.В. Муравьев, А.В. Якимов, С.В. Казанцев Распределение остаточных напряжений и скорости головной волны в рельсах.....	370
С.В. Панин, Д.Г. Буслович, Л.А. Корниенко, Ю.В. Донцов, Л.Р. Иванова Двухкомпонентные полимер-полимерные композиции на основе сверхвысокомолекулярного полиэтилена (СВМПЭ) для аддитивных производственных технологий.....	377
Ю.А. Рубанникова, Ю.Ф. Иванов, Д.А. Романов, В.Е. Кормышев Механические и трибологические свойства борированного слоя, наплавленного на низкоуглеродистую сталь.....	387
В.В. Шляров, Д.В. Загуляев Влияние магнитных полей на процесс пластической деформации цветных металлов.....	394
А.А. Голубева, С.В. Коновалов, В.Г. Смелов, Е.А. Носова, К.А. Осинцев, Ю.В. Никитина Градиентный анализ покрытия, полученного селективным лазерным сплавлением порошка жаропрочного сплава на титановую подложку.....	399
Ф.И. Иванов, Ю.А. Захаров, Е.В. Исакова Особенности разложения нитевидных кристаллов азидов тяжелых металлов в электрическом поле и механизм инициирования детонации в поликристаллических образцах.....	407
В.Е. Громов, Д.В. Загуляев, Ю.А. Рубанникова, Е.А. Петрикова Комплексная электронно-ионно-плазменная обработка доэвтектического силумина: структура и свойства поверхности.....	411

Contents

Preface.....	289
I.V. Zorya, G.M. Poletaev, M.D. Starostenkov Binding energy and migration of impurity atoms of carbon, nitrogen and oxygen in the crystal lattices of nickel, silver and aluminum.....	291
I.A. Garmaeva, Sh. Mei, Q. Zhen, J. Zhan, B.S. Tsydypov, Zh.V. Samaev, B.D. Lygdenov, A.M. Guriev Structure and properties of the diffusion layer at saturation of the surface of medium carbon steel in a mixture containing boron amorphous.....	298
Yu.F. Ivanov, V.E. Gromov, A.M. Glezer, A.A. Yur'ev, O.A. Peregudov Rail surface mechanism strengthening at megaplastic deformation.....	303
V.I. Danilov, V.V. Gorbatenko, D.V. Orlova, L.V. Danilova Switching autowaves of localized plasticity under superelasticity.....	309
V.D. Sarychev, A.Yu. Gagarin, S.A. Nevskii, A.Yu. Granovskii Modelling of electric current action on plastic deformation of materials.....	315
L.B. Zuev Autowave nature of the elastic-plastic invariant of strain.....	323
S.V. Panin, Nguen Duk Anh, S.A. Bochkareva, L.A. Kornienko, L.R. Ivanova Content optimization of polyethyrene based composites with prescribed tribomechanical properties.....	331
G.S. Partin, N.A. Kochetova, I.E. Animitsa Optimization of functional properties of $\text{La}_2\text{Mo}_2\text{O}_9$ oxide-ion conductor by heterogeneous doping.....	339
I.A. Komissarova, K.A. Osintsev, E.D. Kryukova, S.V. Konovalov, Yu.V. Nikitina Influence of small electric potential on the microhardness of commercial pure titanium.....	344
A.V. Markidonov, V.V. Kovalenko, M.D. Starostenkov Computer simulation of the enlargement of grains of fcc crystals under external energy influences.....	349
V.A. Fedorov, M.V. Boitsova, T.N. Pluzhnikova, G.V. Novikov, S.V. Vasilyeva The effect of β -particles and UV radiation on the properties of alloys in a nonequilibrium state.....	355
D.A. Romanov, S.V. Moskovskii, K.V. Sosnin, A.D. Filyakov, E.V. Protopopov The effect of electron-beam processing on the structure and electrical discharge resistance of electric blasting coatings of the CuO-Ag system.....	361

V.V. Murav'ev, A.V. Yakimov, S.V. Kazantsev

Distribution of residual stresses and speed of a creep wave in rails.....370

S.V. Panin, D.G. Buslovich, L.A. Kornienko, Yu.V. Dontsov, L.R. Ivanova

Two-component polymer composites based on ultra high molecular weight polyethylene (UHMWPE) for additive manufacturing.....377

Yu.A. Rubannikova, Yu.F. Ivanov, D.A. Romanov, V.E. Kormyshev

Mechanical and tribological properties of boron layer welded on low carbon steel.....387

V.V. Shlyarov, D.V. Zagulyaev

Effect of magnetic fields on the process of plastic deformation of non-ferrous metals.....394

