



ТОМСКИЙ
ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ

На правах рукописи

Зоря Ирина Васильевна

**ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ АТОМОВ С, N, O, H С ДЕФЕКТАМИ
КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ
В ГЦК МЕТАЛЛАХ НА ПРИМЕРЕ Ni, Ag, Al**

Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

Специальность 1.3.8 – физика конденсированного состояния

Томск – 2022

Работа выполнена в ФГБОУ ВО «Алтайский государственный технический
университет им. И.И. Ползунова»

Научный консультант:	Полетаев Геннадий Михайлович, доктор физико-математических наук, профессор
Официальные оппоненты:	Зольников Константин Петрович, доктор физико-математических наук, профессор, ФГБУН «Институт физики прочности и материаловедения СО РАН», лаборатория компьютерного конструирования материалов, главный научный сотрудник, г. Томск; Клопотов Анатолий Анатольевич, доктор физико-математических наук, профессор, ФГБОУ ВО «Томский государственный архитектурно-строительный университет», профессор кафедры прикладной механики и материаловедения, г. Томск; Маркидонов Артем Владимирович, доктор физико-математических наук, доцент, Кузбасский гуманитарно-педагогический институт ФГБОУ ВО «Кемеровский государственный университет», заведующий кафедрой информатики и вычислительной техники им. В.К. Буторина, г. Новокузнецк.

Защита состоится «14» сентября 2022 г. в 15:00 на заседании диссертационного совета ДС.ТПУ.03 при ФГАОУ ВО «Национальный исследовательский Томский политехнический университет» по адресу: 634028, г. Томск, пр. Ленина, 2а, строение 4, аудитория 245.

С диссертацией можно ознакомиться в научно-технической библиотеке ФГАОУ ВО «Национальный исследовательский Томский политехнический университет» по адресу: г. Томск, ул. Белинского, 55 и на сайте: <https://portal.tpu.ru/council/indcouncils/6053/worklist>

Автореферат разослан «___» _____ 2022 г.

Ученый секретарь

диссертационного совета ДС.ТПУ.03,
доктор технических наук



Гынгазов С.А.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы исследования

Взаимодействие примесных атомов легких элементов с металлами имеет большой научный и технологический интерес. Наиболее распространенные среди них, водород, кислород, азот и углерод, участвуют во многих инженерных и естественных процессах диффузионного происхождения, обладают высокой химической активностью и уже при низких концентрациях сильно влияют на свойства металлов. Обладая малыми размерами по сравнению с размерами атомов металла, примесные атомы легких элементов эффективно взаимодействуют с дефектами кристаллической решетки металлов, оказывая влияние на подвижность дефектов и возможность их трансформации. Важнейшими для практики проявлениями такого взаимодействия являются, например, влияние примесей и образуемых ими атмосфер Коттрелла и Сузуки на подвижность дислокаций в металлах и, тем самым, на прочностные свойства, а также выделение примесей на границах зерен, приводящее к торможению процессов роста зерен и рекристаллизации, что используется, например, для решения актуальной проблемы неустойчивости нанокристаллической структуры металлических материалов. Важным является также знание особенностей взаимодействия примесных атомов с точечными дефектами: вакансиями, вакансионными кластерами, собственными межузельными атомами, ответственными, в частности, за процессы диффузионного характера и способность удерживать примеси за счет положительной энергии связи с ними.

Отдельно среди других атомов легких элементов располагается водород. Атомы водорода, обладая уникально малой массой и размерами по сравнению с другими атомами внедрения в металлах, имеют исключительно высокую диффузионную подвижность. Взаимодействие водорода с металлами остается предметом интенсивного изучения на протяжении более чем ста лет. С одной стороны, это обусловлено практическим интересом в использовании системы металл-водород: создание радиационноустойчивых материалов, фильтров для получения чистого водорода, в том числе для разделения изотопов, аккумуляция и хранение легких газов в металлах и сплавах, проблема транспортировки водорода. С другой стороны, это связано с нежелательным воздействием водорода на свойства материалов (охрупчивание, коррозия, распространение трещин).

Степень разработанности темы

Ввиду высокой важности и долгой истории вопроса влияния примесных атомов на свойства металлов и сплавов, в настоящее время накоплен большой материал как по влиянию отдельных примесей легких элементов на конкретные свойства металлических материалов, так и по структурно-энергетическим аспектам примесных атомов в металлах на атомном уровне. Тем не менее, в связи со сложностью и многообразием данной темы, в настоящее время остается до-

вольно много нерешенных вопросов, особое место среди которых занимают проблемы взаимодействия примесных атомов с различными дефектами кристаллической решетки на атомном уровне.

Цель работы заключается в определении с помощью метода молекулярной динамики структурно-энергетических характеристик и особенностей взаимодействия примесных атомов легких элементов С, N, О, Н с различными дефектами кристаллической структуры ГЦК металлов на примере Ni, Ag и Al.

Для достижения поставленной цели решались следующие **задачи**:

1. Моделирование примесных атомов Н, С, О, N в идеальных ГЦК кристаллах металлов: определение структурных и энергетических характеристик, изучение механизма диффузии и получение диффузионных характеристик примесных атомов в кристаллах металлов.
2. Исследование взаимодействия примесных атомов с точечными дефектами и их комплексами в металлах. Расчет энергии связи примесных атомов с дефектами и определение предпочтительных мест расположения примесных атомов в дефектах.
3. Изучение взаимодействия примесных атомов с краевыми дислокациями. Определение механизма торможения примесями движущихся краевых дислокаций в ГЦК металлах.
4. Исследование взаимодействия примесей с границами наклона, определение влияния примесей на диффузию вдоль границ наклона.
5. Исследование миграции границ зерен наклона и влияния на скорость и механизм миграции примесных атомов.
6. Изучение влияния примесных атомов на скорость движения фронта кристаллизации в металлах, определение механизма торможения кристаллизации примесями.
7. Исследование взаимодействия примесных атомов с тройными стыками границ зерен в металлах. Изучение влияния примесей на диффузию вдоль стыков, на скорость и механизм миграции тройных стыков.

Объекты исследования: атомы легких элементов С, N, О, Н в кристаллической решетке и вблизи дефектов в ГЦК металлах Ni, Ag и Al.

Предмет исследования: процессы взаимодействия примесных атомов легких элементов С, N, О, Н с различными дефектами кристаллической структуры ГЦК металлов на примере Ni, Ag и Al.

Научная новизна диссертационной работы заключается в том, что впервые с помощью метода молекулярной динамики в рамках одного подхода проведено исследование взаимодействия примесных атомов легких элементов (С, N, О, Н) с различными дефектами кристаллической структуры в ГЦК металлах. Построены потенциалы Морзе для описания взаимодействий

атомов легких элементов C, N, O с атомами металлов Al, Ag, Ni. Рассчитаны энергии связи примесных атомов с различными дефектами и найдены предпочтительные места расположения примесных атомов в рассматриваемых дефектах. Получены значения энергии активации диффузии примесных атомов в кристаллической решетке рассматриваемых металлов и вдоль ядер краевых дислокаций. Изучено влияние примесей на диффузионную подвижность точечных дефектов и диффузионную проницаемость границ зерен и их тройных стыков. Найдены зависимости порогового напряжения скольжения краевой дислокации в ГЦК металлах от концентрации примесных атомов. Определены атомные механизмы миграции границ наклона с осями разориентации $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$ и влияние на скорость их миграции концентрации примесных атомов. Выявлен механизм влияния примесных атомов на скорость движения фронта кристаллизации в металлах.

Теоретическая значимость работы состоит в том, что полученные результаты могут быть использованы для развития теоретических представлений о взаимодействии примесных атомов легких элементов с дефектами в металлах, для создания математических моделей скольжения дислокаций, диффузии, миграции границ зерен, кристаллизации, учитывающих закономерности и количественные характеристики, найденные в настоящей работе. Построенные в настоящей работе потенциалы могут быть использованы в дальнейших исследованиях с помощью компьютерного моделирования взаимодействия примесей с металлами.

Практическая значимость работы состоит в том, что эффективность предложенных научно-исследовательских решений подтверждена справками о промышленном внедрении результатов диссертационной работы. Кроме того, некоторые результаты диссертационной работы использованы в качестве демонстрационного материала для студентов физических специальностей на курсах профессиональной переподготовки, на их базе созданы работы для лабораторного практикума, что подтверждено справкой об использовании результатов в учебном процессе.

Методология диссертационного исследования.

Изучение особенностей взаимодействия примесных атомов с дефектами кристаллической решетки на атомном уровне с помощью реальных экспериментов в настоящее время затруднительно ввиду необходимости исследования динамики структуры на атомном уровне. Для решения поставленных в работе задач наиболее эффективным методом является компьютерное моделирование, в частности, метод молекулярной динамики, который позволяет не только исследовать атомную структуру материалов и с удовлетворительной точностью рассчитывать структурно-энергетические характеристики различных дефектов, но и изучать в динамике процессы, происходящие на атомном уровне, с использованием разнообразных наглядных визуализаторов.

Научные положения, выносимые на защиту:

1. Рассчитаны энергии связи примесных атомов с различными дефектами кристаллической структуры в Ni, Ag, Al: вакансиями, бивакансиями, тетраэдрами дефектов упаковки, собственными межузельными атомами, частичными и вершинными дислокациями. Найдены предпочтительные места расположения примесных атомов в данных дефектах.

2. Найдены зависимости порогового напряжения скольжения дислокации в ГЦК металлах от концентрации примесных атомов. Основной причиной роста порогового напряжения при введении примесей в рассмотренных системах является закрепление примесных атомов на дефекте упаковки между частичными дислокациями.

3. 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.

4. Миграция границ наклона сопровождается согласованным разделением структуры зерна, в сторону которого происходит миграция, на области одинаковой формы и размера, поворачивающиеся на угол разориентации до достижения кристаллической ориентации другого зерна. Размер областей зависит от угла разориентации и для малоугловых границ равен расстоянию между соседними дислокациями. Образование и поворот данных областей связан с расщеплением и скольжением зернограницных дислокаций.

5. Примесные атомы эффективно снижают миграционную подвижность границ, что связано с положительной энергией связи примесных атомов с границами, а в случае атомов углерода еще и с тенденцией образования агрегатов из атомов углерода, которые, закрепляясь на границе зерен, становятся эффективными стопорами, препятствующими ее перемещению.

6. Наличие примесей приводит к существенному замедлению скорости фронта кристаллизации. При этом чем выше локальная деформация кристаллической решетки, которую вызывают атомы примеси, тем меньше скорость фронта кристаллизации.

Личный вклад автора состоит в постановке цели и задач исследований, проведении исследований взаимодействия примесных атомов с дефектами кристаллической решетки на атомном уровне, анализе, обработке и обобщении результатов исследований, формулировании выводов и положений, выносимых на защиту, подготовки публикаций по теме диссертации.

Достоверность результатов обеспечивается применением известных и апробированных методик (метод молекулярной динамики), их физической непротиворечивостью, сравнением результатов с данными других авторов (там, где это возможно).

Апробация результатов работы. Результаты работы доложены на международных и российских конференциях: XIV международная школа-семинар «Эволюция дефектных структур в конденсированных средах», Барнаул (2016); IV Российско-Казахстанская молодежная научно-техническая конференция «Новые материалы и технологии», Барнаул (2016); Научные чтения им. И.А. Одингга «Механические свойства современных конструкционных материалов», Москва (2016); VII международная конференция «Деформация и разрушение материалов и наноматериалов», Москва (2017); XV международная школа-семинар «Эволюция дефектных структур в конденсированных средах», Барнаул (2018); Открытая школа-конференция стран СНГ «Ультрамелкозернистые и наноструктурные материалы - 2018» (УМЗНМ-2018), Уфа (2018); Научные чтения им. И.А. Одингга «Механические свойства современных конструкционных материалов», Москва (2018); VI Российско-Казахстанская молодежная научно-техническая конференция «Новые материалы и технологии», Барнаул (2018); II Международная научно-практическая конференция «Наука и инновационные разработки - Северу», Мирный (2019); VII Российско-Казахстанская молодежная научно-техническая конференция «Новые материалы и технологии», Барнаул (2019); XVI международная школа-семинар «Эволюция дефектных структур в конденсированных средах», Барнаул (2020).

Публикации. По теме диссертации опубликовано 69 статей, из которых 52 – в журналах, рекомендованных ВАК Минобрнауки РФ, в том числе 31 – в журналах, индексируемых в Web of Science и Scopus.

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, семи глав, заключения, списка литературы из 419 наименований и приложений. Работа изложена на 311 страницах машинописного текста, содержит 21 таблицу и 118 рисунков.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проекты 3.4820.2017/8.9, FZMM-2020-0002) и РФФИ (проекты №14-02-98000-р_сибирь_a, №16-48-190182 р_a).

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обосновывается актуальность исследуемой проблемы, сформулирована цель диссертационной работы, описаны научная новизна, научная и практическая ценность, основные защищаемые положения. Дается краткое содержание работы по главам.

В первой главе диссертации дается общий обзор экспериментальных и теоретических данных по теме взаимодействия примесных атомов легких элементов с металлами. Рассматривается влияние примесей на свойства металлов, современные представления о диффузии примесных атомов в металлах, взаимодействие примесей с различными дефектами кристаллической структуры. Первая часть главы посвящена примесям углерода, азота и кислорода, вторая часть – водороду. В конце первой главы сделана постановка задачи.

Вторая глава посвящена вопросу моделирования примесей в металлах на атомном уровне. В начале главы приводится описание методов компьютерного моделирования, основное внимание уделено методу молекулярной динамики. Приводится обоснование выбора ГЦК металлов для проведения исследований. В заключительной части главы описывается процедура поиска потенциалов межатомных взаимодействий между примесными атомами и атомами металлов.

В качестве ГЦК металлов для изучения взаимодействия металлов с примесями С, N, О были выбраны Ni, Ag, Al. Этот набор из трех металлов уникален тем, что два из них имеют почти одинаковые радиусы атомов, тогда как другие два – почти одинаковые электроотрицательности. Радиусы атомов: Al – 1,43 Å, Ag – 1,44 Å, Ni – 1,24 Å [1]. Электроотрицательности (шкала Полинга): Al – 1,61, Ag – 1,93, Ni – 1,91 [2]. Таким образом, при получении различных зависимостей для данных трех металлов будет видна взаимосвязь либо с размером атомов, либо с электроотрицательностью. При изучении примеси водорода преимущественно рассматривались Pd и Ni, обладающие разной сорбционной способностью по отношению к водороду (высокой и средней соответственно).

Взаимодействия атомов металла друг с другом описывались многочастичными потенциалами Клери-Росато [3], построенными в рамках модели сильной связи. Потенциальная энергия i -го атома в этом случае находится с помощью выражения

$$U_i = \sum_j A \exp \left(-p \left(\frac{r_{ij}}{r_0} - 1 \right) \right) - \sqrt{\sum_j \xi^2 \exp \left(-2q \left(\frac{r_{ij}}{r_0} - 1 \right) \right)}. \quad (1)$$

Здесь A , p , q , ξ , r_0 – параметры потенциала; r_{ij} – расстояние между i -м и j -м атомами. Опыт применения потенциалов Клери-Росато в молекулярно-динамических моделях показывает, что с их помощью удастся достаточно хорошо описывать разнообразные свойства металлов и сплавов.

Для описания взаимодействия примесных атомов друг с другом и с атомами металла использовались парные потенциалы Морзе

$$\varphi(r_{ij}) = D\beta e^{-\alpha r_{ij}} (\beta e^{-\alpha r_{ij}} - 2), \quad (2)$$

где α , β , D – параметры потенциала. Парные потенциалы сравнительно часто используются различными исследователями для описания межатомных взаимодействий в системах металл-примесь.

Параметры потенциалов для описания взаимодействий примесных атомов С, N, О с атомами рассматриваемых металлов были найдены с учетом эмпирических зависимостей и известных характеристик, наблюдаемых для большого ряда металлов, имеющих данные примеси, таких как температура плавления или разложения соответствующего химического соединения металла с легким элементом, энергия активации диффузии примесного атома в кристаллической решетке металла. Для описания взаимодействий атомов примеси друг с другом в металлах были взяты потенциалы, предложенные другими авторами: для связи С-С – из работы [4], для связей N-N и О-О – из работ [5, 6]. Параметры потенциалов приведены в таблицах 1 и 2. В таблице 1 также приведены значения энергии активации диффузии примесных атомов в металлах: Q^* – найденная в модели, Q_1 и Q_2 – рассчитанные по двум разным эмпирическим зависимостям, найденным по ряду экспериментальных данных различных авторов.

