



САМОДИФФУЗИЯ ВДОЛЬ СПЕЦИАЛЬНЫХ ГРАНИЦ ЗЕРЕН НАКЛОНА В ВОЛЬФРАМЕ.

Попов Владимир Владимирович, Ступак Максим Евгеньевич, Уразалиев Михаил Григорьевич

Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук, г. Екатеринбург, Россия

Введение

Методами компьютерного моделирования проведен расчет зернограничной самодиффузии в 29 симметричных границах наклона $\langle 110 \rangle$ поликристаллического вольфрама. Расчеты проведены с помощью программного комплекса LAMMPS с использованием потенциала погруженного атома. В качестве визуализатора использовалась программа OVITO.

Для моделирования процесса самодиффузии при температуре применялся метод прямой молекулярной динамики с использованием изотермо-изобарического ансамбля (NPT) и термостата Нозе-Гувера. Для молекулярно-динамического (МД) моделирования применялся блок, содержащий границу зерен (ГЗ), полученный с помощью молекулярно-статического (МС) моделирования. Для предотвращения миграции ГЗ применялись фиксированные условия на краях блока моделирования.

Расчет зернограничной самодиффузии проводился как для вакансионного механизма диффузии, так и для межузельного механизма. Коэффициент зернограничной диффузии рассчитывался на основании среднего квадратичного смещения. Расчет диффузии проводился в течение 2.5 нс, с шагом 1 фс.

Основные уравнения

Коэффициент самодиффузии рассчитывался вдоль ГЗ по следующей формуле:

$$D_{gb} = \langle r_i^2 \rangle / 4t \cdot n/N$$

Где $\langle r_i^2 \rangle$ - среднее квадратичное смещение, t - время симуляции, n количество атомов в блоке моделирования, а N количество атомов на точечный дефект. Коэффициент n/N добавлен для учета того, что количество атомов в ГЗ в блоке моделирования отличается от количества атомов на один точечный дефект.

Число атомов на точечный дефект N рассчитывается как обратная равновесная концентрация точечного дефекта C_{pd} :

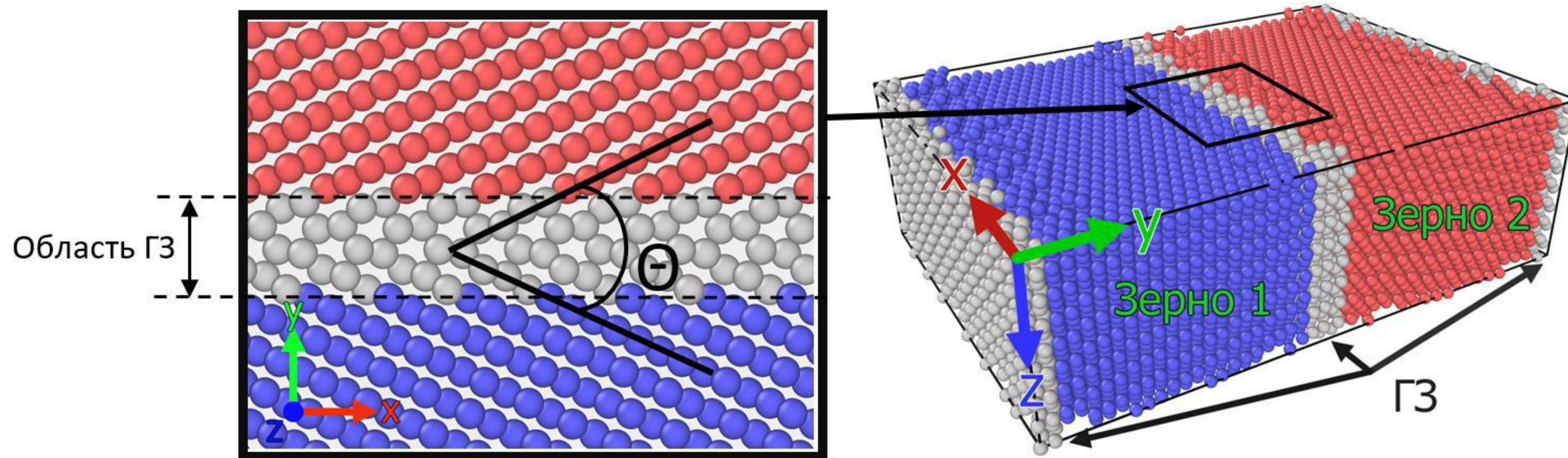
$$N = 1/C_{pd}$$

Равновесную концентрацию точечного дефекта рассчитывали по формуле:

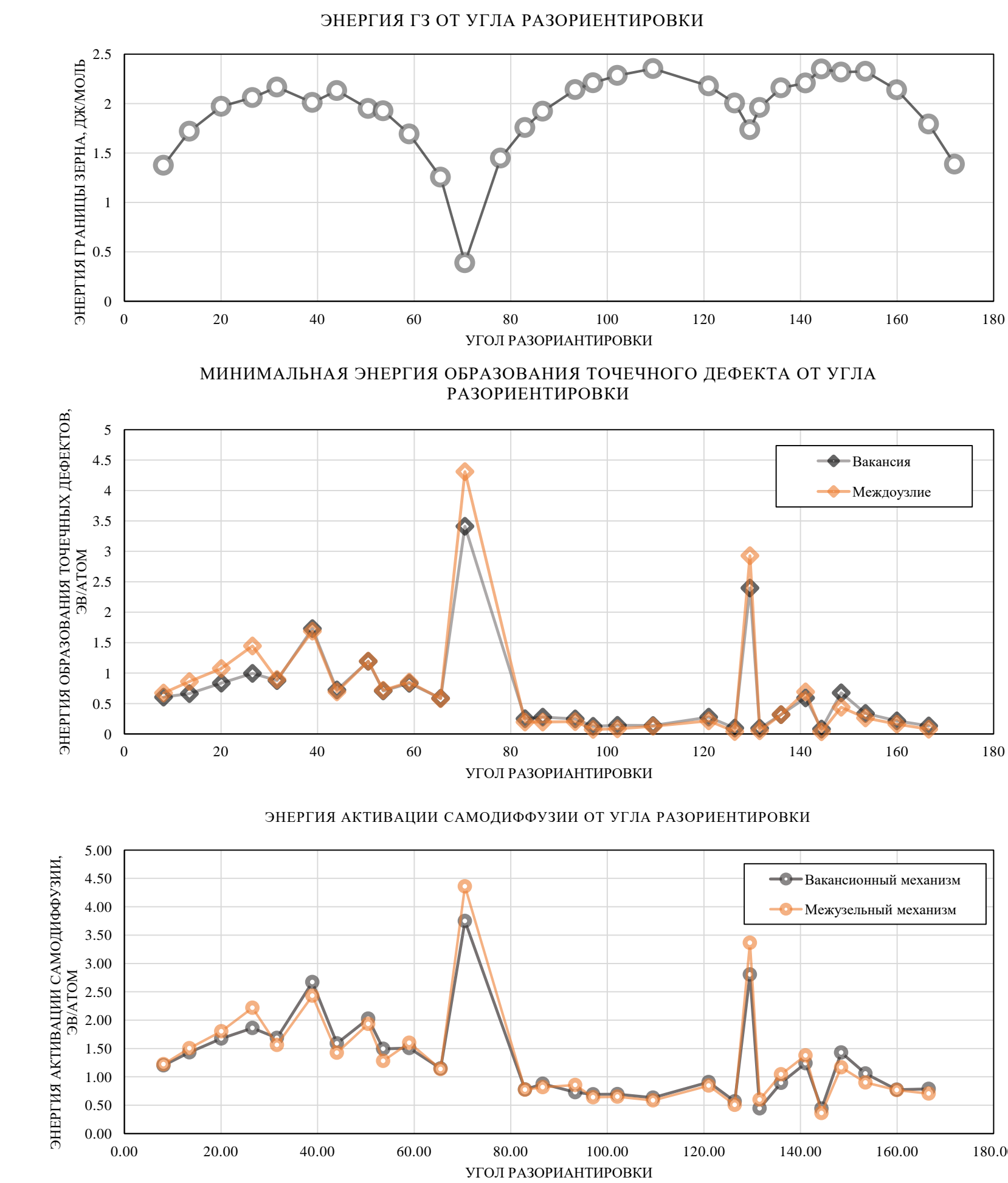
$$C_{pd} = \exp(-E_{pdmin}/kT)$$

где E_{pdmin} - минимальная энергия образования точечного дефекта.