A.A. Golubeva, S.V. Kononov, V.G. Smelov, E.A. Nosova,

K.A. Osintsev, Yu.V. Nikitina

Gradient analysis of the coating obtained by selective laser melting the powder of heat-resistant alloy on a titanium substrate.....399

F.I. Ivanov, Y.A. Zakharov, E.V. Isakova

Features of decomposition of thread azides of heavy metals in the electric field and the mechanism of initiation of detonation in polycrystalline samples.....407

V.E. Gromov, D.V. Zagulyaev, Yu.A. Rubannikova, E.A. Petrikova

Complex electron-ion-plasma processing of hypoeutectic silumin: structure and properties of surface..411

Предисловие

«ПРОЧНОСТЬ И ПЛАСТИЧНОСТЬ МАТЕРИАЛОВ ПРИ ВНЕШНИХ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ВОЗДЕЙСТВИЯХ»



Сибирский государственный индустриальный университет

Данный выпуск журнала посвящен 90-летию кафедры физики им. проф. В.М. Финкеля Сибирского государственного индустриального университета и ее научной школе «Прочность и пластичность материалов при внешних энергетических воздействиях». Кафедра физики является мощным научно-педагогическим коллективом с оригинальной физической тематикой, посвященной проблемам прочности и пластичности твердых тел. Этот процесс становления генетически связан с руководством кафедрой профессором Виктором Моисеевичем Финкелем, чье имя она сейчас носит. Его приемники: профессор Лев Борисович Зуев и нынешний заведующий профессор Виктор Евгеньевич Громов сохранили и преумножили научно-исследовательские традиции коллектива кафедры физики.

Школа органично объединяет три научных направления: фундаментальное (изучение физических механизмов внешних электромагнитных воздействий на прочность и пластичность материалов), прикладное (использование достижений физического материаловедения в современных технологиях обработки металлов давлением) и методическое (аппаратурное обеспечение экспериментов в области физики прочности и пластичности). Таким образом, свое 90-летие кафедра встречает достойно с обоснованной уверенностью в будущем.

Выяснение физических механизмов формирования и эволюции структурно-фазовых состояний и дислокационной субструктуры в сталях и сплавах при внешних энергетических воздействиях – одна из важнейших задач физики твердого тела. Экспериментальные исследования структур и фазового состава, формирующихся в сечении изделий в результате таких воздействий, очень важны для понимания физической природы превращений, поскольку позволяют целенаправленно из-

менять структуру и эксплуатационные параметры изделий. При этом получение необходимого комплекса высоких прочностных и пластических свойств требует понимания физических механизмов и природы структурно-фазовых изменений на всех масштабных условиях – от макро до нано. Значительная роль в решении фундаментальных и прикладных задач принадлежит теоретическим подходам и модельным представлениям.

Спектр способов внешних энергетических воздействий достаточно широк: традиционные виды химико-термической и термомеханической обработок, лазерная, плазменная, ультразвуковая обработка, электронные и ионные пучки и т.д. Способы поверхностного модифицирования, использующие концентрированные потоки энергии, такие как лазерное излучение, мощные электронные и ионные пучки, плазменные потоки и струи, являются очень экономичными. Они позволяют проводить обработку локально, т.е. в тех местах, которые непосредственно испытывают разрушение в процессе эксплуатации детали. Один из таких конструктивно простых способов, получивших развитие в последнее десятилетие, состоит в легировании поверхности импульсными плазменными струями, формируемыми при электрическом взрыве проводников. Электровзрывное легирование (ЭВЛ) проводится с оплавлением поверхности, а распределение легирующих элементов по глубине осуществляется конвективными процессами. Улучшение качества поверхности после ЭВЛ эффективно достигается при дополнительной электронно-пучковой обработке.

Слабые и сильные электромагнитные поля и токи вот уже на протяжении последних 50 лет являются эффективным инструментом управления прочностью и пластичностью. Огромный объем выполненных исследований показал актуальность и практическую значимость этих методов в физике конденсированного состояния.

Получение покрытий с высокими эксплуатационными характеристиками, обеспечивающими повышение надежности и долговечности работы изделий в экстремальных условиях, характеризующихся повышенными механическими нагрузками, износом, коррозией, наличием агрессивных сред и циклическим воздействием, является фундаментальной задачей.

Особенность всех статей в том, что они идейно и стилистически находятся в рамках научной школы кафедры физики, и их логически легко отнести к трем названным направлениям.