Таблица 1 – Параметры потенциалов Морзе взаимодействия атомов металла и примеси и энергии активации диффузии примесного атома в металле

Связь	α , Å ⁻¹	β	D , эВ	Q^* , эВ	Q_1 , эВ	Q_2 , эВ
Al-C	2,59263	300	0,90	1,34	1,44	1,73
Ag-C	2,96429	700	0,15	1,43	1,40	1,47
Ni-C	2,63598	200	0,20	1,57	1,57	1,57
Al-N	2,66532	300	0,84	1,51	1,56	2,04
Ag-N	3,01255	650	0,26	1,64	1,56	1,80
Ni-N	3,03257	370	0,30	1,86	1,83	1,95
Al-O	2,74220	300	0,84	1,76	1,62	2,23
Ag-O	2,58068	220	0,58	1,87	1,66	2,00
Ni-O	2,71735	170	0,60	2,04	1,99	2,18

Для описания взаимодействий атомов водорода с атомами Pd и Ni использовались потенциалы из работы [7], которые одновременно хорошо воспроизводят такие экспериментально получаемые характеристики как энергию абсорбции, энергию активации надбарьерной диффузии водорода в металле (при нормальных и высоких температурах), энергию связи с вакансией. Для описания взаимодействий атомов водорода друг с другом в металле использовался потенциал из работы [8].

Таблица 2 – Параметры потенциалов Морзе для описания взаимодействия примесных атомов друг с другом в металле [4-6]

Связь	$\alpha, \text{\AA}^{-1}$	β	$D, \text{эВ}$
C-C	2,62351	190	0,65
N-N	1,55580	700	0,001
O-O	1,26829	500	0,001

В таблице 3 приведены параметры потенциалов для систем Pd-H и Ni-H, а также значения энергии активации диффузии атома водорода в Pd и Ni, найденные в модели (Q^*), и экспериментальные данные, приведенные в работах [9 – 12].

Таблица 3 – Параметры потенциалов Морзе для описания взаимодействий в системах Pd-H и Ni-H [7, 8]

Связь	$\alpha, \text{\AA}^{-1}$	β	$D, \text{эВ}$	$Q^*, \text{эВ}$	$Q, \text{эВ}$ [9-12]
Pd-H	0,9	9,76	0,10737	0,23	0,22–0,25
Ni-H	1,2	14	0,1331	0,34	0,33–0,42
H-H	2,11	800	0,001	–	–

Третья глава диссертации посвящена исследованию методом молекулярной динамики структурно-энергетических характеристик и диффузии примесных атомов легких элементов в кристаллах металлов с ГЦК решеткой. В первой части главы приводятся результаты расчета энергии примесных атомов в рассматриваемых металлах и вызываемой ими деформации кристаллической решетки. Вторая часть посвящена исследованию диффузии примесных атомов в кристаллической решетке металлов. В заключительной части главы рассматривается вопрос влияния упругой деформации на энергию связи и миграции примесных атомов.

Примесные атомы C, N, O имеют малые размеры по сравнению с атомами металла (радиусы атомов: 0,77 Å для C, 0,71 Å для N и 0,65 Å для O [1]), в связи с чем они занимают октаэдрические междоузлия в ГЦК решетке. При исследовании смещений атомов металлов вблизи атомов примеси, находящихся в октаэдрических пустотах, наибольшие смещения наблюдались в алюминии, наименьшие – в серебре. Смещения увеличивались в порядке O-N-C от 0,02 Å (для O в Ag) до 0,11 Å (для C в Al).

При моделировании диффузии примесных атомов (значения энергий активации приведены в таблицах 1 и 3) в металле было выяснено, что ведущий механизм диффузии примесных атомов легких элементов в ГЦК кристалле заключается в последовательной миграции через октаэдрические и тетраэдрические пустоты кристаллической решетки (траектория 2 на рисунке 1).

Упругая деформация оказывала слабое влияние на изменение энергии миграции примесных атомов. В случае примесей C, N, O в Ni и Ag наблюдалось небольшое снижение энергии при растяжении кристалла. Для Al – напротив, при сжатии.

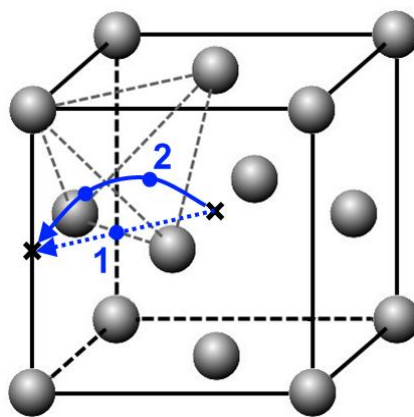


Рисунок 1 – Рассматриваемые в работе траектории миграции примесного атома из одной октаэдрической поры в соседнюю (показаны крестиками).

Точки на траекториях – перевальные точки

Четвертая глава посвящена исследованию взаимодействия примесных атомов легких элементов с точечными дефектами и их комплексами в ГЦК металлах. Для различных типов дефектов в рассматриваемых металлах получены значения энергии связи с примесными атомами, изучено влияние примесей на диффузионную подвижность и механизм миграции точечных дефектов.

Энергия связи примесного атома с тем или иным дефектом рассчитывалась в настоящей работе как разность потенциальной энергии расчетного блока, содержащего дефект и атом примеси в октаэдрической поре на таком расстоянии друг от друга, которое исключает взаимодействие дефекта и примесного атома (как правило, несколько десятков межатомных расстояний), и потенциальной энергии расчетного блока, содержащего атом примеси в дефекте (в наиболее энергетически выгодной позиции). Перед расчетом энергий проводилась релаксация структуры расчетного блока, после которой он охлаждался до 0 К.

В таблице 4 приведены полученные в модели значения энергии связи примесных атомов с вакансией, а также значения величины δ – смещения примесного атома из центра вакансии в направлении $\langle 100 \rangle$ в процессе релаксации.

Таблица 4 – Энергия связи примесного атома с вакансией (эВ)

	C		N		O		H	
	E_{bv}	δ (Å)	E_{bv}	δ (Å)	E_{bv}	δ (Å)	E_{bv}	δ (Å)
Ni	0,70	0,438	0,39	0,684	-0,05	0,796	0,40	0
Ag	0,05	1,025	-0,25	1,242	-0,59	1,965	–	–
Al	0,86	0,946	0,14	0,999	-0,58	1,046	–	–
Pd	–	–	–	–	–	–	0,26	0

Для сравнения можно привести значения энергии связи атома углерода с вакансией в γ -Fe: 0,67 эВ [13] и 0,37-0,41 эВ [14]. В работе [14] эта величина была найдена экспериментально и с помощью первопринципных вычислений; в [13] – только с помощью вычислений. К γ -Fe по

характеристикам из рассматриваемых металлов ближе Ni (радиусы атомов: 1,29 Å (γ -Fe) и 1,24 Å (Ni); разности электроотрицательностей с C: 0,72 (Fe) и 0,64 (Ni)). Энергия связи атома углерода с вакансией в никеле, найденная в настоящей работе, оказалась равна 0,70 эВ, что близко к значениям из [13].

Энергия связи атомов водорода с вакансией в Pd и Ni являлась одной из характеристик, по которым подбирались параметры потенциалов, поэтому полученные значения полностью совпадают с известными данными.

Помимо моновакансии в работе были рассчитаны энергии связи примесных атомов с вакансионными кластерами: бивакансией и тетраэдром дефектов упаковки (ТДУ). ТДУ образуются в ГЦК кристаллах, их грани ориентированы вдоль плоскостей типа (111) и являются дефектами упаковки, а ребра ориентированы вдоль направлений $\langle 110 \rangle$ и представляют собой дислокации с вектором Бюргерса $1/6\langle 110 \rangle$ [15]. В случае бивакансий энергия связи оказалась близка к энергии связи с моновакансией. Энергии, полученные для ТДУ, приведены в таблице 5.

Таблица 5 – Энергия связи примесного атома с ТДУ в вершине и ребре (эВ)

	C		N		O		H	
	вершина	ребро	вершина	ребро	вершина	ребро	вершина	ребро
Ni	0,64	0,77	0,49	0,72	0,27	0,62	0,08	0,12
Ag	0,10	0,30	-0,03	0,25	-0,34	0,22	–	–
Al	0,80	1,14	0,24	0,88	-0,11	0,44	–	–
Pd	–	–	–	–	–	–	0,11	0,15

Как видно из таблицы 5, энергия связи атомов C, N, O для всех металлов оказалась выше с ребром ТДУ (т.е. с дислокацией $1/6\langle 110 \rangle$), чем с вершиной. Наибольшая энергия связи получена для атома углерода с ребром ТДУ в Al – 1,14 эВ. Такое высокое значение энергии связи говорит в пользу сравнительно крепкой связи атомов углерода с дислокациями данного типа. Наименьшие энергии связи получены для Ag, что обусловлено, по всей видимости, одновременно двумя факторами: сравнительно большим параметром решетки и неглубокими потенциалами взаимодействия примесных атомов с атомами металла. Для кислорода, как и в случаях вакансии и бивакансии, получены наименьшие значения энергии связи.

Собственные межузельные атомы (с.м.а.) в качестве «ловушек» для примесных атомов рассматриваются нечасто, тем не менее, согласно расчетам, проведенным в [13, 16], они могут также иметь достаточно высокую энергию связи с примесями, близкую к энергии связи примеси с вакансией. Например, для α -Fe и γ -Fe в [13] получены значения 0,68 и 0,58 эВ соответственно.

При введении примесных атомов легких элементов в область с.м.а., оба дефекта в молекулярно-динамической модели образовывали конфигурацию, изображенную на рисунке 2. Межузельный атом принимал форму гантели $\langle 100 \rangle$ (наиболее энергетически выгодную и в от-

существование примесного атома), а примесной атом смещался в центр ближайшей октаэдрической поры. В таблице 6 приведены полученные в модели значения энергии связи примесного атома с с.м.а. в рассматриваемых металлах.

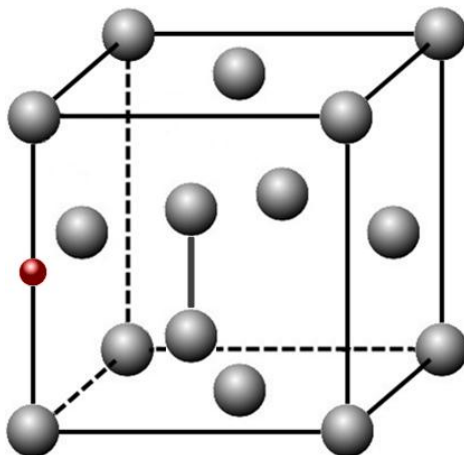


Рисунок 2 – Позиция примесного атома вблизи собственного межузельного атома в ГЦК решетке. Положения атомов приведены без учета релаксации структуры

Таблица 6 – Энергия связи примесного атома с собственным межузельным атомом (эВ)

	C	N	O	H
Ni	0,43	0,53	0,63	0,10
Ag	0,22	0,23	0,29	–
Al	0,86	0,66	0,45	–
Pd	–	–	–	0,04

Собственный межузельный атом является самым подвижным точечным дефектом в чистых металлах. Для анализа влияния примесей на подвижность с.м.а. в моделируемый расчетный блок вводилось 10 ат.% примесных атомов. Для каждого случая была найдена энергия активации миграции с.м.а., которая определялась по наклону зависимостей $\ln D$ от T^{-1} , где D – коэффициент самодиффузии, T – температура. Полученные значения приведены в таблице 7.

Таблица 7 – Энергия миграции собственного межузельного атома в чистом металле и в условиях присутствия 10% примесных атомов (эВ)

	без примеси	C	N	O
Ni	0,09	0,38	0,30	0,34
Ag	0,07	0,17	0,20	0,19
Al	0,05	0,22	0,16	0,14

Для сравнения, в [17, 18] приводятся следующие значения энергии миграции с.м.а. в чистых металлах, полученные разными авторами преимущественно с помощью компьютерного моделирования: 0,04 – 0,15 эВ в Ni, 0,05 – 0,12 эВ в Ag и 0,03 – 0,1 эВ в Al.

Как видно из таблицы 7, подвижность с.м.а. существенно снижается из-за наличия примесей в металле. При концентрации примесных атомов 10% энергия миграции собственных межузельных атомов в рассматриваемых металлах увеличивается в несколько раз. При изуче-

нии траекторий миграции с.м.а. в молекулярно-динамической модели было выяснено, что наличие примесей приводит к существенному снижению вклада краудинного механизма миграции с.м.а. Его миграция осуществляется преимущественно за счет гантельного механизма.

Пятая глава диссертации посвящена исследованию взаимодействия примесных атомов легких элементов с краевыми дислокациями. Для моделирования краевой дислокации в ГЦК металлах использовался расчетный блок, имеющий форму вытянутого параллелепипеда (рисунок 3а).

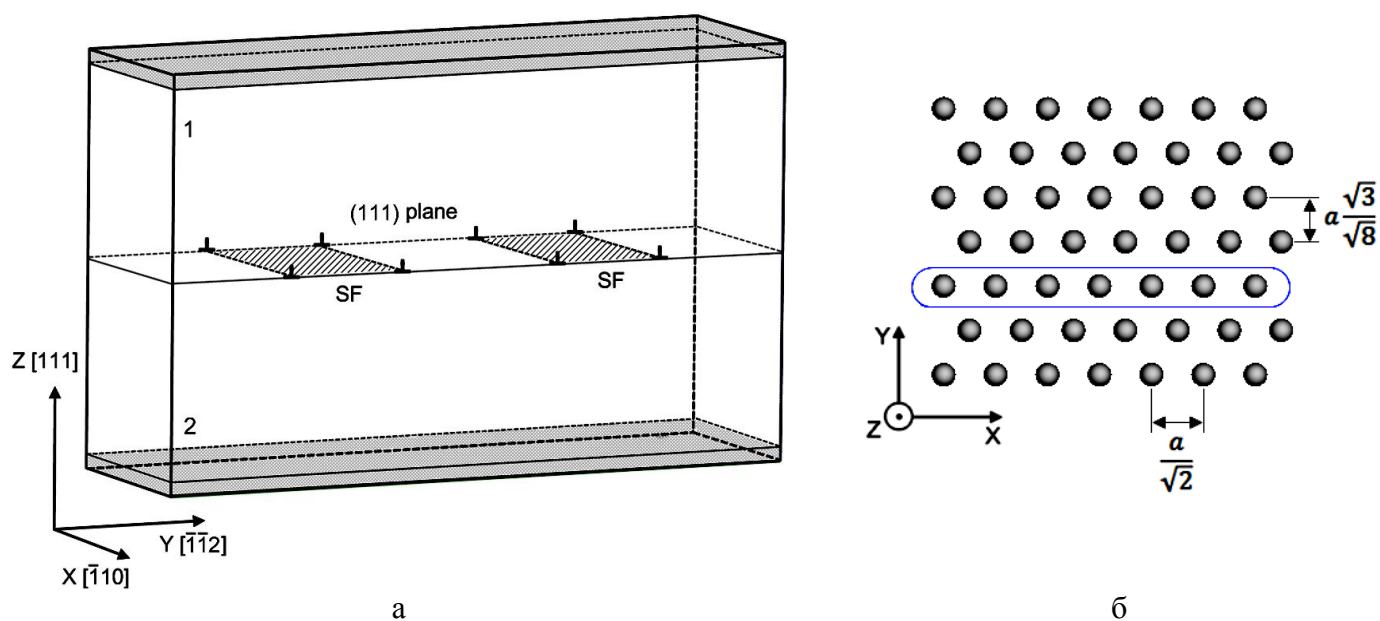


Рисунок 3 – Моделирование краевой дислокации в ГЦК металле:

- а) модель комплекса из двух пар частичных дислокаций (SF – дефект упаковки);
- б) плоскость XY {111} с указанием межатомных расстояний

Плоскость скольжения дислокаций {111} располагалась посередине блока и совпадала с плоскостью XY. Граничные условия вдоль осей X и Y задавались периодическими, то есть имитировалось бесконечное повторение структуры расчетного блока вдоль данных направлений. Сверху и снизу расчетного блока вдоль оси Z приграничные атомы были жестко зафиксированы (жесткие граничные условия) – на рисунке 3 области с зафиксированными атомами выделены серым цветом. Дислокация вводилась путем сжатия верхней части расчетного блока (1 на рисунке 3а) и растяжения нижней (2 на рисунке 3а) вдоль оси Y на одинаковую величину – на одно межатомное расстояние. Размер расчетного блока вдоль оси Y подбирался достаточно большим, чтобы деформация верхней и нижней частей блока не вызывали появление избыточных внутренних напряжений при последующем моделировании.

Следует обратить внимание на одну важную особенность дислокаций в ГЦК кристаллах. Дело в том, что введение только одной полной дислокации с вектором Бюргерса $1/2\langle 110 \rangle$ недостаточно для сохранения сплошности кристалла по обе стороны от плоскости скольжения. Действительно, если ввести в расчетный блок только одну полную дислокацию $1/2\langle 110 \rangle$, что

соответствует деформированию одной части блока относительно другой на одно межатомное расстояние вдоль оси Y , то есть на $a\sqrt{3/8}$, где a – параметр решетки (рисунок 3 б), это будет равносильно удалению (или добавлению) одной атомной полуплоскости вдоль оси X (как, например, выделенной контуром на рисунке 3 б). В этом случае симметрия кристалла, как видно из рисунка 3(б), вдоль оси Y будет нарушена, что спровоцирует создание дополнительного дефекта упаковки в плоскости, отличной от плоскости XY , и приведет к образованию вершинной дислокации (рисунок 4), обладающей гораздо меньшей подвижностью по сравнению с частичной дислокацией.

