

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РФ

ИЗВЕСТИЯ

ВЫСШИХ УЧЕБНЫХ ЗАВЕДЕНИЙ

ЧЕРНАЯ МЕТАЛЛУРГИЯ

№ 4, 2017

Издается с января 1958 г. ежемесячно

Том 60

ИЗВЕСТИЯ

ВЫСШИХ УЧЕБНЫХ ЗАВЕДЕНИЙ

ЧЕРНАЯ МЕТАЛЛУРГИЯ

Главный редактор: ЛЕОНТЬЕВ Л.И.
(Российская Академия Наук, г. Москва)

Заместитель главного редактора: ПРОТОПОПОВ Е.В.
(Сибирский государственный индустриальный университет, г. Новокузнецк)

Ответственный секретарь: ПОЛУЛЯХ Л.А.
(Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», г. Москва)

Заместитель ответственного секретаря: БАЩЕНКО Л.П.
(Сибирский государственный индустриальный университет, г. Новокузнецк)

Члены редакционной коллегии:

АЛЕШИН Н.П. (Российская Академия Наук, г. Москва)
АСТАХОВ М.В. (Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», г. Москва)
АШИХМИН Г.В. (ОАО «Институт Цветмет-обработка», г. Москва)
БАЙСАНОВ С.О. (Химико-металлургический институт им. Ж.Абишева, г. Караганда, Республика Казахстан)
БЕЛОВ В.Д. (Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», г. Москва)
БРОДОВ А.А., редактор раздела «**Экономическая эффективность металлургического производства**» (ФГУП «ЦНИИчермет им. И.П. Бардина», г. Москва)
ВОЛЫНКИНА Е.П. (Сибирский государственный индустриальный университет, г. Новокузнецк)
ГЛЕЗЕР А.М. (Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», г. Москва)
ГОРБАТЮК С.М. (Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», г. Москва)
ГРИГОРОВИЧ К.В., редактор раздела «**Металлургические технологии**» (Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова РАН, г. Москва)
ГРОМОВ В.Е. (Сибирский государственный индустриальный университет, г. Новокузнецк)
ДМИТРИЕВ А.Н. (Институт металлургии УрО РАН, г. Екатеринбург)
ДУБ А.В. (ЗАО «Наука и инновации», г. Москва)
ЖУЧКОВ В.И. (Институт металлургии УрО РАН, г. Екатеринбург)
ЗИНГЕР Р.Ф. (Институт Фридриха-Александра, Германия)
ЗИНИГРАД М. (Институт Ариэля, Израиль)
ЗОЛОТУХИН В.И. (Тульский государственный университет, г. Тула)

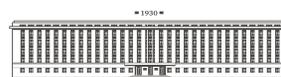
КОЛМАКОВ А.Г. (Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова РАН, г. Москва)
КОЛОКОЛЬЦЕВ В.М. (Магнитогорский государственный технический университет, г. Магнитогорск)
КОСТИНА М.В. (Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова РАН, г. Москва)
КОСЫРЕВ К.Л. (АО «НПО «ЦНИИТМаш», г. Москва)
КУРГАНОВА Ю.А. (МГТУ им. Н.Э. Баумана, г. Москва)
КУРНАНОВ В.В. (Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», г. Москва)
ЛАЗУТКИН С.С. (ГК «МетПром», г. Москва)
ЛИНН Х. (ООО «Линн Хай Терм», Германия)
ЛЫСАК В.И. (Волгоградский государственный технический университет, г. Волгоград)
МЫШЛЯЕВ Л.П. (Сибирский государственный индустриальный университет, г. Новокузнецк)
НИКУЛИН С.А. (Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», г. Москва)
НУРУМГАЛИЕВ А.Х. (Карагандинский государственный индустриальный университет, г. Караганда, Республика Казахстан)
ОСТРОВСКИЙ О.И. (Университет Нового Южного Уэльса, Сидней, Австралия)
ПОДГОРОДЕЦКИЙ Г.С., редактор раздела «**Ресурсосбережение в черной металлургии**» (Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», г. Москва)
ПЫШМИНЦЕВ И.Ю., редактор раздела «**Инновации в металлургическом и лабораторном оборудовании, технологиях и материалах**» (Российский научно-исследовательский институт трубной промышленности, г. Челябинск)

РАШЕВ Ц.В., редактор раздела «**Стали особого назначения**» (Академия наук Болгарии, Болгария)
РУДСКОЙ А.И. (Санкт-Петербургский Политехнический Университет Петра Великого, г. Санкт-Петербург)
СИВАК Б.А. (АО АХК «ВНИИМЕТМАШ», г. Москва)
СИМОНЯН Л.М., редактор раздела «**Экология и рациональное природопользование**» (Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», г. Москва)
СМИРНОВ Л.А. (ОАО «Уральский институт металлов», г. Екатеринбург)
СОЛОДОВ С.В., редактор раздела «**Информационные технологии и автоматизация в черной металлургии**» (Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», г. Москва)
СПИРИН Н.А. (Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург)
ТАНГ ГУОИ (Институт перспективных материалов университета Циньхуа, г. Шеньжень, Китай)
ТЕМЛЯНЦЕВ М.В. (Сибирский государственный индустриальный университет, г. Новокузнецк)
ФИЛОНОВ М.Р., редактор раздела «**Материаловедение**» (Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», г. Москва)
ЧУМАНОВ И.В. (Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск)
ШЕШУКОВ О.Ю. (Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург)
ШПАЙДЕЛЬ М.О. (Швейцарская академия материаловедения, Швейцария)
ЮРЬЕВ А.Б. (ОАО «ЕВРАЗ ЗСМК», г. Новокузнецк)
ЮСУПОВ В.С. (Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова РАН, г. Москва)

Учредители:



Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»



Сибирский государственный индустриальный университет

Настоящий номер журнала подготовлен к печати
Сибирским государственным индустриальным университетом

Адреса редакции:

119049, Москва, Ленинский пр-т, д. 4
Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»,
Тел./факс: (495) 638-44-11, (499) 236-14-27
E-mail: fermet.misis@mail.ru, ferrous@misis.ru
www.fermet.misis.ru

