

ВЛИЯНИЕ НА ПОДВИЖНОСТЬ ГРАНИЦ ЗЕРЕН В НИКЕЛЕ ПРИМЕСНЫХ АТОМОВ АЛЮМИНИЯ

Зюзин Денис Игоревич

Студент 1 курса магистратуры, группы 8КТМ-01

Полетаев Геннадий Михайлович, доктор ф.м.н., профессор

Алтайский государственный технический университет

им. И.И. Ползунова,

г. Барнаул, Россия

Полученные в обычных условиях металлы по своему строению являются поликристаллами. Кристаллы, из которых состоят такие металлы, называются зернами. Каждое такое зерно имеет неправильную форму и свою ориентировку кристаллической решетки относительно соседних зерен.

Главную роль в большом количестве процессов в металлах играют границы зерен, межфазные и межзеренные границы. Это относится и к поликристаллам, композиционным материалам и механическим смесям с малым размером фаз-компонентов. В таких случаях влияние границ зерен на макроскопические свойства материалов высоко.

Границы зерен служат основными дефектами поликристаллов. Многие свойства материалов зависят от ГЗ. Важное место в процессах деформации и разрушении при повышенных температурах занимают границы зерен. Макроскопические свойства при таких условиях будут зависеть от размеров зерен и от микроскопических свойств, их структурного состояния. Процесс возврата, рекристаллизации, сегрегации примесей будут зависеть от влияния свойств ГЗ, влияющих на процессы формирования микроскопической структуры.

Стоит отметить, что весомая доля теоретических и экспериментальных данных по границам зерен содержит описание специальных границ. В настоящее время обычные границы, имеющие неупорядочное строение, мало исследованы [1]. На данном этапе времени, ни одна из исследованных моделей границ, не может в полной мере оценить термодинамические параметры границы и рассчитать их кинетические свойства.

Знание структуры энергетических характеристик ГЗ способно объяснить явления, протекающие в материалах: рост зерен, деформация, сегрегация примесей, разрушение и т.д. Как правило, границы зерен рассматривают как стоки для примесных атомов и точечных дефектов. Но пристальное изучение взаимодействий ГЗ с дефектами и примесями на атомном уровне начались не так давно.

Миграция ГЗ стоит в основе рекристаллизации. Такое явление необходимо рассматривать как важный фактор в получении материалов с требуемыми свойствами. Тут стоит учитывать физические механизмы процесса миграции для управления рекристаллизацией и заданием свойств получаемых материалов. Но не во всех случаях процесс рекристаллизации необходим. Знание механизмов миграции дает возможность предположить методики стабилизации структуры и торможения процессов упрочнения зерна

с течением времени. Изменение конфигурации миграции ГЗ играет значимую роль при деформации кристаллов с малым размером зерна. Поэтому сейчас большое внимание уделено к изучению вопроса подвижности границ зерен.

Не смотря на то, что в ранних работах есть множество данных по движению границ, примесей на миграцию получались из исследований роста зерен. К большому сожалению, еще не разработана строгая теория, которая объяснить влияние вакансий и примесей на скорость миграций. Поэтому влияние примесей миграцию является одним из важных вопросов. Ни одна из моделей границ, не позволяет в полной мере оценить термодинамические параметры границы и рассчитать их кинетические свойства.

Такие задачи можно решить, используя метод молекулярной динамики. Такой метод позволяет решать задачи, касающиеся проблем структурно-энергетических трансформаций в различных материалах. Это является одним из весомых достоинств по отношению к другим методам. Задавая начальные и граничные условия или изменяя в процессе моделирования значения параметров, можно с достаточно большой достоверностью реализовать механизмы, протекающие в реальных структурах.

Он позволяет рассчитать различные свойства системы, к примеру, как термодинамические, энергию, давление, энтропию, так и кинетические коэффициенты диффузии, частоты колебаний атомов. Главный недостаток метода - большие затраты машинного времени, требуемые для выполнения расчетов. Сейчас метод хорошо показал себя для металлов с ГЦК и ГПУ решетками.