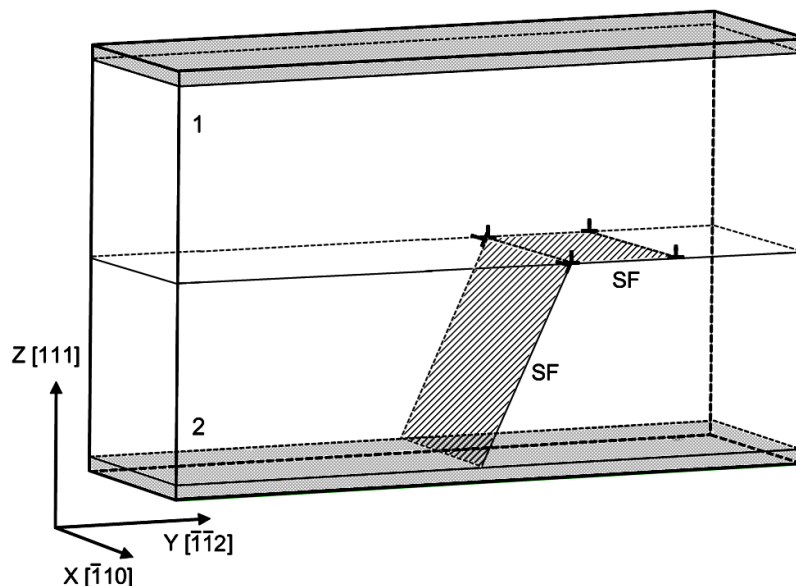


Рисунок 4 – Создание вершинной дислокации в модели

В работе были рассчитаны энергии связи примесных атомов с частичной дислокацией, вершинной дислокацией, а также с порогом (ступенькой) на вершинной дислокации. Полученные данные приведены в таблице 8.

Таблица 8 – Энергия связи примесного атома с краевой дислокацией (эВ)

	Ni				Ag			Al			Pd
	C	N	O	H	C	N	O	C	N	O	H
Частичная дислокация	0,07	0,09	0,12	0,02	0,05	0,06	0,07	0,26	0,34	0,43	0,04
Вершинная дислокация	0,77	0,72	0,62	0,12	0,30	0,25	0,22	1,14	0,88	0,44	0,15
Порог на вершинной дислокации	0,87	0,80	0,62	0,19	0,24	0,18	0,12	0,72	0,39	0,28	0,23

Все три типа дефектов, рассмотренных в таблице 8, играют важную роль в различных процессах в ГЦК кристаллах. Частичные дислокации обеспечивают пластические сдвиги, вершинные – являются неотъемлемым структурным элементом малоугловых границ зерен наклона, границ раздела двух ГЦК металлов, а также ребрами тетраэдров дефектов упаковки. Важным элементом, дефектом на самих дислокациях, являются пороги. Согласно [19], деформаци-

онные и диффузионные процессы на границах раздела инициируются на атомном уровне преимущественно на порогах дислокаций.

Согласно полученным данным, частичные дислокации, по сравнению с вершинными, обладают слабым взаимодействием с примесными атомами. Причем, как оказалось, частичные дислокации сильнее притягивают атомы кислорода, тогда как вершинные, наоборот, – атомы углерода. Значения энергии связи, найденные для вершинных дислокаций, близки к тем, которые обычно получают при исследовании, например, взаимодействия углерода с дислокациями в железе: 0,4 – 0,7 эВ [20, 21].

Согласно полученным данным, пороги на дислокациях являются предпочтительным местом сегрегации для примесных атомов преимущественно в металлах со сравнительно небольшим параметром решетки. В Al и Ag энергия связи примесных атомов с порогом на вершинной дислокации ниже, чем с неискривленной дислокацией.

Для водорода были получены следующие значения энергии связи водорода с ядром вершинной дислокации: 0,15 эВ для Pd и 0,12 эВ для Ni. Полученные величины хорошо согласуются с данными других авторов: 0,19–0,22 эВ [22] для Pd и 0,09–0,15 эВ для Ni [23]. Таким образом, краевая дислокация может выступать в роли дефекта-ловушки для водорода, однако менее эффективной, чем вакансии (таблица 4).

В работе был проведен расчет энергии миграции рассматриваемых примесных атомов вдоль ядра частичной дислокации. Энергия миграции определялась по высоте энергетического барьера при смещении примесного атома вдоль ядра дислокации. В каждом положении примесного атома проводилась релаксация структуры, при этом сам примесной атом оставался неподвижным. Полученные значения приведены в таблице 9.

Как видно из полученных данных, энергия миграции примесных атомов вдоль дислокации в несколько раз ниже энергии миграции в чистом кристалле, что согласуется с результатами других исследователей [20, 21].

Таблица 9 – Энергия миграции примесного атома вдоль ядра дислокации (эВ)

Ni				Ag			Al			Pd
C	N	O	H	C	N	O	C	N	O	H
0,21	0,26	0,27	0,15	0,32	0,38	0,42	0,38	0,39	0,44	0,12

При исследовании влияния концентрации примесных атомов на скорость и пороговое напряжение скольжения дислокаций в рассматриваемых ГЦК металлах использовалась модель, изображенная на рисунке 3. Сдвиг инициировался в молекулярно-динамической модели путем приложения сил к атомам в верхней серой области на рисунке 3 в направлении $[10\bar{1}]$, то есть вдоль плоскости XY. Область, окрашенная в серый цвет, в процессе компьютерного эксперимента перемещалась как одно целое. Перемещение остальных атомов в расчетном блоке никак не ограничивалось, оно описывалось классическими уравнениями движения Ньютона.

Для определения порогового сдвигового напряжения, при котором инициируется движение комплекса из двух пар частичных дислокаций (рисунок 3) использовалась следующая методика. Сдвиговое напряжение при постоянной температуре ступенчато повышалось на заданное значение каждые 10 пс. По графику зависимости смещения верхней части расчетного блока от времени отмечался момент, когда происходил необратимый сдвиг верхней части расчетного блока (рисунок 5). По времени, когда происходил необратимый сдвиг, определялось значение порогового напряжения.

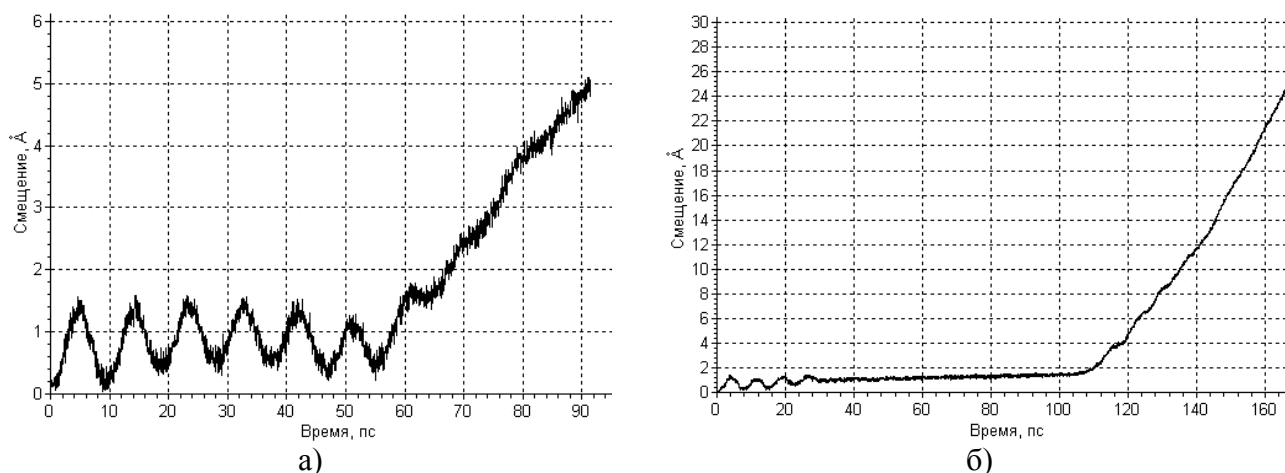


Рисунок 5 – Примеры графиков зависимости смещения верхней части расчетного блока от времени компьютерного эксперимента при постепенном увеличении касательного напряжения: а) в чистом Al при температуре 300 К; б) в Ni, содержащем 5% атомов кислорода при температуре 300 К

На рисунке 6 приведены полученные зависимости порогового напряжения от концентрации примесных атомов в рассматриваемых металлах при температуре 300 К. Как можно видеть, введение примесных атомов приводит к значительному повышению порогового напряжения: от нескольких МПа для чистых металлов (всего 7 – 9 МПа при температуре 300 К) до 1000–2000 МПа при введении 10% примесных атомов. Для всех трех металлов влияние на пороговое напряжения увеличивается в направлении С–N–О.

В качестве причин торможения скольжения дислокаций в металлах, содержащих примеси, обычно указывают образование атмосфер Коттрелла и Сузуки. Согласно полученным ранее значениям энергии связи примесных атомов с частичными дислокациями (таблица 8), частичные дислокации в Ni и Ag, из-за низких значений энергии связи, обладают сравнительно невысокой тенденцией к образованию атмосфер Коттрелла.

Для проверки предположения о том, что в рассматриваемых случаях основным механизмом влияния на пороговое напряжение скольжения дислокации является механизм Сузуки, т.е. закрепление примесных атомов на дефекте упаковки (ДУ) между частичными дислокациями, были найдены энергии связи примесных атомов с ДУ в рассматриваемых металлах (таблица 10).

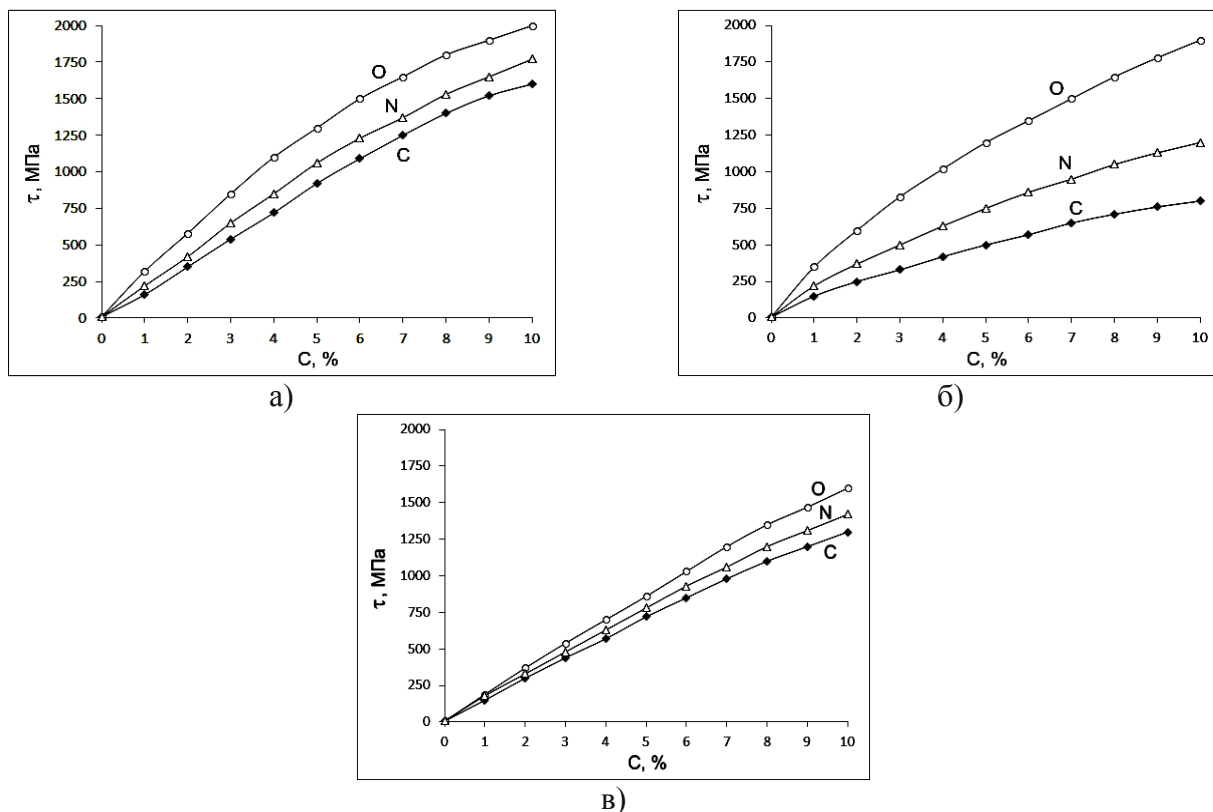


Рисунок 6 – Зависимости порогового напряжения от концентрации примесных атомов в Ni (а), Ag (б) и Al (в) при температуре 300 К

Таблица 10 – Энергия связи примесного атома с дефектом упаковки (эВ)

	C	N	O
Ni	0,05	0,06	0,07
Ag	0,02	0,03	0,06
Al	0,05	0,05	0,06

Во всех случаях энергия связи примесного атома с ДУ получилась сравнительно небольшой, однако, учитывая аддитивное действие каждого примесного атома в ДУ на общий барьер Пайерлса-Набарро, можно сделать вывод о преобладающем вкладе механизма Сузуки в повышение порогового напряжения с ростом концентрации примесей в рассматриваемой модели. Наибольшие энергии связи получились для атомов кислорода, что согласуется с зависимостями на рисунке 6.

В шестой главе приводятся результаты исследования взаимодействия примесей с границами зерен наклона. Первая часть главы посвящена влиянию примесных атомов на диффузию по границам зерен, вторая – влиянию примесей на миграцию границ.

Граница наклона создавалась в молекулярно-динамической модели в середине расчетного блока путем поворота двух кристаллов вокруг осей $\langle 100 \rangle$, $\langle 111 \rangle$ или $\langle 110 \rangle$ на угол разориентации θ относительно друг друга (рисунок 7). Получающийся расчетный блок обрезался по краям таким образом, чтобы он приобрел форму параллелепипеда и не содержал по краям пустот.

После процедуры удаления лишних атомов проводилась релаксация структуры. Затем, для избавления от избыточных внутренних напряжений, расчетный блок подвергался незначи-

тельной всесторонней деформации сжатия или растяжения (при этом межатомные расстояния изменялись, как правило, менее чем на 0,1%) до достижения минимума энергии. После этого снова проводилась релаксация и последующее охлаждение. Полученные таким образом расчетные блоки использовались в основных компьютерных экспериментах как стартовые.

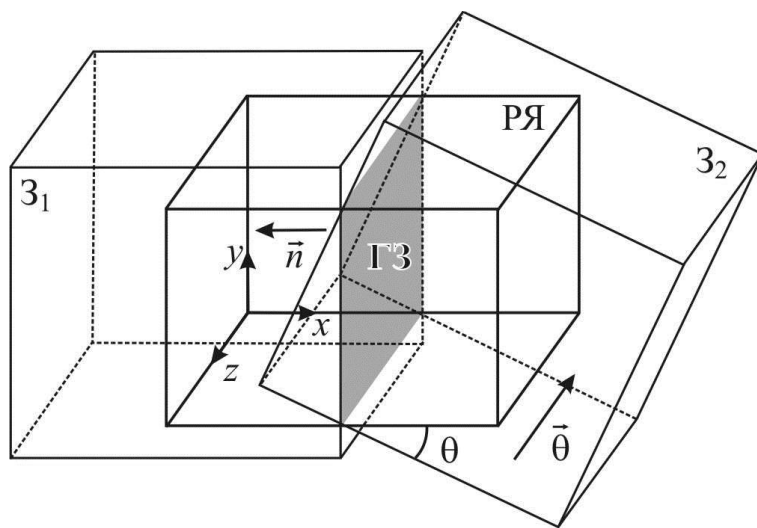


Рисунок 7 – Схема построения расчетной ячейки с границей зерен наклона:

Z_1 и Z_2 – зерна, РЯ – расчетная ячейка, ГЗ – граница зерен, $\vec{\theta}$ – вектор разориентации зерен, $\vec{n}$ – единичный вектор нормали ГЗ

Количество атомов в расчетных блоках составляло примерно 30000. Была введена декартова система координат (рисунок 7): ось X была направлена перпендикулярно плоскости межзеренной границы вглубь зерна, ось Y – вдоль границы зерна и перпендикулярно оси наклона, ось Z – вдоль оси наклона. Вдоль осей X и Y были наложены жесткие условия, вдоль Z – периодические. Продолжительность молекулярно-динамических экспериментов при определении коэффициентов диффузии составляла 300 пс, в течение которых температура расчетного блока оставалась постоянной – $0,9 \cdot T_{пл}$ (1553 К для Ni, 1112 К для Ag и 840 К для Al), где $T_{пл}$ – температура плавления металла.