УДК 538.911

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА УКРУПНЕНИЯ ЗЕРЕН ГЦК КРИСТАЛЛОВ ПРИ ВНЕШНИХ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ВОЗДЕЙСТВИЯХ

А.В. Маркидонов^{1,2†}, В.В. Коваленко¹, М.Д. Старостенков³

[†]markidonov_artem@mail.ru

¹Сибирский государственный индустриальный университет, ул. Кирова, 42, 654007, Новокузнецк, Россия

²Новокузнецкий институт (филиал) Кемеровского государственного университета, ул. Циолковского, 23, 654041, Новокузнецк, Россия

³Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова, пр. Ленина, 46, 656038, Барнаул, Россия

Данная статья посвящена исследованию методом молекулярной динамики атомных механизмов укрупнения зерен кристаллов с ГЦК решеткой, осуществляемых путем миграции межзеренных границ, инициированной ударными послекасадными волнами. Возникновение данных волн обусловлено воздействием на поверхность твердого тела высокоэнергетическими частицами. Моделирование проводилось с помощью пакета XMD. Межчастичное взаимодействие описывалось с помощью потенциала, построенного с применением метода погруженного атома, базирующегося на квантово-механической теории функционала электронной плотности. Рассматривались модели кристаллов, содержащих границы зерен наклона, кручения и смешанного типа. Проведенное исследование показало, что инициированный ударными волнами рост зерен наблюдается при создании в расчетной ячейке деформации растяжения. В случае наличия границы зерен кручения миграция границы осуществляется по двум основным механизмам, каждый из которых становится доминирующим при определенных углах разориентации зерен. Первый, характерный для малоугловых границ, заключается в кооперативных атомных смещениях по кольцевым траекториям вдоль зернограницных дислокаций, приводящим к повороту атомной плоскости одного из зерен. Второй механизм, наблюдаемый при большеугловых границах, заключается в локальной аморфизации структуры первого зерна с последующей кристаллизацией на втором зерне. При рассмотрении границы зерен наклона миграция наблюдается в случае зарождения поры при локализации избыточного свободного объема в межзеренной области. Поэтому для упрощения реализации данного механизма при моделировании в одно из зерен вводились вакансии. Отличительной чертой механизма миграции границы зерен наклона под воздействием ударных волн является возможность его реализации при температурах, недостаточных для активации диффузионных процессов. Миграция границы зерен смешанного типа осуществляется по механизмам, характерным как для границы зерен наклона так и кручения.

Ключевые слова: моделирование, зерно, граница, миграция, волна, деформация.

COMPUTER SIMULATION OF THE ENLARGEMENT OF GRAINS OF FCC CRYSTALS UNDER EXTERNAL ENERGY INFLUENCES

A.V. Markidonov^{1,2†}, V.V. Kovalenko¹, M.D. Starostenkov³

[†]markidonov_artem@mail.ru

¹Siberian State Industrial University, Kirov Str., 42, Novokuznetsk, 654007, Russia

²Novokuznetsk Branch-Institute of Kemerovo State University, Tsiolkovskii Str., 23, Novokuznetsk, 654041, Russia

³I.I. Polzunov Altai State Technical University, Lenin Pr., 46, Barnaul, 656038, Russia

This article is devoted to the study by molecular dynamics of the atomic mechanisms of the enlargement of crystal grains with an fcc lattice, carried out by the migration of grain boundaries initiated by shock after-cascade waves. The occurrence of these waves is due to the action on the surface of a solid by high-energy particles. Modeling was carried out using the XMD package. Interparticle interaction was described using a potential constructed using the immersed atom method, based on the quantum mechanical theory of the electron density functional. Models of crystals containing grain boundaries of tilt, torsion, and mixed type were considered. The study showed that grain growth initiated by shock waves is observed when tensile strain is created in the calculated cell. In the case of the boundary of torsion grains, the migration of the boundary is carried out according to two main mechanisms, each of which becomes dominant at certain angles of grain disorientation. The first, characteristic of small-angle boundaries, consists in cooperative atomic displacements along annular trajectories along grain-boundary dislocations, leading to a rotation of the atomic plane of one of the grains. The second mechanism observed at high-angle boundaries is local amorphization of the structure of the first grain, followed by crystallization on the second grain. When considering the grain boundary of the slope, migration is observed in the case of pore nucleation upon localization of the excess free volume in the intergranular region. Therefore, to simplify the implementation of this mechanism during modeling, vacancies were introduced into one of the grains. A distinctive feature of the mechanism of migration of the grain boundary of the slope under the influence of shock waves is the possibility of its implementation at temperatures insufficient to activate diffusion processes. Mixed grain boundary migration is carried out by mechanisms characteristic of both the grain boundary of tilt and torsion.

Keywords: modeling, grain, border, migration, wave, deformation.

Введение

Границы зерен играют немаловажную роль при рассмотрении различных радиационно-стимулированных явлений. Так, например, известно, что образующиеся в результате воздействия на поверхность твердого тела ускоренными частицами межузельные атомы мигрируют к стокам, которыми являются границы зерен, и образуют сегрегации, закрепляющие дислокации, и тем самым способствуя росту предела текучести облученного материала. При повышении температуры увеличивается диффузионная подвижность вакансий и по границам зерен формируется пористость, являющаяся причиной радиационного охрупчивания.

