



Оригинальная статья

УДК 538.911

DOI 10.17073/0368-0797-2022-2-106-112



ВЛИЯНИЕ ПРИМЕСЕЙ УГЛЕРОДА И КИСЛОРОДА НА СКОРОСТЬ МИГРАЦИИ ГРАНИЦ НАКЛОНА <110> В АУСТЕНИТЕ

И. В. Зоря¹, Г. М. Полетаев², Р. Ю. Ракитин³

¹ Сибирский государственный индустриальный университет (Россия, 654007, Кемеровская обл. – Кузбасс, Новокузнецк, ул. Кирова, 42)

² Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова (Россия, 656038, Алтайский край, Барнаул, пр. Ленина, 46)

³ Алтайский государственный университет (Россия, 656038, Алтайский край, Барнаул, пр. Комсомольский, 100)

Аннотация. Методом молекулярной динамики проведено исследование влияния примесных атомов углерода и кислорода на скорость миграции границ наклона с осью разориентации <110> в γ -железе, имеющем ГЦК кристаллическую решетку. Получены зависимости энергии рассматриваемых границ и скорости их миграции при температуре 1600 К от угла разориентации. Скорость миграции границ наклона <110> при тех же условиях оказалась на порядок ниже скорости миграции границ <111> и <100>, что, в первую очередь, обусловлено сравнительно низкой энергией границ <110>. Кроме того, малоугловые границы наклона <110> являются уникальными по сравнению с другими границами наклона: зернограницные дислокации в них представляют собой обычные полные краевые дислокации с ровными ядрами, не содержащими периодически расположенных на них изломов, как в границах <111> и <100>. Введение примесных атомов углерода и кислорода приводит к значительному снижению скорости миграции границ зерен. Для примесных атомов углерода и кислорода рассчитаны энергии связи с зернограницными дислокациями в аустените. Полученные значения хорошо коррелируют с зависимостями скорости миграции границ <110> от концентрации примесей. Влияние примесей на миграцию границ в аустените оказалось сильнее, чем в изученных ранее никеле и тем более в серебре, что объясняется сравнительно низким значением электроотрицательности атомов железа по сравнению с никелем и серебром. Более высокое значение энергии связи с дислокациями в аустените и, соответственно, большее влияние на скорость миграции границ зерен были получены для атомов углерода.

Ключевые слова: молекулярная динамика, граница зерен, миграция, аустенит, примесь

Для цитирования: Зоря И.В., Полетаев Г.М., Ракитин Р.Ю. Влияние примесей углерода и кислорода на скорость миграции границ наклона <110> в аустените // Известия вузов. Черная металлургия. 2022. Т. 65. № 2. С. 106–112. <https://doi.org/10.17073/0368-0797-2022-2-106-112>

Original article

INFLUENCE OF CARBON AND OXYGEN IMPURITIES ON THE MIGRATION RATE OF <110> TILT BOUNDARIES IN AUSTENITE

I. V. Zorya¹, G. M. Poletaev², R. Yu. Rakitin³

¹ Siberian State Industrial University (42 Kirova Str., Novokuznetsk, Kemerovo Region – Kuzbass 654007, Russian Federation)

² Polzunov Altai State Technical University (46 Lenina Ave., Barnaul, Altai Territory 656038, Russian Federation)

³ Altai State University (100 Komsomol'skii Ave., Barnaul, Altai Territory 656038, Russian Federation)

Abstract. The effect of impurity carbon and oxygen atoms on the migration rate of the tilt boundaries with the misorientation axis <110> in γ -Fe with fcc crystal lattice was studied by the method of molecular dynamics. Dependences of energy of the considered boundaries and rate of their migration at a temperature of 1600 K on the misorientation angle were obtained. The migration rate of <110> tilt boundaries under the same conditions turned out an order of magnitude lower than the migration rate of <111> and <100> boundaries, which is primarily due to the relatively low energy of <110> boundaries. In addition, the low-angle <110> tilt boundaries are unique compared to other tilt boundaries – grain-boundary dislocations in them are ordinary perfect edge dislocations with even cores that do not contain jogs periodically located on them as in <111> and <100> boundaries. The introduction of impurity carbon and oxygen atoms led to a significant decrease in migration rate of the grain boundaries. The binding energies of impurity carbon and oxygen atoms with grain-boundary dislocations in the austenite were calculated. The obtained values correlate well with the dependences of migration rate of <110> boundaries on the impurities concentration. Effect of impurities on migration of the boundaries in austenite turned out to be stronger than in the previously studied nickel and even more so in silver, which can be explained by the relatively low value of

the electronegativity of iron atoms in comparison with nickel and silver. A higher value of the binding energy with dislocations in austenite and, accordingly, a greater effect on the migration rate of grain boundaries were obtained for carbon atoms.