654007, Новокузнецк, 7,
Кемеровской обл., ул. Кирова, д. 42
Сибирский государственный индустриальный университет,
Тел.: (3843) 74-86-28
E-mail: redjizvz@sibsiiu.ru

Журнал «Известия ВУЗов. Черная металлургия» по решению ВАК входит в «Перечень ведущих рецензируемых научных журналов и изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученой степени доктора и кандидата наук»

СОДЕРЖАНИЕ

МЕТАЛЛУРГИЧЕСКИЕ ТЕХНОЛОГИИ

Лехов О.С., Михалев А.В., Билалов Д.Х., Шевелев М.М. Установка циклической деформации для обжатия непрерывнолитых слэбов 257

Домбровский Ю.М., Степанов М.С. Формирование покрытия карбидного типа при микродуговом ванадировании стали 262

ЭКОЛОГИЯ И РАЦИОНАЛЬНОЕ ПРИРОДОПОЛЬЗОВАНИЕ

Кузнецов С.Н., Школлер М.Б., Протопопов Е.В., Темлянец М.В., Фейлер С.В. Технологические основы адсорбционного обезвоживания и термохимического окускования конвертерных шламов 268

Мулякко В.И., Олейник Т.А., Ляшенко В.И. Повышение эффективности работы вертикальных осадительных камер для утилизации пыли металлургического производства 276

Шинкин В.Н. Расчет параметров листогибочных несимметричных трехвалковых вальцов при производстве стальных труб ... 285

МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ

Баранникова С.А., Шляхова Г.В., Зернин Е.А., Кузнецов М.А. Методика определения оптимальной концентрации наноструктурированных порошков в защитном газе 292

Поletaев Г.М., Новоселова Д.В., Зоря И.В., Старостенков М.Д. Молекулярно-динамическое исследование деформации нанокристаллического никеля 298

Кормышев В.Е., Иванов Ю.Ф., Громов В.Е., Коновалов С.В., Тересов А.Д. Нанотвердость поверхности износостойкой наплавки, облученной электронным пучком 304

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ МЕТАЛЛУРГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Тягунов А.Г., Барышев Е.Е., Тягунов Г.В., Мушников В.С., Цепелев В.С. Систематизация политерм физических свойств металлических расплавов 310

ИННОВАЦИИ В МЕТАЛЛУРГИЧЕСКОМ ПРОМЫШЛЕННОМ И ЛАБОРАТОРНОМ ОБОРУДОВАНИИ, ТЕХНОЛОГИЯХ И МАТЕРИАЛАХ

Гусев А.И., Кибко Н.В., Попова М.В., Козырев Н.А., Осетковский И.В. Наплавка порошковыми проволоками систем C-Si-Mn-Mo-V-B и C-Si-Mn-Cr-Mo-V деталей горнорудного оборудования 318

НАУКА ПРОИЗВОДСТВУ

Фастыковский А.Р., Федоров А.А. Повышение эффективности производства арматурных профилей на действующем непрерывном мелкосортном стане 324

ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ И АВТОМАТИЗАЦИЯ В ЧЕРНОЙ МЕТАЛЛУРГИИ

Швыдкий В.С., Ярошенко Ю.Г., Спириин Н.А., Лавров В.В. Математическая модель процесса обжига рудодоугольных окатышей на конвейерной машине», авторы 329

CONTENTS

METALLURGICAL TECHNOLOGIES

O.S. Lekhov, A.V. Mikhalev, D.Kh. Bilalov, M.M. Shevelev Cyclic deformation unit for continuous slabs reduction 257

Yu.M. Dombrovskii, M.S. Stepanov Formation of carbide type coating in the process of microarc steel vanadation 262

ECOLOGY AND RATIONAL USE OF NATURAL RESOURCES

S.N. Kuznetsov, M.B. Shkoller, E.V. Protopopov, M.V. Temlyantsev, S.V. Feiler Technological basics of adsorption dehydration and thermochemical sintering of BOF sludge 268

V.I. Mulyavko, T.A. Oleinik, V.I. Lyashenko Improvement of the efficiency of vertical settling chambers for recycling of metallurgical dust 276

V.N. Shinkin Calculation of parameters of the asymmetrical three-roller sheet-bending rolls in steel pipes production 285

MATERIAL SCIENCE

S.A. Barannikova, G.V. Shlyakhova, E.A. Zernin, M.A. Kuznetsov Method of determining the optimal concentration of nanostructured powders in shielding gas 292

G.M. Poletaev, D.V. Novoselova, I.V. Zorya, M.D. Starostenkov Molecular-dynamic study of nanocrystalline deformation of nickel 298

V.E. Kormyshev, Yu.F. Ivanov, V.E. Gromov, S.V. Konovalov, A.D. Teresov Surface nanohardness of wear resistant surfacing irradiated by electron beam 304

PHYSICO-CHEMICAL BASICS OF METALLURGICAL PROCESSES

A.G. Tyagunov, E.E. Baryshev, G.V. Tyagunov, V.S. Mushnikov, V.S. Tsepelev Systematization of physical properties polytherms of metallic melts 310

INNOVATIONS IN METALLURGICAL INDUSTRIAL AND LABORATORY EQUIPMENT, TECHNOLOGIES AND MATERIALS

A.I. Gusev, N.V. Kibko, M.V. Popova, N.A. Kozyrev, I.V. Osetkovskii Surfacing of details of mining equipment by powder wires of C-Si-Mn-Mo-V-B and C-Si-Mn-Cr-Mo-V systems 318

SCIENCE APPLICATION

A.R. Fastykovskii, A.A. Fedorov Improvement of the production efficiency of reinforcement sections at the operating continuous small-section mill 324

INFORMATION TECHNOLOGIES AND AUTOMATIC CONTROL IN FERROUS METALLURGY

V.S. Shvydkii, Yu.G. Yaroshenko, N.A. Spirin, V.V. Lavrov Mathematical model of burning process of coal-ore pellets on conveyor machine 329

