

УДК 544.022.342, 544.022.344.2

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДВОЙНИКОВЫХ МЕЖЗЕРЕННЫХ ГРАНИЦ В ОЦК МЕТАЛЛАХ И СПЛАВАХ

© 2012 А.Б. Муралев

Научно-исследовательский технологический институт,
Ульяновский государственный университет

Поступила в редакцию 20.11.2012

В работе проведено молекулярно-динамическое моделирование двойниковых межзеренных границ в системах с ОЦК структурой. Рассмотрено шесть типов протяженных симметрично-наклонных межзеренных границ в альфа-железе, хроме, ванадии и бинарном неупорядоченном сплаве Fe-10ат.%Cr. Исследование проведено с применением многотельного межатомного взаимодействия. На основе выполненного моделирования проанализированы отрелаксированные состояния монокристаллитов, рассчитаны удельные энергии исследуемых двойниковых границ в каждом из выбранных материалов. Ключевые слова: молекулярно-динамическое моделирование, двойниковые межзеренные границы, ОЦК структура.

1. ВВЕДЕНИЕ

В связи с колосальным развитием вычислительных систем растет популярность применения так называемого вычислительного эксперимента в тех научных направлениях, в которых экспериментальные исследования и непосредственные измерения весьма затруднены, а иногда – невозможны. К одному из таких направлений относятся исследования на микро-,nano- и мезомасштабах, для которых широко применяется атомистическое моделирование: моделирование методом Монте-Карло, молекулярно-динамическое моделирование, расчеты из первых принципов (*Ab Initio*).

В силу того, что реальным твердым телам присуще огромное множество дефектов и несовершенств кристаллической структуры, несомненный интерес для исследователя представляют процессы, происходящие с участием таких образований. С экспериментальной точки зрения сдерживающим фактором здесь является с одной стороны скротечность таких процессов, с другой – достаточно малые размеры.

Данная работа посвящена исследованию протяженных, линейных дефектов кристаллической решетки, таких как специальные межзеренные границы. Исследование проведено методом молекулярной динамики.

2. МОДЕЛЬ МЕЖЗЕРЕННОЙ ГРАНИЦЫ

Кристаллические структуры, содержащие двойниковые (специальные, симметрично-наклонные)

Муралев Артем Бойсович, младший научный сотрудник лаборатории компьютерного моделирования неорганических материалов. E-mail: a.b.muralev@yandex.ru

границы зерен (ГЗ, GB), представляют собой монокристаллические области, структуры которых связаны друг с другом операцией точечной симметрии. Специальная ГЗ представляет собой границу между двойниками, являясь плоскостью зеркальной симметрии. Такие дефекты нарушают трансляционную инвариантность в направлении, перпендикулярном плоскости распространения ГЗ, однако в направлениях параллельных ГЗ трансляционная симметрия сохраняется.

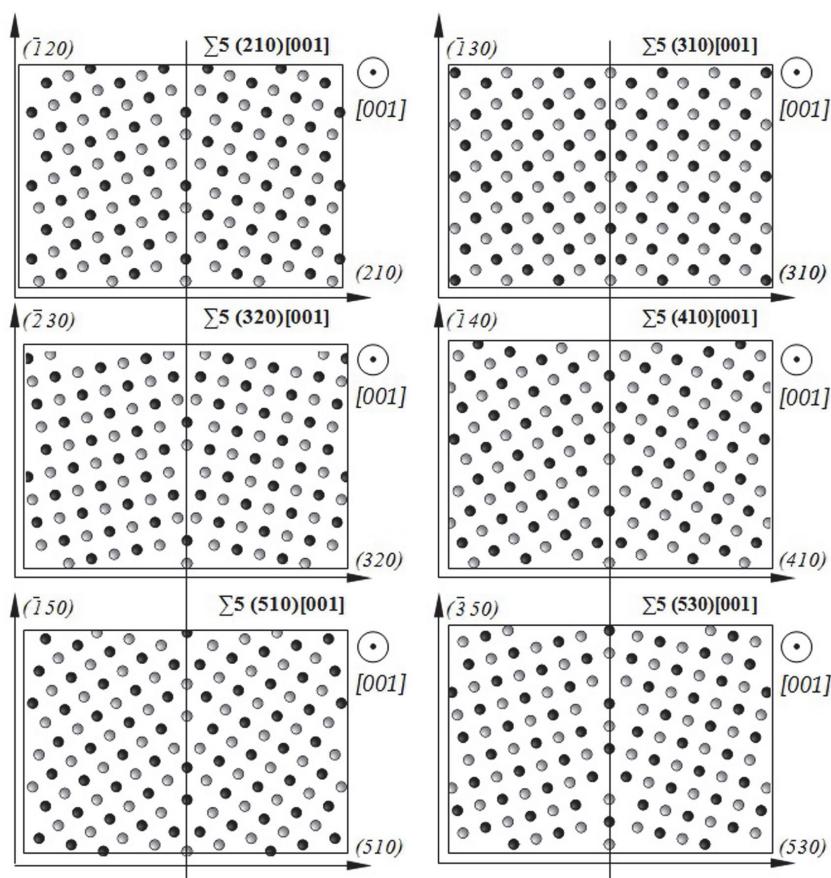
В работе рассматриваются следующие материалы, имеющие объемо-центрированную кубическую (ОЦК) кристаллическую решетку: альфа-железо, хром, ванадий и неупорядоченный бинарный сплав Fe-10ат.% Cr. Для каждого из этих материалов рассмотрены шесть типов двойниковых ГЗ, перечисленных в табл. 1.

