

ВЛИЯНИЕ ДЕФОРМАЦИИ НА СКОРОСТЬ МИГРАЦИИ ГРАНИЦ НАКЛОНА В НИКЕЛЕ

Полетаев Г.М.¹, д.ф.-м.н., профессор, заведующий кафедрой высшей математики
и математического моделирования (gmpoletaev@mail.ru)

Зоря И.В.², к.т.н., директор архитектурно-строительного института

Ракитин Р.Ю.³, к.ф.-м.н., директор колледжа

Коханенко Д.В.⁴, к.ф.-м.н., доцент кафедры учета и информационных технологий в бизнесе

Старостенков М.Д.¹, д.ф.-м.н., профессор, заведующий кафедрой физики (genphys@mail.ru)

¹ Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова

(656038, Россия, Барнаул, Алтайский край, пр. Ленина, 46)

² Сибирский государственный индустриальный университет

(654007, Россия, Новокузнецк, Кемеровская обл., ул. Кирова, 42)

³ Алтайский государственный университет

(656049, Россия, Барнаул, Алтайский край, пр. Ленина, 61)

⁴ Финансовый университет при Правительстве РФ, Барнаулский филиал

(656038, Россия, Барнаул, Алтайский край, пр. Ленина, 54)

Аннотация. Методами молекулярной динамики проведено исследование влияния деформации вдоль различных направлений относительно мигрирующей границы на скорость миграции границ наклона с осями разориентации $\langle 100 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$ в никеле. Границы зерен создавали в модели U -образной формы. Сила поверхностного натяжения границы, возникающая вследствие стремления границы минимизировать свою энергию, являлась причиной направленного перемещения границы в сторону уменьшения ее площади. Сила, провоцирующая миграцию, и скорость миграции границы оставались в модели постоянными в течение почти всего движения границы, плавно уменьшаясь к концу компьютерного эксперимента, что позволяло достаточно просто проводить измерение скорости миграции. В работе рассматривали влияние одноосной деформации вдоль осей X , Y , Z на скорость миграции границ. Одноосную деформацию в модели задавали в начале компьютерного эксперимента путем изменения соответствующих межатомных расстояний вдоль одной из осей. Взаимодействия атомов никеля друг с другом описывали с помощью многочастичного потенциала Клери-Розато, построенного в рамках модели сильной связи. Для рассматриваемых границ получены зависимости скорости миграции при температуре 1700 К от угла разориентации. Показано, что большеугольные границы наклона $\langle 111 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$ мигрируют приблизительно с одной и той же скоростью, тогда как подвижность малоугольных границ значительно отличается: малоугольные границы $\langle 111 \rangle$ мигрируют примерно в два раза быстрее границ $\langle 100 \rangle$. Получены данные, что почти во всех случаях (как при упругой деформации сжатия, так и при растяжении) скорость миграции рассматриваемых границ замедлялась. Исключением являлся случай деформации вдоль оси наклона границы $\langle 111 \rangle$. При сжатии вдоль оси наклона граница $\langle 111 \rangle$ мигрировала быстрее, при растяжении, наоборот, медленнее. Полученные результаты свидетельствуют в пользу того, что миграция границ наклона осуществляется не за счет диффузионных процессов (например, переползания дислокаций, одиночных миграций атомов), а, по всей видимости, путем коллективных атомных перестановок: сдвигов, скольжений и расщеплений зернограницных дислокаций.

Ключевые слова: молекулярная динамика, граница зерен, миграция границы, деформация, граница наклона.

DOI: 10.17073/0368-0797-2018-12-974-979

ВВЕДЕНИЕ

Миграция границ зерен – перемещение границы по нормали к ее поверхности. Миграция границ имеет определяющее значение в развитии рекристаллизации, во многих фазовых превращениях. К настоящему времени известны многие основные закономерности миграции границ зерен в зависимости от разных факторов [1, 2]. Подвижность определяется типом и структурой границы, температурой, наличием различных дефектов. С ростом температуры подвижность границ увеличивается, причем исследователи отмечают, что на температурной зависимости подвижности имеется, как правило, два или даже три интервала с различны-

ми энергиями активации миграции [1 – 3]. В области высоких температур наблюдается более низкая энергия активации. Многие исследования, выполненные как на металлах с кубической, так и гексагональной кристаллической решеткой, показали, что с ростом угла разориентации зерен подвижность границ в целом увеличивается. В работах [4, 5] отмечается, что самыми подвижными границами в металлах с ГЦК решеткой по сравнению со всеми другими границами являются границы наклона $\langle 111 \rangle$ с углом разориентации 38° . Вместе с тем относительно энергии активации миграции границ до сих пор есть разногласия. Например, в работах [1, 2] говорится, что энергия активации почти монотонно уменьшается при увеличении угла разориентации в диа-

пазоне малоугловых границ. Однако в работах [6–8] результаты экспериментов по миграции границ наклона показали, что малоугловые границы с одной и той же осью разориентации имеют почти одинаковую энергию активации миграции в широком диапазоне углов разориентации, что косвенно свидетельствует об одинаковом элементарном механизме миграции таких границ.