УДК 538.911

**МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ДЕФОРМАЦИИ
НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО НИКЕЛЯ****Полетаев Г.М.¹, д.ф.-м.н., профессор, заведующий кафедрой высшей математики
и математического моделирования (gmpoletaev@mail.ru)**Новоселова Д.В.¹, к.ф.-м.н., докторант кафедры высшей математики
и математического моделирования (dmitdarya@mail.ru)**Зоря И.В.², к.т.н., директор архитектурно-строительного института (zorya.i@mail.ru)**Старостенков М.Д.¹, д.ф.-м.н., профессор, заведующий кафедрой физики (genphys@mail.ru)*¹ Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова
(656038, Россия, Барнаул, пр. Ленина, 46)² Сибирский государственный индустриальный университет
(654007, Россия, Кемеровская обл., Новокузнецк, ул. Кирова, 42)

Аннотация. С помощью метода молекулярной динамики проведено исследование структурных трансформаций в нанокристаллическом никеле, содержащем границы наклона $\langle 111 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$, под действием деформации. Нанокристаллический никель создавали в модели путем кристаллизации из жидкого состояния расчетного блока в форме пластины толщиной 1,5 – 2,0 нм, содержащей специально введенные кристаллические затравки – цилиндрические кристаллические области с неподвижно зафиксированными атомами. При создании расчетного блока цилиндрические области с кристаллической структурой поворачивали на случайные либо заданные углы вокруг центральной оси цилиндров. Это делалось для того, чтобы конечные кристаллические зерна имели по завершении кристаллизации между собой границы наклона. Взаимодействия атомов никеля друг с другом описывали с помощью многочастичных потенциалов Клери-Розато, построенных в модели сильной связи. Деформацию сжатия или растяжения задавали путем изменения межатомных расстояний вдоль заданной оси. Основное внимание уделяли изучению механизма пластической деформации с участием границ зерен и тройных стыков. Решали следующие вопросы: что преимущественно является инициатором пластических сдвигов: поверхность или граница; имеются ли проявления самоорганизации в этом случае; генерируются ли дислокации или механизм пластической деформации в случае нанокристаллической структуры в основном связан с зернограничным проскальзыванием. В настоящей работе в результате моделирования было выяснено, что пластическая деформация при размере зерен порядка нескольких нанометров осуществляется преимущественно посредством зернограничного проскальзывания без образования дислокаций и внутризеренного скольжения, причем зернограничное проскальзывание в некоторых случаях сопровождается вращением зерен. Смещения атомов в процессе пластической деформации в рассматриваемых материалах в первую очередь формировались от свободных поверхностей: при растяжении атомные смещения, как правило, были направлены от поверхности в глубь поликристалла, при сжатии – наоборот, в сторону поверхности. В результате воздействия деформации процесс рекристаллизации протекал в моделируемом нанокристаллическом никеле интенсивнее, интенсивнее также в этом случае мигрировали дефекты и избыточный свободный объем к границам раздела (границам зерен и свободной поверхности).

Ключевые слова: молекулярная динамика, граница зерен, граница наклона, тройной стык, свободный объем, деформация, зернограничное проскальзывание.

DOI: 10.17073/0368-0797-2017-4-298-303

В последнее время большое внимание уделяется материалам с очень малым размером зерен – ультрамелкозернистым материалам. К ним относятся субмикроструктурные материалы со средним размером зерен около 100 нм и нанокристаллические с размером зерен порядка нескольких десятков нанометров. Повышенный интерес к ним связан с их уникальными физико-механическими свойствами: более высокими, чем у обычных поликристаллов, прочностью и пластичностью; уникальными тепловыми и магнитными свойствами; относительно

высоким коэффициентом самодиффузии и т.д. [1 – 4]. Малый размер зерен обуславливает большую развитость и протяженность межзеренных границ раздела. В нанокристаллических материалах с размером зерен от 10 до 100 нм на границы раздела приходится от 10 до 50 % вещества (при толщине границ, равной 0,5 – 1,5 нм) [1, 5], что свидетельствует о существенной роли границ зерен и тройных стыков в большинстве процессов и явлений в этих материалах.

Тройной стык зерен представляет собой линейный дефект, вдоль которого сопрягаются три границы зерен. Согласно экспериментальным данным диффузия в области тройного стыка границ зерен протекает значительно интенсивнее, чем вдоль самих границ [3, 6, 7], а его структура является сравнительно более

* Исследование выполнено в рамках научного проекта № 166 программы Министерства образования и науки РФ «Формирование государственных заданий высшим учебным заведениям в части проведения научно-исследовательских работ» и при финансовой поддержке гранта РФФИ № 16-48-190182 p_a.

«рыхлой» [1] (даже с включениями аморфной фазы [8]), то есть с более высоким содержанием свободного объема по сравнению с образующими этот стык границами зерен. В работе [9] с помощью компьютерного моделирования ранее было показано, что избыточный свободный объем образуется в стыках преимущественно в процессе кристаллизации в результате «запирания» плотности жидкой фазы при встрече трех фронтов кристаллизации и, как следствие, концентрирования избыточного свободного объема в тройном стыке после затвердевания. Накопление вектора Бюргера при зернограничном проскальзывании и образование в стыке дислокационного или дисклинационного комплекса в работе [9] представлялось второстепенной причиной.

Границы зерен оказывают существенное влияние на такие важные процессы, происходящие в поликристаллах, как ползучесть и сверхпластичность. В настоящее время установлено, что ползучесть осуществляется при коррелированном действии зернограничного проскальзывания (ЗПП) и внутриверного скольжения (ВЗС) [10]. Под ЗПП принято понимать смещение одного зерна относительно другого вдоль общей поверхности границы; ВЗС обычно происходит в плотноупакованных плоскостях и в некоторых случаях наблюдается совместно с ЗПП. Другим эффектом, определяющую роль в котором играют границы зерен, является структурная сверхпластичность. Сверхпластичность – явление аномально высокой пластичности металлов и сплавов, проявляющееся при создании в них ультрамелкозернистой структуры и деформации в определенном температурно-скоростном диапазоне [11].