Keywords: molecular dynamics, grain boundary, migration, austenite, impurity

For citation: Zorya I.V., Poletaev G.M., Rakitin R.Yu. Influence of carbon and oxygen impurities on the migration rate of $\langle 110 \rangle$ tilt boundaries in austenite. *Izvestiya. Ferrous Metallurgy*. 2022, vol. 65, no. 2, pp. 106–112. (In Russ.). <https://doi.org/10.17073/0368-0797-2022-2-106-112>

ВВЕДЕНИЕ

Миграция границ зерен играет определяющую роль в процессе рекристаллизации во многих фазовых превращениях. Несмотря на давний интерес к проблеме миграции границ, в настоящее время все еще остаются нерешенными вопросы, связанные с механизмом и особенностями миграции разных типов границ. Считается, что малоугловые границы наклона мигрируют посредством комбинированного действия двух механизмов: скольжения и переползания зернограницных дислокаций [1]. В работах [2, 3], например, авторы приходят к мнению, что основным механизмом миграции малоугловых границ наклона является переползание зернограницных дислокаций. Но, с другой стороны, результаты работ [4, 5], напротив, косвенно свидетельствуют о преобладании скольжения дислокаций в процессе миграции. В работах [6, 7] при компьютерном моделировании миграции границ наклона с осями разориентации $\langle 111 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$ также сделан вывод, что миграция данных границ осуществляется преимущественно путем скольжения зернограницных дислокаций.

Другим важным вопросом является влияние на подвижность границ зерен различных примесей, дефектов, свободного объема. Известно, что примесные атомы, закрепляясь на границах, существенно тормозят их миграцию [8–11]. Границы зерен (как и дислокации) собирают вокруг себя облака или так называемые атмосферы примесей, вроде атмосферы Коттрелла [12, 13]. Миграционная подвижность границ в результате образования облака примесей значительно снижается, поскольку, как и в случае дислокаций, требуется дополнительная энергия для отрыва границы от облака. Для малоугловых границ энергия связи примесного атома с границей приблизительно равна энергии связи с дислокацией. В работах [14, 15], например, были найдены энергии связи атома углерода с дислокацией в железе в диапазоне 0,4–0,7 эВ, в работе [16] для атома кислорода в цирконии было получено значение 0,5 эВ. Порядок величины указывает на сравнительно высокую связь примесных атомов как с дислокациями, так и, очевидно, с границами наклона.

Ранее были проведены исследования влияния примесей углерода и кислорода на скорость миграции границ наклона с осями разориентации $\langle 100 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$ в ГЦК металлах: никеле, серебре, алюминии [17]. Было, в частности, показано, что введение примесных атомов легких элементов приводит к существенному торможению миграции границ зерен. Не были рассмотрены

границы с осью разориентации $\langle 110 \rangle$. Однако рассмотрение границ наклона $\langle 110 \rangle \{111\}$ имеет большое практическое значение, поскольку, как известно, большинство границ в ГЦК металлах ориентировано в плотноупакованных плоскостях $\{111\}$ [18, 19], среди которых чаще всего встречаются границы наклона с осью разориентации $\langle 110 \rangle$ [18–22]. К этому типу границ относятся также двойники $\Sigma 3 \{111\} \langle 110 \rangle$, играющие исключительно важную роль в деформационных процессах [23, 24].

Настоящая работа посвящена исследованию методом молекулярной динамики влияния примесных атомов углерода и кислорода на скорость миграции границ наклона $\langle 110 \rangle$ в аустените. Рассмотрение γ -железа, имеющего ГЦК кристаллическую решетку, обусловлено его высоким практическим значением в качестве основы большого класса аустенитных сталей.

ОПИСАНИЕ МОДЕЛИ

За основу была взята методика исследования миграции границы зерен наклона, предложенная и развитая в работах [1, 25]. Создается четко аттестованная граница в форме петли или арки, как на рис. 1, а (показана черной штриховой линией). Сила натяжения границы, которая, подобно поверхностному натяжению, возникает вследствие стремления границы минимизировать свою энергию, является причиной направленного перемещения границы в сторону уменьшения ее площади (рис. 1, б). Сила, провоцирующая миграцию, зависит от угла разориентации (с ростом угла разориентации растет, как правило, и энергия границы) и кривизны границы. В рассматриваемой модели граница создавалась с относительно высокой кривизной для того, чтобы скорость миграции была достаточно высокой для того, чтобы ее можно было измерить методом молекулярной динамики. Сила и скорость миграции при постоянной температуре оставались в рассматриваемой модели постоянными в течение почти всего движения границы, плавно уменьшаясь к концу компьютерного эксперимента.