Для некоторых типов ГЗ начальная (неотрелаксированная) атомная конфигурация бикристаллита обладает относительно высокой потенциальной энергией, в силу малых расстояний между атомами монокристаллитов на границе раздела. Для исключения таких областей существует два способа: первый из них основан на поиске наименьшего энергетического состояния обоих монокристаллов путем смещения одного относительно другого в направлении распространения ГЗ [1], второй – на замене близко лежащих атомов граничащих двойников одним атомом, лежащим на границе раздела.

При использовании первого из описанных способов нарушается пространственная зеркальная симметрия относительно плоскости распространения ГЗ, при применении второго способа уменьшается число частиц в моделируемой системе. В данной работе в качестве метода построения структур с ГЗ выбран второй из описанных

Таб. 1. Параметры исследуемых типов симметрично-наклонных межзеренных границ

Тип границы зерна	Ось вращения	Угол наклона одного зерна относительно другого α , °
(320)[001] $\sum 13$	[001]	22.62
(530)[001] $\sum 17$		28.07
(210)[001] $\sum 5$		36.87
(310)[001] $\sum 5$		53.13
(410)[001] $\sum 17$		61.93
(510)[001] $\sum 13$		67.38

**Рис. 1.** Фрагменты неотрелаксированных ОЦК бикристаллитов с межзеренными границами (окружностями серого и черного цветов отображены атомы, находящиеся в смежных атомных слоях)

выше методов. Фрагменты начальных ОЦК бикристаллитов изображены на рис. 1.

Как отмечалось выше, наличие в микрокристаллите специальной ГЗ нарушает трансляционную симметрию в одном из направлений. Поэтому моделирование требует применения специальных граничных условий (ГУ), которые с одной стороны должны имитировать «бесконечную» структуру, с другой – воспроизводить одиночную протяженную ГЗ. В качестве таких граничных условий применяются смешанные ГУ: атомы, лежащие на границах, параллельных плоскости распространения ГЗ, закрепляются в своих первоначальных по-

ложении; для границ, перпендикулярных ГЗ, используются периодические ГУ.

3. МОДЕЛИРОВАНИЕ РЕЛАКСАЦИИ БИКРИСТАЛЛОВ

Все типы симметрично-наклонных межзеренных границ по отдельности моделировались в трех металлах α -Fe, Cr, V и неупорядоченном бинарном сплаве Fe-10 % ат. Сr при температуре 300 К. Время релаксации бикристаллитов составляло около 30 пс. Выбранного временного промежутка достаточно для достижения системой

энергетически выгодной атомной конфигурации. Линейные размеры бикристаллитов выбирались таким образом, чтобы максимально уменьшить влияние жестких граничных условий и составили 230, 170 и 170 Å вдоль осей OX, OY и OZ соответственно.