Увеличение размеров зерен может отрицательно сказываться на свойствах нанокристаллов. Основным механизмом роста является миграция границ и слияние зерен в результате термообработки или механического деформирования [1]. Кроме того, существуют экспериментальные свидетельства миграции границ в результате облучения высокоэнергетическими частицами [2-4].

Несмотря на важность осуществления контроля над процессом увеличения размеров зерен при внешнем воздействии некоторые детали механизма миграции границ на атомном уровне не совсем понятны, поэтому необходимо более тщательное его изучение, в том числе с использованием возможностей современных вычислительных машин. Как правило, считается, что миграции границы способствует наличие на ней подвижных дефектов, таких как вакансии, примеси или дислокации, но существуют работы, в которых миграция границ наблюдалась без участия дефектов [5]. С помощью только экспериментальных методов исследования, по-видимому, не удастся получить информацию о механизмах миграции отдельно взятой границы, так как при исследовании роста зерен результаты представляют собой усреднение данных по большому числу зерен. Поэтому для проведения подобного исследования предпочтительней использовать компьютерное моделирование.

Необходимо оговорить, что по современным представлениям воздействие потока высокоэнергетических частиц на твердое тело сопровождается образованием ударных послекаскадных волн [6], формирующихся в результате резкого расширения сильно разогретой каскадной области. Этот эффект обусловлен разницей во времени термализации атомных колебаний в рассматриваемой конечной области и отвода от

нее тепла. Роль подобных волн в различных радиационно-стимулированных явлениях не до конца понятна, и поэтому требуются дополнительные исследования. Ранее были проведены исследования [7-10] в которых получены результаты, свидетельствующие о возможности модификации дефектной структуры кристалла ударными послекаскадными волнами путем перемещения отдельных дефектов, даже при температурах, когда диффузионные процессы не активны.

Целью представленной работы является определение с помощью метода молекулярной динамики атомных механизмов миграции межузельных границ под воздействием ударных волн, генерируемых в кристалле.

1. Методика исследования

Исследование проводилось с помощью метода молекулярной динамики на расчетной ячейке, моделирующей кристалл никеля. В качестве потенциальной функции межатомного взаимодействия использовался потенциал Джонсона, рассчитанный в рамках метода погруженного атома. Температура расчетной ячейки задавалась путем присвоения атомам случайных скоростей в соответствии с распределением Максвелла-Больцмана для указанной температуры. Шаг численного интегрирования уравнений движения равнялся 5 фс. Компьютерный эксперимент проводился на расчетной ячейке, оси которой соответствовали кристаллографическим направлениям $[1\bar{1}0]$, $[11\bar{2}]$ и $[111]$. Параметр решетки равнялся 3.52 Å. При проведении вычислений использовался пакет XMD и программа визуализации OVITO.

Расчеты проводились на моделях трех типов, содержащих границу наклона, кручения и смешанного типа. Для конструирования границы зерен наклон применялась методика, изложенная в [11]. Граница зерен общего типа создавалась путем разбиения расчетной ячейки в форме параллелепипеда на две части и поворота их относительно друг друга вдоль оси $[111]$, которая параллельна плоскости создаваемой границы, на некоторый угол $\theta/2$. Получившиеся зерна сближались на расстояние, при котором потенциальная энергия расчетной ячейки минимальна, после чего следовала процедура релаксации. При создании границы зерен кручения использовалась методика, аналогичная предложенной в работе [12]. Для этого осуществлялся поворот двух частей, на которые разбивалась расчетная ячейка цилиндрической

формы, в противоположные стороны относительно друг друга на некоторый угол $\gamma/2$ вдоль оси $[1\bar{1}0]$, являющейся перпендикулярной плоскости создаваемой границы. При создании границы зерен смешанного типа использовались обе методики, в результате чего одно из зерен цилиндрической расчетной ячейки поворачивалось на углы θ и γ вдоль оси, являющейся параллельной и перпендикулярной создаваемой границы соответственно. В каждой модели поликристалла сохранение геометрии расчетной ячейки достигалось использованием комбинации жестких и периодических граничных условий. Проверка адекватности построенных моделей осуществлялась путем расчета удельной энергии, отнесенной к единице площади границы, которая вычислялась как разность энергии расчетной ячейки, содержащей границу зерен, и энергии идеальной расчетной ячейки, состоящей из того же числа атомов. Полученные значения не противоречили данным, представленным в работах сторонних авторов, и поэтому было принято решение о возможности их использования.