Расчетная ячейка размерами $20,4 \times 13,8 \times 2,5$ нм содержала примерно 60 000 атомов. Вдоль оси X (рис. 1, а) имитировалось бесконечное повторение структуры, то есть были наложены периодические граничные условия. На краю расчетной ячейки границы зерен должны быть зафиксированы, что подразумевает сохранение ориентации кристаллической решетки двух разных зерен на границе ячейки. В связи с этим по осям Y и Z

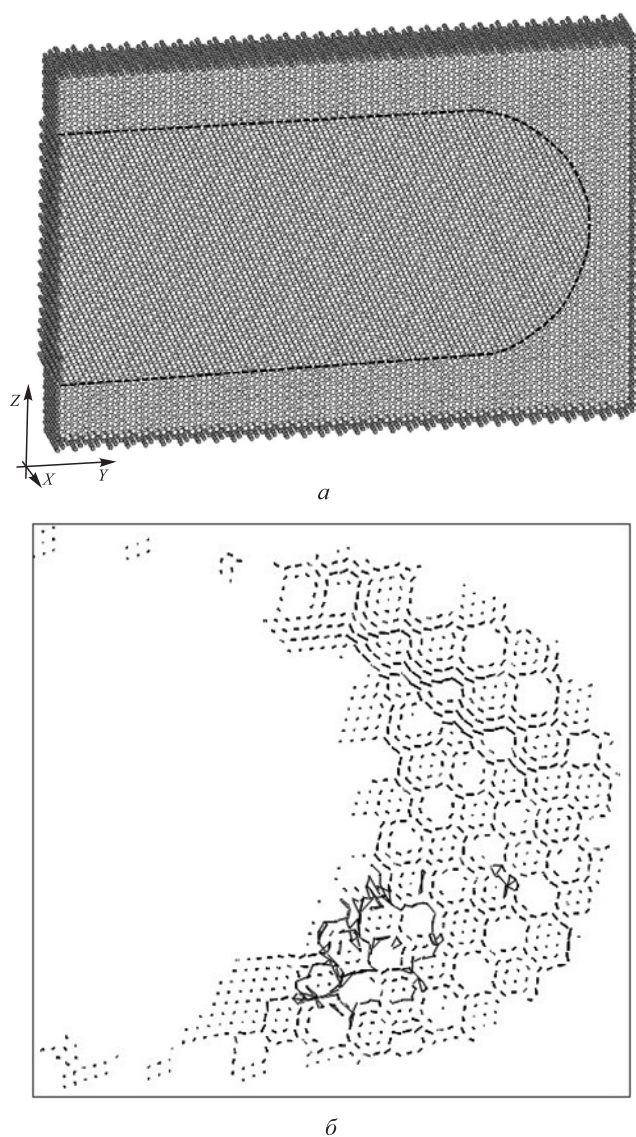


Рис. 1. Расчетная ячейка для моделирования миграции границы наклона $\langle 110 \rangle$ (а) и атомные смещения (показаны только те, которые больше 0,08 нм) в процессе миграции границы наклона $\langle 110 \rangle$ с углом разориентации 15° в аустените в течение 3000 пс при температуре 1600 К (б)

Fig. 1. Calculated cell for modeling migration of $\langle 110 \rangle$ tilt boundaries (a) and atomic displacements (shown only by those who more than 0.08 nm) in the process of migration of $\langle 110 \rangle$ tilt boundary with orientation angle of 15° in austenite during 3000 PS at 1600 K (b)

границы ячейки были жестко закреплены для фиксации заданной разориентации зерен (атомы окрашены в темно-серый цвет на рис. 1, а) оставались неподвижными в процессе компьютерного эксперимента.

Для описания взаимодействий атомов в аустените был взят известный и испытанный ЕАМ потенциал Лау [26]. В частности, в работе [27] он был детально апробирован при описании структурных, энергетических и упругих характеристик аустенита. Для описания взаимодействий атомов примесей легких элементов с атомами металла и атомов примесей друг с другом использовали парные потенциалы Морзе [28]. Оба

потенциала хорошо зарекомендовали себя в ряде расчетов, выполненных методом молекулярной динамики [28 – 30]. Параметры потенциалов для описания взаимодействий примесных атомов углерода и кислорода с атомами железа были взяты из работ [26, 28], где они были найдены с учетом эмпирических зависимостей и известных характеристик (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 в работе [28] за основу были взяты потенциалы, предложенные другими авторами. Для связи С–С парный потенциал, взятый из работы [31], был трансформирован в потенциал Морзе. Для связи О–О был применен потенциал из работы [32].

Примесные атомы вводили в расчетную ячейку, содержащую границу зерен, случайно в октаэдрические пустоты. Как известно, примесные атомы легких элементов (таких как углерод и кислород) располагаются в ГЦК решетке металлов в октаэдрических пустотах [8]. Моделирование миграции границ наклона $\langle 110 \rangle$ проводили при температуре 1600 К. Выбор температуры вблизи верхней границы существования чистого аустенита обусловлен тем, что при такой температуре скорость миграции границ наибольшая.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

На рис. 2 показаны зависимости энергии E границ наклона $\langle 110 \rangle$ и скорости v их миграции при температуре 1600 К от угла разориентации θ . Рассматривали углы от 0 до 45° . Энергию границ рассчитывали как отношение разности энергий расчетной ячейки с границей и идеального кристалла с таким же количеством атомов к площади границы. Перед расчетом энергии проводили релаксацию структуры ячейки. Полученные значения хорошо согласуются с результатами других авторов [20, 21].

