

eLIBRARY ID: [27159](#)

Язык описания: русский, [английский](#)

ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ ПРОБЛЕМЫ СОВРЕМЕННОГО МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ

ОСНОВНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ:

Тип сериального издания: периодическое издание

Элементы сериального издания: выпуск журнала

Назначение издания: научное

Способ распространения: только в печатном виде

Доступ к полным текстам: все выпуски в открытом доступе

Основной источник финансирования: учредитель

Мультидисциплинарность: не является мультидисциплинарным

Язык публикаций: русский, английский

УЧРЕДИТЕЛИ:

[Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова](#) (Барнаул)

[Сибирский государственный индустриальный университет](#) (Новокузнецк)

[Томский государственный архитектурно-строительный университет](#) (Томск)

[Алтайский государственный педагогический университет](#) (Барнаул)

РЕДАКЦИЯ:

[Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова](#) (Барнаул)

ИЗДАТЕЛЬСТВО:

[Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова](#) (Барнаул)

РАСПРОСТРАНТЕЛЬ:

[Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова](#) (Барнаул)

МЕСТО РАСПОЛОЖЕНИЯ РЕДАКЦИИ:

[Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова](#) (Барнаул)

СВЕДЕНИЯ ОБ ИЗДАНИИ:

ISSN печатной версии: [1811-1416](#)

ISSN электронной версии:

Число выпусков в год: 4

Год основания: 2003

Число статей в выпуске: 22

Период выпуска: 2004-...

Число страниц в выпуске: 138

Архив на eLIBRARY.RU: 2004-2022

Всего статей на eLIBRARY.RU: [1580](#)

Всего выпусков на eLIBRARY.RU: [73](#)

Свидетельство о регистрации СМИ: [ПИ № ФС77-75026 от 01.02.2019](#)

ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ ПРОБЛЕМЫ СОВРЕМЕННОГО МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ

Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова
Сибирский государственный индустриальный университет
Томский государственный архитектурно-строительный университет
Алтайский государственный педагогический университет
(Барнаул)

Том: 18 Номер: 4 Год: 2021

Название статьи

Стр. Чит.

РАЗДЕЛ 1. ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

☐	ФИЗИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ КОМПЛЕКСНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ УПРОЧНЕНИЯ ДЕТАЛЕЙ НА БАЗЕ ПЛАЗМЕННОЙ НАПЛАВКИ В СРЕДЕ АЗОТА	399-407	0
	<i>Малушин Н.Н., Громов В.Е., Романов Д.А., Бащенко Л.П., Ковалев А.П., Соснин К.В.</i>		
☐	ДИНАМИКА СПЕКТРАЛЬНЫХ ЛИНИЙ АКУСТИЧЕСКОЙ ЭМИССИИ ПРИ ТЕРМОУПРУГИХ МАРТЕНСИТНЫХ ПРЕВРАЩЕНИЯХ В НИКЕЛИДЕ ТИТАНА	408-413	0
	<i>Грязнов А.С., Плотников В.А., Гусева А.В.</i>		
☐	СОЛИТОНОПОДОБНЫЕ ВОЛНЫ ПРИ ПЕРИОДИЧЕСКОМ ГАРМОНИЧЕСКОМ ВОЗМУЩЕНИИ В ИНТЕРМЕТАЛЛИЧЕСКОМ СОЕДИНЕНИИ СОСТАВА A_3B	414-421	0
	<i>Захаров П.В., Старостенков М.Д., Янковская У.И., Дмитриев С.В., Корзникова Е.А.</i>		
☐	СТРУКТУРА И ДИСЛОКАЦИОННАЯ СУБСТРУКТУРА ВЫСОКОЭНТРОПИЙНОГО СПЛАВА СОСРГЕМНИ ПОСЛЕ ОБЛУЧЕНИЯ ИМПУЛЬСНЫМИ ЭЛЕКТРОННЫМИ ПУЧКАМИ	422-431	0
	<i>Иванов Ю.Ф., Громов В.Е., Коновалов С.В., Шлярова Ю.А., Воробьев С.В., Целлермаер В.Я.</i>		
☐	К ВОПРОСУ О ПРОТОННОЙ ПРОНИЦАЕМОСТИ ГРАФЕНА И БОРОФЕНА В РАЗЛИЧНЫХ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СРЕДАХ	432-440	0
	<i>Маслова О.А., Рябых А.В., Безносюк С.А.</i>		
☐	ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ФАЗОВОГО СОСТАВА ВЫСОКОЭНТРОПИЙНОГО СПЛАВА CO-CR-ZR-MN-NI С ПОМОЩЬЮ РАСЧЕТА ФЕНОМЕНОЛОГИЧЕСКИХ КРИТЕРИЕВ	441-449	0
	<i>Осинцев К.А., Панченко И.А., Коновалов С.В.</i>		
☐	МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ОРИЕНТАЦИИ МЕЖФАЗНОЙ ГРАНИЦЫ НА СКОРОСТЬ ВЗАИМНОЙ ДИФфуЗИИ ПРИ ТВЕРДО-ЖИДКОФАЗНОМ КОНТАКТЕ TI И AL	450-458	0
	<i>Полетаев Г.М., Коваленко В.В.</i>		
☐	ХАОТИЧЕСКИЕ ДИСКРЕТНЫЕ БРИЗЕРЫ В ТРЕУГОЛЬНОЙ РЕШЕТКЕ ФЕРМИ-ПАСТА-УЛАМА	459-469	0
	<i>Семенов А.С., Семенова М.Н., Упадхья А., Дмитриев С.В.</i>		
☐	ПОЛУЧЕНИЕ И ИССЛЕДОВАНИЕ КРИСТАЛЛОВ СМЕШАННЫХ ГАЛОГЕНИДОВ ДЛЯ НИЗКОФОНОННЫХ ЛАЗЕРНЫХ МАТРИЦ	470-477	0
	<i>Исаенко Л.И., Елисеев А.П., Голошумова А.А., Молокеев М.С., Тарасова А.Ю.</i>		
☐	ВЛИЯНИЕ СОСТАВА АМИНА НА СПОСОБНОСТЬ ОБРАЗОВАНИЯ ПРОИЗВОДНЫХ ГЕКСААЗОИЗОВЮРЦИТАНА	478-484	0
	<i>Рябых А.В., Маслова О.А., Безносюк С.А., Чикина М.В., Глухачева В.С.</i>		
☒	МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ПРИМЕСЕЙ УГЛЕРОДА И КИСЛОРОДА НА СКОРОСТЬ МИГРАЦИИ ГРАНИЦ НАКЛОНА <110> В НИКЕЛЕ И СЕРЕБРЕ	485-493	0
	<i>Зоря И.В., Полетаев Г.М.</i>		