Немوتря на давний интерес к проблеме миграции границ и рекристаллизации, в настоящее время остается много вопросов, связанных, в частности, с механизмом миграции на атомном уровне для разных типов границ, влиянием на кинетику миграции различных дефектов кристаллической структуры, деформации. В работах [9, 10] было установлено, что подвижность границ заметно уменьшается с повышением давления, причем для границ разного типа (произвольных и специальных) этот эффект отличается. В связи с этим возникает вопрос, как именно влияет деформация на подвижность границ разного типа. Настоящая работа посвящена исследованию методом молекулярной динамики влияния деформации вдоль различных направлений относительно мигрирующей границы на скорость миграции границ наклона с осями разориентации $\langle 100 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$ в типичном металле с ГЦК кристаллической решеткой – никеле.

ОПИСАНИЕ МОДЕЛИ

За основу была взята методика исследования миграции границы зерен наклона, предложенная и развитая в работах [2, 6]. В настоящем случае создается четко

аттестованная граница U -образной формы (рис. 1, *a*) (ось разориентации совпадает с осью Z). Сила поверхностного натяжения границы, возникающая вследствие стремления границы минимизировать свою энергию, является причиной направленного перемещения границы в сторону уменьшения ее площади [11–13]. Сила, провоцирующая миграцию, и скорость миграции границы остаются в рассматриваемой модели постоянными в течение почти всего движения границы, плавно уменьшаясь к концу компьютерного эксперимента, что позволяет достаточно просто проводить измерение скорости миграции. На рис. 1, *б* приведен пример изменения положения границы наклона $\langle 111 \rangle$ с углом разориентации 30° после молекулярно-динамического эксперимента в течение 200 пс.

В работах [14–16] похожую модель использовали для моделирования методом молекулярной динамики миграции тройного стыка границ зерен. В работах [15, 16] моделирование проводили в двумерной модели. Следует заметить, что относительно механизма миграции границ зерен, особенно малоугловых, двумерная и трехмерная модели имеют принципиальное отличие. В двумерной модели зернограницные краевые дислокации не имеют периодически расположенных вдоль ядер дислокаций изломов, которые играют важную роль в зернограницных процессах, особенно диффузии [17]. Поэтому в настоящей работе было принято решение создать трехмерный расчетный блок в молекулярно-динамической модели в виде пластины толщиной в 12 атомных плоскостей (рис. 1, *a*). Этой толщины

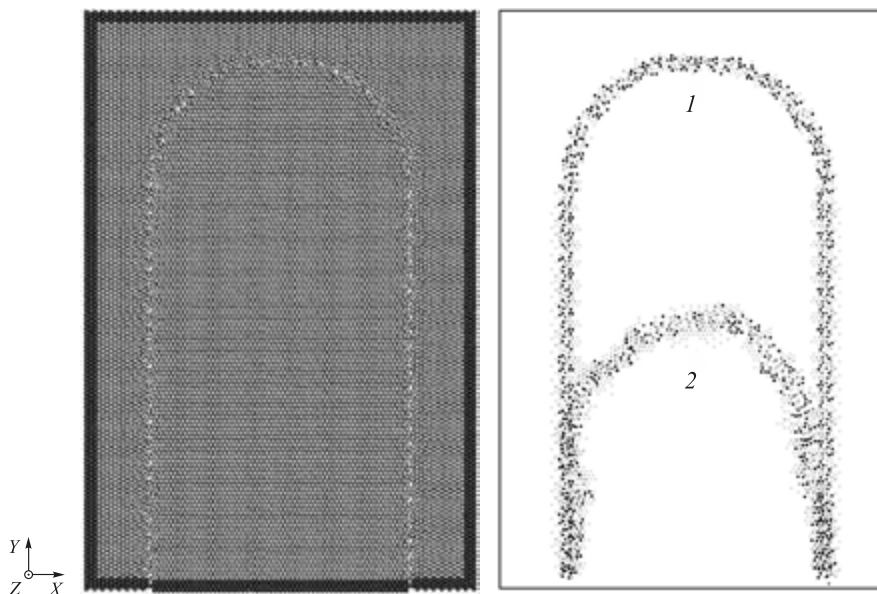


Рис. 1. Расчетный блок, содержащий границу наклона $\langle 111 \rangle 30^\circ$:

a – вид на плоскость XY в начальный момент времени (атомы, которые оставались неподвижными в течение компьютерного эксперимента окрашены в темно-серый цвет); *б* – начальное положение границы (1) и положение после моделирования в течение 200 пс при температуре 1700 К (2), показанные с помощью визуализатора свободного объема

Fig. 1. Design unit, containing edge boundary $\langle 111 \rangle 30^\circ$:

a – view of XY plane at the initial moment of time (atoms that remained stationary during computer experiment are colored in dark gray); *б* – initial position of the boundary (1) and position after simulation for 200 ps at temperature of 1700 K (2), shown using free volume visualizer

вполне достаточно для появления эффектов, связанных с изломами зернограницных дислокаций. В случае границ наклона $\langle 111 \rangle$ расчетный блок никеля имел высоту 18,0 нм, ширину 12,0 нм и толщину 2,4 нм. Для границ $\langle 100 \rangle$ размеры составляли 18,2, 12,1 и 2,2 нм соответственно. Блоки содержали примерно 50 000 атомов. Вдоль оси Z (рис. 1, а) имитировали бесконечное повторение структуры, то есть были наложены периодические граничные условия. На краю расчетного блока границы зерен должны быть зафиксированы, что подразумевает сохранение ориентации кристаллической решетки двух разных зерен на границе блока. В связи с этим по осям X и Y границы блока (выделены темно-серым цветом на рис. 1, а) были жестко закреплены для фиксации заданной разориентации зерен.

Для описания межатомных взаимодействий использовали многочастичные потенциалы Клери-Розато [18], построенные в приближении сильной связи. Потенциалы такого типа неоднократно использовали в молекулярно-динамических моделях и прошли апробацию по большому числу характеристик [19 – 22]. Опыт их применения показывает, что с их помощью удастся описать разнообразные свойства металлов и сплавов. Шаг интегрирования по времени в методе молекулярной динамики составлял 2 фс. Температуру в модели задавали через начальные скорости атомов согласно распределению Максвелла, при этом учитывали тепловое расширение расчетных блоков. Для сохранения температуры постоянной в процессе моделирования использовали термостат Нозе-Гувера.

В настоящей работе рассматривали влияние одноосной деформации вдоль осей X , Y , Z на скорость миграции границ. Одноосную деформацию в модели задавали в начале компьютерного эксперимента путем изменения соответствующих межатомных расстояний вдоль одной из осей.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

На рис. 2 приведены зависимости скорости миграции (v) границ наклона $\langle 100 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$ от угла разориентации (θ). Измерение скорости миграции границ зерен проводили при температуре 1700 К. При этой температуре, близкой к температуре плавления никеля, миграция границ с углом разориентации выше 10° происходила с достаточно высокой скоростью, чтобы ее можно было измерять в молекулярно-динамической модели. Специальные и симметричные границы в настоящей работе не рассматривали.

Поверхностное натяжение границ зерен пропорционально их энергии. С ростом угла разориентации растет энергия и натяжение [2, 13], в связи с чем увеличивается и сила, провоцирующая миграцию границы. Для большеугловых границ энергия примерно одинакова, что характерно, по мнению многих авторов, для большого класса большеугловых границ и границ

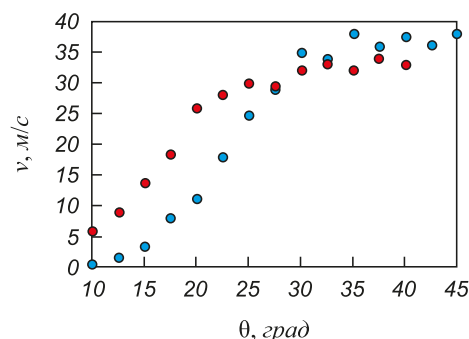


Рис. 2. Скорость миграции границ наклона и $\langle 100 \rangle$ (●) и $\langle 111 \rangle$ (●) при температуре 1700 К в зависимости от угла разориентации θ в никеле

Fig. 2. Migration rate of edge boundaries $\langle 100 \rangle$ (●) and $\langle 111 \rangle$ (●) at temperature of 1700 K, depending on misorientation angle θ in nickel

смешанного типа, в связи с чем, например, большинство углов между границами в тройных стыках близки к 120° [23, 24].