Ударная волна, по аналогии с методикой в работе [13], создавалась путем выделения в расчетной ячейке кристаллографической плоскости $(1\bar{1}0)$, содержащей граничные атомы, и присвоения им равной по величине скорости, превышающей скорость продольных звуковых волн, вектор которой ориентирован по нормали к выделенной плоскости. Выбор плотноупакованного кристаллографического направления обусловлен наличием механизма фокусировки энергии, в результате которого сферическая волна трансформируется во фрагменты плоских волн, распространяющихся именно вдоль таких направлений. В результате последующих атомных соударений формируется бегущая волна, ширина фронта которой не превышает нескольких межатомных расстояний, а амплитуда смещений атомов значительно превосходит амплитуду тепловых колебаний. При этом для того чтобы исключить рост температуры расчетной ячейки, возникающий при создании ударной волны, использовался пропорциональный термостат.

2. Результаты исследования и их обсуждение

В результате проведенного исследования выяснилось, что построенные модели поликристаллов остаются стабильными при генерации в них ударных волн в широком диапазоне температуры расчетной ячейки, и процесс миграции

границы зерен не наблюдается. Активировать данный процесс возможно с помощью дополнительных напряжений в расчетной ячейке, создавая в ней деформацию растяжения. Так, например, граница зерен кручения при создании подобных деформаций и поддержании температуры расчетной ячейки не ниже половины температуры плавления начинает мигрировать по направлению к источнику генерации волн, в результате чего осуществляется рост одного из зерен. Увеличение числа генерируемых ударных волн приводит к большему росту зерна. Так на рис.1 представлены срезы атомных плоскостей расчетной ячейки, демонстрирующие последовательный рост зерна. Отметим, что повороту всей атомной плоскости препятствует использование жестких граничных условий.

Молекулярно-динамическое моделирование показало, что существует два атомистических механизма миграции границы зерен кручения. При малых углах разориентации миграция осуществляется путем кооперативных смещений групп атомов вдоль ядер зернограничных дислокаций. Данный процесс приводит к повороту атомной плоскости на угол γ . Для большеугловых границ зерен, когда ядра дислокаций начинают перекрываться, доминирующим механизмом миграции границы становится локальная аморфизация структуры, возникающая при прохождении ударной волны по зернограничной области, с последующей вторичной кристаллизацией на втором зерне.

Процесс миграции границы зерен наклона удалось активировать ударными волнами при более низких температурах расчетной ячейки, но при этом одним из необходимых условий являлось присутствие в ячейке вакансий. Так, например, если в одном из зерен имеется некоторое число вакансий, распределенных случайным образом, а во втором зерне генерируется ударная волна, то после ее прохождения наблюдается смещение вакансий по направлению к границе зерен, не смотря на то, что температура расчетной ячейки не достаточна для термоактивации диффузии. В случае возбуждения нескольких волн, вакансии начинают оседать на зернограничных дислокациях с последующей делокализацией. Деформация всестороннего растяжения способствует направленному дрейфу вакансий и порообразованию в зернограничной области, что дополнительно облегчается тем, что свободный объем границы, обособляющий зерна друг от друга, создает растягивающие напряжения. Как показано в работе [14] наибольшей устойчивостью в зерногра-

ничной области обладает пора, пересекающая ядра дислокаций. Поэтому после генерации нескольких ударных волн и последующей релаксации структуры, наблюдалось перемещение зародыша поры по направлению к источнику волн, после чего экстраплоскость дислокации «прорастает» вглубь кристалла, что значительно упрощается в условиях растяжения. В дальнейшем начинает происходить скольжение дислокаций, удаленных от поры, стремящихся выстроиться в вертикальную стенку, в резуль-

тате чего наблюдается выгибание границы. Последующее смещение группы освобожденных решеточных дислокаций вызывает локальную пластическую деформацию и образование удлиненного зерна (см. рис.2а). Кроме того, при увеличении величины деформации, например до $\varepsilon = 4\%$, пора формируется на месте стыка зерен, и, смещаясь под действием создаваемых ударных волн, также способствует росту зерна (см. рис.2.б).