Малоугловые границы наклона $\langle 110 \rangle$ уникальны по сравнению с другими границами наклона: зернограницные дислокации в таких границах представляют собой обычные идеальные краевые дислокации с прямыми ядрами, не содержащими изломов (ступенек) на них. На границах наклона с другими осями разориентации, например $\langle 111 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$, зернограницные дислокации более сложные: как правило, парные (в одном ядре объединяются дислокации из двух разных наборов с разными плоскостями скольжения) и содержат геометрически обязательные изломы [6, 7]. Дислокации в границах наклона $\langle 110 \rangle$ не имеют изломов и содержат меньше свободного объема, их энергия существенно ниже энергии границ $\langle 111 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$ при тех же углах разориентации (рис. 2, а).

Миграция границ $\langle 110 \rangle$ происходила почти на порядок медленнее, чем границ $\langle 111 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$ [7] (рис. 2, б).

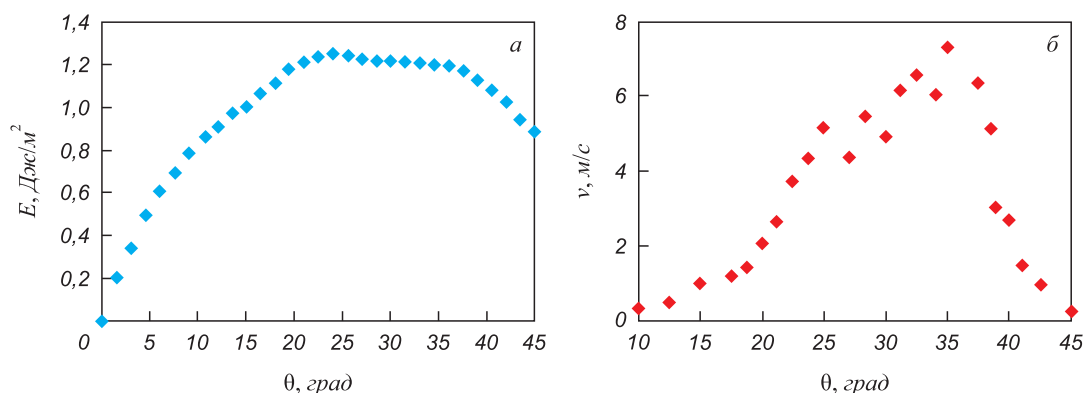


Рис. 2. Энергия границ наклона <110> (а) и скорость их миграции (б) при температуре 1600 К в зависимости от угла разориентации θ в аустените

Fig. 2. Energy of <110> tilt boundaries (a) and their migration rate (b) at 1600 K depending on orientation angle θ in austenite

Очевидно, это связано с относительно низкой энергией границ <110>. При близких условиях, температуре и размере расчетной ячейки, скорость миграции границ <111> и <100> с углом разориентации более 30° для никеля в работе [7] составляла примерно 30 – 35 м/с. Пик скорости миграции границ <110> наблюдали для большеугловых границ в диапазоне углов от 22 до 37° (рис. 2, б). Далее скорость снова уменьшалась, снижаясь почти до нуля при угле разориентации 45°.

В результате миграции границ наклона <110> траектории смещений атомов образовывали «сетки» (рис. 1, б), похожие на те, которые формировались при миграции границ <111> и <100> в работах [6, 7]. Во время миграции границы в зерне, в сторону которого происходила миграция, образовывались области одинаковой формы, упорядоченно повернутые на угол разориентации, размер которых в случае малоугловых границ зависел от расстояния между соседними зернограницными дислокациями. Форма этих ячеек сетки определяется кристаллографией, в случае границ <110> они имеют почти шестиугольную форму. Следует отметить, что характер атомных смещений в границах зерен <110> такой же, как и для границ <111> и <100> [6, 7]. Во всех случаях миграция происходила посредством кооперативных сдвигов в результате согласованного скольжения зернограницных дислокаций. Переползание дислокаций, вызванное, например, диффузией, согласно проведенным исследованиям практически не вносит вклад в механизм миграции границ.

Введение примесных атомов углерода и кислорода приводило к значительному снижению скорости миграции границ зерен, что, очевидно, связано с высокими энергиями связи примесных атомов с ними. На рис. 3 показаны зависимости скорости v миграции границ наклона <110> с углом разориентации 35° при температуре 1600 К от концентрации примесных атомов в γ -железе.