Угол разориентации зерен варьировался от 10 до 45° для границ $\langle 100 \rangle$ и до 40° для границ $\langle 111 \rangle$. В случае границ $\langle 100 \rangle$ максимальный угол разориентации составлял 45° . В случае границ $\langle 111 \rangle$ принимали во внимание тот факт, что наибольшей подвижностью, согласно, например работ [4, 5], обладают границы наклона $\langle 111 \rangle$ с углом разориентации 38° . С ростом угла разориентации скорость миграции границ возрастала, что является известной закономерностью [1, 2]. Следует обратить внимание, что при углах разориентации выше 25° большеугловые границы $\langle 100 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$ мигрируют приблизительно с одной скоростью ($30 - 37$ м/с при температуре 1700 К), тогда как скорости миграции малоугловых границ наклона $\langle 100 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$ существенно отличаются: малоугловые границы $\langle 100 \rangle$ мигрируют примерно в два раза медленнее границ $\langle 111 \rangle$, что объясняется, по всей видимости, различием дислокационной структуры рассматриваемых границ.

На рис. 3 приведены полученные в модели зависимости скорости миграции границ наклона $\langle 111 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$ с углом разориентации 30° от степени деформации отдельно вдоль осей X , Y и Z . Деформацию рассматривали упругую: от 3 % одноосного сжатия (отрицательные значения ϵ на рис. 3) до 3 % растяжения (положительные значения). В молекулярно-динамической модели при таких значениях деформации пластические сдвиги не инициировались.

В первую очередь следует обратить внимание на то, что почти во всех случаях (как при упругой деформации сжатия, так и при растяжении) скорость миграции рассматриваемых границ замедлялась. Данный результат не является тривиальным и, по всей видимости, не связан с изменением свободного объема при упругой деформации [25], который, как известно, в значительной степени влияет на диффузионные процессы. Действительно, при растяжении доля свободного объема увели-

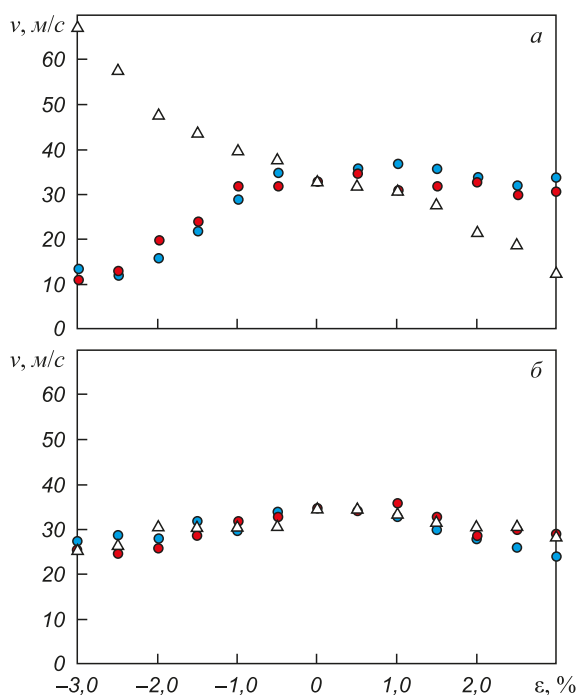


Рис. 3. Скорость миграции границ наклона $\langle 111 \rangle$ (а) и $\langle 100 \rangle$ (б) с углом разориентации 30° в зависимости от деформации вдоль осей X (ϵ_x), Y (ϵ_y) и Z (ϵ_z) при температуре 1700 К:

ϵ_x – ●; ϵ_y – ●; ϵ_z – Δ

Fig. 3. Migration rate of edge boundaries $\langle 111 \rangle$ (a) and $\langle 100 \rangle$ (b) with misorientation angle of 30° depending on strain along the X (ϵ_x), Y (ϵ_y) and Z (ϵ_z) axes at temperature of 1700 K:

ϵ_x – ●; ϵ_y – ●; ϵ_z – Δ

чивается, и такие процессы, как, например, переползание дислокаций, диффузия вдоль дислокационных ядер должны контролироваться степенью деформации. Особенно выделяется «аномальная» зависимость подвижности границ $\langle 111 \rangle$ от деформации вдоль оси Z : при сжатии вдоль оси Z на 3 % скорость миграции границ $\langle 111 \rangle$ с углом разориентации 30° увеличилась вдвое, а при растяжении – напротив, почти вдвое уменьшилась. В случае границы наклона $\langle 100 \rangle$ все три зависимости (при деформации вдоль осей X , Y , Z) оказались одинаковы (рис. 3, б).