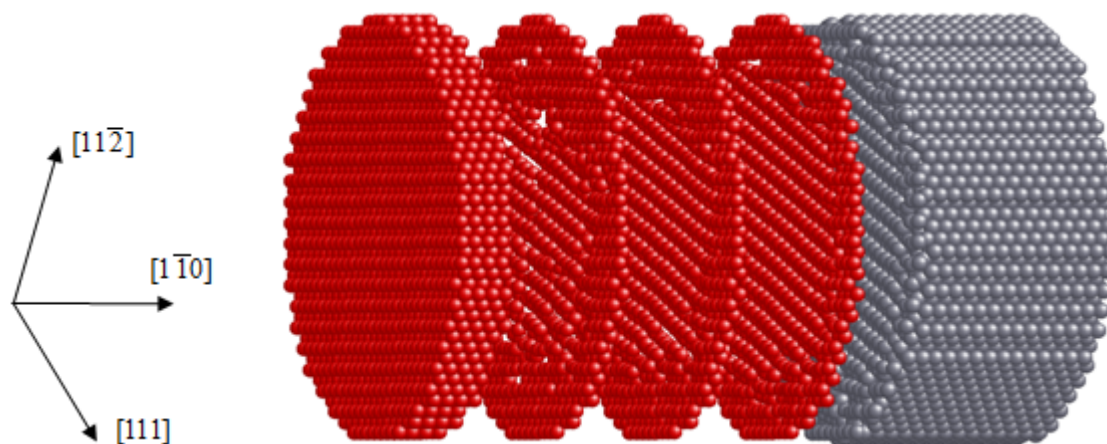


Рис.1. Срезы плоскостей $(1\bar{1}0)$ одного из зерен расчетной ячейки ($\gamma = 20^\circ$) после прохождения четырех ударных волн, генерируемых через 2.5 пс вычислений, при всесторонней деформации, равной по величине 4%. Поддерживаемая температура системы равна 900 К

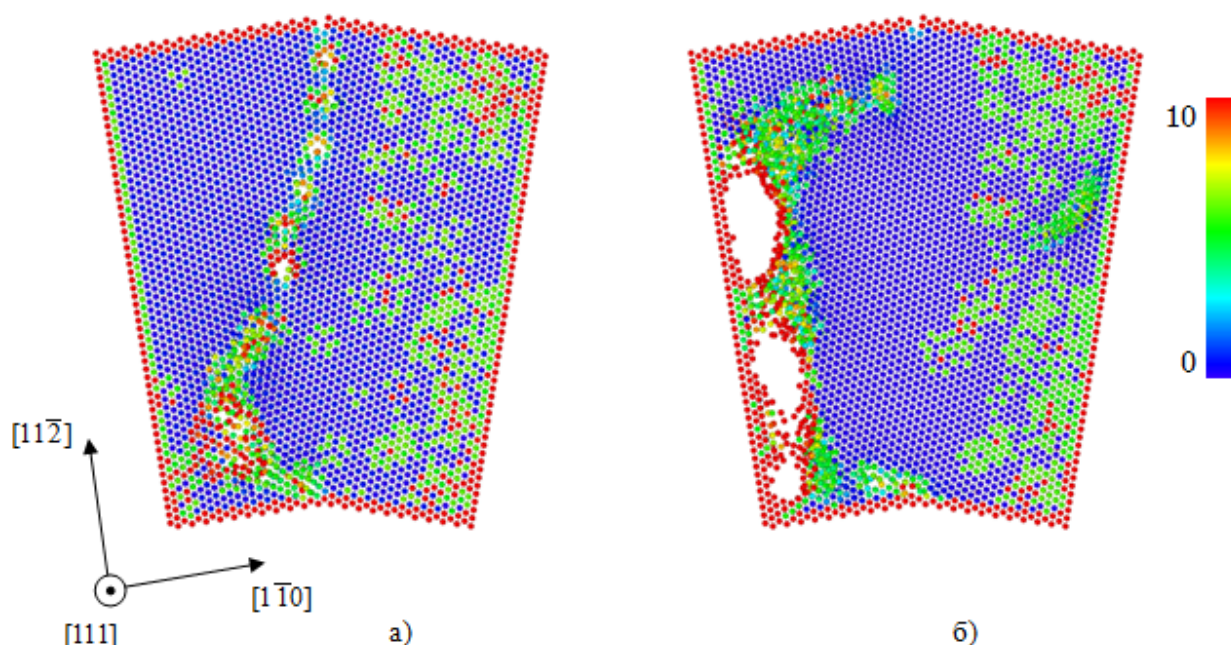


Рис.2. Фрагмент плоскости (111) расчетной ячейки, содержащей границу зерен с углом разориентации $\theta = 18^\circ$, после прохождения десяти ударных волн, генерируемых через 2.5 пс, при всесторонней деформации, равной по величине 3% (б) и 4% (в). Поддерживаемая температура системы равна 300 К. Цветовая визуализация выполнена на основе расчета параметра центральной симметрии [15]

Миграция границы зерен смешанного типа реализуется с помощью комбинации механизмов, описанных выше. Под воздействием ударных волн наблюдается одновременный поворот одного из зерен и смещение зернограницных дислокаций по направлению к источнику волн.