В работах [12, 13] М.Ю. Гуткин и И.А. Овидько выделили следующие механизмы, обуславливающие пластичность ультрамелкозернистых металлов: диффузия по границам зерен, диффузия по тройным стыкам, ротационная пластическая деформация зерен (вращение зерен), ЗПП. Ведущим механизмом, обеспечивающим ползучесть и сверхпластичность, является, по мнению многих исследователей, зернограничное проскальзывание.

Настоящая работа посвящена исследованию с помощью метода молекулярной динамики структурных трансформаций в нанокристаллическом никеле, содержащем границы наклона $\langle 111 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$, под действием деформации.

Моделирование проводили с помощью метода молекулярной динамики. Нанокристаллический никель создавали в модели путем кристаллизации расчетного блока в форме пластины (один из размеров расчетного блока задавали сравнительно небольшим – около 1,5 – 2,0 нм), содержащем специально введенные кристаллические затравки (зародыши) – цилиндрические кристаллические области с неподвижно зафиксированными атомами. Кристаллические затравки использовали по причине сложности моделирования кристаллиза-

ции в молекулярно-динамической модели из жидкого состояния при типичных для этого метода скоростях охлаждения. Дело в том, что для формирования кристаллической структуры из жидкого состояния требуются очень малые, по меркам молекулярной динамики, скорости охлаждения – примерно 10^{12} К/с [14]. При обычных ($10^{15} - 10^{16}$ К/с) скоростях охлаждения, используемых в молекулярной динамике, при затвердевании из жидкого состояния образуется аморфная структура [14]. При создании расчетного блока цилиндрические области с кристаллической структурой поворачивали на случайные либо заданные углы вокруг центральной оси цилиндров; это делали для того, чтобы конечные кристаллические зерна имели по завершении кристаллизации между собой границы наклона.

На рис. 1 показан пример расчетного блока, содержащего четыре кристаллические затравки. Расчетные блоки содержали 20 – 30 тысяч атомов. Толщина расчетных блоков вдоль оси Z составляла 4 – 5 параметров решетки (15 – 20 Å). Рассматривали расчетные блоки, плоскость XY которых соответствовала кристаллографическим плоскостям (111) и (100). Граничные условия вдоль осей X и Z задавали периодические, вдоль оси Y – свободные, чтобы расчетный блок имел возможность менять объем в процессе кристаллизации и изменения температуры.

Взаимодействия атомов никеля друг с другом описывали многочастичным потенциалом Клерри-Розато [15], который хорошо зарекомендовал себя в ряде расчетов структурно-энергетических характеристик металлов, выполненных методом молекулярной динамики [16 – 20]. Шаг интегрирования по времени в ме-

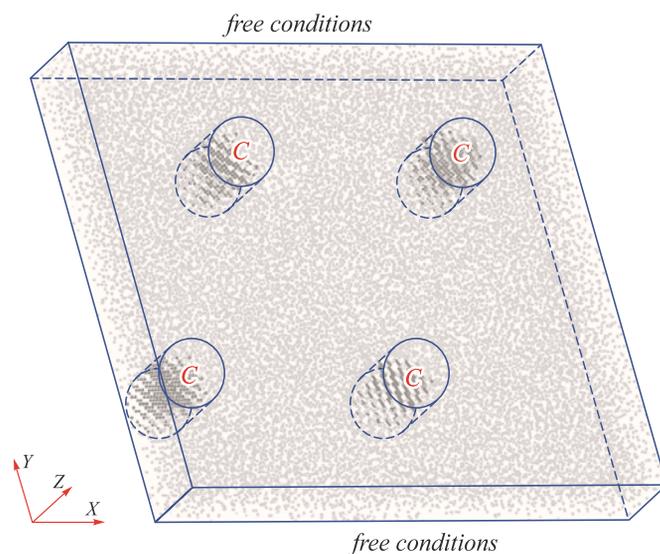


Рис. 1. Пример расчетного блока для моделирования кристаллизации (кристаллические затравки (кристаллические зародыши) выделены в виде цилиндрических областей и отмечены буквой «С»)

Fig. 1. An example of the calculation block for crystallization modeling (crystalline seeds (crystalline embryos) are identified in the form of cylindrical zones and marked with the letter "C")

тоде молекулярной динамики равен 5 фс. Температуру в модели задавали через начальные скорости атомов согласно распределению Максвелла.

Кристаллизацию в молекулярно-динамической модели проводили по следующей схеме. Сначала расчетный блок плавил путем нагревания до температуры 3000 К. Затем постепенно охлаждали, при этом температура ступенчато изменялась от 1500 до 800 К. При каждой температуре расчет проводили от нескольких десятков до нескольких сотен пикосекунд. При задании той или иной температуры все межатомные расстояния в расчетном блоке изменялись в соответствии с коэффициентом теплового расширения. Полученные таким образом нанокристаллические структуры являлись стартовыми для проведения исследований структурной трансформации в условиях деформации (рис. 2, а, 3, а).

Деформацию сжатия или растяжения задавали путем изменения межатомных расстояний вдоль оси X (рис. 1). Использование движущихся «зажимов» в этом случае невозможно, поскольку они подразумевают наложение жестких граничных условий, оказывающих значительное влияние на формирование структуры вблизи них. Основное внимание уделяли изучению механизма пластической деформации с участием границ

зерен и тройных стыков. Решали следующие вопросы: что преимущественно является инициатором пластических сдвигов – поверхность или граница; имеются ли проявления самоорганизации в этом случае; генерируются ли дислокации (то есть внутризеренное скольжение) или механизм пластической деформации в случае нанокристаллической структуры в основном связан с зернограничным проскальзыванием.