РАЗДЕЛ 2. МЕТАЛЛОВЕДЕНИЕ И ТЕРМИЧЕСКАЯ ОБРАБОТКА МЕТАЛЛОВ И СПЛАВОВ

☐	СТРУКТУРНЫЕ ФАКТОРЫ УПРОЧНЕНИЯ УГЛЕРОДИСТОЙ ИНСТРУМЕНТАЛЬНОЙ СТАЛИ У8А ПРИ ЦИКЛИЧЕСКОМ ТЕПЛОВОМ ВОЗДЕЙСТВИИ	494-502	0
	<i>Гурьев А.М., Иванов С.Г., Гурьев М.А., Черных Е.В.</i>		
☐	АНАЛИЗ ДЕФОРМАЦИОННЫХ ДИАГРАММ ОДНООСНОГО ЦИКЛИЧЕСКОГО РАСТЯЖЕНИЯ ПРОВОЛОК И МЕТАЛЛАТРИКОТАЖА ИЗ TiNi СПЛАВА	503-510	0
	<i>Марченко Е.С., Байгонакова Г.А., Ковалёва М.А., Гюнтер С.В., Шишелова А.А., Гарин А.С., Ветрова А.В., Дубовиков К.М., Мамазакиров О.</i>		
☐	ЖИДКОФАЗНЫЙ СИНТЕЗ МЕТАЛЛОМАТРИЧНЫХ КОМПОЗИТОВ ГИБРИДНОГО СОСТАВА	511-519	0
	<i>Прусов Е.С., Деев В.Б., Киреев А.В.</i>		

Научная статья

01.04.07 – Физика конденсированного состояния (физико-математические науки)

УДК 538.911

doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2021.04.011

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ПРИМЕСЕЙ УГЛЕРОДА И КИСЛОРОДА НА СКОРОСТЬ МИГРАЦИИ ГРАНИЦ НАКЛОНА <110> В НИКЕЛЕ И СЕРЕБРЕ

Ирина Васильевна Зоря¹, Геннадий Михайлович Полетаев^{2†}

¹ Сибирский государственный индустриальный университет, ул. Кирова, 42, 654007, Новокузнецк, Кемеровская обл. – Кузбасс, Россия

² Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова, пр. Ленина, 46, 656038, Барнаул, Россия

¹ zorya.i@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-5748-813X>

² gmpoletaev@mail.ru[†], <https://orcid.org/0000-0002-5252-2455>

Аннотация. Методом молекулярной динамики проведено исследование влияния примесных атомов углерода и кислорода на скорость миграции границ наклона с осью разориентации <110> в ГЦК металлах никеле и серебре. Получены зависимости энергии рассматриваемых границ и скорости их миграции при температуре $0,95 \cdot T_{пл}$ от угла разориентации. Показано, что скорость миграции границ наклона <110> при тех же условиях ниже на порядок скорости миграции границ <111> и <100>, что, в первую очередь, обусловлено сравнительно низкой энергией границ <110>. Миграция границ сопровождалась формированием областей одинаковой формы в том зерне, в сторону которого перемещалась граница, повернутых на угол разориентации. Миграция малоугловых границ, как правило, происходила посредством кооперативных сдвигов в результате согласованного скольжения зернограницных дислокаций. Переползание дислокаций, вызванное диффузией, практически не вносило вклад в механизм миграции границ. Введение примесных атомов углерода и кислорода приводило к значительному снижению скорости миграции границ зерен. Для примесных атомов углерода и кислорода рассчитаны энергии связи с зернограницными дислокациями в рассматриваемых металлах. Полученные значения хорошо коррелируют с зависимостями скорости миграции границ <110> от концентрации примесей. Влияние примесей на миграцию границ в Ag оказалось меньше, чем в Ni, что в данном случае объясняется отличием их параметров решетки (4,086 Å и 3,524 Å соответственно), при том, что их электроотрицательности почти одинаковые. Наибольшие эффект примесей на скорость миграции границ и значение энергии связи были получены для системы Ni-C, наименьшие – для Ag-O.

Ключевые слова: молекулярная динамика, граница зерен, миграция, граница наклона, примесь.

Благодарности: Работа поддержана Министерством науки и высшего образования Российской Федерации (FZMM-2020-0002).

Для цитирования: Зоря И.В., Полетаев Г.М. Молекулярно-динамическое исследование влияния примесей углерода и кислорода на скорость миграции границ наклона <110> в никеле и серебре // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2021. Т. 18, № 4. С. 485–493. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2021.04.011.

Original article

MOLECULAR DYNAMICS STUDY OF THE INFLUENCE OF CARBON AND OXYGEN IMPURITIES ON THE VELOCITY OF <110> TILT BOUNDARIES MIGRATION IN NICKEL AND SILVER

Irina V. Zorya¹, Gennady M. Poletaev^{2†}

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

² I.I. Polzunov Altai State Technical University, Lenin Pr., 46, Barnaul, 656038, Russia