Полученные зависимости свидетельствуют в пользу того, что механизм миграции рассматриваемых границ зерен не содержит диффузионных элементов, то есть осуществляется не за счет переползания дислокаций, одиночных миграций атомов, а, по всей видимости, протекает путем коллективных атомных перестановок, например, сдвигов, скольжений и расщеплений зернограницных дислокаций.

Выводы

Методами молекулярной динамики проведено исследование влияния деформации вдоль различных направлений относительно мигрирующей границы на скорость миграции границ наклона с осями разориен-

тации $\langle 100 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$ в никеле. Для рассматриваемых границ получены зависимости скорости миграции при температуре 1700 К от угла разориентации. Показано, что большеугольные границы наклона $\langle 111 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$ мигрируют приблизительно с одной и той же скоростью, тогда как подвижность малоугловых границ отличается значительно: малоугловые границы $\langle 111 \rangle$ мигрируют примерно в два раза быстрее границ $\langle 100 \rangle$. Получены данные, что почти во всех случаях (как при упругой деформации сжатия, так и при растяжении) скорость миграции рассматриваемых границ замедлялась. Исключением являлся случай деформации вдоль оси наклона границы $\langle 111 \rangle$. При сжатии вдоль оси наклона граница $\langle 111 \rangle$ мигрировала быстрее, при растяжении, наоборот, медленнее. Полученные результаты свидетельствуют в пользу того, что миграция границ наклона осуществляется не за счет диффузионных процессов, как, например, переползания дислокаций, одиночных миграций атомов, а, по всей видимости, путем коллективных атомных перестановок: сдвигов, скольжений и расщеплений зернограницных дислокаций.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Кайбышев О.А., Валиев Р.З. Границы зерен и свойства металлов. – М: Металлургия, 1987. – 216 с.
2. Gottstein G., Shvindlerman L.S. Grain Boundary Migration in Metals: Thermodynamics, Kinetics, Applications. Second Edition. – Boca Raton: CRC Press, 2009. – 711 p.
3. Хесснер Ф., Хофман С. Границы зерен рекристаллизационного происхождения. – В кн.: Рекристаллизация металлических материалов / Пер. с англ. – М.: Металлургия, 1982. С. 71 – 102.
4. Huang Y., Humphreys F.J. Measurements of grain boundary mobility during recrystallization of a single-phase aluminium alloy // *Acta Materialia*. 1999. Vol. 47. P. 2259 – 2268.
5. Huang Y., Humphreys F.J. The effect of solutes on grain boundary mobility during recrystallization and grain growth in some single-phase aluminium alloys // *Materials Chemistry and Physics*. 2012. Vol. 132. P. 166 – 174.
6. Gottstein G., Molodov D.A., Shvindlerman L.S. Grain boundary migration in metals: recent developments // *Interface Science*. 1998. Vol. 6. No. 1-2. P. 7 – 22.
7. Winning M., Rollett A.D., Gottstein G., Srolovitz D.J., Lim A., Shvindlerman L.S. Mobility of low-angle grain boundaries in pure metals // *Philosophical Magazine*. 2010. Vol. 90. No. 22. P. 3107 – 3128.
8. Molodov D.A., Ivanov V.A., Gottstein G. Low angle tilt boundary migration coupled to shear deformation // *Acta Materialia*. 2007. Vol. 55. P. 1843 – 1848.
9. Molodov D.A., Straumal B.B., Shvindlerman L.S. Influence of pressure on the migration of LT on BR 001 RT on BR tilt boundaries in tin bicrystals. *Soviet Physics, Solid State* (English translation of *Fizika Tverdogo Tela*). 1984, vol. 26, no. 4, pp. 629–633.
10. Molodov D.A., Straumal B.B., Shvindlerman L.S. The effect of pressure on migration of $\langle 001 \rangle$ tilt grain boundaries in tin bicrystals // *Scripta Materialia*. 1984. Vol. 18. No. 3. P. 207 – 211.
11. Yang C.C., Rollett A.D., Mullins W.W. Measuring relative grain boundary energies and mobilities in an aluminum foil from triple junction geometry // *Scripta Materialia*. 2001. Vol. 44. No. 12. P. 2735 – 2740.
12. Rollett A.D., Yang C.C., Mullins W.W., Adams B.L., Wu C.T., Kinderlehrer D., Ta'asan S., Manolache F., Liu C., Livshits I., Mason D., Talukder A., Ozdemir S., Casasent D., Morawiec A., Saylor D., Rohrer G.S., Demirel M., El-Dasher B., Yang W. Grain