Межатомное взаимодействие для всех систем было описано в рамках метода погруженного атома (МПА, EAM) [2, 3]. Для α -Fe был использован многочастичный потенциал, разработанный Акландом, Менделеевым и др. [4] (модификация ранее разработанного потенциала [5]), для хрома использован потенциал из работы [3], для ванадия – из работы [6]. Потенциал для описания кросс-взаимодействия между железом и хромом для сплава Fe-10ат. % Cr взят из работы [7].

Моделирование проведено на вычислительном кластере Научно-исследовательского технологического института УлГУ (НИТИ УлГУ) с применением молекулярно-динамического пакета MDRDS, также разработанным в НИТИ УлГУ.

4. РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Существенные изменения в энергии системы происходят в течение нескольких десятков временных шагов, по истечении которых устанавливается равновесная атомная конфигурация, в соответствие с заданной температурой. В приграничной области ГЗ происходит формирование так называемой межзеренной (зернограницкой) области, отличающейся своим энергетическим и

пространственным состоянием от областей, лежащих в объеме монокристаллитов, для которых характерно сохранение ОЦК структуры в течение всего времени моделирования (рис. 2). Как хорошо видно из рис. 5 для зернограницкой области характерен ощущимый «всплеск» потенциальной энергии, имеющий, между тем, множество локальных потенциальных «ям». Ширина межзеренных областей достаточно мала по сравнению с размерами бикристаллитов.

Энергия двойниковой ГЗ E_{GB} может быть определена как избыточная энергия микроструктуры, локализованная в межзеренной области [8]:

$$E_{GB} = \frac{E_p - N \cdot E_s}{S}, \quad (1)$$

где E_p – полная потенциальная энергия релаксированного бикристалла, N – число частиц, находящееся в расчетной области, E_s – энергия связи, приходящаяся на один атом бездефектной кристаллической решетки монокристалита, S – площадь границы зерна.

Соответствующие результаты определения удельных энергий межзеренных границ представлены на рис. 3. Оценки удельной энергии двойниковых границ лежат в интервале 0,054 – 0,087 eV/Å² для всех рассмотренных материалов. Среди чистых металлов наибольшими значениями удельной энергии обладают ГЗ в ванадии, наименьшими – ГЗ в альфа-железе. Моделирование показало, что процесс релаксации для