¹ zorya.i@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-5748-813X>

² gmpoletaev@mail.ru[†], <https://orcid.org/0000-0002-5252-2455>

Abstract. The molecular dynamics method was used to study the influence of impurity carbon and oxygen atoms on the migration velocity of the tilt boundaries with the misorientation axis $\langle 110 \rangle$ in fcc metals nickel and silver. The dependences of the energy of the considered boundaries and the rate of their migration at a temperature of $0.95 \cdot T_{\text{melt}}$ on the misorientation angle have been obtained. It is shown that the migration velocity of the $\langle 110 \rangle$ tilt boundaries under the same conditions is an order of magnitude lower than the migration velocity of the $\langle 111 \rangle$ and $\langle 100 \rangle$ boundaries, which is primarily due to the relatively low energy of the $\langle 110 \rangle$ boundaries. The migration of boundaries was accompanied by the formation of regions of the same shape, rotated by an angle of misorientation, in the grain towards which the boundary moved. The migration of low-angle boundaries, as a rule, occurred through cooperative shears as a result of coordinated sliding of grain-boundary dislocations. The dislocation climb caused by diffusion practically did not contribute to the mechanism of boundary migration. The introduction of impurity carbon and oxygen atoms led to a significant decrease in the migration rate of grain boundaries. The binding energies of the impurity carbon and oxygen atoms with grain-boundary dislocations in the metals under consideration are calculated. The obtained values correlate well with the dependences of the migration velocity of the $\langle 110 \rangle$ boundaries on the concentration of impurities. The effect of impurities on the migration of boundaries in Ag turned out to be less than in Ni, which in this case is explained by the difference in their lattice parameters (4.086 Å and 3.524 Å, respectively), while their electronegativities are almost the same. The greatest effect of impurities on the migration rate of boundaries and the value of the binding energy was obtained for the Ni-C system, the least for Ag-O.

Keywords: molecular dynamics, grain boundary, migration, tilt boundary, impurity.

Acknowledgements: The study was supported by Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (FZMM-2020-0002).

For citation: Zorya, I. V. & Poletaev, G. M. (2021). Molecular dynamics study of the influence of carbon and oxygen impurities on the velocity of $\langle 110 \rangle$ tilt boundaries migration in nickel and silver. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 4(18), 485–493. (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2021.04.011.

Введение

Скорость миграции границ зерен в поликристаллах является определяющим фактором в процессе рекристаллизации, в различных фазовых превращениях, и играет важную роль, в частности, в вопросе стабильности структуры нанокристаллических материалов. Несмотря на сравнительно давний интерес к проблеме миграции границ зерен, в настоящее время существует несколько дискуссионных моментов. Например, невыясненным остается вопрос относительно того что является ключевым в механизме миграции: диффузия или кооперативные перемещения атомов. Последние исследования, выполненные в основном с помощью компьютерного моделирования, говорят о преобладании во многих случаях согласованных перемещений групп атомов, что особенно характерно для малоугловых границ [1-7]. По поводу механизма миграции малоугловых границ наклонного типа, структура которых представляет собой периодически расположенные краевые зернограницные дислокации, также имеются разногласия. Например, в [2, 3] авторы утверждают о преобладании в этом случае переползания зернограницных дислокаций. Однако результаты работ [4, 5], напротив, косвенно свидетельствуют о преобладании скольжения

дислокаций в процессе миграции. В [6, 7], при компьютерном моделировании миграции границ наклона с осями разориентации $\langle 100 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$, мы также пришли к выводу, что миграция данных границ осуществляется преимущественно путем скольжения зернограницных дислокаций.

Другим важным вопросом является влияние на подвижность границ зерен различных примесей, дефектов, свободного объема. Известно, что примеси, даже при небольших концентрациях, сильно снижают подвижность границ [8-11]. Это связывают с тем, что примеси притягиваются к границам и образуют вокруг них, как и вокруг дислокаций, так называемые атмосферы или облака Коттрелла [12, 13]. Для движения границе, как и в случае движения дислокации, необходима дополнительная энергия для отрыва от облака примесей. Можно предположить, что для малоугловых границ эта энергия, приходящаяся на один атом примеси, приблизительно равна энергии связи примесного атома с дислокацией. В железе, согласно, например, [14, 15], энергия связи атома углерода с дислокацией имеет значение порядка 0,4-0,7 эВ. Для атома кислорода в цирконии в [16] было получено значение 0,5 эВ. Приведенные величины указывают на сравнительно

крепкую связь атомов примеси с дислокациями и, следовательно, с границами зерен.

Нами ранее [17] было проведено исследование влияния примесных атомов углерода и кислорода на скорость миграции границ зерен наклонного типа с осями разориентации $\langle 100 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$ в никеле, серебре и алюминии. Было показано, что примеси существенно тормозят миграцию рассматриваемых границ. В нашей работе [17] мы, однако, не уделили внимание границам с осью разориентации $\langle 110 \rangle$. Вместе с тем, рассмотрение границ наклона $\langle 110 \rangle \{111\}$ имеет большое практическое значение, поскольку, как известно, большинство границ в ГЦК металлах ориентировано в плотноупакованных плоскостях $\{111\}$ [18, 19], среди которых чаще всего встречаются границы наклона с осью разориентации $\langle 110 \rangle$ [18–22]. К этому типу границ, например, относятся двойники – $\Sigma 3 \{111\} \langle 110 \rangle$, играющие исключительно важную роль в деформационных процессах [23, 24].

Настоящая работа посвящена исследованию влияния примесных атомов углерода и кислорода на скорость миграции границ зерен наклонного типа с осью разориентации $\langle 110 \rangle$ в никеле и серебре с помощью метода молекулярной динамики. Радиусы атомов ГЦК металлов Ni и Ag сильно отличаются: 1,24 Å и 1,44 Å соответственно [8]. Однако электроотрицатель-

ности почти совпадают: 1,91 для Ni и 1,93 для Ag [25]. Таким образом, на отличие полученных результатов для Ni и Ag будет преимущественно оказывать влияние размерный фактор – разное соотношение радиусов атомов металлов и атомов примесей.

Описание модели

Методика исследования скорости миграции границы зерен была взята из работ [1, 26], где она использовалась как в реальных экспериментах, так и в компьютерных моделях. В данном случае в бикристалле создается четко аттестованная граница в форме полупетли с достаточно малым радиусом кривизны (рис.1а). При этом чем меньше радиус кривизны, тем выше скорость миграции. Граница зерен имеет поверхностное натяжение, и, вследствие стремления границы минимизировать свою энергию путем сокращения своей площади, возникает направленное ее перемещение (рис.1б). Помимо радиуса кривизны, сила, провоцирующая миграцию, зависит также от угла разориентации. В молекулярно-динамической модели сила и скорость миграции оставались в рассматриваемой модели при постоянной температуре постоянными в течение почти всего движения границы, плавно уменьшаясь к концу моделирования.