Примесные атомы вводились случайно в октаэдрические пустоты обоих зерен. При введении сравнительно высокой концентрации (более 5%) атомов углерода в решетку металла, они стремились в процессе компьютерного эксперимента образовать агрегаты, которые преимущественно концентрировались на границе зерен. Причем на малоугловых границах они концентрировались в основном вблизи зернограницных дислокаций. Образование агрегатов атомов углерода приводило к снижению подвижности самих атомов углерода и к снижению, из-за частичного запираания границы, интенсивности самодиффузии. Атомы кислорода агрегаты не образовывали, тем не менее, также оказывали влияние на диффузионную проницаемость границ зерен.

На рисунке 8 приведены примеры зависимостей коэффициентов самодиффузии по границам наклона $\langle 110 \rangle$ с углом разориентации 7° вдоль осей Y и Z при температуре $0,9 \cdot T_{пл}$ от концентрации примесных атомов. Расчет коэффициентов диффузии проводился для области

шириной 7 Å. Ярко выраженная анизотропия (отличие коэффициентов диффузии вдоль осей Y и Z) обусловлена строением малоугловых границ – диффузия по малоугловым границам протекает преимущественно вдоль ядер зернограницных дислокаций.

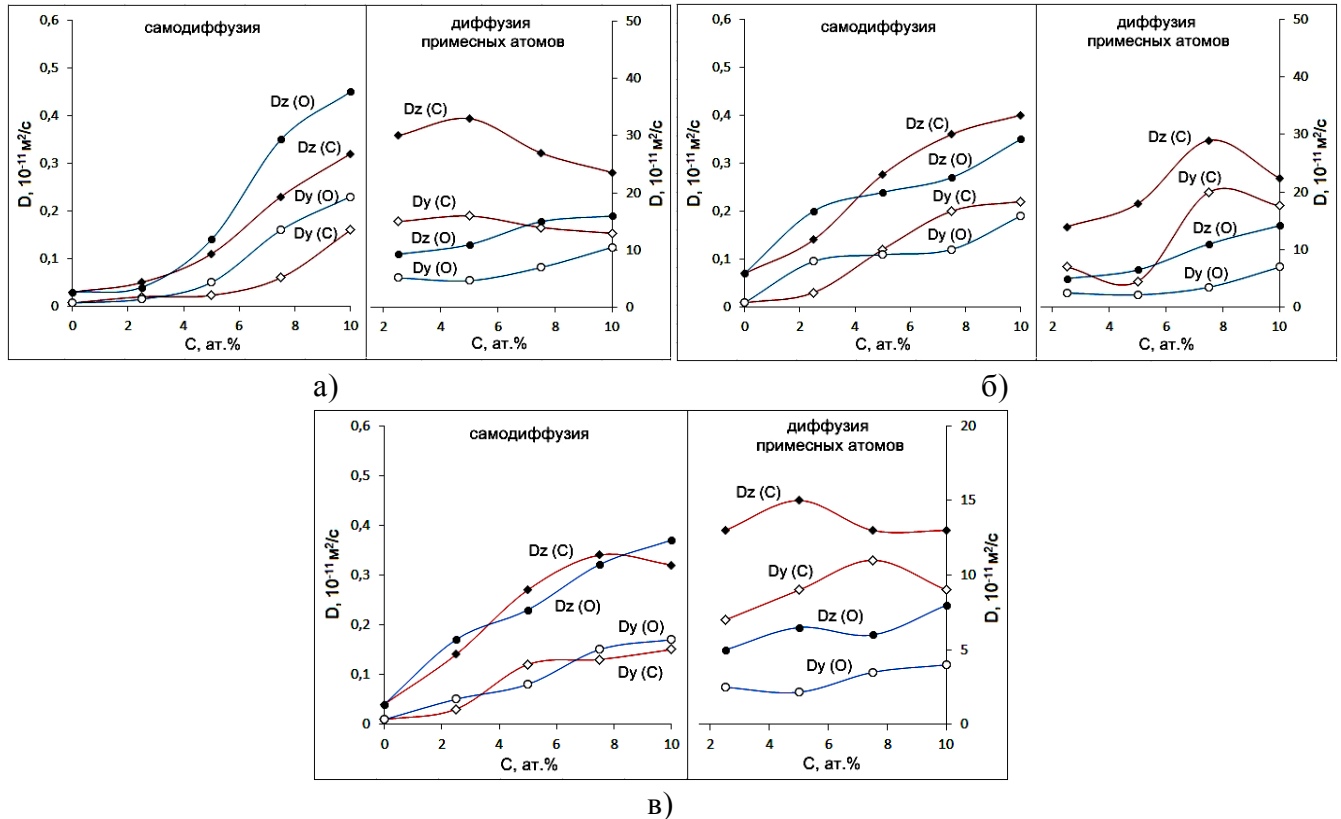


Рисунок 8 – Зависимости коэффициентов самодиффузии (левые графики) и диффузии примесных атомов (правые графики) вдоль осей Y и Z по малоугловым границам наклона $\langle 110 \rangle 7^\circ$ от концентрации примесных атомов C и O при температуре $0,9 \cdot T_{пл}$: а) в Ni; б) в Ag; в) в Al

Границы наклона $\langle 110 \rangle$, как показали молекулярно-динамические эксперименты, обладают гораздо меньшей диффузионной проницаемостью по сравнению с границами наклона с осями $\langle 100 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$, и, по всей видимости, среди всех границ наклона, кроме специальных, что обусловлено уникальностью их строения, связанного с тем, что ось разориентации данных границ $\langle 110 \rangle$ совпадает с ориентацией ядер дислокаций в ГЦК кристалле, из-за чего, в частности, зернограницные дислокации на границах $\langle 110 \rangle$ не содержат периодически расположенных изломов, как на границах $\langle 111 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$.

Введение примесей, как правило, приводило к значительному увеличению коэффициента самодиффузии по границам зерен с осью разориентации $\langle 110 \rangle$ (рисунок 8), что было обусловлено деформацией кристаллической решетки вблизи примесных атомов, из-за чего вдоль границ возникали дополнительные искажения и свободный объем. Атомы углерода оказались более подвижны в границах $\langle 110 \rangle$, чем атомы кислорода, что согласуется с энергиями активации их миграции вдоль ядер дислокаций (таблица 9). Сравнительно небольшое увеличение

интенсивности самодиффузии вследствие введения примесей наблюдалось также для малоугловых границ $\langle 111 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$. Следует отметить общую закономерность: чем меньше изначально граница зерен содержала свободного объема, тем сильнее было влияние примесей на самодиффузию вдоль нее.

При исследовании миграции границ зерен в настоящей работе за основу была взята методика исследования миграции границы зерен наклона, предложенная и развитая в работах [24, 25]. Создается четко аттестованная граница в форме петли или арки (рисунок 9). Сила натяжения границы, которая, подобно поверхностному натяжению, возникает вследствие стремления границы минимизировать свою энергию, является причиной направленного перемещения границы в сторону уменьшения ее площади. Сила, провоцирующая миграцию, и скорость миграции границы остаются в рассматриваемой модели постоянными в течение почти всего движения границы, плавно уменьшаясь к концу компьютерного эксперимента.

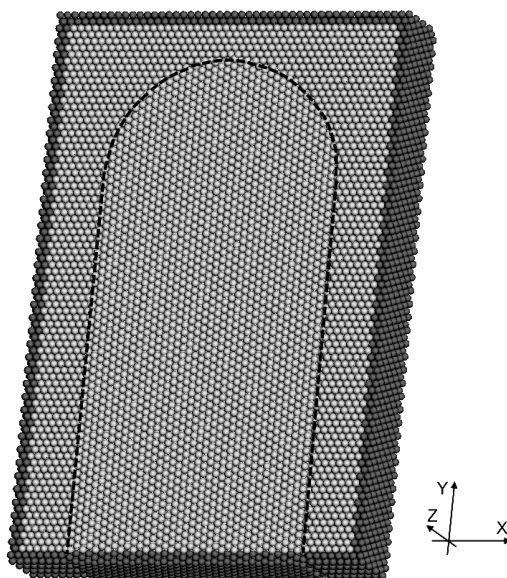


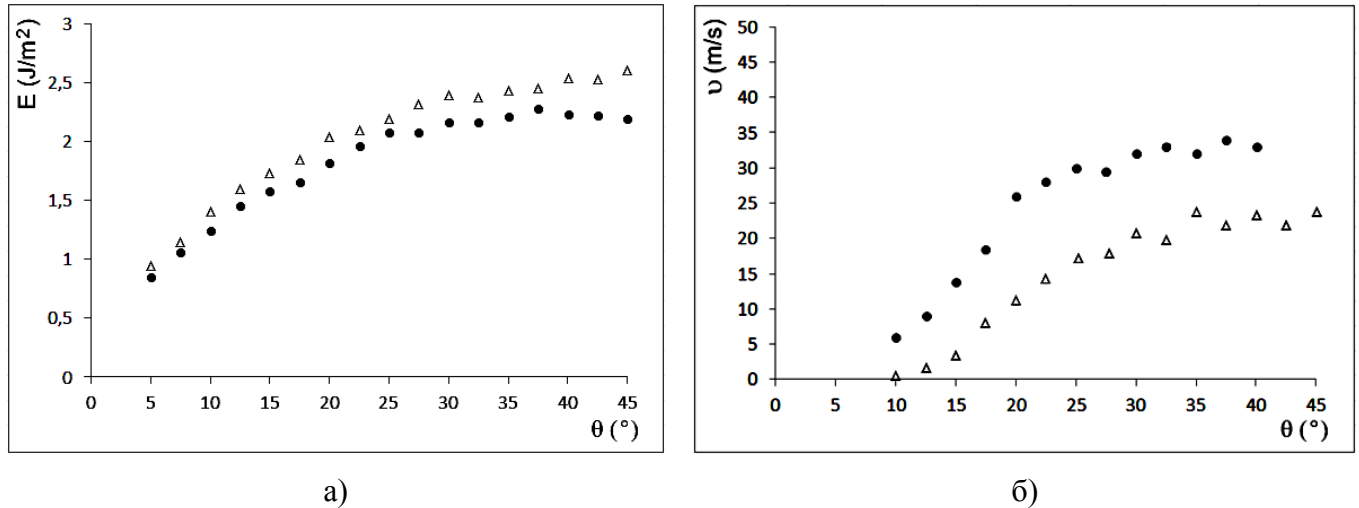
Рисунок 9 – Расчетный блок для моделирования миграции границы наклона $\langle 111 \rangle 30^\circ$.

Темно-серые атомы на краю расчетного блока в процессе компьютерного эксперимента оставались неподвижными (жесткие граничные условия)

В первую очередь было проведено исследование механизма миграции в чистом металле на примере никеля. Расчетный блок имел форму пластины толщиной в 12 атомных плоскостей (рисунок 9). Размеры блока составляли 18.0 нм в высоту, 12.0 нм в ширину и 2.4 нм в толщину. Блоки содержали примерно 50000 атомов. Граничные условия вдоль оси Z (рисунок 9) были наложены периодические. На других границах (перпендикулярных осям X и Y) использовались жесткие условия, т.е. атомы вблизи края расчетного блока (выделены темно-серым на рисунке 9) были жестко зафиксированы в процессе компьютерного эксперимента.

На рисунке 10 приведены зависимости энергии границ зерен наклона $\langle 100 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$ и скорости их миграции при температуре 1700 К в никеле в зависимости от угла разориентации.

Специальные и симметричные границы в настоящей работе не рассматривались. Энергия границ зерен рассчитывалась как отношение разности энергий расчетного блока с границей и такого же числа атомов в идеальном кристалле к площади границы. Перед вычислением энергии проводилась релаксация структуры.



а) Рисунок 10 – Энергия границ наклона $\langle 100 \rangle$ (треугольные белые маркеры) и $\langle 111 \rangle$ (круглые черные маркеры) (а) и скорость их миграции (б) при температуре 1700 К в зависимости от угла разориентации θ в Ni

Натяжение границ зерен пропорционально их энергии. С ростом угла разориентации растет энергия и натяжение (рисунок 10а). Для большеугловых границ энергия примерно одинакова, что характерно, по мнению многих авторов, для большого класса большеугловых границ и границ смешанного типа, в связи с чем, например, большинство углов между границами в тройных стыках близки к 120°.

Измерение скорости миграции границ зерен в чистом никеле проводилось при температуре 1700 К. Скорость миграции определялась как отношение перемещения верхней части границы (рисунок 9) ко времени молекулярно-динамического эксперимента. С ростом угла разориентации скорость миграции границ возрастала (рисунок 10б), что является известной закономерностью.

Как видно из графиков на рисунок 10 (б), границы $\langle 100 \rangle$ мигрируют медленнее границ $\langle 111 \rangle$. Скорость их миграции, при тех же условиях, примерно в 1,5 – 2 раза меньше скорости миграции границ $\langle 111 \rangle$.

На рисунке 11 изображены примеры атомных смещений в процессе миграции границ $\langle 100 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$ с углом разориентации 20°. Смещения показаны в виде отрезков, соединяющих начальные и конечные положения атомов (показаны только смещения больше 0,1 нм). На рисунках хорошо видно, что атомные смещения при миграции рассматриваемых границ имеют четкий рисунок: для границ $\langle 100 \rangle$ это сетка с квадратными ячейками, для границ $\langle 111 \rangle$ – с шестиугольными. Несмотря на сравнительно большой угол разориентации 20°, относящийся обычно к большеугловым границам (т.е. границам, в которых не выделяют отдельные зерно-

границные дислокации), смещения атомов при миграции малоугловых границ имели такой же вид, отличаясь лишь большим размером ячеек, который уменьшался с ростом угла разориентации. При углах выше $25 - 30^\circ$ уже становилось сложно рассмотреть упорядоченную сетку атомных смещений.

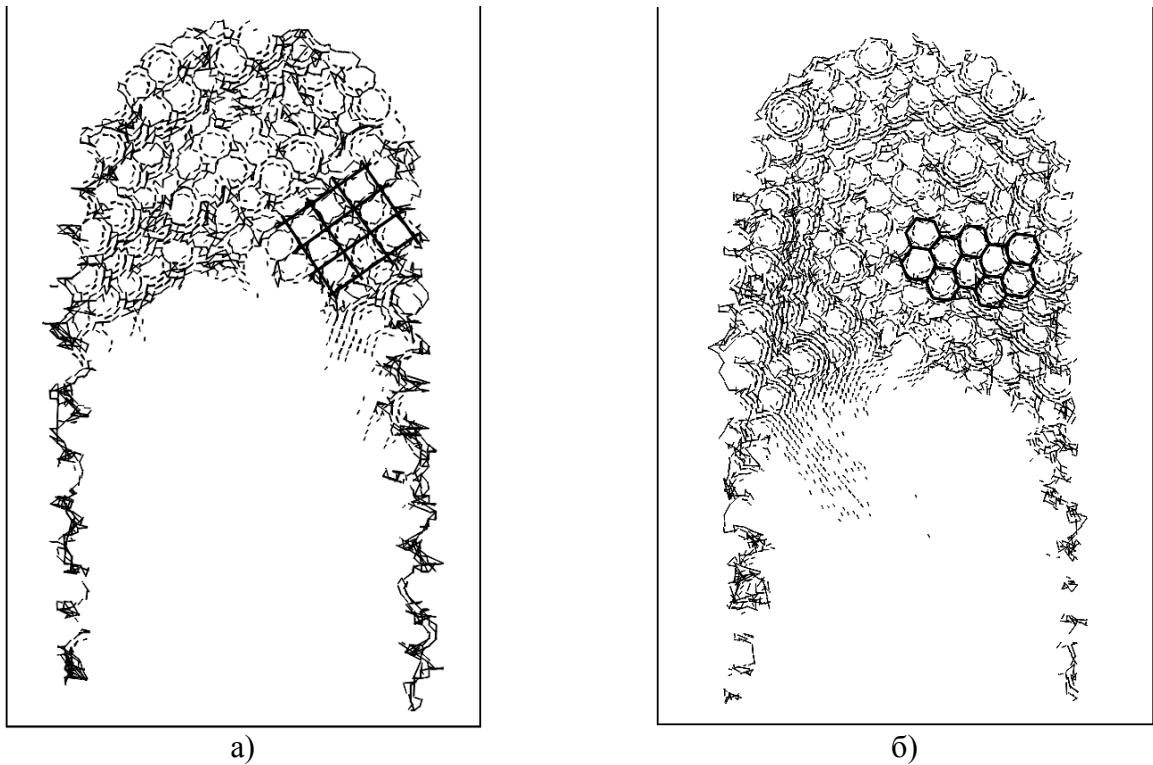


Рисунок 11 – Атомные смещения в процессе миграции границ наклона $\langle 100 \rangle 20^\circ$ (в течение 540 пс) (а) и $\langle 111 \rangle 20^\circ$ (в течение 300 пс) (б) в Ni при температуре 1700 К.

