

5. Livingston J.D. SEM studies of magnetic domains in amorphous ribbons. // IEEE Trans. Magn., 1981, Т. 17, №6, Р. 2624.
6. Драгошанский Ю.Н. Способ термомагнитной обработки магнитомягких материалов. // Патент РФ №2025504, Бюл. изобр. №24, 1994.
7. Драгошанский Ю.Н. Физические механизмы динамического измельчения доменной структуры электротехнических материалов. // ФММ, 1994, Т. 77, №1, С. 106.
8. Драгошанский Ю.Н., Зайкова В.А., Хан Е.Б. Влияние кристаллографической ориентации и упругой деформации на магнитные потери монокристаллов кремнистого железа. // Международная конференция по магнетизму МКМ-73, М.: "Наука", 1974, Т. 4, С.518.
9. Nozawa T., Yamamoto T., Matsuo Yu., Ohya Yo.. Relationship between total losses under tensile stress in 3%Si-Fe single crystals and their orientations near (110)[001]. // IEEE Trans. Magn., 1978, Т. 14, №4, Р. 252.
10. Shilling J.W., Morris W.G., Osborn M.L., Rao P.. Orientation dependence of domain wall spacing and losses in 3%Si-Fe single crystals. // IEEE Trans. Magn., 1978, Т. 14, №3, Р. 104.
11. Драгошанский Ю.Н., Шейко Л.М. Влияние плоскостных растяжений на доменную структуру и магнитные свойства кремнистого железа. // Изв.АН СССР, 1985, сер. физич., Т. 49, №8, С. 1568.
12. Глазер А.А., Драгошанский Ю.Н., Потапов А.П., Шейко Л.М. Влияние одноосных и двухосных напряжений на магнитные свойства лент электротехнических сплавов Fe-Si и Fe-Si-B. // Республиканская конференция "Мягкие магнитные материалы и их применение в технике". // Свердловск: "Полиграфист", 1985, С. 36.
13. Драгошанский Ю.Н., Ханжина Т.А.. Аморфная электротехническая сталь с электроизоляционным покрытием. // Научно-техническая конференция "Управление структурой и свойствами магнитомягких материалов". Свердловск: "Полиграфист", 1988, С. 25.
14. Драгошанский Ю.Н., Корзуныч Г.С., Мельников М.Б., Пятагин А.И., Чистяков В.К.. Влияние растягивающих напряжений на магнитные характеристики современной анизотропной электротехнической стали. //ФММ, 2006, т.101, № 4, С.

УДК 669.017: 666.018

### ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЗМОВ ДИФФУЗИИ АТОМОВ ВБЛИЗИ ГРАНИЦ ЗЕРЕН НАКЛОНА В ИНТЕРМЕТАЛЛИДЕ $\text{Ni}_3\text{Al}$ МЕТОДОМ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Синяев Д. В., Ракитин Р. Ю.\*, Старостенков М. Д.\*, Коваленко В. В.,  
Громов В. Е.

*Сибирский государственный индустриальный университет, Новокузнецк*

*\* Алтайский государственный технический университет, Барнаул,*

Границы зерен являются неотъемлемой частью структуры металлов и сплавов, представляющих, в основном, поликристаллы. Границы зерен (ГЗ) образуются в процессах кристаллизации, при рекристаллизационном отжиге и в процессах деформации [1], оказывают определяющее влияние на многие физические и физико-механические свойства материалов, такие как пластичность, диффузия, высокотемпературная и структурная ползучесть, разрушение, плавление и другие [2]. Несмотря на большой объем исследований ГЗ, в настоящее время остаются не ясными многие проблемы, связанные со структурой и со структурными изменениями, происходящими вблизи них в процессах температурно-силового воздействия на материал.

Процессы, происходящие с участием ГЗ, непосредственно связаны с их атомной структурой. Решение таких вопросов с использованием реальных экспериментов в настоящее время является затруднительным, поскольку требуется исследовать динамическое поведение структуры ГЗ на атомном уровне. Поэтому наиболее эффективным оказывается применение методов компьютерного моделирования.

Границы наклона создавались посредством поворота двух кристаллов на углы разориентации  $\theta$  и  $\beta$  вокруг осей  $[111]$  или  $[100]$ . Угол  $\beta$  определял ориентацию одного из зерен относительно границы,  $\theta$  – угол разориентации зерен (рис. 1).

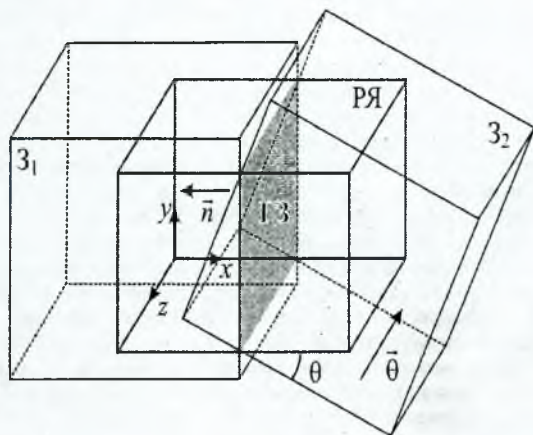


Рис. 1. Схема построения трехмерной расчетной ячейки с границей зерен наклона.