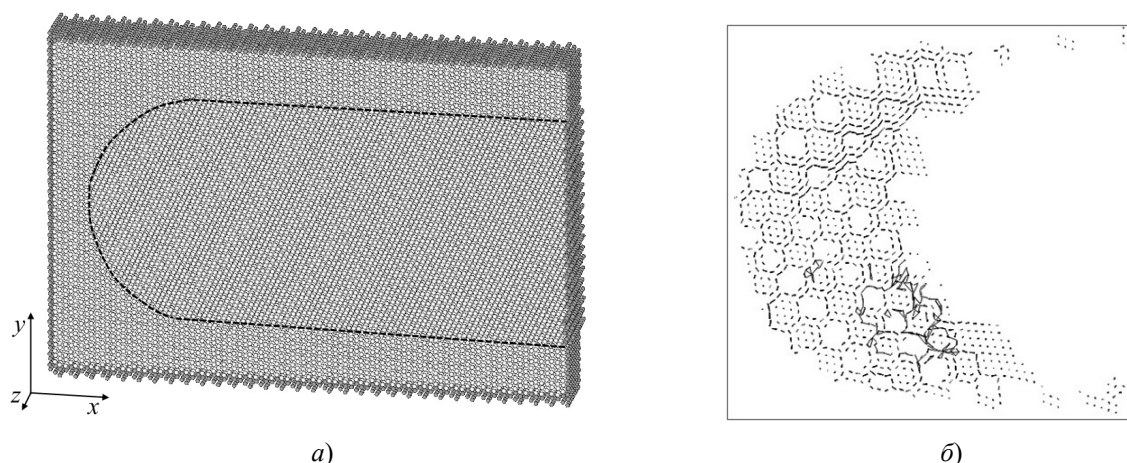


Рис.1. Расчетная ячейка для моделирования миграции границы наклона $\langle 110 \rangle$ (а) и атомные смещения (показаны только те, которые больше 0,08 нм) в процессе миграции границы наклона $\langle 110 \rangle$ с углом разориентации 15° в Ni течение 3000 пс при температуре 1640 К (б)

Fig.1. Computational cell for modeling the migration of the tilt boundary $\langle 110 \rangle$ (a) and atomic displacements (only those that are greater than 0.08 nm are shown) during the migration of the tilt boundary $\langle 110 \rangle$ with a misorientation angle of 15° in Ni for 3000 ps at a temperature 1640 K (b)

Расчетная ячейка имела высоту 20,1 нм, ширину 13,6 нм и толщину 2,5 нм и содержала примерно 60 тысяч атомов. Атомы на краях ячейки вдоль осей X и Y (выделены темно-серым на рис.1а) были зафиксированы для сохранения ориентации кристаллической решетки обоих зерен на границе ячейки. Вдоль оси Z использовались периодические условия. После создания бикристалла проводилась релаксация структуры и последующее охлаждение до температуры, близкой к 0 К.

Примесные атомы углерода и кислорода заданной концентрации вводились случайно по всему объему расчетной ячейки в октаэдрические пустоты ГЦК решетки. Как известно, атомы малого радиуса (H, He, O, N, C и др.) располагаются в ГЦК кристалле преимущественно в октаэдрических пустотах [8].

Описание взаимодействий атомов металла друг с другом проводилось с помощью многочастичных потенциалов Клери и Росато [27]. Взаимодействия атомов металла с атомами углерода и кислорода и примесных атомов друг с другом описывались парными потенциалами Морзе, параметры которых были взяты из работы [28]. Оба потенциала хорошо зарекомендовали себя в ряде исследований, выполненных методом молекулярной динамики [28-33].

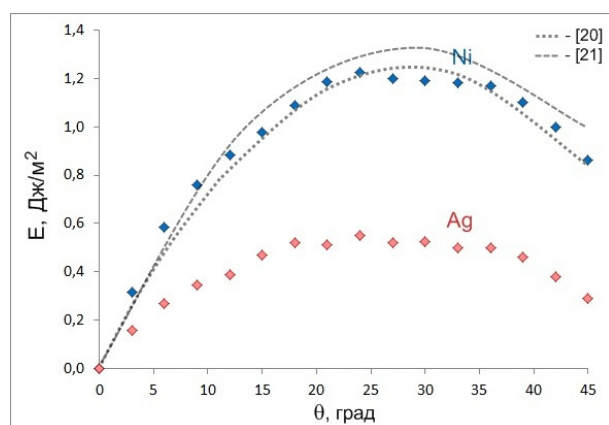
Результаты и обсуждение

Для границ наклона $\langle 110 \rangle$ были рассчитаны значения энергии образования в зависимости от угла разориентации от 0° до 45° (рис.2а). Рассматривались углы от 0° до 45° . Энергия

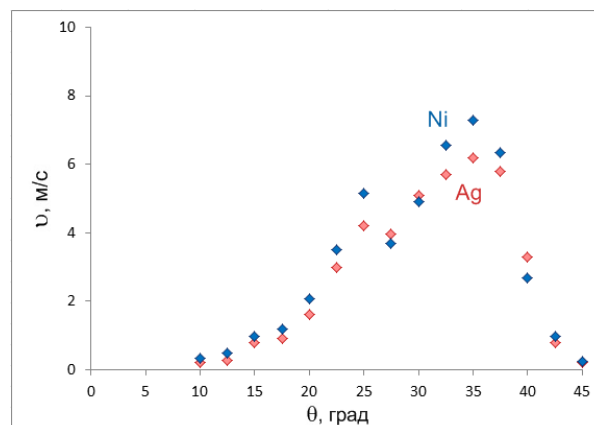
границ рассчитывалась как отношение разности энергий расчетной ячейки с границей и идеального кристалла с таким же числом атомов к площади границы. Перед расчетом энергии проводилась релаксация структуры ячейки. Полученные значения хорошо согласуются с результатами других авторов [20, 21].

Малоугловые границы наклона $\langle 110 \rangle$ уникальны по сравнению с другими границами наклонного типа – зернограницные дислокации в таких границах представляют собой обычные идеальные краевые дислокации с прямыми ядрами, не содержащими изломов (ступенек) на них. На границах наклона с другими осями разориентации, например $\langle 111 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$, зернограницные дислокации более сложные, они, как правило, парные (в одном ядре объединяются дислокации из двух разных наборов с разными плоскостями скольжения) и содержат геометрически обязательные изломы [6, 7]. Дислокации в границах наклона $\langle 110 \rangle$ не имеют изломов и содержат меньше свободного объема, а их энергия существенно ниже энергии границ $\langle 111 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$ при тех же углах разориентации (рис.2а).