На рис. 2 приведены изображения расчетного блока с ориентацией XU (111) после деформации растяжения и сжатия, а также соответствующие картины смещений атомов в процессе структурной трансформации. На рис. 3 приведены аналогичные изображения для ориентации XU (100). Деформацию сжатия и растяжения задавали достаточной для инициации пластических трансформаций в моделируемом поликристалле; 3 % в случаях, представленных на рис. 2 и 3. Деформацию проводили при начальной температуре 0 К. В течение структурных трансформаций, обусловленных пластической деформацией, температура повышалась. Изображения (рис. 2, 3) получены после заключительного охлаждения.

В процессе пластической деформации в связи с очень малым размером кристаллических зерен образования дислокаций и внутризеренного скольжения не

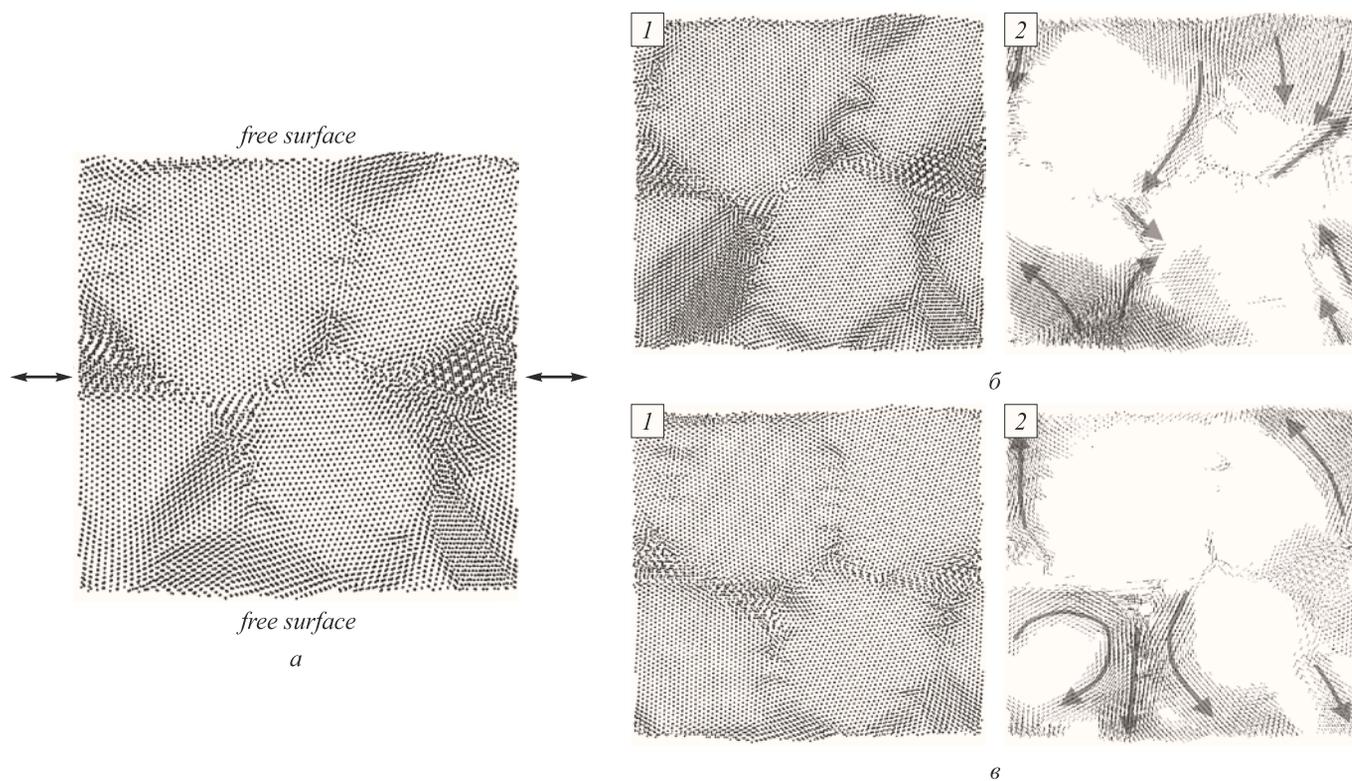


Рис. 2. Изображения расчетного блока (1) в плоскости XU и соответствующие картины атомных смещений (2) (показаны только смещения больше 1,3 Å) после компьютерного эксперимента в течение 30 пс (плоскость XU соответствует ориентации (111)): а – стартовая структура; б – при деформации растяжения 3 %; в – при деформации сжатия 3 %

Fig. 2. Images of the calculation block (1) in XU plane and corresponding patterns of atomic displacements (2) (only displacements larger than 1.3 Å are shown) after the computer experiment during 30 ps (the XU plane corresponds to the orientation (111)): а – starting structure; б – with a tensile deformation of 3 %; в – with a compression deformation of 3 %