Влияние примесей на миграцию границ в аустените оказалось сильнее, чем в изученных ранее никеле и тем более в серебре, что объясняется сравнительно

низким значением электроотрицательности атомов железа (1,83) по сравнению с никелем (1,91) и серебром (1,93). Для γ -железа были получены и большие значения энергии связи атомов углерода и кислорода с дислокациями (0,79 и 0,66 эВ соответственно) по сравнению с никелем (0,77 и 0,62 эВ [7]) и тем более серебром (0,30 и 0,10 эВ) [7]. Найденные значения энергии связи хорошо коррелируют с приведенными на рис. 3 зависимостями.

Энергию связи примесного атома с зернограницной дислокацией рассчитывали как разность потенциальной энергии расчетной ячейки, содержащей малоугловую границу <110> и атом примеси в октаэдрической поре кристаллической решетки на таком расстоянии друг от друга, которое исключает взаимодействие дислокации и примесного атома, и потенциальной энергии расчетной ячейки, содержащей атом примеси в ядре дислокации. В обоих случаях перед расчетом энергии

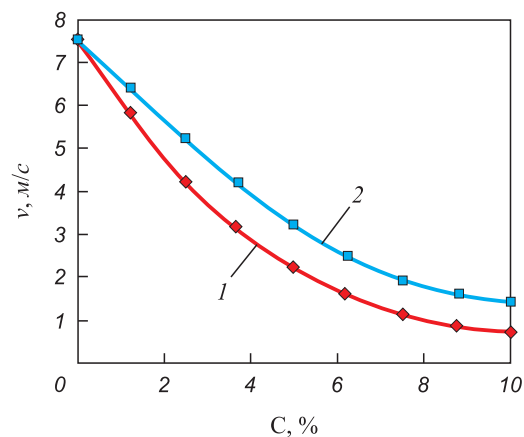


Рис. 3. Зависимости скорости миграции границ наклона <110> с углом разориентации 35° при температуре 1600 К от концентрации примесных атомов углерода (1) и кислорода (2) в аустените

Fig. 3. Dependences of migration rate of <110> tilt boundaries with orientation angle of 35° at 1600 K on concentration of impurity carbon atoms (1) and oxygen (2) in austenite

расчетной ячейки проводили релаксацию структуры, после которой расчетную ячейку охлаждали до 0 К. Позицию примесного атома в ядре дислокации подбирали такой, при которой энергия связи получалась наибольшей, то есть выбиралась энергетически наиболее выгодная позиция примеси в дислокации.

Выводы

Методом молекулярной динамики проведено исследование влияния примесных атомов углерода и кислорода на скорость миграции границ наклона с осью разориентации <110> в γ -железе, имеющем ГЦК кристаллическую решетку. Получены зависимости энергии рассматриваемых границ и скорости их миграции при температуре 1600 К от угла разориентации. Показано, что скорость миграции границ наклона <110> при тех же условиях ниже на порядок скорости миграции границ <111> и <100>, что, в первую очередь, обусловлено сравнительно низкой энергией границ <110>. Кроме того, малоугловые границы наклона <110> являются уникальными по сравнению с другими границами наклона: зернограницные дислокации в них представляют собой обычные полные краевые дислокации с ровными ядрами, не содержащими периодически расположенных на них изломов, как в границах <111> и <100>.

Во время миграции границы в зерне, в сторону которого происходит миграция, образуются области одинаковой формы, упорядоченно повернутые на угол разориентации, размер которых в случае малоугловых границ зависит от расстояния между соседними зернограницными дислокациями. Миграция малоугловых границ, как правило, происходит посредством кооперативных сдвигов в результате согласованного скольжения зернограницных дислокаций. Переползание дислокаций, вызванное диффузией, практически не вносит вклад в механизм миграции границ.

Введение примесных атомов углерода и кислорода приводит к значительному снижению скорости миграции границ зерен. Для примесных атомов углерода и кислорода рассчитаны энергии связи с зернограницными дислокациями в аустените. Полученные значения хорошо коррелируют с зависимостями скорости миграции границ <110> от концентрации примесей. Влияние примесей на миграцию границ в аустените оказалось сильнее, чем в изученных ранее никеле и тем более в серебре, что объясняется сравнительно низким значением электроотрицательности атомов железа по сравнению с никелем и серебром. Более высокое значение энергии связи с дислокациями в аустените и, соответственно, большее влияние на скорость миграции границ зерен получены для атомов углерода.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