Моделирование миграции границ наклона $\langle 110 \rangle$ проводилось при температуре $0,95 \cdot T_{пл}$, где $T_{пл}$ – температура плавления (для используемого потенциала: 1640 К для Ni, 1173 К для Ag [27]). Температура удерживалась постоянной с помощью термостата Нозе-Гувера. Выбор температуры, почти равной температуре плавления, обусловлен тем, что при данной температуре скорость миграции границ наибольшая.



а)



б)

Рис.2. Энергия границ наклона $\langle 110 \rangle$ (а) и скорость их миграции (б) при температуре $0,95 \cdot T_{пл}$ в зависимости от угла разориентации θ в Ni и Ag. Пунктирные линии на рисунке (а) – данные из работ [20, 21] для Ni

Fig.2. Energy of the slope boundaries $\langle 110 \rangle$ (a) and their migration rate (b) at a temperature of $0,95 \cdot T_m$, depending on the angle of misorientation θ in Ni and Ag. Dashed lines in figure (a) are data from [20, 21] for Ni

Миграция границ $\langle 110 \rangle$ происходила почти на порядок медленнее, чем границ $\langle 111 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$ [7] (рис.2б), что, очевидно, связано с относительно низкой энергией границ $\langle 110 \rangle$. При тех же условиях, температуре и размере расчетной ячейки, скорость миграции границ $\langle 111 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$ с углом разориентации более 30° в [7] составляла примерно 30-35 м/с. Пик скорости миграции границ $\langle 110 \rangle$ наблюдался для большеугловых границ в диапазоне углов от 22° до 37° (рис.2б). Затем скорость снова уменьшалась, снижаясь почти до нуля при угле разориентации 45° .

В результате миграции границ наклона $\langle 110 \rangle$ траектории смещений атомов образовывали «сетки» (рис.1б), похожие на те, которые формировались при миграции границ $\langle 111 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$ в [6, 7]. Во время миграции границы в зерне, в сторону которого происходила миграция, образовывались области одинаковой формы, упорядоченно повернутые на угол разориентации, размер которых в случае малоугловых границ зависел от расстояния между соседними зернограницными дислокациями. Форма этих ячеек сетки определяется кристаллографией, и в случае границ $\langle 110 \rangle$ они имеют почти шестиугольную форму. Следует отметить, что ха-

рактер атомных смещений в границах зерен $\langle 110 \rangle$ такой же, как и для границ $\langle 111 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$ [6, 7]. Во всех случаях миграция происходила посредством кооперативных сдвигов в результате согласованного скольжения зернограницных дислокаций. Переползание дислокаций, вызванное, например, диффузией, согласно нашим исследованиям, практически не вносило вклад в механизм миграции границ.

Введение примесных атомов углерода и кислорода приводило к значительному снижению скорости миграции границ зерен, что, очевидно, связано с высокими энергиями связи примесных атомов с ними. На рис.3 показаны зависимости скорости миграции границ наклона $\langle 110 \rangle$ с углом разориентации 35° при температуре $0,95 \cdot T_{пл}$ от концентрации примесных атомов в никеле и серебре. Как видно из приведенных графиков, скорости миграции аналогичных границ в разных чистых металлах имеют близкие значения при разных температурах (1640 К и 1173 К соответственно), но при одинаковом соотношении с температурой плавления – $0,95 \cdot T_{пл}$. Взаимосвязь энергии активации различных процессов с температурой плавления металлов неоднократно подчеркивалась многими исследователями.

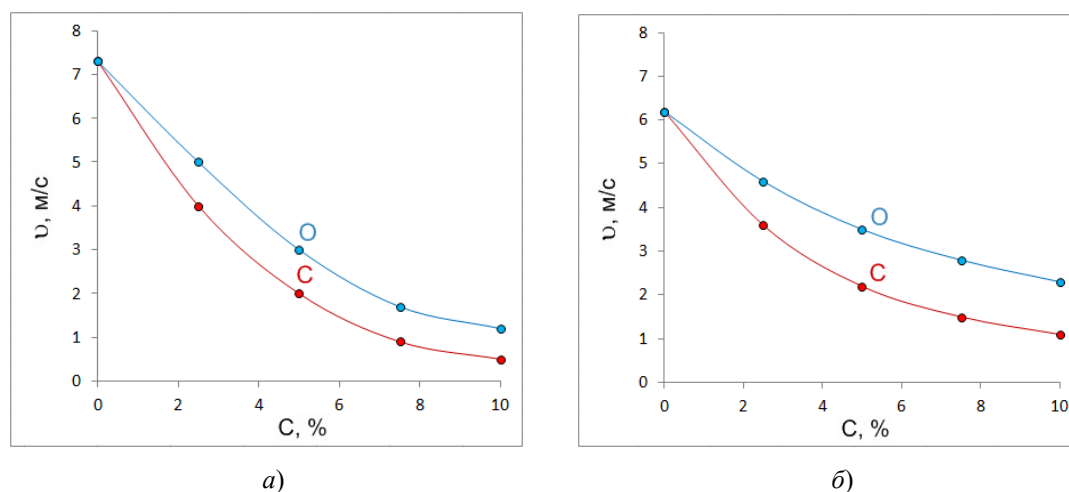


Рис.3. Зависимости скорости миграции границ наклона $\langle 110 \rangle$ с углом разориентации 35° при температуре $0,95 \cdot T_{пл}$ от концентрации примесных атомов углерода и кислорода: а) в Ni; б) в Ag

Fig.3. Dependences of the migration rate of the boundaries of the slope $\langle 110 \rangle$ with a misorientation angle of 35° at a temperature of $0.95 \cdot T_m$ on the concentration of impurity carbon and oxygen atoms: а) in Ni; б) in Ag

Влияние примесей на миграцию границ зерен в Ag оказалось меньше, чем в Ni. Параметр решетки Ni значительно меньше, чем в Ag (3,524 Å и 4,086 Å соответственно), а электроотрицательности, как уже писалось выше, почти одинаковые. Из-за отличия соотношения

размеров атомов металла и примеси отличались, в частности, и энергии связи рассматриваемых примесей с дислокациями: в Ni 0,77 эВ для атомов углерода и 0,62 эВ для атомов кислорода, в Ag 0,30 эВ и 0,10 эВ соответственно.