- boundary property determination through measurement of triple junction geometry and crystallography. – In Int. Conf. on Grain Growth and Recrystallization, Aachen, Germany, 2001. P. 165 – 176.
13. Штремель М.А. Прочность сплавов. Ч. 1. Дефекты решетки. – М.: Металлургия, 1982. – 280 с.
 14. Gottstein G., Sursaeva V., Shvindlerman L. The effect of triple junctions on grain boundary motion and grain microstructure evolution // *Interface Science*. 1999. Vol. 7. P. 273 – 283.
 15. Upmanyu M., Srolovitz D.J., Shvindlerman L.S., Gottstein G. Triple junction mobility: a molecular dynamics study // *Interface Science*. 1999. Vol. 7. P. 307 – 319.
 16. Upmanyu M., Srolovitz D.J., Shvindlerman L.S., Gottstein G. Molecular dynamics simulation of triple junction migration // *Acta Materialia*. 2002. Vol. 50. P. 1405 – 1420.
 17. Starostenkov M.D., Sinyaev D.V., Rakitin R.Yu., Poletaev G.M. Diffusion mechanisms near tilt grain boundaries in Ni_3Al intermetallic // *Solid State Phenomena*. 2008. Vol. 139. P. 89 – 94.
 18. Cleri F., Rosato V. Tight-binding potentials for transition metals and alloys // *Physical Review B*. 1993. Vol. 48. P. 22 – 33.
 19. Poletaev G.M., Novoselova D.V., Kaygorodova V.M. The causes of formation of the triple junctions of grain boundaries containing excess free volume in fcc metals at crystallization // *Solid State Phenomena*. 2016. Vol. 249. P. 3 – 8.
 20. Starostenkov M., Poletaev G., Rakitin R., Sinyaev D. Interdiffusion and order fracture over grain boundaries in the deformed Ni_3Al intermetallic // *Materials Science Forum*. 2008. Vol. 567-568. P. 161 – 164.
 21. Poletaev G.M., Starostenkov M.D. Mutual diffusion at the interface in a two-dimensional Ni-Al system // *Technical Physics Letters*. 2003. Vol. 29. No. 6. P. 454 – 455.
 22. Kulabukhova N.A., Poletaev G.M., Starostenkov M.D., Kulagina V.V., Potekaev A.I. A molecular dynamics study of hydrogen atom diffusion in fcc-metals // *Russian Physics Journal*. 2012. Vol. 54. P. 1394 – 1399.
 23. Fortes M.A., Deus A.M. Effects of triple grain junctions on equilibrium boundary angles and grain growth kinetics // *Materials Science Forum*. 2004. Vol. 455-456. P. 648 – 652.
 24. Perevalova O.B., Kononova E.V., Koneva N.A., Kozlov E.V. Energy of grain boundaries of different types in fcc solid solutions, ordered alloys and intermetallics with L12 superstructure // *Journal of Materials Science and Technology*. 2003. Vol. 19. P. 593 – 596.
 25. Tucker G.J., Tschopp M.A., McDowell D.L. Evolution of structure and free volume in symmetric tilt grain boundaries during dislocation nucleation // *Acta Materialia*. 2010. Vol. 58. P. 6464 – 6473.

Поступила 20 июня 2018 г.

IZVESTIYA VUZOV. CHERNAYA METALLURGIYA = IZVESTIYA. FERROUS METALLURGY. 2018. VOL. 61. NO. 12, pp. 974-979.

EFFECT OF DEFORMATION ON MIGRATION RATE OF GRAIN BOUNDARIES IN NICKEL

G.M. Poletaev¹, I.V. Zorya², R.Y. Rakitin³, D.V. Kokhanenko⁴, M.D. Starostenkov²

¹Altai State Technical University, Barnaul, Altai Territory, Russia

²Siberian State Industrial University, Novokuznetsk, Kemerovo Region, Russia

³Altai State University, Barnaul, Altai Territory, Russia

⁴Barnaul branch of the Financial University under the Government of the Russian Federation, Barnaul, Altai Territory, Russia

