

УДК 538.911

DOI: 10.17223/00213411/62/4/109

*Г.М. ПОЛЕТАЕВ<sup>1</sup>, М.Д. СТАРОСТЕНКОВ<sup>1</sup>, Р.Ю. РАКИТИН<sup>2</sup>, В.Я. ЦЕЛЛЕРМАЕР<sup>3</sup>, М.А. ИЛЬИНА<sup>4</sup>*

## ОПРЕДЕЛЕНИЕ РАДИУСА ТРОЙНЫХ СТЫКОВ ГРАНИЦ НАКЛОНА В НИКЕЛЕ: МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Методом молекулярной динамики проведено исследование распределения свободного объема и энергии в области тройных стыков большеугловых границ наклона с осями разориентировки  $\langle 100 \rangle$  и  $\langle 111 \rangle$  в никеле, полученных в результате кристаллизации. Кристаллизация моделировалась от трех кристаллических зародышей при варьируемой величине свободного объема. Показано, что введенный свободный объем в процессе кристаллизации концентрируется преимущественно в области границ зерен, причем по мере приближения к месту стыка границ доля свободного объема увеличивается. По распределению энергии в области тройных стыков был определен их эффективный радиус. В границах наклона  $\langle 100 \rangle$  и образованных ими стыках свободный объем при кристаллизации рассеивается эффективнее, чем в стыках, образованных границами  $\langle 111 \rangle$ . По этой причине энергетический радиус тройного стыка границ  $\langle 100 \rangle$  с ростом введенного свободного объема изменялся слабо: от 5 до 7 Å, тогда как радиус стыка границ  $\langle 111 \rangle$  при введении 2 % вакансий в стартовую расчетную ячейку достигал 14 Å.

**Ключевые слова:** молекулярная динамика, тройной стык, граница зерен, граница наклона, свободный объем.

### Введение

Тройной стык границ зерен представляет собой линейный дефект, вдоль которого сопрягаются три межзеренные границы. Согласно экспериментальным данным, диффузия в области тройного стыка границ зерен протекает значительно интенсивнее, чем вдоль самих границ [1, 2], вклад тройных стыков в диффузию возрастает по мере уменьшения среднего размера зерна в материале. Кроме того, тройные стыки играют важную роль в процессах, связанных с пластической деформацией, генерацией дислокаций, рекристаллизацией [3]. Тройной стык зачастую характеризуется относительно более «рыхлой» структурой (даже с включениями аморфной фазы [4]), то есть с более высоким содержанием свободного объема по сравнению с образующими этот стык границами зерен. Вместе с тем, например в работах [5–7], выполненных с помощью компьютерного моделирования, было получено, что диффузионная проницаемость тройного стыка не сильно отличается, или не отличается вовсе, от проницаемости границ зерен.

В работах [8, 9] с помощью метода молекулярной динамики мы проанализировали различные причины формирования свободного объема в тройных стыках и пришли к выводу, 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 Бюргерса при зернограницном проскальзывании и образование в стыке дислокационного или дисклинационного комплекса представляется второстепенной причиной.

Цель настоящей работы заключается в определении с помощью метода молекулярной динамики эффективного радиуса тройных стыков большеугловых границ наклона с осями разориентировки  $\langle 100 \rangle$  и  $\langle 111 \rangle$  в никеле. Никель выбран как хорошо изученный типичный ГЦК-металл, который также является основой многих современных жаропрочных сплавов. Радиус тройного стыка можно определить по распределению в пространстве того или иного локального свойства (распределению потенциальной энергии, диффузионной проницаемости, свободного объема и т.д.), выделяющего дефектную область на фоне чистого кристалла. В настоящей работе исследование проводилось по распределению потенциальной энергии.

### Описание модели

Рассматривались тройные стыки границ наклона с осями разориентировки  $\langle 100 \rangle$  и  $\langle 111 \rangle$ . Тройной стык создавался в центре расчетного блока путем сопряжения трех зерен, разориентированных относительно друг друга с помощью поворота вокруг оси, параллельной линии тройного стыка. Углы между границами в стыке изначально задавались  $120^\circ$ . После вырезания сегментов

Уважаемые читатели!

Доступ к полнотекстовой версии журнала  
**«Известия высших учебных заведений. Физика»**  
осуществляется на платформе  
Научной электронной библиотеки eLIBRARY.RU  
на платной основе:

<https://elibrary.ru/contents.asp?titleid=7725>