Эти значения хорошо коррелируют с приведенными на рис.3 графиками.

Энергия связи примесного атома с зернограницной дислокацией рассчитывалась как разность потенциальной энергии расчетной ячейки, содержащей малоугловую границу $\langle 110 \rangle$ и атом примеси в октаэдрической поре кристаллической решетки на таком расстоянии друг от друга, которое исключает взаимодействие дислокации и примесного атома, и потенциальной энергии расчетной ячейки, содержащей атом примеси в ядре дислокации. В обоих случаях перед расчетом энергии расчетной ячейки проводилась релаксация структуры, после которой расчетная ячейка охлаждалась до 0 К. Позиция примесного атома в ядре дислокации подбиралась такой, при которой энергия связи получалась наибольшей, то есть выбиралась энергетически наиболее выгодная позиция примеси в дислокации.

Заключение

Методом молекулярной динамики проведено исследование влияния примесных атомов углерода и кислорода на скорость миграции границ наклона с осью разориентации $\langle 110 \rangle$ в ГЦК металлах никеле и серебре. Получены зависимости энергии рассматриваемых границ и скорости их миграции при температуре $0,95 \cdot T_{пл}$ от угла разориентации. Показано, что скорость миграции границ наклона $\langle 110 \rangle$ при тех же условиях ниже на порядок скорости миграции границ $\langle 111 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$, что, в первую очередь, обусловлено сравнительно низкой энергией границ $\langle 110 \rangle$. Кроме того, малоугловые границы наклона $\langle 110 \rangle$ являются уникальными по сравнению с другими границами наклона – зернограницные дислокации в них представляют собой обычные полные краевые дислокации с ровными ядрами, не содержащими периодически расположенных на них изломов, как в границах $\langle 111 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$.

Во время миграции границы в зерне, в сторону которого происходила миграция, образовывались области одинаковой формы, упорядоченно повернутые на угол разориентации, размер которых в случае малоугловых границ зависел от расстояния между соседними зернограницными дислокациями. Миграция малоугловых границ, как правило, происходила посредством кооперативных сдвигов в результате согласованного скольжения зернограницных

дислокаций. Переползание дислокаций, вызванное диффузией, практически не вносило вклад в механизм миграции границ.

Введение примесных атомов углерода и кислорода приводило к значительному снижению скорости миграции границ зерен. Для примесных атомов углерода и кислорода рассчитаны энергии связи с зернограницными дислокациями в рассматриваемых металлах. Полученные значения хорошо коррелируют с зависимостями скорости миграции границ $\langle 110 \rangle$ от концентрации примесей. Влияние примесей на миграцию границ в Ag оказалось меньше, чем в Ni, что в данном случае объясняется отличием их параметров решетки (4,086 Å и 3,524 Å соответственно), при том, что их электроотрицательности почти одинаковые. Наибольшие эффект примесей на скорость миграции границ и значение энергии связи были получены для системы Ni-C, наименьшие – для Ag-O.

Список литературы

1. Gottstein G., Shvindlerman L.S. Grain Boundary Migration in Metals: Thermodynamics, Kinetics, Applications. Second Edition. Boca Raton: CRC Press, 2009. 711 p.
2. Balluffi R.W., Cahn J.W. Mechanism for diffusion induced grain boundary migration // *Acta Metallurgica*. 1981. V. 29. P. 493–500.
3. Winning M., Rollett A.D., Gottstein G., Srolovitz D.J., Lim A., Shvindlerman L.S. Mobility of low-angle grain boundaries in pure metals // *Philosophical Magazine*. 2010. V. 90. P. 3107–3128.
4. Huang Y., Humphreys F.J. Measurements of grain boundary mobility during recrystallization of a single-phase aluminium alloy // *Acta Materialia*. 1999. V. 47. P. 2259–2268.
5. Huang Y., Humphreys F.J. The effect of solutes on grain boundary mobility during recrystallization and grain growth in some single-phase aluminium alloys // *Materials Chemistry and Physics*. 2012. V. 132. P. 166–174.
6. Poletaev G., Zorya I., Rakitin R. Molecular dynamics study of migration mechanism of triple junctions of tilt boundaries in fcc metals // *Computational Materials Science*. 2018. V. 148. P. 184–189.
7. Poletaev G.M., Zorya I.V., Starostenkov M.D., Rakitin R.Yu., Tabakov P.Ya. Molecular dynamics simulation of the migration of tilt grain