Доминирование каждого из механизмов зависит от величины углов θ и γ . Если $\theta \gg \gamma$, то более заметно смещение стенки дислокаций, а если $\theta \ll \gamma$, – то повороты атомных плоскостей (см. рис.3).

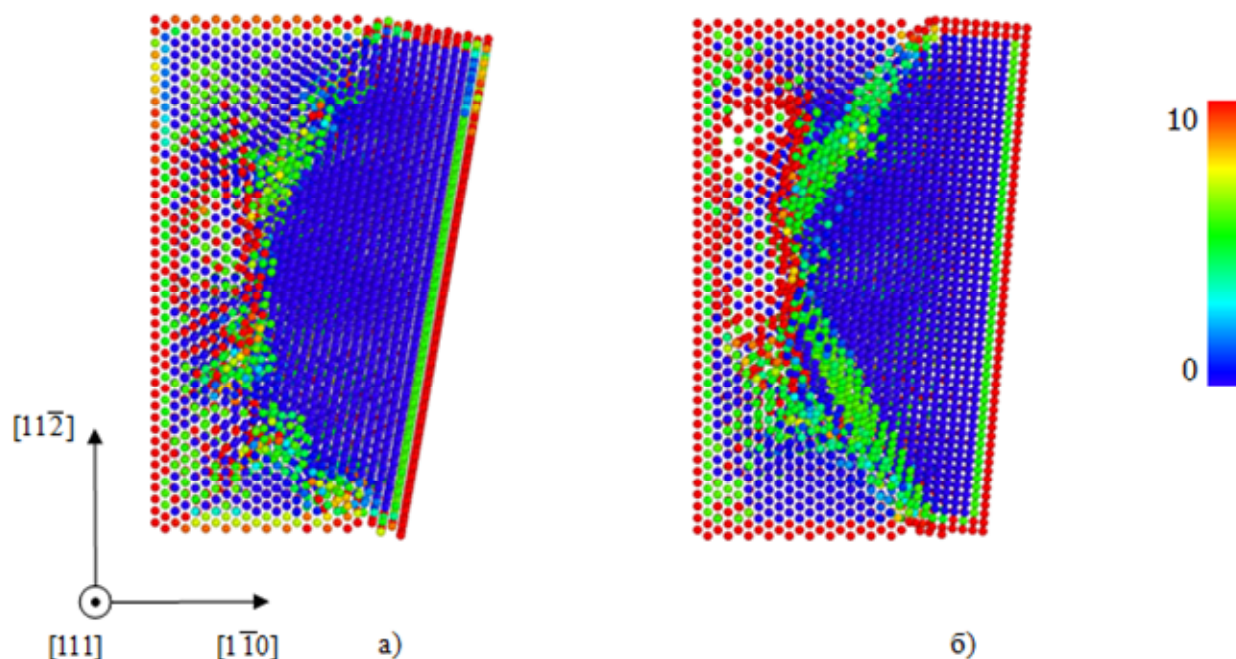


Рис.3. Фрагмент плоскости (111) расчетной ячейки, содержащей границу зерен с углами разориентации $\gamma = 5^\circ$, $\theta = 10^\circ$ (а) и $\gamma = 10^\circ$, $\theta = 5^\circ$ (б) после прохождения десяти ударных волн, генерируемых через 2.5 пс, при всесторонней деформации, равной по величине 4%. Поддерживаемая температура системы равна 900 К. Цветовая визуализация выполнена на основе расчета параметра центральной симметрии

В конце необходимо оговорить следующее. В работе [16] предложена теоретическая модель, согласно которой испускание границами зерен частичных дислокаций Шокли является энергетически выгодным процессом. Анализ построенных моделей с помощью метода, предложенного в работе [17], также показал образование большого числа сегментов частичных дислокаций Шокли в зернограницной области при миграции границ смешанного типа, которое уменьшается по мере увеличения угла θ . Таким образом, можно сделать вывод, что полученные результаты не противоречат известным теоретическим моделям.

Закключение

Результаты моделирования свидетельствуют о возможности инициации миграции межзеренных границ воздействием на них ударных послекаскадных волн, что приводит к укрупнению зерен ГЦК кристалла. При этом для границ

наклона и кручения существуют различные атомные механизмы миграции. Для границ смешанного типа проявление каждого из механизмов зависит от углов разориентации. Результаты моделирования могут быть использованы в радиационном материаловедении, нанотехнологии, при ультразвуковой обработке материалов и построении новых математических моделей.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Администрации Алтайского края в рамках научного проекта №18-42-220002 p_a.