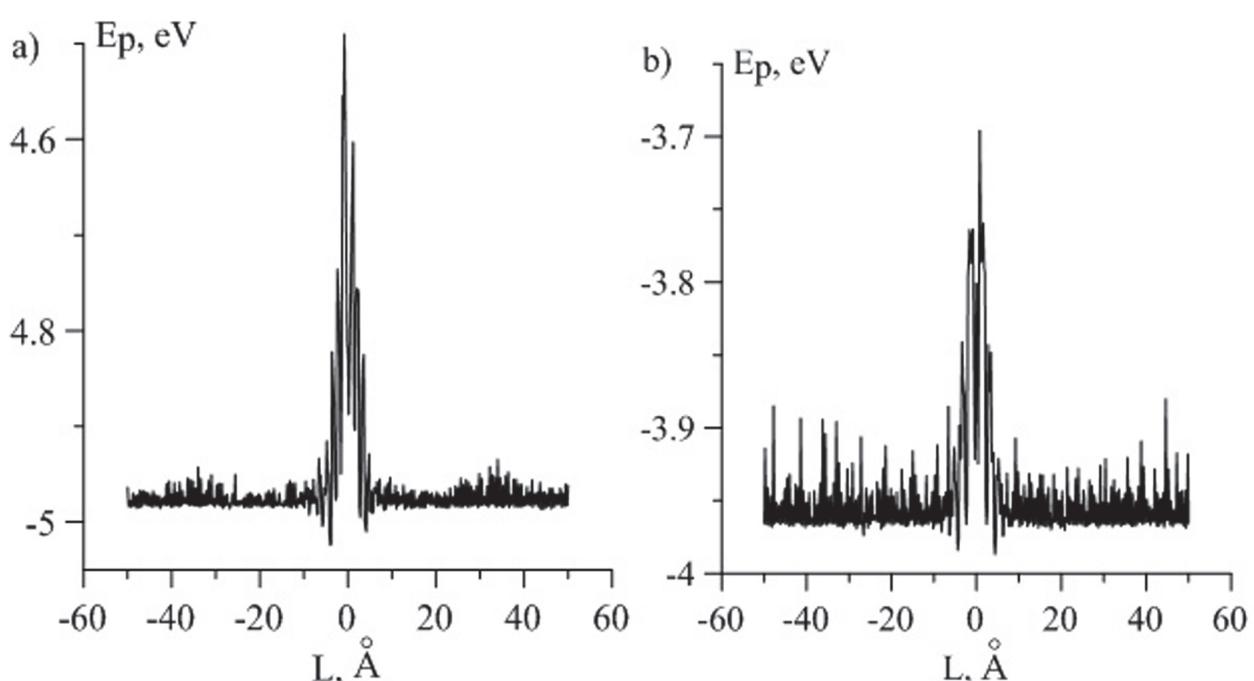


Рис. 2. Распределение потенциальной энергии бикристаллита (на один атом) вдоль направления, перпендикулярного плоскости распространения ГЗ:

a – (510)[001] 13 в ванадии; b – (210)[001] 5 в сплаве Fe-10ат.Cr

(Начало отсчета на оси абсцисс совпадает с плоскостью распространения ГЗ)

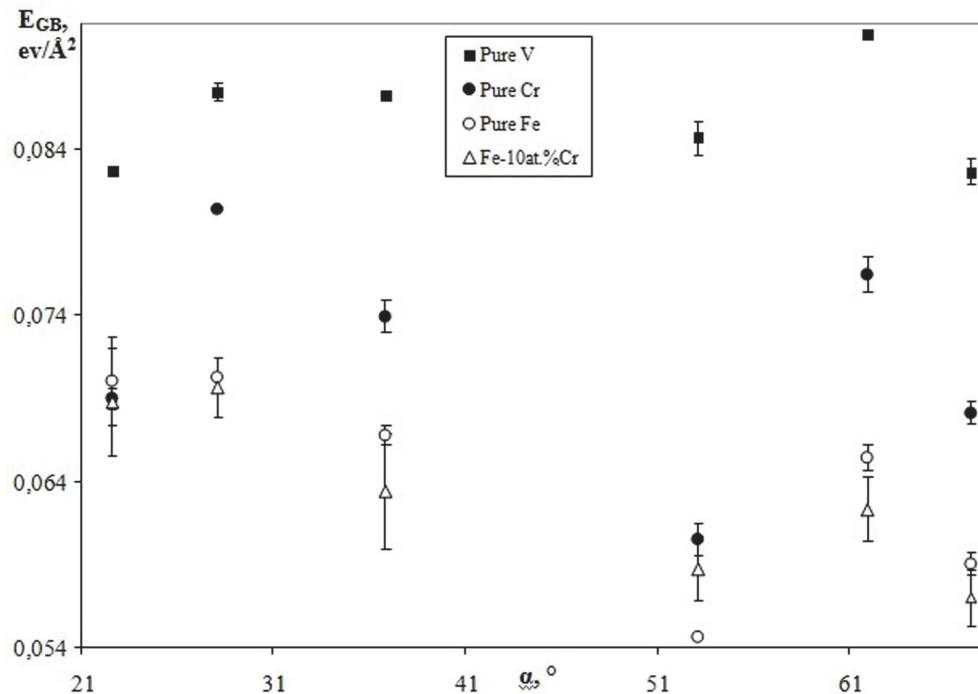


Рис. 3. Удельная энергия межзеренных границ в чистых металлах в зависимости от угла разориентации двойников в бикристаллите

различных ОЦК систем проходит неоднозначно. Так для ванадия максимальной зернограницей энергией обладает ГЗ (410)[001] $\sum 17$, минимальной – (210)[001] $\sum 5$. Как для хрома, так и для альфа-железа наибольшим значением энергии обладает ГЗ (530)[001] $\sum 17$, наименьшим – (310)[001] $\sum 5$. Стоит отметить, что ранее бикристаллы ванадия были рассмотрены группой исследователей в работе [9] при 10 К. Результаты изменения удельной межзеренной энергии в зависимости от угла разориентации двойников [9] качественно совпадают с результатами, полученными в данной работе.