- boundaries in Ni and Ni₃Al // Journal of Experimental and Theoretical Physics. 2019. V. 128, N 1. P. 88–93.
8. Goldschmidt H.J. Interstitial Alloys. London: Butterworths, 1967. 640 p.
9. Аверин В.В., Ревякин А.В., Федорченко В.И. Азот в металлах. М.: Металлургия, 1976. 224 с.
10. De Castro C.L., Mitchell B.S. Crystal growth kinetics of nanocrystalline aluminum prepared by mechanical attrition in nylon media // Materials Science and Engineering A. 2005. V. 396. P. 124–128.
11. Iwanciw J., Podorska D., Wypartowicz J. Simulation of oxygen and nitrogen removal from steel by means of titanium and aluminum // Archives of Metallurgy and Materials. 2011. V. 56. P. 635–644.
12. Lucke K., Detert K. A quantitative theory of grain-boundary motion and recrystallization in metals in the presence of impurities // Acta Metallurgica. 1957. V. 5. P. 628–637.
13. Sursaeva V., Zieba P. Diffusion impurity drag of twin grain boundaries and triple junctions motion in zinc // Defect and Diffusion Forum. 2005. V. 237–240. P. 578–583.
14. Veiga R.G.A., Goldenstein H., Perez M., Becquart C.S. Monte Carlo and molecular dynamics simulations of screw dislocation locking by Cottrell atmospheres in low carbon Fe-C alloys // Scripta Materialia. 2015. V. 108. P. 19–22.
15. Карькина Л.Е., Карькин И.Н., Яковлева И.Л., Зубкова Т.А. Моделирование диффузии углерода вблизи дислокации $b/2[010](001)$ в цементите // Физика металлов и материаловедение. 2013. Т. 114, № 2. С. 172–178.
16. Atrens A. Dependence of the pinning point dislocation energy on the dislocation structure in zirconium alloys // Scripta Metallurgica. 1974. V. 8. P. 401–412.
17. Poletaev G.M., Zorya I.V., Rakitin R.Y., Iliina M.A., Starostenkov M.D. Effect of carbon and oxygen impurity atoms on the migration rate of tilt boundaries in fcc metals: a molecular dynamics simulation // Letters on Materials. 2019. V. 9, No. 4. P. 391–394.
18. Li J., Dillon S.J., Rohrer G.S. Relative grain boundary area and energy distributions in nickel // Acta Materialia. 2009. V. 57. P. 4304–4311.
19. Ratanaphan S., Olmsted D.L., Bulatov V.V., Holm E.A., Rolletta A.D., Rohrer G.S. Grain boundary energies in body-centered cubic metals // Acta Materialia. 2015. V. 88. P. 346–354.
20. Olmsted D.L., Foiles S.M., Holm E.A. Survey of computed grain boundary properties in face-centered cubic metals: I. Grain boundary energy // Acta Materialia. 2009. V. 57. P. 3694–3703.
21. Bulatov V.V., Reed B.W., Kumar M. Grain boundary energy function for fcc metals // Acta Materialia. 2014. V. 65. P. 161–175.
22. Tschopp M.A., Coleman Sh.P., McDowell D.L. Symmetric and asymmetric tilt grain boundary structure and energy in Cu and Al (and transferability to other fcc metals) // Integrating Materials and Manufacturing Innovation. 2015. V. 4. P. 176–189.
23. Malyar N.V., Grabowski B., Dehm G., Kirchlechner C. Dislocation slip transmission through a coherent $\Sigma 3\{111\}$ copper twin boundary: strain rate sensitivity, activation volume and strength distribution function // Acta Materialia. 2018. V. 161. P. 412–419.
24. Liang Y., Yang X., Gong M., Liu G., Liu Q., Wang J. Interactions between dislocations and three-dimensional annealing twins in face centered cubic metals // Computational Materials Science. 2019. V. 161. P. 371–378.
25. Pauling L. The Nature of the Chemical Bond, Third Edition. Ithaca: Cornell University Press, 1960. 664 p.
26. 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.
27. Cleri F., Rosato V. Tight-binding potentials for transition metals and alloys // Physical Review B. – 1993. – V. 48, N 1. – P. 22–33.
28. Poletaev G.M., Zorya I.V., Rakitin R.Y., Iliina M.A. Interatomic potentials for describing impurity atoms of light elements in fcc metals // Materials Physics and Mechanics. 2019. V. 42, N 4. P. 380–388.
29. Полетаев Г.М., Новоселова Д.В., Зоря И.В., Старостенков М.Д. Исследование формирования избыточного свободного объема в тройных стыках границ зерен при кристаллизации на примере никеля // Физика твердого тела. 2018. Т. 60, № 5. С. 846–850.
30. Полетаев Г.М., Зоря И.В. Влияние примесей легких элементов на скорость движения фронта кристаллизации в Ni и Ag: молекулярно-динамическое моделирование // Письма в ЖТФ. 2020. Т. 46, № 12. С. 6–9.

31. Полетаев Г.М., Зоря И.В. Исследование влияния примесей легких элементов на скольжение краевой дислокации в никеле и серебре: молекулярно-динамическое моделирование // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 2020. Т. 158, № 3. С. 485–491.

32. Полетаев Г.М. Самодиффузия в жидких и твердых сплавах системы Ti-Al: молекулярно-динамическое моделирование // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 2021. Т. 160, № 4(10). С. 527–533.

33. Полетаев Г.М., Ракитин Р.Ю. Молекулярно-динамическое исследование влияния концентрации вакансий на скорость миграции границ наклона в никеле // Физика твердого тела. 2021. Т. 63, № 5. С. 582–587.

Информация об авторах

И. В. Зоря – кандидат технических наук, доцент, заведующий кафедрой теплогазоснабжения, водоотведения и вентиляции Сибирского государственного индустриального университета.

Г. М. Полетаев – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой Алтайского государственного технического университета им. И.И. Ползунова.

References

1. Gottstein, G. & Shvindlerman, L. S. (2009). Grain Boundary Migration in Metals: Thermodynamics, Kinetics, Applications. Second Edition. CRC Press. P. 711.
2. Balluffi, R. W. & Cahn, J. W. (1981). Mechanism for diffusion induced grain boundary migration. *Acta Metallurgica*, 29, 493–500. [https://doi.org/10.1016/0001-6160\(81\)90073-0](https://doi.org/10.1016/0001-6160(81)90073-0)
3. Winning, M., Rollett, A. D., Gottstein, G., Srolovitz, D. J., Lim, A. & Shvindlerman, L. S. (2010). Mobility of low-angle grain boundaries in pure metals. *Philosophical Magazine*, 90, 3107–3128. <https://doi.org/10.1080/14786435.2010.481272>
4. Huang, Y. & Humphreys, F. J. (1999). Measurements of grain boundary mobility during recrystallization of a single-phase aluminium alloy. *Acta Materialia*, 47, 2259–2268.
5. Huang, Y. & Humphreys, F. J. (2012). The effect of solutes on grain boundary mobility during recrystallization and grain growth in some single-

phase aluminium alloys. *Materials Chemistry and Physics*, 132, 166–174.

6. Poletaev, G., Zorya, I. & Rakitin, R. (2018). Molecular dynamics study of migration mechanism of triple junctions of tilt boundaries in fcc metals. *Computational Materials Science*, 148, 184–189.

7. Poletaev, G. M., Zorya, I. V., Starostenkov, M. D., Rakitin, R. Yu. & Tabakov, P. Ya. (2019). Molecular dynamics simulation of the migration of tilt grain boundaries in Ni and Ni₃Al. *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 128(1), 88–93.