REFERENCES

- Gottstein G., Shvindlerman L.S. *Grain Boundary Migration in Metals: Thermodynamics, Kinetics, Applications*. 2nd Ed. Boca Raton: CRC Press, 2009. 711 p.
- Balluffi R.W., Cahn J.W. Mechanism for diffusion induced grain boundary migration // *Acta Metallurgica*. 1981. Vol. 29. No. 3. P. 493–500. [https://doi.org/10.1016/0001-6160\(81\)90073-0](https://doi.org/10.1016/0001-6160(81)90073-0)
- 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. <https://doi.org/10.1080/14786435.2010.481272>
- Huang Y., Humphreys F.J. Measurements of grain boundary mobility during recrystallization of a single-phase aluminium alloy // *Acta Materialia*. 1999. Vol. 47. No. 7. P. 2259–2268. [https://doi.org/10.1016/S1359-6454\(99\)00062-2](https://doi.org/10.1016/S1359-6454(99)00062-2)
- 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. No.1. P. 166–174. <https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2011.11.018>
- 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. Vol. 148. P. 184–189. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2018.02.047>
- Poletaev G.M., Zorya I.V., Starostenkov M.D., Rakitin R.Yu., Tabakov P.Ya. Molecular dynamics simulation of the migration of tilt grain boundaries in Ni and Ni₃Al // *Journal of Experimental and Theoretical Physics*. 2019. Vol. 128. No. 1. P. 88–93. <https://doi.org/10.1134/S1063776118120087>
- Goldschmidt H.J. *Interstitial Alloys*. London: Butterworths, 1967. 640 p.
- Аверин В.В., Ревякин А.В., Федорченко В.И. Азот в металлах. М.: Металлургия, 1976. 224 с.
- Gottstein G., Shvindlerman L.S. *Grain Boundary Migration in Metals: Thermodynamics, Kinetics, Applications*. 2nd Ed. Boca Raton: CRC Press, 2009. 711 p.
- Balluffi R.W., Cahn J.W. Mechanism for diffusion induced grain boundary migration. *Acta Metallurgica*. 1981, vol. 29, no. 3, pp. 493–500. [https://doi.org/10.1016/0001-6160\(81\)90073-0](https://doi.org/10.1016/0001-6160(81)90073-0)
- 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. <https://doi.org/10.1080/14786435.2010.481272>
- Huang Y., Humphreys F.J. Measurements of grain boundary mobility during recrystallization of a single-phase aluminium alloy. *Acta Materialia*. 1999, vol. 47, no. 7, pp. 2259–2268. [https://doi.org/10.1016/S1359-6454\(99\)00062-2](https://doi.org/10.1016/S1359-6454(99)00062-2)
- 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, no. 1, pp. 166–174. <https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2011.11.018>
- 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, vol. 148, pp. 184–189. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2018.02.047>
- Poletaev G.M., Zorya I.V., Starostenkov M.D., Rakitin R.Yu., Tabakov P.Ya. Molecular dynamics simulation of the migration of tilt grain boundaries in Ni and Ni₃Al. *Journal of Experimental and Theoretical Physics*. 2019, vol. 128, no. 1, pp. 88–93. <https://doi.org/10.1134/S1063776118120087>
- Goldschmidt H.J. *Interstitial Alloys*. London: Butterworths, 1967, 640 p.
- Averin V.V., Revyakin A.V., Fedorchenko V.I. *Nitrogen in Metals*. Moscow: Metallurgiya, 1976, 224 p. (In Russ.).