Изображены смещения больше 0,1 нм

Для объяснения механизма возникновения подобных сеток атомных смещений при миграции малоугловых границ наклона, следует принять во внимание, что краевые зернограницные дислокации в границах $\langle 100 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$ отличаются от обычных, внутризеренных, в первую очередь тем, что они парные (рисунок 12). На малоугловых границах обрываются атомные плоскости двух зерен, принадлежащие кристаллическим решеткам с разной ориентацией. Таким оборванным атомным полуплоскостям, принадлежащим разным кристаллическим зернам, как правило, энергетически выгодно объединиться в один дефект, представляющий собой парную зернограницную дислокацию.

Парные зернограницные дислокации могут расщепляться. В границах $\langle 111 \rangle$, например, дислокации могут расщепляться с реакцией $1/2[1\bar{1}0] \rightarrow 1/6[2\bar{1}\bar{1}] + 1/6[1\bar{2}1]$, в границах $\langle 100 \rangle$ – $1[0\bar{1}0] \rightarrow 1/2[0\bar{1}1] + 1/2[0\bar{1}\bar{1}]$ [19].

При изучении в динамике атомного механизма миграции малоугловых границ наклона $\langle 100 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$ было выяснено, что миграция малоугловых границ протекала путем расщепления и смены дислокаций-партнеров. На рисунке 12 (а) видно, что в результате работы данного механизма при миграции малоугловых границ наклона $\langle 100 \rangle$ смещения атомов образуют сетку

с квадратными ячейками. В случае миграции границ $\langle 111 \rangle$, помимо указанного механизма, добавляется механизм совместного скольжения парных зернограницных дислокаций (2 на рисунок 12б). В процессе миграции границ $\langle 111 \rangle$ наблюдалось комбинированное действие обоих механизмов. При миграции в том зерне, куда двигалась граница, образовывались симметричные участки, которые путем поворота подстраивались под структуру другого зерна. В связи с этим ячейки сетки атомных смещений при миграции границ $\langle 111 \rangle$ имели гексагональную форму.

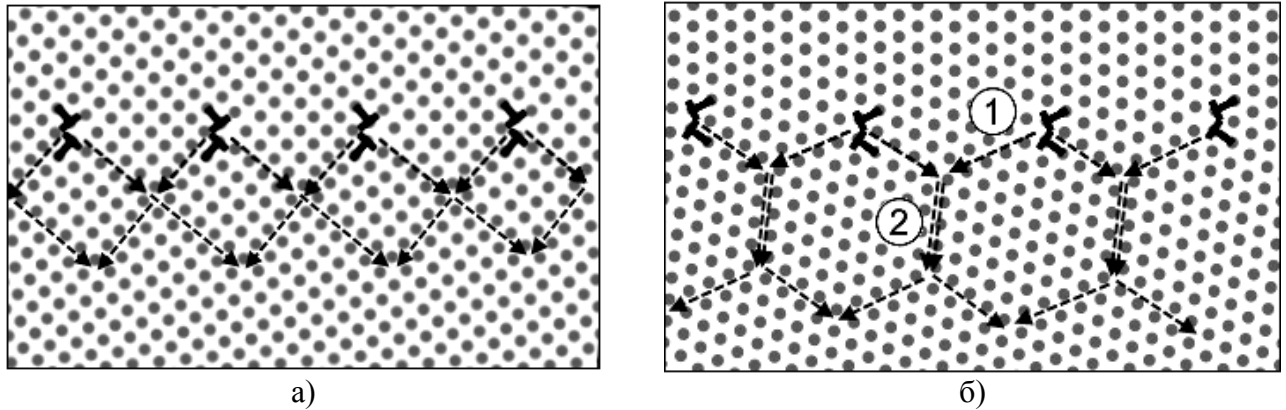


Рисунок 12 – Схема механизма миграции малоугловых границ наклона $\langle 100 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$ в моноатомной плоскости: а) граница $\langle 100 \rangle$ 10° – смена дислокаций-партнеров; б) граница $\langle 111 \rangle$ 7° :

1 – смена дислокаций-партнеров, 2 – совместное скольжение парных дислокаций

Границы наклона с осью разориентации $\langle 110 \rangle$, ввиду их принципиального отличия от границ $\langle 100 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$, рассматривались нами отдельно. Границы $\langle 110 \rangle$ обладают сравнительно низкой диффузионной проницаемостью и высокой анизотропией диффузии даже в случае большеугловых границ. Зернограницные дислокации в данных границах не содержат изломов. В связи с этим они содержат меньше свободного объема, а их энергия существенно ниже энергии границ $\langle 100 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$ при тех же углах разориентации (рисунок 13 а). Полученные значения энергии хорошо согласуются с результатами других авторов [26, 27].

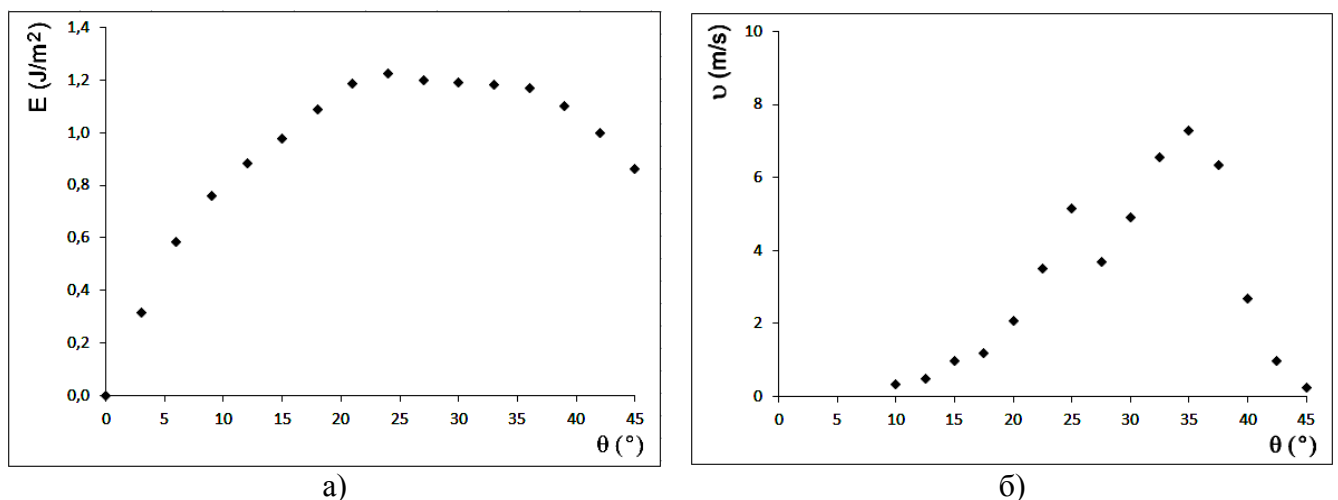


Рисунок 13 – Энергия границ наклона $\langle 110 \rangle$ (а) и скорость их миграции (б) при температуре 1700 К в зависимости от угла разориентации θ в Ni

Миграция границ наклона $\langle 110 \rangle$ протекала почти на порядок медленнее, чем границ $\langle 111 \rangle$, которые являются самыми «быстрыми» из рассмотренных. Продолжительность моделирования миграции границ $\langle 110 \rangle$ составляла, как правило, несколько тысяч пикосекунд. На рисунке 13 (б) изображена зависимость скорости миграции границ наклона $\langle 110 \rangle$ в никеле от угла разориентации при температуре 1700 К. До угла 20° миграция протекала очень медленно. Пик скорости наблюдался для большеугловых границ от 20° до 37° . Дальше скорость опять падала, снижаясь почти до нуля при угле разориентации 45° . На рисунке 14 изображен пример атомных смещений в процессе миграции границы $\langle 110 \rangle$ с углом разориентации 15° . Отчетливо видна аналогия механизмов миграции всех рассмотренных границ наклона. При миграции в том зерне, в сторону которого происходит миграция, образуются упорядоченно поворачивающиеся на угол разориентации области, размер которых зависит от угла разориентации и для малоугловых границ равен расстоянию между соседними дислокациями. Форма этих областей или ячеек близка к окружности, но с учетом кристаллографической упаковки плоскости, перпендикулярной оси разориентации.

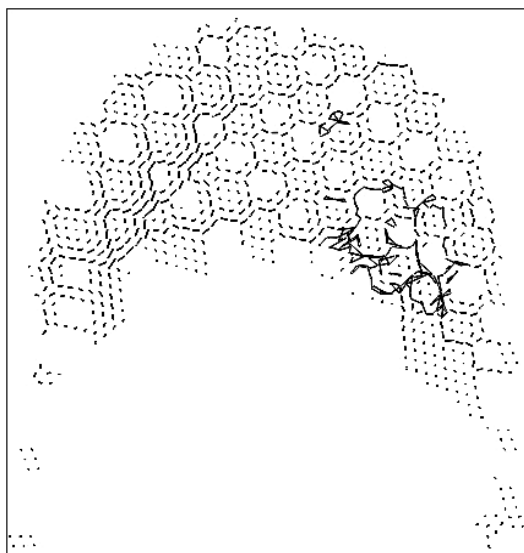


Рисунок 14 – Атомные смещения в процессе миграции границы наклона $\langle 110 \rangle 15^\circ$ (в течение 3000 пс) в Ni при температуре 1700 К. Изображены смещения больше 0,08 нм

Исследования миграции границ были проведены также для интерметаллида Ni_3Al , имеющего ГЦК решетку и упорядочение по типу $L1_2$. На рисунке 15 (а) изображены зависимости энергии границ наклона $\langle 100 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$ от угла разориентации в Ni_3Al .

Следует заметить, что энергия границ примерно в полтора раза выше, чем в Ni. Это обусловлено, в первую очередь, вкладом эффекта разупорядочения, т.е. увеличением при разориентации зерен доли связей Ni-Ni и особенно Al-Al, имеющих меньшую энергию по сравнению со связью Ni-Al.

При исследовании влияния примесей на скорость миграции границ зерен примесные атомы вводились в расчетную ячейку случайно по всему объему в октаэдрические пустоты кри-

сталлической решетки. Введение примесных атомов углерода и кислорода (азот в данном исследовании не рассматривался) приводило к существенному торможению миграции границ, что, очевидно, обусловлено высокими значениями энергии связи примесных атомов с границами зерен. Для малоугловых границ энергия связи, например, близка к энергии связи примесных атомов с дислокациями (таблица 8).

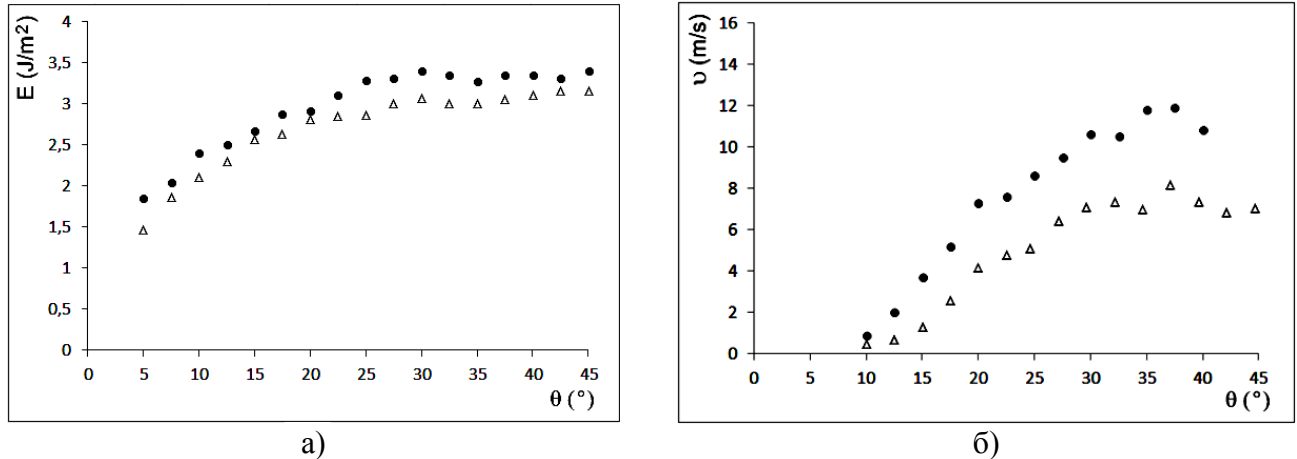


Рисунок 15 – Энергия границ наклона $\langle 100 \rangle$ (треугольные белые маркеры) и $\langle 111 \rangle$ (круглые черные маркеры) (а) и скорость их миграции (б) при температуре 1700 К в зависимости от угла разориентации θ в интерметаллиде Ni_3Al

На рисунке 15 (б) приведены зависимости скорости миграции границ в Ni_3Al от угла разориентации. Несмотря на более высокую энергию границ, а значит и силу их натяжения, скорость миграции границ в интерметаллиде Ni_3Al оказалась существенно ниже по сравнению с Ni – примерно в 3 раза при той же температуре 1700 К. В основном это обусловлено дополнительными затратами энергии на разупорядочение и разрыв связей Ni-Al при движении границ в Ni_3Al . На рисунке 16 приведен пример образования разупорядоченной области позади мигрирующей границы $\langle 111 \rangle$ 20° . Из-за высокой скорости миграции данной границы порядок не успевает восстановиться, процесс упорядочения в данном случае протекает гораздо медленней, чем миграция.

Атомы углерода в процессе компьютерного эксперимента стремились образовать агрегаты, которые преимущественно концентрировались на границе зерен (рисунок 17 а). Данные агрегаты оказались эффективными стопорами для движущихся границ – их образование приводило к снижению скорости миграции границ на один-два порядка.

Атомы кислорода не образовывали агрегаты, но из-за высоких значений энергии связи с границей также эффективно тормозили ее миграцию. В отличие от образования атомами углерода агрегатов, в случае примеси кислорода наблюдался другой эффект – разрыхление и увеличение ширины границы (рисунок 17 б). Происходило дополнительное разупорядочение структуры, в некоторых случаях даже с образованием аморфной области позади мигрирующей границы (рисунок 17 б).

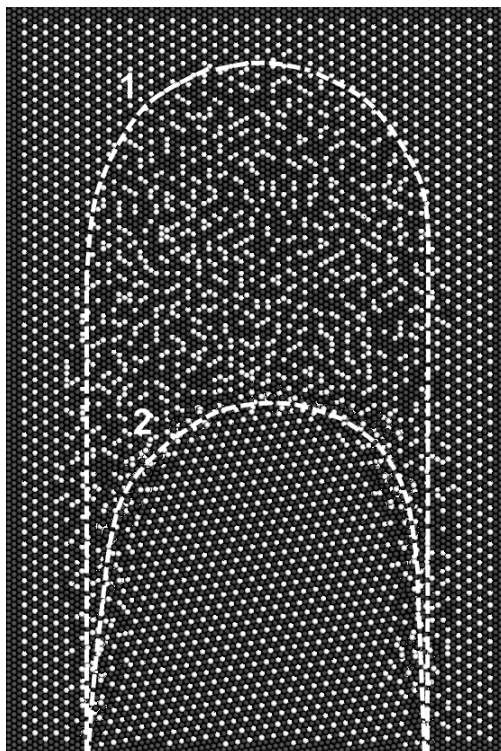
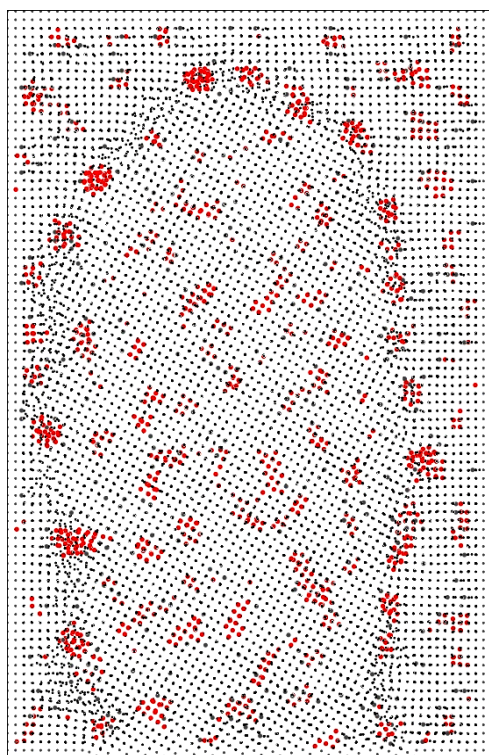
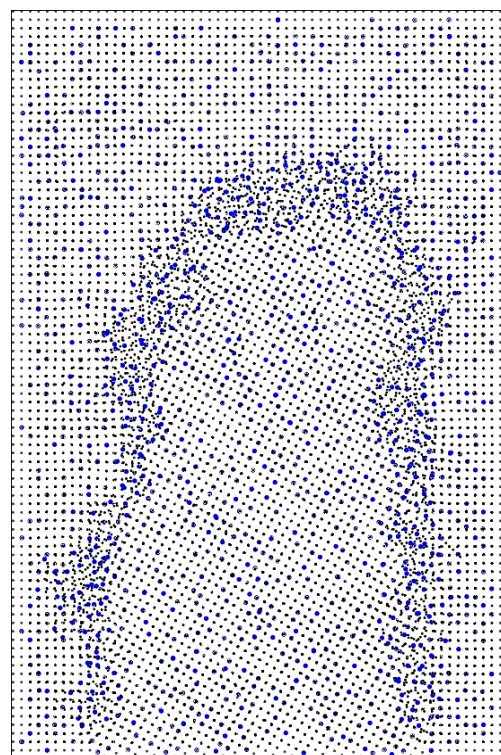


Рисунок 16 – Образование разупорядоченной области позади движущейся границы в интерметаллиде Ni_3Al (1 – начальное положение границы, 2 – текущее положение) при миграции границы наклона $\langle 111 \rangle 20^\circ$ при температуре 1700 К в течение 1000 пс



а)



б)

Рисунок 17 – Образование агрегатов атомов углерода (а) и «разрыхление» границы зерен из-за наличия примесных атомов кислорода (б) в Ni при моделировании миграции границ наклона $\langle 100 \rangle 30^\circ$. Примесные атомы углерода красные, кислорода – синие. Рисунки получены после охлаждения расчетной ячейки

На рисунке 18 приведены зависимости скорости миграции границ наклона $\langle 111 \rangle 30^\circ$ и $\langle 100 \rangle 30^\circ$ при температуре $0,9 \cdot T_{пл}$ от концентрации примесных атомов С и О. В данном случае расчетный блок имел меньший размер, чем при исследовании миграции в чистом Ni и интерметаллиде Ni_3Al , поэтому, из-за более высокой кривизны границ зерен, они имели более высокие значения скорости миграции. Как видно по приведенным зависимостям, примеси углерода и кислорода существенно тормозят миграцию – при введении 5% почти на порядок, 10% – на два порядка. Влияние примеси кислорода в Ag оказалось ниже по сравнению с другими случаями, что коррелирует с энергией связи примесных атомов с дислокациями (таблица 8). Для границ $\langle 110 \rangle$ были получены качественно аналогичные зависимости, но с тем отличием, что скорость миграции границ $\langle 110 \rangle$ на порядок ниже скорости миграции границ $\langle 111 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$.