8. Goldschmidt, H. J. (1967). Interstitial Alloys. Butterworths. P. 640.

9. Averin, V. V., Revyakin, A. V. & Fedorchenko, V. I. Nitrogen in metals. *Metallurgiya*. P. 224. (In Russ.).

10. De Castro, C. L. & Mitchell, B. S. (2005). Crystal growth kinetics of nanocrystalline aluminum prepared by mechanical attrition in nylon media. *Materials Science and Engineering A*, 396, 124–128.

11. Iwanciw, J., Podorska, D. & Wypartowicz, J. (2011). Simulation of oxygen and nitrogen removal from steel by means of titanium and aluminum. *Archives of Metallurgy and Materials*, 56, 635–644.

12. Lucke, K. & Detert, K. (1957). A quantitative theory of grain-boundary motion and recrystallization in metals in the presence of impurities. *Acta Metallurgica*, 5, 628–637.

13. Sursaeva, V. & Zieba, P. (2005). Diffusion impurity drag of twin grain boundaries and triple junctions motion in zinc. *Defect and Diffusion Forum*, 237–240, 578–583.

14. Veiga, R. G. A., Goldenstein, H., Perez, M. & Becquart, C. S. (2015). Monte Carlo and molecular dynamics simulations of screw dislocation locking by Cottrell atmospheres in low carbon Fe-C alloys. *Scripta Materialia*, 108, 19–22.

15. Kar'kina, L. E., Kar'kin, I. N., Yakovleva, I. L. & Zubkova, T. A. (2013). Computer simulation of carbon diffusion near b/2[010](001) dislocation in cementite. *The Physics of Metals and Metallography*, 114(2), 155–161. (In Russ.).

16. Atrens, A. (1974). Dependence of the pinning point dislocation energy on the dislocation structure in zirconium alloys. *Scripta Metallurgica*, 8, 401–412.

17. Poletaev, G. M., Zorya, I. V., Rakitin, R. Y., Iliina, M. A. & Starostenkov, M. D. (2019). Effect of carbon and oxygen impurity atoms on the

migration rate of tilt boundaries in fcc metals: a molecular dynamics simulation. *Letters on Materials*, 9(4), 391–394.

18. Li, J., Dillon, S. J. & Rohrer, G. S. (2009). Relative grain boundary area and energy distributions in nickel. *Acta Materialia*, 57, 4304–4311.

19. Ratanaphan, S., Olmsted, D. L., Bulatov, V. V., Holm, E. A., Rolletta, A. D. & Rohrer, G. S. (2015). Grain boundary energies in body-centered cubic metals. *Acta Materialia*, 88, 346–354.

20. Olmsted, D. L., Foiles, S. M. & Holm, E. A. (2009). Survey of computed grain boundary properties in face-centered cubic metals: I. Grain boundary energy. *Acta Materialia*, 57, 3694–3703.

21. Bulatov, V. V., Reed, B. W. & Kumar, M. (2014). Grain boundary energy function for fcc metals. *Acta Materialia*, 65, 161–175.

22. Tschopp, M. A., Coleman, Sh. P. & McDowell, D. L. (2015). Symmetric and asymmetric tilt grain boundary structure and energy in Cu and Al (and transferability to other fcc metals). *Integrating Materials and Manufacturing Innovation*, 4, 176–189.

23. Malyar, N. V., Grabowski, B., Dehm, G. & Kirchlechner, C. (2018). Dislocation slip transmission through a coherent $\Sigma 3\{111\}$ copper twin boundary: strain rate sensitivity, activation volume and strength distribution function. *Acta Materialia*, 161, 412–419.

24. Liang, Y., Yang, X., Gong, M., Liu, G., Liu, Q. & Wang, J. (2019). Interactions between dislocations and three-dimensional annealing twins in face centered cubic metals. *Computational Materials Science*, 161, 371–378.

25. Pauling, L. (1960). The Nature of the Chemical Bond, Third Edition. Cornell University Press. P. 664.

26. Protasova, S. G., Sursaeva, V. G. & Shvindlerman, L. S. (2003). Study of the motion of individual triple junctions in aluminum. *Physics of the Solid State*, 45(8), 1471–1474. (In Russ.).

27. Cleri, F. & Rosato, V. (1993). Tight-binding potentials for transition metals and alloys. *Physical Review B*, 48, 22–33.

28. Poletaev, G. M., Zorya, I. V., Rakitin, R. Y. & Iliina, M. A. (2019). Interatomic potentials for describing impurity atoms of light elements in fcc metals. *Materials Physics and Mechanics*, 42(4), 380–388.

29. Poletaev, G. M., Novoselova, D. V., Zorya, I. V. & Starostenkov, M. D. (2018). Formation of the excess free volume in triple junctions during nickel crystallization. *Physics of the Solid State*, 60(5), 847–851. (In Russ.).

30. Poletaev, G. M. & Zorya, I. V. (2020). Influence of light impurities on the crystal-melt interface velocity in Ni and Ag. Molecular dynamics simulation. *Technical Physics Letters*, 46(6), 575–578. (In Russ.).

31. Poletaev, G. M. & Zorya, I. V. (2020). Effect of light element impurities on the edge dislocation glide in nickel and silver: molecular dynamics simulation. *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 131(3), 432–436. (In Russ.).

32. Poletaev, G. M. (2021) Self-diffusion in liquid and solid alloys of the Ti–Al system: molecular-dynamics simulation. *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 133(4), 455–460. (In Russ.).

33. Poletaev, G. M. & Rakitin, R. Yu. (2021). Molecular-dynamics simulation of the influence of a vacancy concentration on the tilt boundary migration velocity in nickel. *Physics of the Solid State*, 63(5), 682–687. (In Russ.).

Information about the authors

I. V. Zorya – Candidate of Technical Sciences, Assistant Professor, Head of the Department of Heat and Gas Supply, Wastewater Disposal and Ventilation, Siberian State Industrial University.

G. M. Poletaev – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Head of department, I.I. Polzunov Altai State Technical University.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.
The authors declare that there is no conflict of interest.

Статья поступила в редакцию 12.11.2021; одобрена после рецензирования 23.11.2021; принята к публикации 29.11.2021.

The article was received by the editorial board on 12 Nov. 21; approved after reviewing 23 Nov. 21; accepted for publication 29 Nov. 21.