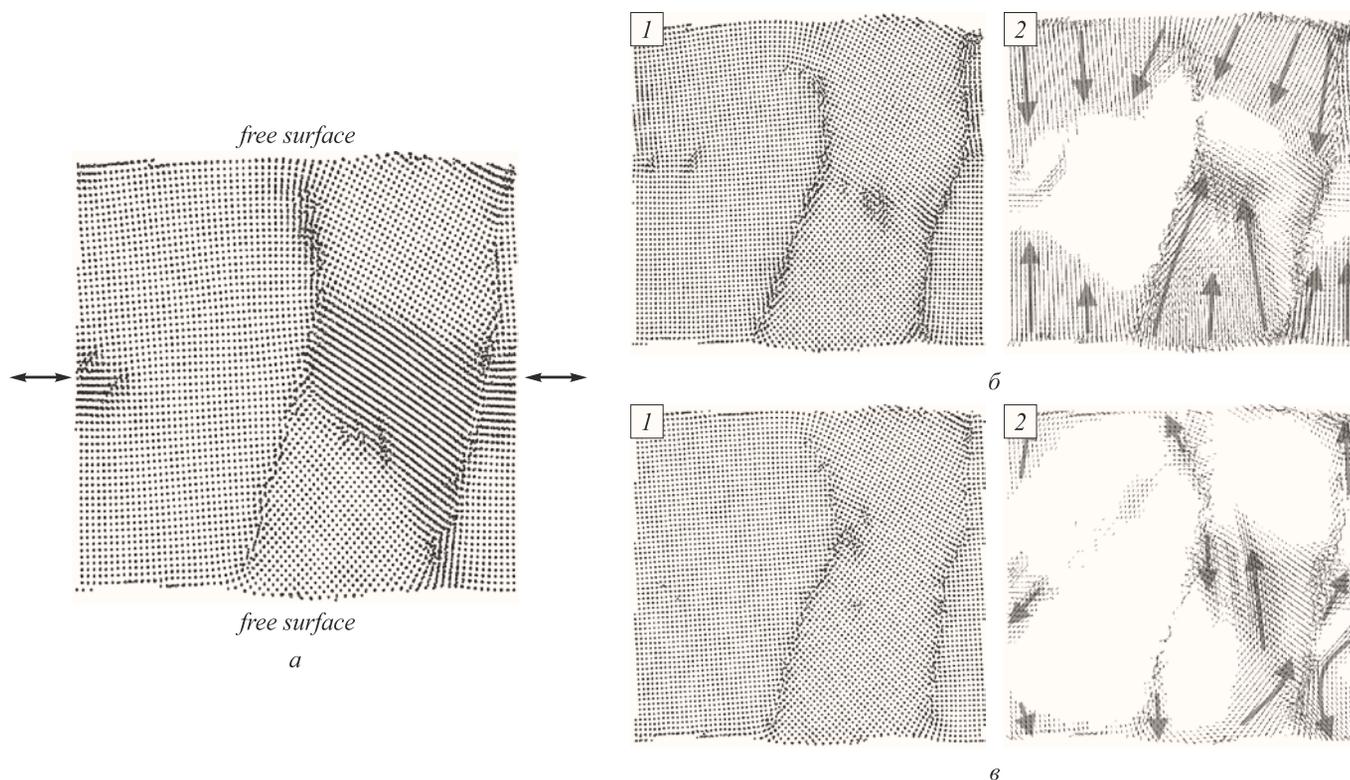


Рис. 3. Изображения расчетного блока (1) в плоскости XY и соответствующие картины атомных смещений (2) (показаны только смещения больше $1,3 \text{ \AA}$) после компьютерного эксперимента в течение 20 пс (плоскость XY соответствует ориентации (100)): a – стартовая структура; b – при деформации растяжения 3 %; v – при деформации сжатия 3 %

Fig. 3. Images of the calculation block (1) in XY plane and corresponding patterns of atomic displacements (2) (only displacements greater than 1.3 \AA are shown) after the computer experiment during 20 ps (the XY plane corresponds to the orientation (100)): a – starting structure; b – with a tensile deformation of 3 %; v – with a compression deformation of 3 %

наблюдали. Пластическая деформация в рассматриваемых поликристаллах осуществлялась преимущественно посредством зернограничного проскальзывания. Этот результат согласуется с экспериментальными результатами, касающимися явления сверхпластичности в ультрамелкозернистых материалах [9]. Кроме того, на полученных картинах атомных смещений присутствуют все механизмы, обуславливающие, согласно работам М.Ю. Гуткина и И.А. Овидько [10, 11], пластичность ультрамелкозернистых материалов: зернограничное проскальзывание, диффузия по границам зерен и тройным стыкам, ротационная пластическая деформация зерен (вращение зерен).

При непосредственном наблюдении атомных смещений в процессе компьютерного эксперимента было выяснено, что смещения атомов в первую очередь возникали от свободных поверхностей. Причем в случае растяжения смещения были направлены от поверхности в глубь расчетного блока, в случае сжатия – наоборот, в сторону поверхности.

В результате воздействия деформации процесс рекристаллизации протекал в рассматриваемых расчетных блоках интенсивнее: на рис. 2, b , v , 3, b , v видно, что вследствие деформации количество различных дефектов, ширина границ и связанная с ними доля сво-

бодного объема стали меньше, особенно в результате деформации сжатия. По всей видимости, при сжатии структурные трансформации приводят к тому, что часть свободного объема вытесняется на свободную поверхность. Но даже при этом, как видно (например, на рис. 2, v), свободного объема по-прежнему больше в области тройного стыка, чем в границах зерен. Причина образования сравнительно высокой доли свободного объема в тройных стыках при кристаллизации заключается, как было показано в работах [5 – 7], в «запирании» плотности жидкой фазы при встрече трех фронтов кристаллизации и, как следствие, концентрирования избыточного свободного объема в тройном стыке после затвердевания.

Выводы. Пластическая деформация в рассмотренном нанокристаллическом никеле (при размерах зерен порядка нескольких нанометров), содержащем границы наклона $\langle 111 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$, осуществляется преимущественно посредством зернограничного проскальзывания без образования дислокаций и внутризеренного скольжения, причем в некоторых случаях зернограничное проскальзывание может сопровождать вращение зерен. Смещения атомов в процессе пластической деформации в первую очередь возникали от свободных поверхностей: при растяжении атомные смещения были

направлены от поверхности в глубь расчетного блока, при сжатии – наоборот, в сторону поверхности. В результате воздействия деформации процесс рекристаллизации протекал в моделируемом нанокристаллическом никеле интенсивнее, интенсивнее также в этом случае мигрировали дефекты и избыточный свободный объем к границам раздела (границам зерен и свободной поверхности).