Abstract. Effect of deformation along various directions against migrating boundary on migration rate of edge boundaries with $\langle 100 \rangle$ and $\langle 111 \rangle$ misorientation axes in nickel was studied by means of molecular dynamics method. Grain boundaries were created in U-shaped model. Force of boundary surface tension, arising from the boundary intension to minimize its energy, was the reason of directed movement of the boundary toward its area decrease. The force provoking migration and migration rate of the boundary remained constant throughout the entire movement of the boundary, gradually decreasing towards the end of computer experiment, which made it possible to measure migration rate quite simply. Effect of uniaxial deformation along the X, Y, Z axes on migration rate of the boundaries was considered. Uniaxial deformation in the model was set at beginning of the computer experiment by changing corresponding interatomic distances along one of the axes. Interactions of nickel atoms with each other were described with the aid of Cleri Rosato many-particle potential constructed in the framework of tight binding model. For the boundaries considered, dependences of migration rate on misorientation angle at temperature of 1700 K were obtained. It is shown that the high-angle $\langle 111 \rangle$ and $\langle 100 \rangle$ edge boundaries migrate approximately at the same rate, while mobility of low-angle boundaries differs significantly: low-angle $\langle 111 \rangle$ boundaries migrate about twice as fast as the $\langle 100 \rangle$ boundaries. It was found that in almost all cases, both at elastic compression and tension deformation, migration rate of considered boundaries was slowed down. An exception was the case of deformation along the $\langle 111 \rangle$ edge boundary axis. When compressing along the edge axis, $\langle 111 \rangle$ boundary migrated faster, while on the contrary, it was slower at tension. The obtained results testify to the fact that migration of edge boundaries is not due to diffusion processes, such as climbing of dislocations, single migrations

of atoms, but, apparently, by collective atomic permutations: shifts, slides and splittings of grain boundary dislocations.

Keywords: molecular dynamics, grain boundary, boundary migration, deformation, edge boundary.

DOI: 10.17073/0368-0797-2018-12-974-979

REFERENCES

1. Kaibyshev O.A., Valiev R.Z. *Granitsy zeren i svoistva metallov* [Grain boundaries and properties of metals]. Moscow: Metallurgiya, 1987, 216 p. (In Russ.).
2. Gottstein G., Shvindlerman L.S. *Grain Boundary Migration in Metals: Thermodynamics, Kinetics, Applications*. Second Edition. Boca Raton: CRC Press, 2009, 711 p.
3. Haessner F., Hofmann S. Migration of high angle grain boundaries. In: *Recrystallization of metallic materials*. Haessner F. ed. Stuttgart, Riederer-Verlag, 1978, pp. 63–96. (Russ.ed.: Haessner F., Hofmann S. Granitsy zeren rekristallizatsionnogo proiskhozhdeniya. In: *Rekristallizatsiya metallicheskih materialov*. Moscow: Metallurgiya, 1982, pp. 71–102.)
4. Huang Y., Humphreys F.J. Measurements of grain boundary mobility during recrystallization of a single-phase aluminium alloy. *Acta Materialia*. 1999, vol. 47, pp. 2259–2268.
5. Huang Y., Humphreys F.J. The effect of solutes on grain boundary mobility during recrystallization and grain growth in some single-phase aluminium alloys. *Materials Chemistry and Physics*. 2012, vol. 132, pp. 166–174.
6. Gottstein G., Molodov D.A., Shvindlerman L.S. Grain boundary migration in metals: recent developments. *Interface Science*. 1998, vol. 6, no. 1-2, pp. 7–22.
7. Winning M., Rollett A.D., Gottstein G., Srolovitz D.J., Lim A., Shvindlerman L.S. Mobility of low-angle grain boundaries in pure metals. *Philosophical Magazine*. 2010, vol. 90, no. 22, pp. 3107–3128.
8. Molodov D.A., Ivanov V.A., Gottstein G. Low angle tilt boundary migration coupled to shear deformation. *Acta Materialia*. 2007, vol. 55, pp. 1843–1848.