Список используемой литературы

1. Овидько И.А. Теории роста зерен и методы его подавления в нанокристаллических и поликристаллических материалах // Materials Physics and Mechanics. – 2009. – V.8, No.2. – P. 174–199.
2. Horita Z., Smith D.J., Furukawa M., Nemoto M., Valiev R.Z., Langdon T.G. High-resolution

- electron microscopy observations of grain boundary structures in submicrometer-grained Al-Mg alloys // *Materials Science Forum*. – 1996. – V.204-206. – P. 437–442.
3. Dey S., Mardinly J., Wang Y., Valdez J.A., Holesinger T.G., Uberuaga B.P., Ditto J.J., Drazin J.W., Castro R.H.R. Irradiation-induced grain growth and defect evolution in nanocrystalline zirconia with doped grain boundaries // *Physical Chemistry Chemical Physics*. – 2016. – V.18, No.18. – P. 16921–16929.
4. Jian L., Liu J.C., Mayer J.W. Ar⁺ ion irradiation induced grain growth in Au and Pt thin films // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*. – 1989. – V.36, No.3. – P. 306–311.
5. Jhan R.J., Bristowe P.D. A molecular dynamics study of grain boundary migration without the participation of secondary grain boundary dislocations // *Scripta Metallurgica et Materialia*. – 1990. – V.24, No.7. – P. 1313–1318.
6. Овчинников В.В. Радиационно-динамические эффекты. Возможности формирования уникальных структурных состояний и свойств конденсированных сред // *Успехи физических наук*. – 2008. – Т.178, №9. – С. 991–1001.
7. 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, В.8. – С. 1521–1524.
8. Маркидонов А.В., Старостенков М.Д., Смирнова М.В., Коваленко В.В., Захаров П.В. Влияние ударных послекаскадных волн на динамику краевой дислокации // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. – 2014. – Т.11, №4. – С. 461–469.
9. Маркидонов А.В., Старостенков М.Д. Радиационно-динамические процессы в ГЦК кристаллах, сопровождающиеся высокоскоростным массопереносом. – Кемерово: Кузбассвузиздат, 2014 – 191 с.
10. Маркидонов А.В., Захаров П.В., Старостенков М.Д., Медведев Н.Н. Механизмы кооперативного поведения атомов в кристаллах. – Новокузнецк: филиал КузГТУ в г. Новокузнецке, 2016. – 219 с.
11. Markidonov A.V., Starostenkov M.D., Tabakov P.Y. Splitting Vacancy Voids in the Grain Boundary Region by a Post-Cascade Shock Wave // *Materials Physics and Mechanics*. – 2013. – V.18, No.2. – P. 148–155.
12. Полетаев Г.М., Мартынов А.Н., Старостенков М.Д. Структура и энергия границ зерен кручения в ГЦК металлах // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. – 2010. – Т.7, №4. – С. 27–34.
13. Маркидонов А.В., Старостенков М.Д., Яшин А.В. Структурные трансформации вакансионной поры при радиационном облучении материала // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. – 2013. – Т.10, №1. – С. 12–20.
14. Маркидонов А.В., Старостенков М.Д., Павловская Е.П., Яшин А.В., Медведев Н.Н., Захаров П.В., Ситников А.А. Расщепление вакансионной поры в зернограничной области ударной послекаскадной волной // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. – 2013. – Т.10, №3. – С. 443–453.
15. Kelchner C.L., Plimpton S.J., Hamilton J.C. Dislocation nucleation and defect structure during surface indentation // *Physical Review B*. – 1998. – V.58, No.17. – P. 11085–11088.
16. Гудкин М.Ю., Овидько И.А., Скиба Н.В. Эмиссия частичных дислокаций границами зерен в нанокристаллических материалах // *Физика твердого тела*. – 2004. – Т.46, В.11. – С. 1975–1985.
17. Stukowski A., Bulatov V.V., Arsenlis A. Automated identification and indexing of dislocations in crystal interfaces // *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. – 2012. – V.20, No.8. – P. 085007-16.

Поступила в редакцию 16.09.19.

Сведения об авторах

Маркидонов Артем Владимирович, д.ф.-м.н., доцент СибГИУ, зав. кафедрой НИ (филиала) КемГУ, markidonov_artem@mail.ru
Коваленко Виктор Викторович, д.ф.-м.н., проф. СибГИУ, vikt.kowalencenko@yandex.ru
Старостенков Михаил Дмитриевич, д.ф.-м.н., проф., зав. кафедрой АлтГТУ, genphys@mail.ru

Отпечатано в типографии АлтГТУ. Адрес: 656038, Алтайский край, г. Барнаул, пр. Ленина, д. 46

Сдано в набор 15.08.2019 г. Подписано в печать 28.08.2019 г. Дата выхода в свет 10.10.2019 г.
Формат 60х84 1/8 Бумага офсет Гарнитура Таймс Печать цифровая
Усл. печ. л. / Тираж 250 экз. Заказ № 256