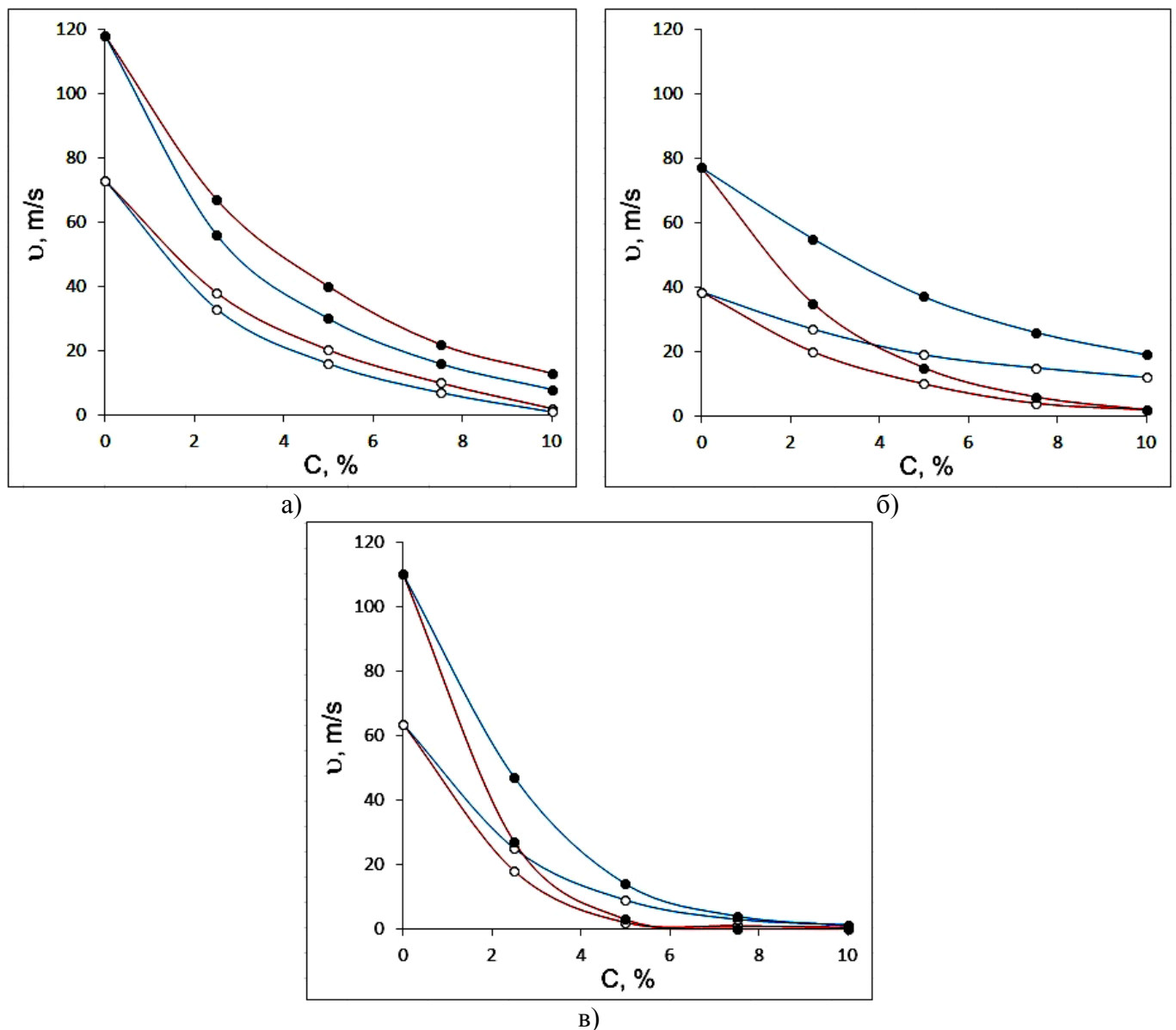


Рисунок 18 – Зависимости скорости миграции границ наклона $\langle 111 \rangle$ (черные маркеры) и $\langle 100 \rangle$ (белые маркеры) с углом разориентации 30° при температуре $0,9 \cdot T_m$ от концентрации примесных атомов углерода (красные кривые) и кислорода (синие кривые): а) в Ni; б) в Ag; в) в Al

Атомы водорода, как показало моделирование, в значительно меньшей степени оказывают влияние на скорость миграции границ, чем примеси углерода и кислорода. При концентрации 50% атомов водорода в Pd скорость миграции границ наклона становится меньше примерно в два раза по сравнению с чистым металлом.

Седьмая глава диссертации посвящена исследованию влияния примесей на процесс кристаллизации в металлах, диффузию вдоль тройных стыков границ зерен и их миграцию.

При изучении образования тройных стыков границ зерен в результате кристаллизации было замечено, что примесные атомы в значительной степени влияют на скорость движения фронта кристаллизации. В связи с этим было проведено отдельное исследование влияния концентрации примесных атомов на скорость кристаллизации. Для этого была создана специальная модель, позволяющая измерять скорость движения фронта кристаллизации. Расчетный блок создавался в форме вытянутого параллелепипеда (рисунке 19). Граничные условия вдоль осей X и Y задавались периодические, вдоль оси Z – жесткие. Жестко закрепленная кристаллическая структура сверху и снизу расчетного блока на рисунке 19 (темные атомы) имитировала стартовое положение фронта кристаллизации.

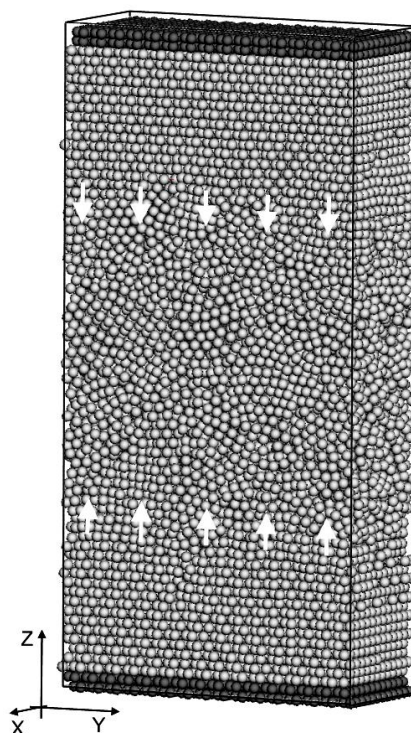


Рисунок 19 – Расчетная ячейка для моделирования кристаллизации. Темно-серые атомы оставались неподвижными в процессе моделирования. Белыми стрелками показано направление движения фронта кристаллизации

На первом этапе расчетный блок плавился путем выдерживания при температуре, превышающей температуру плавления. Затем включался термостат, и проводилось выдерживание при постоянной температуре $0,9 \cdot T_{пл}$. В течение молекулярно-динамического эксперимента фронт кристаллизации двигался от нижней и верхней стенок к центру расчетного блока (рису-

нок 19). Скорость движения фронта определялась как средняя скорость верхнего и нижнего фронтов. В начале моделирования скорость кристаллизации была выше из-за ориентирующего действия жестко закрепленных границ, поэтому ее измерение проводилось в тот период, когда она была постоянна.

На рисунке 20 изображены графики зависимости скорости движения фронта кристаллизации при температуре $0,9 \cdot T_{nl}$ от концентрации примесных атомов в рассматриваемых металлах.

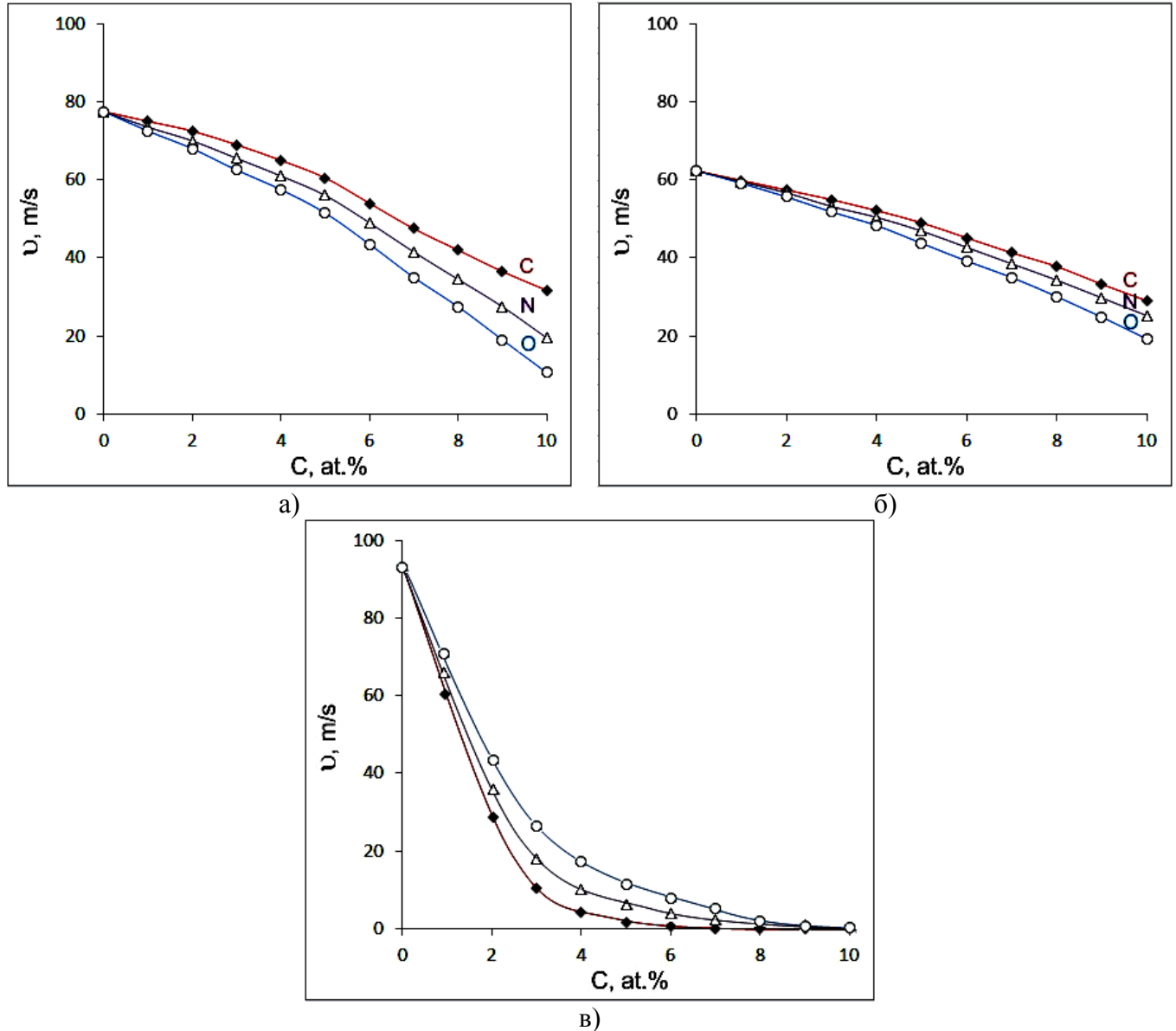


Рисунок 20 – Зависимости скорости движения фронта кристаллизации при температуретермостата $0,9 \cdot T_m$ от концентрации примесных атомов:

а) в Ni; б) в Ag; в) в Al

Как видно, введение примесных атомов существенно снижает скорость кристаллизации, и если в Ni и Ag введение 10% примесей приводило к снижению скорости в несколько раз, то в Al кристаллизацию смоделировать не удавалось вовсе – металл оставался жидким в течение сравнительно длительного компьютерного эксперимента.

В кинетической модели Вильсона-Френкеля с диффузионным ограничением скорость движения фронта кристаллизации задается выражением [28, 29]

$$v(T) = A \exp\left(-\frac{E}{kT}\right) \left[1 - \exp\left(-\frac{\Delta\mu}{kT}\right)\right], \quad (3)$$

где A – предэкспоненциальный множитель,

E – энергия активации миграции атома в жидкой фазе,

k – постоянная Больцмана,

T – температура,

$\Delta\mu$ – разность свободных энергий жидкого и кристаллического состояний.

С ростом концентрации примесных атомов в металле средние величины E и $\Delta\mu$, очевидно, будут изменяться: энергия миграции в жидкой фазе E , из-за создания относительно крепких связей между атомами металла и примеси, будет повышаться, а величина $\Delta\mu$, из-за дилатационного эффекта примесей, – снижаться. То и другое будет приводить, согласно формуле (3), к снижению скорости движения фронта кристаллизации.

Механизм торможения кристаллизации примесными атомами, таким образом, заключается в замедлении образования новой кристаллической структуры и во внесении ими разупорядочивающего эффекта при ее создании. Примесные атомы вызывают локальную деформацию, искажение, кристаллической решетки. Причем наибольшие смещения соседних с примесью атомов металла наблюдались нами как раз для кислорода в никеле и наименьшие – для углерода в серебре.

Найденные нами скорости движения фронта кристаллизации согласуются со значениями, полученными другими исследователями. В [30] для чистого Ni при температуре 1550 К ($0,9 \cdot T_m$) методом молекулярной динамики были получены скорости 70 м/с при ориентации межфазной границы (110) и 90 м/с при ориентации (100). В [29] экспериментально и с помощью моделирования для чистого Ag при температуре 1100 К ($0,9 \cdot T_m$) были получены значения скорости в диапазоне 40–50 м/с.

На рисунке 21 изображены примеры структур расчетных ячеек в процессе протекания кристаллизации в условиях наличия высокой концентрации примесных атомов (10 ат.%). Следует отметить особенности кристаллизации при содержании в металлах различных примесей. Для углерода характерным было образование агрегатов при достаточно высоких концентрациях примесных атомов (отмечены цифрой 1 на рисунке 21а). Фронт кристаллизации задерживался на данных агрегатах. В результате искажения кристаллической структуры вблизи агрегатов зачастую формировались дислокации несоответствия (отмечены цифрой 2 на рисунке 21а). При кристаллизации в условиях наличия примесей кислорода и азота дислокации наблюдались го-

раздо реже, однако часто наблюдались двойники (отмечены цифрой 3 на рисунке 21б), параллельные линии фронта кристаллизации.