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

- Gusev A.I. Effects of the nanocrystalline state in solids // *Physics-Uspokhi*. 1998. Vol. 41. P. 49 – 76.
- Мулюков Р.Р. Структура и свойства субмикроструктурных металлов, полученных интенсивной пластической деформацией. Автореф. дис. доктора физ.-мат. наук. – М., 1996. – 34 с.
- Kumar K.S., Van Swygenhoven H., Suresh S. Mechanical behavior of nanocrystalline metals and alloys // *Acta Materialia*. 2003. Vol. 51. P. 5743 – 5774.
- Andrievskii R.A. Thermal stability of nanomaterials // *Russian chemistry reviews*. 2002. Vol. 71. P. 853 – 866.
- Zhou Y., Erb U., Aust K.T., Palumbo G. The effects of triple junctions and grain boundaries on hardness and Young's modulus in nanostructured Ni-P // *Scripta Materialia*. 2003. Vol. 48. P. 825 – 830.
- Bokstein B.S., Rodin A.O., Straumal B.B. Diffusion Controlled Grain Triple Junctions Wetting in Metals // *Defect and Diffusion Forum*. 2011. Vol. 309-310. P. 231 – 238.
- Palumbo G., Aust K.T. A coincident axial direction (CAD) approach to the structure of triple junctions in polycrystalline materials // *Scripta Metallurgica et Materialia*. 1990. Vol. 24. P. 1771 – 1776.
- Rodriguez P., Sundararaman D., Divakar R., Raghunathan V.S. Structure of grain boundaries in nanocrystalline and quasicrystalline materials // *Chemistry for Sustainable Development*. 2000. Vol. 8. P. 69 – 72.
- 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. Vol. 249. P. 3 – 8.
- Розенберг В.М. Ползучесть металлов. – М: Металлургия, 1967. – 276 с.
- Кайбышев О.А., Валиев Р.З. Границы зерен и свойства металлов. – М.: Металлургия, 1987. – 216 с.
- Гуткин М.Ю., Овидько И.А. Предел текучести и пластическая деформация нанокристаллических материалов // *Успехи механики*. 2003. № 1. С. 68 – 125.
- Gutkin M.Yu., Ovidko I.A., Skiba N.V. Grain boundary sliding and lattice dislocation emission in nanocrystalline materials under plastic deformation // *Physics of the Solid State*. 2005. Vol. 47. P. 1662 – 1674.
- Судзуки К., Фудзимори Х., Хасимото К. Аморфные металлы. – М.: Металлургия, 1987. – 328 с.
- Cleri F., Rosato V. Tight-binding potentials for transition metals and alloys // *Physical Review B*. 1993. Vol. 48. P. 22 – 33.
- Poletaev G.M., Starostenkov M.D., Dmitriev S.V. Interatomic potentials in the systems Pd-H and Ni-H // *Materials Physics and Mechanics*. 2016. Vol. 27. № 1. P. 53 – 59.
- Poletaev G.M., Starostenkov M.D. Structural transformations of stacking fault tetrahedra upon the absorption of point defects // *Technical Physics Letters*. 2009. Vol. 35. P. 1 – 4.
- Poletaev G.M., Dmitrienko D.V., Diabdenkov V.V., Mikrukov V.R., Starostenkov M.D. Molecular dynamics investigation of the diffusion permeability of triple junctions of tilt and mixed-type boundaries in nickel // *Physics of the Solid State*. 2013. Vol. 55. № 9. P. 1920 – 1924.
- Gafner S.L., Redel L.V., Gafner Yu.Ya. Simulation of the processes of structuring of copper nanoclusters in terms of the tight-binding potential // *Journal of Experimental and Theoretical Physics*. 2009. Vol. 108. P. 784 – 799.
- Samsonov V.M., Kharechkin S.S., Gafner S.L., Redel L.V., Gafner Yu.Ya., Golovenko Zh.B. On structural transitions in nanoparticles // *Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics*. 2010. Vol. 74. P. 673 – 676.

Поступила 31 октября 2016 г.

IZVESTIYA VUZOV. CHERNAYA METALLURGIYA = IZVESTIYA. FERROUS METALLURGY. 2017. VOL. 60. No. 4, pp. 298–303.

MOLECULAR-DYNAMIC STUDY OF NANOCRYSTALLINE DEFORMATION OF NICKEL

G.M. Poletaev¹, D.V. Novoselova¹, I.V. Zorya², M.D. Starostenkov¹

¹Altai State Technical University named after I.I. Polzunov, Barnaul, Russia

²Siberian State Industrial University, Novokuznetsk, Russia

Abstract. The study of structural transformations in nanocrystalline nickel, containing <111> and <100> edge boundaries, under the effect of deformation was carried out using the method of molecular dynamics. Nanocrystalline nickel was created in the model by crystallization from a liquid state of the computational block in a plate shape of 1.5 – 2.0 nm thickness, containing specifically introduced crystal seeds – cylindrical crystalline areas with the fixed motionless atoms. When creating the computational block, the cylindrical areas with a crystalline structure were rotated to random or predetermined angles around the central axis of cylinders. It was done so that the final crystal grains after crystallization had edge boundaries between each other. Interactions of nickel atoms were described with the help of many-body potential of Cleri-Rosato, constructed in the tight-binding model. Deformation of the compression or tension was set by changing the interatomic distances along a given axis. The main attention was paid to studying the mechanism of plastic deformation with the participation of grain boundaries and triple junctions. The following questions considered: what is the

preferably initiator of the plastic shears: surface or boundary; whether there are manifestations of self-organization in this case; whether the dislocations are generated or mechanism of plastic deformation in the case of nanocrystalline structure is mainly due to grain boundary sliding. In the present study, as a result of the computer simulation it was found that the plastic deformation with the grain size of several nm is performed mainly by the grain boundary sliding without the formation of dislocations and intragrain slip. Herewith the grain boundary sliding in some cases accompanies the grain rotation. Displacements of atoms in the plastic deformation process in these materials were formed primarily from free surfaces: at the tension atomic displacements usually were directed from the surface into the polycrystal, at compression, conversely, toward the surface. As a result of the deformation the recrystallization process proceeded in the simulated nanocrystalline Ni more intensively, defects and excess free volume intensively migrated to the interfaces (grain boundaries and free surfaces).

Keywords: molecular dynamics, grain boundary, edge boundary, triple junction, free volume, deformation, grain boundary sliding.

DOI: 10.17073/0368-0797-2017-4-298-303

REFERENCES

- Gusev A.I. Effects of the nanocrystalline state in solids. *Physics-Uspokhi*. 1998, vol. 41, pp. 49–76.

