УДК 538.911

DOI: 10.17223/00213411/63/12/145

Г.М. ПОЛЕТАЕВ¹, И.В. ЗОРЯ², Р.Ю. РАКИТИН³, М.Д. СТАРОСТЕНКОВ¹

ВЛИЯНИЕ ПРИМЕСНЫХ АТОМОВ УГЛЕРОДА И КИСЛОРОДА НА ДИФФУЗИЮ ПО ГРАНИЦАМ НАКЛОНА В НИКЕЛЕ И СЕРЕБРЕ

Методом молекулярной динамики проведено исследование влияния примесных атомов углерода и кислорода на диффузию по границам зерен наклона с осями разориентации $\langle 111 \rangle$, $\langle 100 \rangle$ и $\langle 110 \rangle$ в ГЦК-металлах Ni и Ag. Показано, что примеси в большинстве случаев приводят к увеличению коэффициента самодиффузии по границам зерен, что обусловлено деформацией кристаллической решетки вблизи примесных атомов, из-за чего вдоль границ возникают дополнительные искажения и свободный объем. При этом чем меньше изначально граница зерен содержит свободного объема, тем сильнее примеси оказывают влияние на самодиффузию вдоль нее. В связи с этим наибольшее влияние примесей наблюдалось для границ наклона $\langle 110 \rangle$ и наименьшее – для границ $\langle 100 \rangle$. Примесь углерода оказывала влияние на самодиффузию по рассматриваемым границам, как правило, сильнее, чем кислород.

Ключевые слова: молекулярная динамика, металл, примесь, граница зерен, граница наклона, диффузия.

Введение

Взаимодействие примесных атомов легких элементов с металлами имеет большой научный и технологический интерес. Атомы углерода, азота, кислорода даже при небольших концентрациях существенно влияют на свойства металлов, что, в первую очередь, обусловлено их взаимодействием с дефектами кристаллической решетки. Несмотря на важность понимания механизмов и процессов, лежащих в основе влияния легирования примесями легких элементов на свойства металлов, в настоящее время остается много вопросов, касающихся поведения примесей на атомном уровне в металлической матрице. Одним из таких вопросов является определение влияния примесей на процессы, протекающие с участием границ зерен. Известно, что границы зерен в поликристаллах определяют многие их свойства, диффузия вдоль границ зерен протекает значительно интенсивнее, чем в объеме кристалла. Вместе с тем влияние примесей на зернограничную диффузию в настоящее время изучено недостаточно хорошо.

Для малоугловых границ энергия связи, очевидно, близка к энергии связи примесных атомов с дислокациями. Например, в [1, 2] были получены значения энергии связи атома углерода с дислокацией в железе в интервале 0.4–0.7 эВ, в [3] для атомов кислорода в цирконии – 0.5 эВ. Порядок величин указывает на достаточно высокую связь примесных атомов как с дислокациями, так и с границами зерен. Известно, что границы зерен, как и отдельные дислокации, собирают вокруг себя атмосферы примесей, подобные атмосфере Коттрелла [4]. Например, миграционная подвижность границ в этом случае значительно снижается, поскольку, как и в случае дислокаций, требуется дополнительная энергия для отрыва границы от атмосферы [5]. Относительно влияния примесей на диффузию по границам известно сравнительно мало. В [6], например, проводилось исследование методом молекулярной динамики влияния гипотетических примесей (не ассоциированных с какими-либо химическими элементами) на диффузию по границе зерен в алюминии, где было получено, что примеси слабо влияют на интенсивность зернограничной диффузии.

Настоящая работа посвящена исследованию влияния примесных атомов углерода и кислорода на диффузию по границам зерен наклона с осями разориентации $\langle 100 \rangle$, $\langle 111 \rangle$ и $\langle 110 \rangle$ в никеле и серебре. Выбор металлов Ni и Ag обусловлен тем, что они имеют существенно отличающиеся радиусы атомов (1.44 Å для Ag и 1.24 Å для Ni [7]), но почти одинаковую электроотрицательность (1.93 для Ag и 1.91 для Ni по шкале Полинга [8]). Другими словами, данные металлы по отношению к взаимодействию с примесными атомами отличает преимущественно размерный фактор – параметры кристаллических решеток.

Описание модели

Моделирование проводилось с помощью метода молекулярной динамики. Расчетная ячейка (рис. 1) содержала около 30000 атомов. Взаимодействия атомов металла друг с другом описывались многочастичными потенциалами Клери – Розато [9], построенными в рамках модели сильной

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>