10. De Castro C.L., Mitchell B.S. Crystal growth kinetics of nanocrystalline aluminum prepared by mechanical attrition in nylon media // *Materials Science and Engineering: A*. 2005. Vol. 396. No. 1-2. P. 124–128. <https://doi.org/10.1016/j.msea.2005.01.008>
11. Iwanciw J., Podorska D., Wypartowicz J. Simulation of oxygen and nitrogen removal from steel by means of titanium and aluminum // *Archives of Metallurgy and Materials*. 2011. Vol. 56. No. 3. P. 635–644. <https://doi.org/10.2478/v10172-011-0069-x>
12. Lücke K., Detert K. A quantitative theory of grain-boundary motion and recrystallization in metals in the presence of impurities // *Acta Metallurgica*. 1957. Vol. 5. No. 11. P. 628–637. [https://doi.org/10.1016/0001-6160\(57\)90109-8](https://doi.org/10.1016/0001-6160(57)90109-8)
13. Sursaeva V., Zieba P. Diffusion impurity drag of twin grain boundaries and triple junctions motion in zinc // *Defect and Diffusion Forum*. 2005. Vol. 237–240. P. 578–583. <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/DDF.237-240.578>
14. 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. Vol. 108. P. 19–22. <https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2015.06.012>
15. 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. <https://doi.org/10.7868/S0015323013020095>
16. Atrens A. Dependence of the pinning point dislocation interaction energy on the dislocation structure in zirconium oxygen alloys // *Scripta Metallurgica*. 1974. Vol. 8. No. 4. P. 401–412. [https://doi.org/10.1016/0036-9748\(74\)90146-X](https://doi.org/10.1016/0036-9748(74)90146-X)
17. 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. Vol. 9. No. 4. P. 391–394. <https://doi.org/10.22226/2410-3535-2019-4-391-394>
18. Li J., Dillon S.J., Rohrer G.S. Relative grain boundary area and energy distributions in nickel // *Acta Materialia*. 2009. Vol. 57. No. 14. P. 4304–4311. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2009.06.004>
19. Ratanaphan S., Olmsted D.L., Bulatov V.V., Holm E.A., Rollett A.D., Rohrer G.S. Grain boundary energies in body-centered cubic metals // *Acta Materialia*. 2015. Vol. 88. P. 346–354. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2015.01.069>
20. 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. Vol. 57. No. 13. P. 3694–3703. <http://dx.doi.org/10.1016/j.actamat.2009.04.007>
21. Bulatov V.V., Reed B.W., Kumar M. Grain boundary energy function for fcc metals // *Acta Materialia*. 2014. Vol. 65. P. 161–175. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2013.10.057>
22. Tschopp M.A., Coleman Sh.P., McDowell D.L. Symmetric and asymmetric tilt grain boundary structure and energy in Cu and Al (and transferability to other fcc metals) // *Integrating Materials and Manufacturing Innovation*. 2015. Vol. 4. P. 176–189. <https://doi.org/10.1186/s40192-015-0040-1>
23. Malyar N.V., Grabowski B., Dehm G., Kirchlechner C. Dislocation slip transmission through a coherent $\Sigma 3\{111\}$ copper twin boundary: strain rate sensitivity, activation volume and strength distribution function // *Acta Materialia*. 2018. Vol. 161. P. 412–419. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2018.09.045>
24. Liang Y., Yang X., Gong M., Liu G., Liu Q., Wang J. Interactions between dislocations and three-dimensional annealing twins in face centered cubic metals // *Computational Materials Science*. 2019. Vol. 161. P. 371–378. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2019.02.024>
25. 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.
26. Lau T.T., Forst C.J., Lin X., Gale J.D., Yip S., Van Vliet K.J. Many-body potential for point defect clusters in Fe–C alloys // *Physical*
10. De Castro C.L., Mitchell B.S. Crystal growth kinetics of nanocrystalline aluminum prepared by mechanical attrition in nylon media. *Materials Science and Engineering: A*. 2005, vol. 396, no. 1-2, pp. 124–128. <https://doi.org/10.1016/j.msea.2005.01.008>
11. Iwanciw J., Podorska D., Wypartowicz J. Simulation of oxygen and nitrogen removal from steel by means of titanium and aluminum. *Archives of Metallurgy and Materials*. 2011, vol. 56, no. 3, pp. 635–644. <https://doi.org/10.2478/v10172-011-0069-x>
12. Lücke K., Detert K. A quantitative theory of grain-boundary motion and recrystallization in metals in the presence of impurities. *Acta Metallurgica*. 1957, vol. 5, no. 11, pp. 628–637. [https://doi.org/10.1016/0001-6160\(57\)90109-8](https://doi.org/10.1016/0001-6160(57)90109-8)
13. Sursaeva V., Zieba P. Diffusion impurity drag of twin grain boundaries and triple junctions motion in zinc. *Defect and Diffusion Forum*. 2005, vol. 237–240, pp. 578–583. <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/DDF.237-240.578>
14. 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, vol. 108, pp. 19–22. <https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2015.06.012>
15. Kar'kina L.E., Kar'kin I.N., Yakovleva I.L., Zubkova T.A. Computer simulation of carbon diffusion near $b/2[010](001)$ dislocation in cementite. *Physics of Metals and Metallography*. 2013, vol. 114, no. 2, pp. 155–161. <https://doi.org/10.1134/S0031918X13020099>
16. Atrens A. Dependence of the pinning point dislocation interaction energy on the dislocation structure in zirconium oxygen alloys. *Scripta Metallurgica*. 1974, vol. 8, no. 4, pp. 401–412. [https://doi.org/10.1016/0036-9748\(74\)90146-X](https://doi.org/10.1016/0036-9748(74)90146-X)
17. 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, vol. 9, no. 4, pp. 391–394. <https://doi.org/10.22226/2410-3535-2019-4-391-394>
18. Li J., Dillon S.J., Rohrer G.S. Relative grain boundary area and energy distributions in nickel. *Acta Materialia*. 2009, vol. 57, no. 14, pp. 4304–4311. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2009.06.004>
19. Ratanaphan S., Olmsted D.L., Bulatov V.V., Holm E.A., Rollett A.D., Rohrer G.S. Grain boundary energies in body-centered cubic metals. *Acta Materialia*. 2015, vol. 88, pp. 346–354. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2015.01.069>
20. 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, vol. 57, no. 13, pp. 3694–3703. <http://dx.doi.org/10.1016/j.actamat.2009.04.007>
21. Bulatov V.V., Reed B.W., Kumar M. Grain boundary energy function for fcc metals. *Acta Materialia*. 2014, vol. 65, pp. 161–175. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2013.10.057>
22. Tschopp M.A., Coleman Sh.P., McDowell D.L. Symmetric and asymmetric tilt grain boundary structure and energy in Cu and Al (and transferability to other fcc metals). *Integrating Materials and Manufacturing Innovation*. 2015, vol. 4, pp. 176–189. <https://doi.org/10.1186/s40192-015-0040-1>
23. Malyar N.V., Grabowski B., Dehm G., Kirchlechner C. Dislocation slip transmission through a coherent $\Sigma 3\{111\}$ copper twin boundary: strain rate sensitivity, activation volume and strength distribution function. *Acta Materialia*. 2018, vol. 161, pp. 412–419. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2018.09.045>
24. Liang Y., Yang X., Gong M., Liu G., Liu Q., Wang J. Interactions between dislocations and three-dimensional annealing twins in face centered cubic metals. *Computational Materials Science*. 2019, vol. 161, pp. 371–378. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2019.02.024>
25. Protasova S.G., Sursaeva V.G., Shvindlerman L.S. Study of the motion of individual triple junctions in aluminum. *Physics of the Solid State*. 2003, vol. 45, no. 8, pp. 1471–1474. <https://doi.org/10.1134/1.1602881>
26. Lau T.T., Forst C.J., Lin X., Gale J.D., Yip S., Van Vliet K.J. Many-body potential for point defect clusters in Fe–C alloys. *Physical Re-*