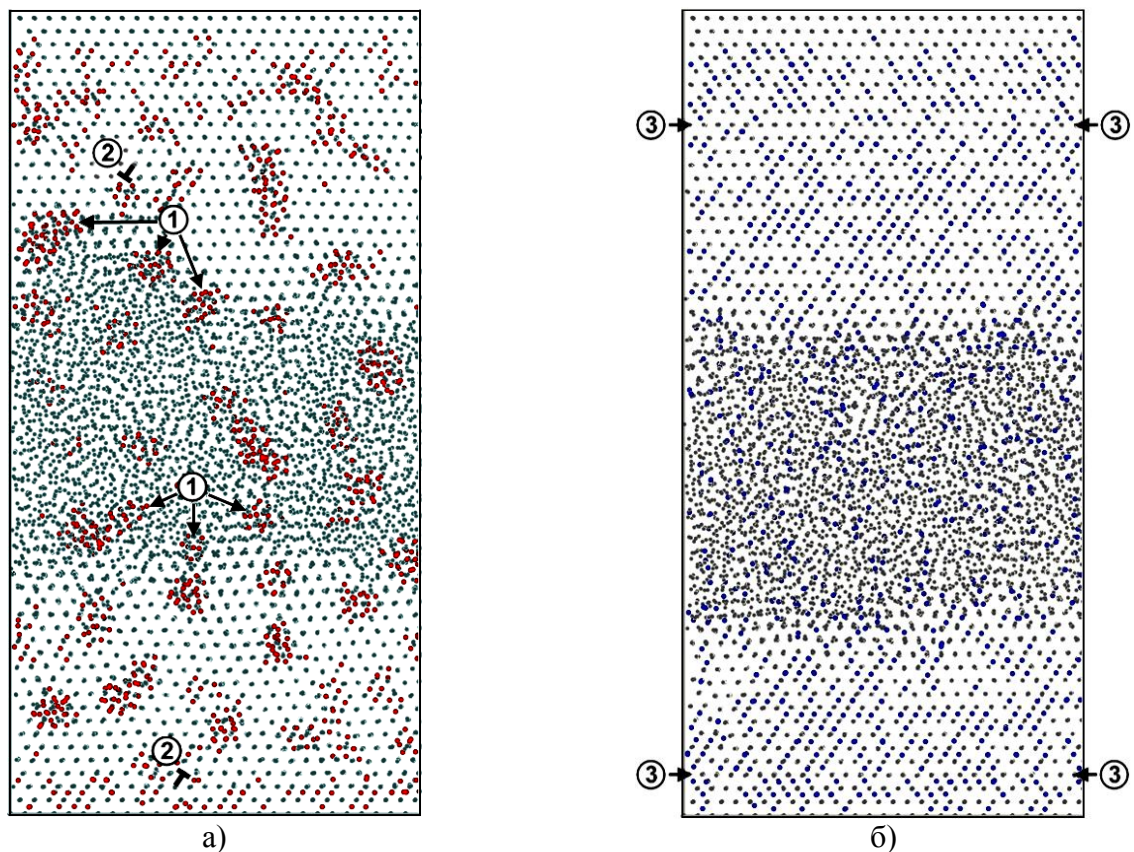


Рисунок 21 – Примеры расчетных ячеек с примесями в Ni после моделирования при температуре $0,9 \cdot T_{пл}$ (1550 K): а) 10 ат.% атомов углерода, 50 пс (1 – агрегаты атомов углерода, 2 – дислокации); б) 10 ат.% атомов кислорода, 150 пс (3 – двойник)

При исследовании диффузии вдоль тройных стыков границ зерен было выяснено, что с увеличением свободного объема в тройных стыках увеличивается как коэффициент самодиффузии вдоль стыков, так и коэффициент диффузии примесных атомов. Примесные атомы при этом мигрировали гораздо быстрее атомов металла.

Как и в случае миграции границ зерен, введение примесных атомов приводило к существенному снижению скорости миграции тройных стыков. Атомы углерода при этом стремились образовать агрегаты, которые, закрепляясь на границах зерен, становились эффективными стопорами, препятствующими перемещению всей системы из трех границ. Атомы кислорода не образовывали агрегатов, но из-за высоких значений энергии связи с границами также эффективно тормозили миграцию тройных стыков.

Основные выводы

1. Получены значения энергии активации диффузии примесных атомов легких элементов Н, С, N, О в ГЦК решетке рассматриваемых металлов. Показано, что ведущий механизм диффузии примесных атомов в ГЦК кристалле заключается в последовательной миграции через октаэдрические и тетраэдрические пустоты.
2. Рассчитаны энергии связи примесных атомов с различными дефектами кристаллической структуры в Ni, Ag, Al: вакансиями, бивакансиями, тетраэдрами дефектов упаковки, собственными межузельными атомами, частичными и вершинными дислокациями. Найдены предпочтительные места расположения примесных атомов в данных дефектах.
3. Подвижность собственных межузельных атомов (с.м.а.) существенно снижается при введении примесей в металл. При введении 10 ат.% атомов примесей энергия активации миграции с.м.а. увеличивается в несколько раз. При этом снижается вклад краудионного механизма, миграция межузельного атома осуществляется преимущественно за счет гантельного механизма.
4. Энергия связи примесных атомов с частичными дислокациями значительно меньше, чем с вершинными, что свидетельствует об относительно слабой тенденции к формированию атмосферы Коттрелла вокруг частичных дислокаций в ГЦК металлах по сравнению с вершинными дислокациями.
5. Пороги на дислокациях являются предпочтительным местом сегрегации для примесных атомов преимущественно в металлах со сравнительно небольшим параметром решетки. В Al и Ag энергия связи примесных атомов с порогом на вершинной дислокации ниже, чем с неискривленной дислокацией.
6. Найдены значения энергии активации диффузии примесных атомов вдоль ядра дислокации. Полученные значения ниже в несколько раз энергии активации диффузии примесей в чистом кристалле.
7. Найдены зависимости порогового напряжения скольжения дислокации в ГЦК металлах от концентрации примесных атомов. Пороговое напряжение повышается от 7–9 МПа в чистом металле до 1–2 ГПа при введении 10 ат.% примесных атомов. Причиной значительного роста порогового напряжения при введении примесей является преимущественно закрепление примесных атомов на дефекте упаковки между частичными дислокациями (т.е. механизм Сузуки).
8. 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 силь-

нее 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 $\langle 100 \rangle$.

9. Миграция границ наклона сопровождается согласованным разделением структуры зерна, в сторону которого происходит миграция, на области одинаковой формы и размера, поворачивающиеся на угол разориентации до достижения кристаллической ориентации другого зерна. Размер областей зависит от угла разориентации и для малоугловых границ равен расстоянию между соседними дислокациями.

10. Наиболее быстро мигрируют границы с осью разориентации $\langle 111 \rangle$. Границы $\langle 100 \rangle$, при той же температуре и угле разориентации, мигрируют примерно в 1,5–2 раза медленнее, а границы $\langle 110 \rangle$ – примерно в 5–10 раз.

11. Механизм миграции малоугловых границ наклона $\langle 100 \rangle$ заключается в расщеплении парных зернограницных дислокаций с последующей сменой дислокаций-партнеров. В границах с осью разориентации $\langle 111 \rangle$, помимо расщепления дислокаций, имеет место дополнительный механизм: совместное скольжение парных зернограницных дислокаций. В малоугловых границах $\langle 110 \rangle$ также присутствуют два набора дислокаций, но они не всегда объединяются в одном ядре, как это часто имеет место в границах $\langle 100 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$. Отмечено, что при миграции границ $\langle 110 \rangle$ необъединенные дислокации принимают более активное участие, чем менее подвижные объединенные дислокации.

12. Скорость миграции границ зерен в интерметаллиде Ni_3Al значительно ниже, чем в Ni (примерно в три раза при температуре 1700 К). Причиной этого является, в частности, образование разупорядоченной области позади мигрирующей границы в Ni_3Al .

13. Введение примесных атомов углерода и кислорода приводит к существенному снижению подвижности границ зерен. Атомы углерода стремятся образовать агрегаты, которые, закрепляясь на границах зерен, становятся эффективными стопорами, препятствуя перемещению границ. Атомы кислорода не образуют агрегаты, но из-за высоких значений энергии связи с границами также эффективно тормозят их миграцию.

14. Наличие примесей легких элементов приводит к существенному замедлению скорости движения фронта кристаллизации в металлах. При этом в первую очередь влияет сила связи атомов примеси и металла, и в меньшей степени – соотношение их радиусов. Торможение примесными атомами фронта кристаллизации связано с локальной деформацией кристаллической решетки, которую они вызывают, и, как правило, чем больше эта деформация, тем сильнее примесные атомы тормозят фронт кристаллизации. Второй причиной замедления кристаллизации примесями служит снижение энергии миграции атомов в расплаве вследствие образования сравнительно крепких связей атомов металла с примесями.

Список цитируемой литературы

1. Гольдшмидт Х.Дж. Сплавы внедрения. – М.: Мир, 1971. – 424 с.
2. Pauling L. The Nature of the Chemical Bond, Third Edition, 1960. - Cornell University Press, Ithaca. – 664 p.
3. Cleri F., Rosato V. Tight-binding potentials for transition metals and alloys // Physical Review B. – 1993. – V.48, №1. – P. 22 – 33.
4. Amara H., Roussel J.-M., Bichara C., Gaspard J.-P., Ducastelle F. Tight-binding potential for atomistic simulations of carbon interacting with transition metals: Application to the Ni-C system // Phys. Rev. B. – 2009. – V.79. – 014109.
5. Siegel D.J., Hamilton J.C. First-principles study of the solubility, diffusion, and clustering of C in Ni // Phys. Rev. B. – 2003. – V.68. – 094105.
6. Zhu Y.-A., Dai Y.-C., Chen D., Yuan W.-K. First-principles study of carbon diffusion in bulk nickel during the growth of fishbone-type carbon nanofibers // Carbon. – 2007. – V.45. – P. 21–27.
7. Полетаев Г.М., Кулабухова Н.А., Старостенков М.Д. Потенциалы межатомного взаимодействия в системах Pd-H и Ni-H // Химическая физика и мезоскопия. – 2011. – Т. 13, № 3. – С. 411 – 418.
8. Ruda M., Farkas D., Abriata J. Embedded-atom interatomic potentials for hydrogen in metals and intermetallic alloys // Physical Review B. – 1996. – V.54. – P. 9765–9774.
9. Лариков Л.Н., Исайчев В.И. Диффузия в металлах и сплавах. – Киев: Наукова думка, 1987. – 511 с.
10. Взаимодействие водорода с металлами / Под. ред. Захарова А.П. М.: Наука, 1987. – 296 с.
11. Спивак Л.В., Скрыбина Н.Е., Кац М.Я. Водород и механическое последствие в металлах и сплавах. Пермь: Изд-во ПГУ, 1993. - 344 с.
12. Tanaka K., Atsumi T., Yamada M. An internal friction peak due to hydrogen-dislocation interaction in nickel // Journal de physique. - 1981. - Vol. 42, № 10. - P. 139-144.
13. Lee B.-J. A modified embedded-atom method interatomic potential for the Fe–C system // Acta Materialia. – 2006. – V.54. – P. 701–711.
14. Slane J.A., Wolverton C., Gibala R. Experimental and theoretical evidence for carbon-vacancy binding in austenite // Metallurgical and Materials Transactions A. – 2004. – V.35. – P. 2239–2245.
15. Хирт Дж., Лоте И. Теория дислокаций. М.: Атомиздат, 1972. - 600 с.
16. Domain C., Becquart C.S., Foct J. Ab initio study of foreign interstitial atom (C, N) interactions with intrinsic point defects in α -Fe // Physical Review B. – 2004. – V.69. – 144112.
17. Волленбергер Г.Й. Точечные дефекты / В кн.: Физическое металловедение. Т.3. Физико-механические свойства металлов и сплавов / Под ред. Р. Кана. – М.: Мир, 1987. – С. 5-74.
18. Орлов А.Н., Трушин Ю.В. Энергии точечных дефектов в металлах. – М.: Энергоатомиздат, 1983. – 80 с.

19. *Поletaев Г.М., Юрьев А.Б., Громов В.Е., Старостенков М.Д.* Атомные механизмы структурно-энергетических превращений вблизи границ зерен наклона в ГЦК металлах и интерметаллиде Ni_3Al . - Новокузнецк: изд-во СибГИУ, 2008. - 160 с.
20. *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.
21. *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 металловедение*. - 2013. - Т.114, №2. - С. 172-178.
22. *Sicking G., Glugla M., Huber B.* Diffusion of tritium in cold-worked palladium // *Berichte der Bunsen-Gesellschaft Physical Chemistry Chemical Physics*. - 1983. - Vol. 87, № 5. - P. 418-424.
23. *Thomas G.J.* Hydrogen effects in metals / Ed. I.M. Bernstein, A.W. Thompson. N.Y.: Met. Soc. AIME. - 1981. - P. 77-85.
24. *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.
25. *Upmanyu M., Srolovitz D.J., Shvindlerman L.S., Gottstein G.* Triple junction mobility: a molecular dynamics study // *Interface Science*. - 1999. - V.7. - P. 307-319.
26. *Bulatov V.V., Reed B.W., Kumar M.* Grain boundary energy function for fcc metals // *Acta Materialia*. - 2014. - V.65. - P. 161-175.
27. *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.
28. *Sun G., Xu J., Harrowell P.* The mechanism of the ultrafast crystal growth of pure metals from their melts // *Nature Materials*. - 2018. - V.17. - P. 881-886.
29. *Chan W.-L., Averbach R.S., Cahill D.G., Ashkenazy Y.* Solidification velocities in deeply undercooled silver // *Physical Review Letters*. - 2009. - V. 102. - 095701.
30. *Zhang H.Y., Liu F., Yang Y., Sun D.Y.* The molecular dynamics study of vacancy formation during solidification of pure metals // *Scientific Reports*. - 2017. - V.7. - 10241.

Основной список работ, опубликованных автором по теме диссертации

Статьи, опубликованные в журналах, рекомендованных ВАК Минобрнауки РФ, и/или индексируемых в Web of Science или Scopus:

1. *Поletaев Г.М., Новоселова Д.В., Кайгородова В.М., Зоря И.В., Старостенков М.Д.* Эффективный энергетический радиус тройных стыков границ наклона в Ni // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. - 2016. - Т.13, №2. - С. 238-244.

2. Полетаев Г.М., Новоселова Д.В., Кайгородова В.М., Зоря И.В., Старостенков М.Д. Диффузионный радиус тройных стыков границ наклона в Ni // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. - 2016. - Т.13, №3. - С. 348-354.
3. Полетаев Г.М., Новоселова Д.В., Кайгородова В.М., Зоря И.В., Старостенков М.Д., Пал С. Структурные трансформации в нанокристаллическом Ni под действием деформации // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. - 2016. - Т.13, №4. - С. 449-455.
4. Poletaev G.M., Medvedeva E.S., Zorya I.V., Novoselova D.V., Starostenkov M.D. Molecular dynamics simulation of interaction of hydrogen impurity with twist boundaries in Pd and Ni // Materials Physics and Mechanics. - 2016. - V.29, №2. - P. 133-137. ([Web of Science, Scopus](#))
5. Полетаев Г.М., Старостенков М.Д., Зоря И.В. Потенциалы Морзе для ГЦК металлов при учете взаимодействия пяти координационных сфер // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. - 2017. - Т.14, №1. - С. 70-75.
6. Poletaev G.M., Novoselova D.V., Zorya I.V., Starostenkov M.D. Diffusion radius of triple junctions of tilt boundaries in Ni // Materials Physics and Mechanics. - 2017. - V.30, №1. - P. 68-74. ([Web of Science, Scopus](#))
7. Полетаев Г.М., Медведева Е.С., Зоря И.В., Новоселова Д.В., Старостенков М.Д. Молекулярно-динамическое исследование взаимодействия примеси водорода с границами кручения в Ni и Pd // Известия вузов. Физика. - 2017. - Т.60, №2. - С. 3-7. ([Web of Science, Scopus](#))
8. Полетаев Г.М., Новоселова Д.В., Зоря И.В., Старостенков М.Д. Молекулярно-динамическое исследование деформации нанокристаллического никеля // Известия вузов. Черная металлургия. - 2017. - Т.60, №4. - С. 298-303. ([Scopus](#))
9. Зоря И.В., Полетаев Г.М., Медведева Е.С., Кулабухова Н.А., Старостенков М.Д. Исследование взаимодействия примеси водорода с точечными и линейными дефектами в палладии и никеле // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. - 2017. - Т.14, №2. - С. 207-214.
10. Зоря И.В., Полетаев Г.М., Медведева Е.С., Руденко Д.С., Капуста Д.Н., Новоселова Д.В., Старостенков М.Д. Молекулярно-динамическое моделирование взаимодействия примеси водорода с нанокристаллическими пленками из палладия и никеля // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. - 2017. - Т.14, №2. - С. 236-243.
11. Полетаев Г.М., Зоря И.В., Кулабухова Н.А., Новоселова Д.В., Старостенков М.Д. Исследование методом молекулярной динамики взаимодействия водорода с наночастицами палладия и никеля // Известия вузов. Черная металлургия. - 2017. - Т.60, №6. - С. 463-468. ([Scopus](#))
12. Poletaev G.M., Zorya I.V., Novoselova D.V., Starostenkov M.D. Molecular dynamics simulation of hydrogen atom diffusion in crystal lattice of fcc metals // International Journal of Materials Research. - 2017. - V.108, №10. - P. 785-790. ([Web of Science, Scopus](#))
13. Poletaev G.M., Zorya I.V., Medvedeva E.S., Novoselova D.V., Starostenkov M.D. The study of the interaction of hydrogen impurity with point and linear defects in palladium and nickel // Materials Physics and Mechanics. - 2017. - V.32, №2. - P. 117-122. ([Web of Science, Scopus](#))