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

Так как основное влияние на свойства границ зерен наклона оказывает изменение угла  $\theta$  и, в меньшей степени, значение угла  $\beta$ , последний принимался равным нулю [3, 4]. Из получаемой структуры вырезался расчетный блок, параллельный одному из зерен, так чтобы граница была в центре блока. Расчетный блок обрезался по краям в форме параллелепипеда, так чтобы на гранях отсутствовали пустоты. Атомы за границей этого блока удалялись, как и «лишние» атомы второго, наклоненного к первому, зерна.

Количество атомов в расчетном блоке составляло от  $2 \cdot 10^5$  до  $10 \cdot 10^5$ . Оси координат расчетного блока были взяты следующими: ось  $X$  – перпендикулярно плоскости межзеренной границы, вглубь одного из зерен,  $Y$  – вдоль границы зерна и перпендикулярно оси наклона,  $Z$  – вдоль оси наклона. Вдоль осей  $X$  и  $Y$  были наложены жесткие граничные условия, а вдоль  $Z$  – периодические.

При описании межатомных взаимодействий в настоящей работе применялись парные центральные межатомные потенциалы Морза в виде

$$\Phi_{kl}(r_{ij}) = D_{kl} \beta_{kl} e^{-\alpha_{kl} r_{ij}} (e^{-\alpha_{kl} r_{ij}} - 2),$$

где  $\alpha_{KL}$ ,  $\beta_{KL}$ ,  $D_{KL}$  – параметры потенциалов, определяющих взаимодействие пары атомов сортов  $K$  и  $L$ ,  $r_{ij}$  – расстояние между  $i$  и  $j$  атомами.

Параметры потенциалов, характеризующие связи А–А и В–В пар атомов определялись с учетом взаимодействий атомов в пяти координационных сферах из экспериментально известных свойств чистых металлов – энергии сублимации, параметра решетки и объемного модуля упругости. Параметры потенциалов, соответствующих связям А–В, находились с учетом экспериментальных данных по интерметаллиду  $Ni_3Al$ : параметру решетки, объемному модулю упругости и энергиям образования антифазных границ типа  $\frac{1}{2} \langle 110 \rangle \{100\}$  и  $\frac{1}{2} \langle 110 \rangle \{111\}$ , согласно методике, приведенной в [5].

Апробация используемых межатомных потенциалов Морза проводилась по сравнению температурного коэффициента линейного расширения [6], скорости распространения продольных и поперечных упругих волн, энергии миграции вакансий. Полученные значения для трехмерных моделей хорошо согласовывались с экспериментальными данными. Исследование структурно-энергетических перестроек границ зерен выполнялось методом молекулярной динамики. Температура расчетной ячейки кристалла задавалась через начальные скорости смещений атомов, одинаковые по абсолютной величине со случайными направлениями. Полная кинетическая энергия соответствовала задаваемой температуре, а суммарный импульс расчетного блока был равен нулю.

После выполнения процедуры построения расчетного блока кристалла проводилась динамическая релаксация структуры и последующее охлаждение посредством диссипации запаса кинетической энергии за пределы расчетного блока кристалла.

Методом молекулярной динамики исследован процесс структурно-энергетической трансформации границ зерен наклона в интерметаллиде  $Ni_3Al$ , происходящей при деформации и разогреве. В зависимости от величины и направления деформации, в диффузионный процесс включается целая серия механизмов диффузии, в том числе, и кооперативные перемещения групп атомов. Различия в коэффициентах диффузии атомов  $Ni$  и  $Al$  между границами наклона  $\langle 111 \rangle$  и  $\langle 100 \rangle$  может быть объяснено тем, что для границ последней ориентации требуется больший запас кинетической энергии для того, чтобы осуществить миграцию атомов вдоль менее плотноупакованного направления.

## Список литературы

1. Хирт Д., Лоте И. Теория дислокаций. М: Атомиздат, 1972. - 600 с.
2. Штрель М.А. Прочность сплавов. - Ч 1. - Дефекты решетки. - М.: Металлургия, 1982. - 280 с.
3. Кирсанов В.В. Атомные механизмы диффузии и дефекты кристаллов // Соросовский образовательный журнал. - 2001. - Т.7, № 9. - С.103-108.
4. Ракитин Р.Ю. Исследование механизмов диффузии по границам зерен наклона в ПЦК металлах. Автореферат диссертации на соискание ученой степени к.ф.-м.н. Издательство АлтГТУ им. И.И.Ползунова, Барнаул, 2006, 24 с.
5. Старостенков М.Д., Горлов Н.В. Энергия упорядочения и ориентационная анизотропия АФГ в сплавах со сверхструктурой  $L1_2$  // Изв. СОАН СССР. – Сер. техн. наук. – 1987, 14, № 6, с. 91-93.
6. Лариков Л.Н., Носарь А.И. Самодиффузия в интерметаллических соединениях со слоистой структурой // Металлофизика и новейшие технологии. - 1995. - Т.17, №2. - С. 37-42.