На сегодняшний день метод молекулярной динамики получил бурное развитие. Идея метода заключается в расчете на компьютере траекторий движения частиц, моделирующих конкретный физический объект. Примерами таких объектов считают: отдельную крупную молекулу, жидкость или твердое тело. Метод молекулярной с использованием классической механики, строится на решении системы обыкновенных дифференциальных уравнений движения Ньютона для системы атомов. Значительная часть расчетов по этому методу осуществлены с помощью классической механики Ньютона. Стоит сказать, что имеется много работ, в которых метод молекулярной динамики комбинируется с решением уравнений Шредингера квантовой механики [3, 4].

Если сравнивать с другими методами компьютерного моделирования, то этот метод обладает значительными достоинствами. Он позволяет решать задачи, которые касаются структурно-энергетических трансформаций в кристаллических и не кристаллических материала. Этим же образом можно решать задачи, основывающиеся на деформации и аморфизации атомных систем, в условиях температурно-силовых воздействий.

В настоящей работе была использована методика исследования миграции границ зерен наклона. Такая методика была предложена и в дальнейшем развита в работах [1, 2]. Из-за стремления границы свести к минимуму собственную энергию, появляется сила натяжения границы. В результате этого

происходит направленное смещение (передвижение) границы в сторону уменьшения площади.

Для исследования факторов, влияющих на изменение скорости миграции ГЗ недостаточно использовать двухмерную модель. Этому свидетельствуют результаты недавних работ [5,6], где моделирование тройных стыков происходило в двухмерной модели. Поэтому, для выполнения выбранных и поставленных задач, необходимо использовать трехмерное моделирование в методе молекулярной динамики.

В этой работе рассматривался бикристалл с осями разориентации границ зерен $\langle 111 \rangle, \langle 100 \rangle$. Модель - небольшая пластина, содержащая искривленную в виде арки границу зерен. Использовались следующие граничные условия: периодические условия располагались по оси Z. В тот же момент боковая поверхность бикристалла имела жесткие граничные условия, в которой атомные слои, располагающиеся на границе, были зафиксированы.

Наличие примесных атомов Al снижает скорость миграции границ $\langle 111 \rangle$ в Ni. Также стоит отметить в первую очередь, это то, что примесные атомы ведут себя хаотично друг относительно друга. Некоторые атомы остаются на своих местах, даже после полного окончания эксперимента, некоторые атомы «цепляются» за границу и вместе с ней мигрируют вниз. Явление происходит при температурах, когда диффузия заторможена. Но стоит отметить, что происходит диффузионный перенос по ГЗ. В таких условиях миграция не будет происходить без диффузионного потока. Это означает, что эффект обусловлен диффузией растворенных атомов, а не сегрегацией атомов на границе. Также эксперимент показал, что наличие примесей снижает скорость миграции ГЗ.

1. Скорость миграции границ зерен наклона увеличивается с ростом температуры и угла разориентации.
2. С ростом концентрации примесных атомов алюминия скорость миграции ГЗ наклона в никеле уменьшается.
3. Границы наклона $\langle 111 \rangle$ мигрирует интенсивнее границ с ориентацией $\langle 100 \rangle$ при тех же углах разориентации и температуре.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Чувильдеев В.Н. Микромеханизм самодиффузии в расплавах металлов. //Часть 1. Модель самодиффузии. Расплавы:, 1996, № 2, с. 919.
2. Розенберг В.М. Ползучесть металлов - М:Металлургия, 1967, 267 с.
3. Новое в синергетике: Взгляд в третье тысячелетие. /под ред. Малинецкого Г.Г., Курдюмова С.П. - М.: Наука, 2002.- 478 с.
4. Nose S. A unified formulation of the constant temperature molecular dynamics methods // J. Chem. Phys. - 1984. - V.81, № 1. - P. 511-519.
5. Козлов Э.В., Конева Н.А., Попова Н.А. Зеренная структура, геометрически необходимые дислокации и частицы вторых фаз в поликристаллах микро- и мезоуровня // Физическая мезомеханика. - 2009. - Т.12, №4. - С. 93-106.
6. Gottstein G., Shvindlerman L.S. Grain Boundary Migration in Metals: Thermodynamics, Kinetics, Applications. Second Edition. - [Boca Raton](#): CRC Press, 2009. - 711 p.