9. Molodov D.A., Straumal B.B., Shvindlerman L.S. Influence of pressure on the migration of LT and BR 001 RT and BR tilt boundaries in tin bicrystals. *Soviet Physics, Solid State (English translation of Fizika Tverdogo Tela)*. 1984, vol. 26, no. 4, pp. 629–633.
10. Molodov D.A., Straumal B.B., Shvindlerman L.S. The effect of pressure on migration of $\langle 001 \rangle$ tilt grain boundaries in tin bicrystals. *Scripta Materialia*. 1984, vol. 18, no. 3, pp. 207–211.
11. Yang C.C., Rollett A.D., Mullins W.W. Measuring relative grain boundary energies and mobilities in an aluminum foil from triple junction geometry. *Scripta Materialia*. 2001, vol. 44, no. 12, pp. 2735–2740.
12. Rollett A.D., Yang C.C., Mullins W.W., Adams B.L., Wu C.T., Kinderlehrer D., Ta'asan S., Manolache F., Liu C., Livshits I., Mason D., Talukder A., Ozdemir S., Casasent D., Morawiec A., Saylor D., Rohrer G.S., Demirel M., El-Dasher B., Yang W. Grain boundary property determination through measurement of triple junction geometry and crystallography. In: *Int. Conf. on Grain Growth and Recrystallization, Aachen, Germany, 2001*, pp. 165–176.
13. Shtremel' M.A. *Prochnost' splavov. Ch. 1. Defekty reshetki* [Alloy strength. Part 1. Lattice defects]. Moscow: Metallurgiya, 1982, 280 p. (In Russ.).
14. Gottstein G., Sursava V., Shvindlerman L. The effect of triple junctions on grain boundary motion and grain microstructure evolution. *Interface Science*. 1999, vol. 7, pp. 273–283.
15. Upmanyu M., Srolovitz D.J., Shvindlerman L.S., Gottstein G. Triple junction mobility: a molecular dynamics study. *Interface Science*. 1999, vol. 7, pp. 307–319.
16. Upmanyu M., Srolovitz D.J., Shvindlerman L.S., Gottstein G. Molecular dynamics simulation of triple junction migration. *Acta Materialia*. 2002, vol. 50, pp. 1405–1420.
17. Starostenkov M.D., Sinyaev D.V., Rakitin R.Yu., Poletaev G.M. Diffusion mechanisms near tilt grain boundaries in Ni_3Al intermetallic. *Solid State Phenomena*. 2008, vol. 139, pp. 89–94.
18. Cleri F., Rosato V. Tight-binding potentials for transition metals and alloys. *Physical Review B*. 1993, vol. 48, pp. 22–33.
19. Poletaev G.M., Novoselova D.V., Kaygorodova V.M. The causes of formation of the triple junctions of grain boundaries containing excess free volume in FCC metals at crystallization. *Solid State Phenomena*. 2016, vol. 249, pp. 3–8.
20. Starostenkov M., Poletaev G., Rakitin R., Sinyaev D. Interdiffusion and order fracture over grain boundaries in the deformed Ni_3Al intermetallic. *Materials Science Forum*. 2008, vol. 567–568, pp. 161–164.
21. Poletaev G.M., Starostenkov M.D. Mutual diffusion at the interface in a two-dimensional Ni-Al system. *Technical Physics Letters*. 2003, vol. 29, no. 6, pp. 454–455.
22. Kulabukhova N.A., Poletaev G.M., Starostenkov M.D., Kulagina V.V., Potekaev A.I. A molecular dynamics study of hydrogen-atom diffusion in fcc-metals. *Russian Physics Journal*. 2012, vol. 54, pp. 1394–1399.
23. Fortes M.A., Deus A.M. Effects of triple grain junctions on equilibrium boundary angles and grain growth kinetics. *Materials Science Forum*. 2004, vol. 455–456, pp. 648–652.
24. Perevalova O.B., Konovalova E.V., Koneva N.A., Kozlov E.V. Energy of grain boundaries of different types in FCC solid solutions, ordered alloys and intermetallics with L12 superstructure. *Journal of Materials Science and Technology*. 2003, vol. 19, pp. 593–596.
25. Tucker G.J., Tschopp M.A., McDowell D.L. Evolution of structure and free volume in symmetric tilt grain boundaries during dislocation nucleation. *Acta Materialia*. 2010, vol. 58, pp. 6464–6473.

Information about the authors:

G.M. Poletaev, Dr. Sci. (Phys.-math.), Professor, Head of the Chair of Advanced Mathematics and Mathematical Modeling (gmpoletaev@mail.ru)

I.V. Zorya, Cand. Sci. (Eng.), Director of the Institute of Architecture and Construction

R.Y. Rakitin, Cand. Sci. (Phys.-math.), College Director

D.V. Kokhanenko, Cand. Sci. (Phys.-math.), Assist. Professor of the Chair of Accounting and IT in Business

Starostenkov M.D., Dr. Sci. (Phys.-math.), Professor, Head of the Chair of Physics (genphys@mail.ru)

Received June 20, 2018