2. Mulyukov R.R. *Struktura i svoistva submikrokristallicheskih metallov, poluchennykh intensivnoi plasticheskoi deformatsiei: Avtoref. diss.d-ra fiz.-mat. nauk* [Structure and properties of submicrocrystalline metals obtained by intense plastic deformation: Extended Abstract of Dr. Sci. Diss.]. Moscow, 1996, 34 p. (In Russ.).
3. Kumar K.S., Van Swygenhoven H., Suresh S. Mechanical behavior of nanocrystalline metals and alloys. *Acta Materialia*. 2003, vol. 51, pp. 5743–5774.
4. Andrievskii R.A. Thermal stability of nanomaterials. *Russian Chemistry Reviews*. 2002, vol. 71, pp. 853–866.
5. Zhou Y., Erb U., Aust K.T., Palumbo G. The effects of triple junctions and grain boundaries on hardness and Young's modulus in nanostructured Ni–P. *Scripta Materialia*. 2003, vol. 48, pp. 825–830.
6. Bokstein B.S., Rodin A.O., Straumal B.B. Diffusion Controlled Grain Triple Junctions Wetting in Metals. *Defect and Diffusion Forum*. 2011, vol. 309-310, pp. 231–238.
7. Palumbo G., Aust K.T. A coincident axial direction (CAD) approach to the structure of triple junctions in polycrystalline materials. *Scripta Metallurgica et Materialia*. 1990, vol. 24, pp. 1771–1776.
8. Rodriguez P., Sundararaman D., Divakar R., Raghunathan V.S. Structure of grain boundaries in nanocrystalline and quasicrystalline materials. *Chemistry for Sustainable Development*. 2000, vol. 8, pp. 69–72.
9. 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, vol. 249, pp. 3–8.
10. Rozenberg V.M. *Polzuchest' metallov* [Creep of metals]. Moscow: Metallurgiya, 1967, 276 p. (In Russ.).
11. Kaibyshev O.A., Valiev R.Z. *Granitsy zeren i svoistva metallov* [Boundaries of grains and properties of metals]. Moscow: Metallurgiya, 1987, 216 p. (In Russ.).
12. Gutkin M.Yu., Ovid'ko I.A. Yield strength and plastic deformation of nanocrystalline materials. *Uspekhi mekhaniki*. 2003, no. 1, pp. 68–125. (In Russ.).
13. Gutkin M.Yu., Ovidko I.A., Skiba N.V. Grain boundary sliding and lattice dislocation emission in nanocrystalline materials under plastic deformation. *Physics of the Solid State*. 2005, vol. 47, pp. 1662–1674.
14. Sudzuki K., Fudzimori Kh., Khasimoto K. *Amorfnye metally* [Amorphous metals]. Moscow: Metallurgiya, 1987, 328 p. (In Russ.).
15. Cleri F., Rosato V. Tight-binding potentials for transition metals and alloys. *Physical Review B*. 1993, vol. 48, pp. 22–33.
16. Poletaev G.M., Starostenkov M.D., Dmitriev S.V. Interatomic potentials in the systems Pd-H and Ni-H. *Materials Physics and Mechanics*. 2016, vol. 27, no. 1, pp. 53–59.
17. Poletaev G.M., Starostenkov M.D. Structural transformations of stacking fault tetrahedra upon the absorption of point defects. *Technical Physics Letters*. 2009, vol. 35, pp. 1–4.
18. Poletaev G.M., Dmitrienko D.V., Diabdenkov V.V., Mikrukov V.R., Starostenkov M.D. Molecular dynamics investigation of the diffusion permeability of triple junctions of tilt and mixed-type boundaries in nickel. *Physics of the Solid State*. 2013, vol. 55, no. 9, pp. 1920–1924.
19. Gafner S.L., Redel L.V., Gafner Yu.Ya. Simulation of the processes of structuring of copper nanoclusters in terms of the tight-binding potential. *Journal of Experimental and Theoretical Physics*. 2009, vol. 108, pp. 784–799.
20. Samsonov V.M., Kharechkin S.S., Gafner S.L., Redel L.V., Gafner Yu.Ya., Golovenko Zh.B. On structural transitions in nanoparticles. *Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics*. 2010, vol. 74, pp. 673–676.

Acknowledgements. The research was carried out within the framework of the scientific project No. 166 of the program of the Ministry of Education and Science of the Russian Federation “Formation of government assignments to higher educational institutions for conducting scientific research” and with the financial support of the RFBR grant No. 16-48-190182 p_a.

Information about the authors:

G.M. Poletaev, Dr. Sci. (Phys.-math.), Professor, Head of the Chair of Advanced Mathematics and Mathematical Modeling (gmpoletaev@mail.ru)

D.V. Novoselova, Cand. Sci. (Phys.-math.), Doctoral of the Chair of Advanced Mathematics and Mathematical Modeling (dmitdarya@mail.ru)

I.V. Zorya, Cand. Sci. (Eng.), Director of the Institute of Architecture and Construction (zorya.i@mail.ru)

M.D. Starostenkov, Dr. Sci. (Phys.-math.), Professor, Head of Chair of Physics (genphys@mail.ru)

Received October 31, 2016

Над номером работали:

Леонтьев Л.И., главный редактор

Протопопов Е.В., заместитель главного редактора

Ивани Е.А., заместитель главного редактора

Бащенко Л.П., заместитель ответственного секретаря

Потапова Е.Ю., заместитель главного редактора по развитию

Олендаренко Н.П., ведущий редактор

Неунывахина Д.Т., ведущий редактор

Расенец В.В., верстка, иллюстрации

Кузнецов А.А., системный администратор

Острогорская Г.Ю., менеджер по работе с клиентами

Подписано в печать 26.04.2017. Формат 60×90 ¹/₈. Бум. офсетная № 1.
Печать цифровая. Усл. печ. л. 10,5. Заказ 5492. Цена свободная.

Отпечатано в типографии Издательского Дома МИСиС.
119049, г. Москва, Ленинский пр-т, 4.
Тел./факс: (499) 236-76-17, 236-76-35