Для неупорядоченного сплава Fe-10ат.Сr значения удельной энергии ГЗ на графике лежат в непосредственной близости от соответствующих оценок, полученных для чистого альфа-железа.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе предложена атомарная модель протяженных двойниковых ГЗ для металлов с ОЦК структурой. Модель основана на многочастичном межатомном взаимодействии в формализме метода погруженного атома. Методом молекуллярно-динамического моделирования исследована энергетика таких границ. Получены количественные оценки удельной энергии ГЗ в альфа-железе, хроме, ванадии и бинарном сплаве Fe-10ат.Сr для температуры 300 К.

В случае ванадия наши результаты качественно согласуются с соответствующими ре-

зультатами, полученными ранее Псахье и др. [9] на основе того же потенциала межатомного взаимодействия, но для очень низкой температуры (10К). По абсолютной величине наши оценки оказываются на $\approx 10\%$ выше. Это отличие объясняется различными температурами моделируемых бикристаллов.

Моделирование двойниковых ГЗ в бикристаллах альфа-железа, ванадия, хрома и бинарного неупорядоченного сплава Fe-10ат.Сr показало, что значения их удельных энергий лежат в относительно узком интервале от 0,054 до 0,087 $\text{eV}/\text{\AA}^2$. Наибольшими удельными энергиями обладают межзеренные границы в ванадии, наименьшими – в альфа-железе и сплаве Fe-10ат.Сr.

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки в рамках государственного задания на 2012–2014 гг, ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009 – 2013 годы и при частичной поддержке гранта РФФИ – проект 12-08-97076

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Javier Perez-Perez F., Smith R. Modelling radiation defects at grain boundaries in bcc iron // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B.* 1999. V. 153. P. 136 – 141.
2. *Daw M.S., Baskes M.I. Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals // Phys. Rev. B.* 1984. Vol 29. P. 6443 – 6453.
3. *Finnis M.F., Sinclair J.E. A simple empirical N-Body*

- potential for transition metals // Philos. Mag. A. 1984. Vol. 50. P. 45 – 55.
4. Development of an interatomic potential for phosphorus impurities in δ-iron / M. I. Mendelev, D. J. Srolovitz, S. Han, A. V. Barashev // J. Phys.: Condens. Matter. 2004. Vol. 16. P. 2629 – 2642.
 5. Development of new interatomic potentials appropriate for crystalline and liquid iron / S. Han, D. J. Srolovitz, G. J. Ackland, D. Y. Sun, M. Asta // Philosophical Magazine. 2003. Vol. 83. P. 3977 – 3994.
 6. Simulation of the interaction between Fe impurities and point defects in V / M.I. Mendelev, S. Han, W. Son, G.J. Ackland, D. J. Srolovitz // Phys. Rev. B. 2007. Vol. 76, № 214105.
 7. MD simulation of atomic displacement cascades in Fe–10 at.%Cr binary alloy / M. Tikhonchev, V. Svetukhin, A. Kadochkin, E. Gaganidze // Journal of Nuclear Materials. 2009. Vol. 395. P. 50–57.
 8. Terentyev D., Xinfu He. Properties of grain boundaries in BCC iron and iron-based alloys: An atomistic study / Open report of the Belgian nuclear research centre SCK•CEN-BLG-1072. Belgium, 2010. 70 p.
 9. Развитие каскадов атомных соударений в кристалле ванадия с внутренней структурой / С.Г. Псахье, В.М. Чернов, К.П. Зольников, Д.С. Крыжевич, А.В. Железняков // Кристаллография. 2009. Т. 54. № 6. С. 1053-1062.

SIMULATION OF TWIN GRAIN BOUNDARIES IN BCC METALS AND ALLOYS

© 2012 A.B. Muralev

Research Institute of Technology, Ulyanovsk State University

We perform molecular dynamics simulation of twin grain boundaries in system with BCC structure. Six types of extended symmetrically tilt grain boundaries are considered in alpha iron, chromium, vanadium, and binary random alloy Fe-10at.%Cr. The study is performed with the use of many-body atomic interaction. In accordance with the simulation results, we have calculated specific energies of the twin boundaries for each of the considered materials.

Key words: molecular dynamics simulation, twin grain boundaries, system with BCC structure