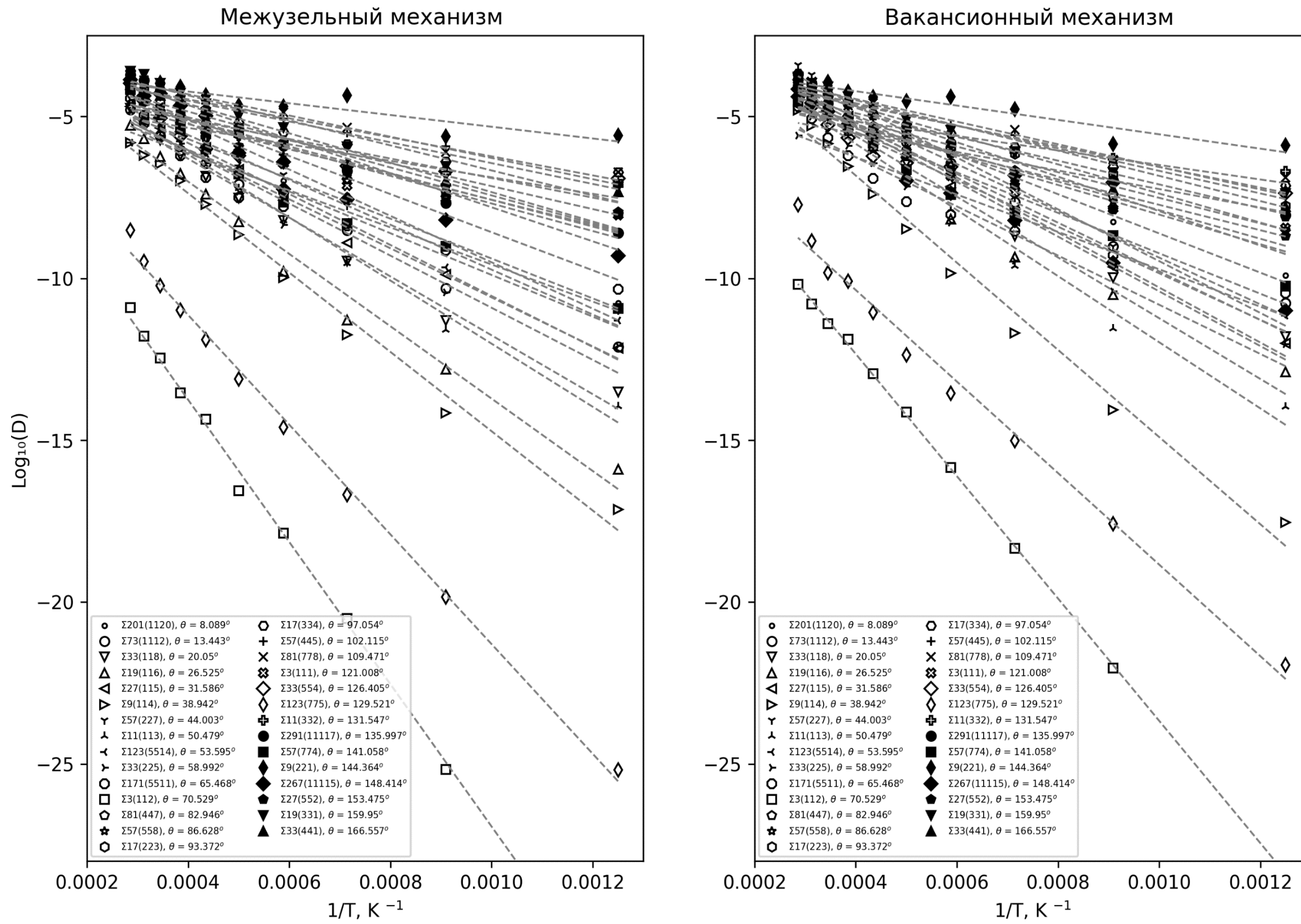
Модель ГЗ:



Результаты



Коэффициент самодиффузии



Заключение

Методом атомистического моделирования методом молекулярной динамики проведен расчет структуры, энергии и образования точечных дефектов в симметричных границах зерен наклона $\langle 110 \rangle$ в вольфраме. Методом прямой молекулярной динамики проведено моделирование процессов диффузии в границах зерен вольфрама и рассчитаны значения коэффициента зернограничной самодиффузии.

Приведена температурная зависимость коэффициента самодиффузии как для вакансионного механизма так и для механизма внедрения, так же представлена зависимость энергии активации самодиффузии от угла разориентировки, показано что структура ГЗ влияет на процессы диффузии в ней и доминирующим механизмом является вакансионный.

Благодарности

- Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России (тема «Функция», номер госрегистрации г.р. № 122021000035-6)
- При проведении работ был использован суперкомпьютер «Уран» ИММ УрО РАН

Контактная информация:
vpopov@imp.uran.ru
+7(343)3783841