14. *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. (*Web of Science, Scopus*) (Q1)
15. Новоселова Д.В., Полетаев Г.М., Зоря И.В., Старостенков М.Д. Исследование миграции тройного стыка границ наклона в ГЦК металлах // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. - 2018. - Т.15, №1. - С. 22-30.
16. 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. (*Web of Science, Scopus*)
17. Зоря И.В., Полетаев Г.М., Старостенков М.Д. Молекулярно-динамическое исследование влияния примеси водорода на миграционную подвижность границ зерен в палладии // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. - 2018. - Т.15, №2. - С. 215-221.
18. Полетаев Г.М., Зоря И.В., Старостенков М.Д., Ракитин Р.Ю. К вопросу о формировании геометрически необходимой дисклинации в тройном стыке границ зерен в металлах // *Известия РАН. Серия физическая*. – 2018. – Т.82, №9. – С. 1239–1243. (*Scopus*)
19. Полетаев Г.М., Зоря И.В., Старостенков М.Д., Ракитин Р.Ю., Коханенко Д.В. Исследование влияния примеси водорода на миграцию границ зерен наклона в палладии // *Известия вузов. Физика*. - 2018. - Т.61, №7. - С. 47-51. (*Web of Science, Scopus*)
20. Полетаев Г.М., Зоря И.В., Ракитин Р.Ю. Исследование взаимодействия примеси водорода с нанокристаллическими палладием и никелем // *Известия вузов. Черная металлургия*. - 2018. - Т.61, №8. - С. 631-637. (*Scopus*)
21. Зоря И.В., Полетаев Г.М., Старостенков М.Д. Изучение причин агрегации примесных атомов водорода в металлах в молекулярно-динамических моделях // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. - 2018. - Т.15, №3. - С. 366-373.
22. *Poletaev G.M., Zorya I.V., Rakitin R.Y., Iliina M.A., Starostenkov M.D.* Migration of tilt boundaries in nickel and Ni₃Al intermetallide: a molecular dynamics study // *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*. - 2018. - V. 447. - 012023. (*Web of Science, Scopus*)
23. Зоря И.В., Полетаев Г.М., Старостенков М.Д. Примесные атомы легких элементов в кристаллах металлов: молекулярно-динамическое моделирование // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. - 2018. - Т.15, №4. - С. 526-532.
24. Полетаев Г.М., Зоря И.В., Ракитин Р.Ю., Коханенко Д.В., Старостенков М.Д. Влияние деформации на скорость миграции границ наклона в никеле // *Известия вузов. Черная металлургия*. - 2018. - Т.61, №12. - С. 974-979. (*Scopus*)
25. Полетаев Г.М., Зоря И.В., Старостенков М.Д., Ракитин Р.Ю., Табаков П.Я. Молекулярно-динамическое исследование миграции границ зерен наклона в Ni и Ni₃Al // *Журнал экспериментальной и теоретической физики*. - 2019. - Т.155, №1. - С. 96-102. (*Web of Science, Scopus*) (Q2)

26. Зоря И.В., Полетаев Г.М. Влияние упругой деформации кристаллической решетки ГЦК металлов на энергию связи и миграции примесных атомов легких элементов // Химическая физика и мезоскопия. - 2019. - Т.21, №1. - С. 135-141.
27. Зоря И.В., Полетаев Г.М., Старостенков М.Д. Энергия связи примесных атомов легких элементов с краевыми дислокациями в ГЦК металлах // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. - 2019. - Т.16, №1. - С. 99-105.
28. Полетаев Г.М., Старостенков М.Д., Зоря И.В., Ильина М.А. Молекулярно-динамическое исследование миграции точечных дефектов в упорядоченном сплаве CuPt в условиях деформации // Деформация и разрушение материалов. - 2019. - №3. - С. 2-7. (*Scopus*)
29. Zorya I.V., Poletaev G.M., Rakitin R.Y., Ilyina M.A., Starostenkov M.D. Interaction of impurity atoms of light elements with self-interstitials in fcc metals // Letters on Materials. – 2019. – V.9, No.2. – P. 207–211. (*Web of Science, Scopus*)
30. Зоря И.В., Полетаев Г.М., Старостенков М.Д. Кристаллизация и диффузия в области тройных стыков границ зерен в условиях наличия примесей легких элементов // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2019. – Т.16, №2. – С. 187–193.
31. Полетаев Г.М., Зоря И.В., Старостенков М.Д., Бебихов Ю.В., Ракитин Р.Ю. Исследование методом молекулярно-динамического моделирования скольжения краевой дислокации в никеле и серебре при наличии примесных атомов легких элементов // Деформация и разрушение материалов. – 2019. – №7. – С. 8–13. (*Scopus*)
32. 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, No.4. – P. 380–388. (*Web of Science, Scopus*)
33. Зоря И.В., Полетаев Г.М., Старостенков М.Д. Энергия связи и миграции примесных атомов углерода, азота и кислорода в кристаллических решетках никеля, серебра и алюминия // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2019. – Т.16, №3. – С. 291–297.
34. 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. (*Web of Science, Scopus*)
35. Полетаев Г.М., Зоря И.В., Ракитин Р.Ю., Семенов А.С., Старостенков М.Д. Влияние примесных атомов углерода и кислорода на скорость миграции тройных стыков границ наклона в ГЦК металлах // Известия вузов. Физика. – 2019. – Т.62, №10. – С. 83–87. (*Web of Science, Scopus*)
36. Poletaev G.M., Zorya I.V., Rakitin R.Yu., Starostenkov M.D. The effect of light-element impurity atoms on grain boundary diffusion in FCC metals: a molecular dynamics simulation // Steel in Translation. – 2019. – V.49, No.12. – P. 825-829. (*Scopus*) (Q2)
37. Полетаев Г.М., Зоря И.В., Старостенков М.Д. Молекулярно-динамическое моделирование скольжения дислокации в ГЦК металле // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2019. – Т.16, №4. – С. 527–532.

38. *Poletaev G.M., Zorya I.V., Rakitin R.Y., Iliina M.A., Starostenkov M.D.* Interaction of impurity atoms of light elements with vacancies and vacancy clusters in fcc metals // *Materials Physics and Mechanics*. – 2020. – V.44, №1. – P. 26–33. ([*Web of Science, Scopus*](#))
39. *Поletaев 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. ([*Web of Science, Scopus*](#)) (Q2)
40. *Зоря И.В., Поletaев Г.М., Старостенков М.Д.* Влияние примесных атомов углерода и кислорода на диффузию по границам наклона $\langle 110 \rangle$ в никеле и серебре // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. – 2020. – Т.17, №1. – С. 45–51.
41. *Зоря И.В., Поletaев Г.М., Старостенков М.Д., Ракитин Р.Ю., Коханенко Д.В.* Влияние примесей легких элементов на процесс кристаллизации никеля в области тройного стыка границ зерен: молекулярно-динамическое моделирование // *Известия вузов. Черная металлургия*. – 2020. – Т.63, №5. – С. 357–363. ([*Scopus*](#))
42. *Зоря И.В., Поletaев Г.М., Старостенков М.Д.* Взаимодействие примесных атомов C, N, O с вакансиями и вакансионными кластерами в Ni, Ag, Al // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. – 2020. – Т.17, №2. – С. 148–154.
43. *Поletaев Г.М., Зоря И.В.* Молекулярно-динамическое моделирование кристаллизации никеля при наличии в расплаве кристаллических зародышей // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. – 2020. – Т.17, №4. – С. 521–527.
44. *Poletaev G.M., Zorya I.V., Novoselova D.V., Rakitin R.Y., Semenov A.S.* Modeling the formation of free volume at grain boundaries and triple junctions during nickel crystallization // *Letters on Materials*. – 2020. – V.10, No.3. – P. 299–302. ([*Web of Science, Scopus*](#))
45. *Poletaev G.M., Zorya I.V., Rakitin R.Y.* Migration mechanism of 110 tilt boundaries in nickel // *Letters on Materials*. – 2020. – V.10, No.4. – P. 543–546. ([*Web of Science, Scopus*](#))
46. *Поletaев 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(9). – С. 485–491. ([*Web of Science, Scopus*](#)) (Q2)
47. *Poletaev G.M., Zorya I.V., Rakitin R.Y., Glubokova L.G.* The binding energy of impurity atoms C, N, O with edge dislocations and the energy of their migration along dislocation core in Ni, Ag, Al // *Materials Physics and Mechanics*. – 2020. – Т. 44, №3. – С. 404–410. ([*Web of Science, Scopus*](#))
48. *Поletaев Г.М., Зоря И.В., Ракитин Р.Ю., Старостенков М.Д.* Влияние примесных атомов углерода и кислорода на диффузию по границам наклона в никеле и серебре // *Известия вузов. Физика*. – 2020. – Т.63, №12. – С. 145–151. ([*Web of Science, Scopus*](#))
49. *Зоря И.В., Поletaев Г.М.* Молекулярно-динамическое исследование взаимодействия примесных атомов углерода, азота и кислорода с собственными межузельными атомами в никеле, серебре и алюминии // *Известия АлтГУ. Физика*. – 2021. – Т.117, №1. – С. 27–32.

50. *Поletaев Г.М., Зоря И.В.* Влияние одноосной деформации на скорость миграции границ наклона $\langle 111 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$ в никеле // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. – 2021. – Т.18, №1. – С. 55–60.
51. *Зоря И.В., Поletaев Г.М.* Молекулярно-динамическое исследование влияния примесей углерода и кислорода на скорость миграции границ наклона $\langle 110 \rangle$ в никеле и серебре // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. – 2021. – Т.18, №4. – С. 485–493.
52. *Зоря И.В., Поletaев Г.М., Ракитин Р.Ю.* Влияние примесей углерода и кислорода на скорость миграции границ наклона $\langle 110 \rangle$ в аустените // *Известия вузов. Черная металлургия*. – 2022. - принята в печать (*Scopus*) (Q2)

Другие публикации:

53. *Поletaев Г.М., Медведева Е.С., Зоря И.В.* Исследование взаимодействия примеси водорода с границами кручения в Pd и Ni // *Сборник трудов XIV Международной школы-семинара «Эволюция дефектных структур в конденсированных средах»*. – Барнаул: Изд-во АлтГТУ, 2016. – С. 138–139.
54. *Поletaев Г.М., Зоря И.В., Медведева Е.С., Новоселова Д.В., Старостенков М.Д.* Компьютерное моделирование взаимодействия примесных атомов водорода с границами кручения в Ni и Pd // *Сборник научных статей IV Российско-Казахстанской молодежной научно-технической конференции «Новые материалы и технологии»*. – Барнаул: Изд-во АлтГУ, 2016. С. 4 – 9.
55. *Поletaев Г.М., Новоселова Д.В., Кайгородова В.М., Зоря И.В., Старостенков М.Д.* Компьютерное моделирование диффузии вдоль тройных стыков границ наклона в Ni, содержащих избыточный свободный объем // *Сборник научных статей IV Российско-Казахстанской молодежной научно-технической конференции «Новые материалы и технологии»*. – Барнаул: Изд-во АлтГУ, 2016. – С. 44 – 51.
56. *Новоселова Д.В., Поletaев Г.М., Зоря И.В., Старостенков М.Д.* Компьютерное моделирование деформации нанокристаллического никеля // *Сборник материалов VII Международной конференции «Деформация и разрушение материалов и наноматериалов»*. – Москва: Изд-во ИМЕТ РАН, 2017. – С. 197 – 199.
57. *Poletaev G.M., Zorya I.V., Starostenkov M.D.* The formation and migration energy of bivacancy in fcc metals // *Journal of Metastable and Nanocrystalline Materials*. – 2018. – V.30. – P. 11 – 16.
58. *Poletaev G.M., Medvedeva E.S., Novoselova D.V., Zorya I.V., Starostenkov M.D.* The necessary duration of a molecular dynamics experiment for the diffusion coefficient calculation // *Journal of Metastable and Nanocrystalline Materials*. – 2018. – V.30. – P. 22 – 27.
59. *Zorya I.V., Poletaev G.M., Starostenkov M.D.* Interaction of hydrogen atom with edge dislocation in Pd and Ni // *Journal of Metastable and Nanocrystalline Materials*. – 2018. – V.30. – P. 46 – 51.
60. *Novoselova D.V., Poletaev G.M., Zorya I.V., Starostenkov M.D.* Investigation of the migration of the tilt boundaries triple junction in fcc metals // В сборнике: *Basic problems of material science. Book of articles. Edition in Chief M.D. Starostenkov*. – Барнаул, 2018. – С. 14 – 21.

61. *Poletaev G.M., Zorya I.V., Starostenkov M.D.* Role of point defects in self-diffusion along low-angle twist boundaries in fcc metals: a molecular dynamics study // *Journal of Micromechanics and Molecular Physics*. – 2018. – V.3, Nos.1&2. – 1850001.
62. *Зоря И.В., Полетаев Г.М., Старостенков М.Д.* Молекулярно-динамическое исследование взаимодействия примеси водорода с нанокристаллическими палладием и никелем // *Сборник тезисов XV международной школы-семинара «Эволюция дефектных структур в конденсированных средах»*. – Барнаул: Изд-во АлтГТУ, 2018. – С. 27.
63. *Новоселова Д.В., Полетаев Г.М., Зоря И.В., Старостенков М.Д.* Компьютерное моделирование миграции тройных стыков границ зерен в металлах // *Сборник тезисов XV международной школы-семинара «Эволюция дефектных структур в конденсированных средах»*. – Барнаул: Изд-во АлтГТУ, 2018. – С. 37–38.
64. *Полетаев Г.М., Зоря И.В., Старостенков М.Д., Зюзин Д.И., Афанасьев В.А., Галин Я.С.* Влияние деформации и примесных атомов алюминия на скорость миграции границ зерен наклона в никеле // *Сборник тезисов XV международной школы-семинара «Эволюция дефектных структур в конденсированных средах»*. – Барнаул: Изд-во АлтГТУ, 2018. – С. 162 – 163.
65. *Зоря И.В., Полетаев Г.М., Старостенков М.Д., Полетаев Я.Г.* Молекулярно-динамическое исследование влияния упругой деформации на скорость миграции границ наклона в никеле // *Сборник научных статей VI Российско-Казахстанской молодежной научно-технической конференции «Новые материалы и технологии»*. – Барнаул: Изд-во АлтГУ, 2018. – С. 45 – 53.
66. *Зоря И.В., Полетаев Г.М., Старостенков М.Д.* Компьютерное моделирование примесных атомов легких элементов в кристаллах металлов // *Сборник материалов II Международной научно-практической конференции «Наука и инновационные разработки – Северу»*. – Мирный: Изд-во «Мирнинская городская типография», 2019. – Ч.1. – С. 133 – 136.
67. *Зоря И.В., Полетаев Г.М., Старостенков М.Д.* Молекулярно-динамическое исследование скольжения краевой дислокации в ГЦК металлах в условиях наличия примесных атомов легких элементов // *Сборник научных статей VII Российско-Казахстанской молодежной научно-технической конференции «Новые материалы и технологии»*. – Барнаул. Изд-во АлтГУ, 2019. – С. 15–22.
68. *Зоря И.В., Полетаев Г.М.* Молекулярно-динамическое исследование влияния примесей С, N, O на скольжение краевой и винтовой дислокаций в Ni, Ag и Al // *Сборник тезисов XVI международной школы-семинара «Эволюция дефектных структур в конденсированных средах»*. – Барнаул: Изд-во АлтГТУ, 2020. – С. 72.
69. *Зоря И.В., Полетаев Г.М.* Молекулярно-динамическое исследование влияния примесей легких элементов на процесс кристаллизации никеля в области тройного стыка границ зерен // *Сборник тезисов XVI международной школы-семинара «Эволюция дефектных структур в конденсированных средах»*. – Барнаул: Изд-во АлтГТУ, 2020. – С. 81 – 82.

Издание подготовлено в авторской редакции
Подписано в печать 25 апреля 2022 г.
Формат бумаги 60х84 1/16. Бумага офисная. Печать цифровая.
Усл. печ. л 2,46. Уч. изд. л. 2,7. Тираж 60 экз. Заказ № 115
ФГБОУ ВО «Сибирский государственный индустриальный университет».
654007, Россия, Кемеровская область – Кузбасс, Новокузнецк, ул. Кирова, 42
Издательский центр СибГИУ