- Review Letters. 2007. Vol. 98. Article 215501.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.98.215501>
27. Oila A., Bull S.J. Atomistic simulation of Fe–C austenite // *Computational Materials Science*. 2009. Vol. 45. No. 2. P. 235–239.
<https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2008.09.013>
 28. 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. Vol. 42. No. 4. P. 380–388. http://dx.doi.org/10.18720/MPM.4242019_2
 29. Poletaev G.M., Novoselova D.V., Zorya I.V., Starostenkov M.D. Formation of the excess free volume in triple junctions during nickel crystallization // *Physics of the Solid State*. 2018. Vol. 60. No. 5. P. 847–851. <https://doi.org/10.1134/S1063783418050244>
 30. Poletaev G.M., Zorya I.V. Influence of light impurities on the crystal-melt interface velocity in Ni and Ag. Molecular dynamics simulation // *Technical Physics Letters*. 2020. Vol. 46. No. 6. P. 575–578. <http://dx.doi.org/10.1134/S1063785020060231>
 31. Ruda M., Farkas D., Garcia G. Atomistic simulations in the Fe–C system // *Computational Materials Science*. 2009. Vol. 45. No. 2. P. 550–560. <http://dx.doi.org/10.1016/j.commatsci.2008.11.020>
 32. Vashishta P., Kalia R.K., Nakano A., Rino J.P. Interaction potentials for alumina and molecular dynamics simulations of amorphous and liquid alumina // *Journal of Applied Physics*. 2008. Vol. 103. Article 083504. <https://doi.org/10.1063/1.2901171>
 - view Letters. 2007, vol. 98, article 215501.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.98.215501>
 27. Oila A., Bull S.J. Atomistic simulation of Fe–C austenite. *Computational Materials Science*. 2009, vol. 45, no. 2, pp. 235–239.
<https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2008.09.013>
 28. 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, vol. 42, no. 4, pp. 380–388. http://dx.doi.org/10.18720/MPM.4242019_2
 29. Poletaev G.M., Novoselova D.V., Zorya I.V., Starostenkov M.D. Formation of the excess free volume in triple junctions during nickel crystallization. *Physics of the Solid State*. 2018, vol. 60, no. 5, pp. 847–851. <https://doi.org/10.1134/S1063783418050244>
 30. Poletaev G.M., Zorya I.V. Influence of light impurities on the crystal-melt interface velocity in Ni and Ag. Molecular dynamics simulation. *Technical Physics Letters*. 2020, vol. 46, no. 6, pp. 575–578. <http://dx.doi.org/10.1134/S1063785020060231>
 31. Ruda M., Farkas D., Garcia G. Atomistic simulations in the Fe–C system. *Computational Materials Science*. 2009, vol. 45, no. 2, pp. 550–560. <http://dx.doi.org/10.1016/j.commatsci.2008.11.020>
 32. Vashishta P., Kalia R.K., Nakano A., Rino J.P. Interaction potentials for alumina and molecular dynamics simulations of amorphous and liquid alumina. *Journal of Applied Physics*. 2008, vol. 103, article 083504. <https://doi.org/10.1063/1.2901171>

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

INFORMATION ABOUT THE AUTHORS

Ирина Васильевна Зоря, к.т.н., доцент, заведующий кафедрой теплогазоснабжения, водоотведения и вентиляции, Сибирский государственный индустриальный университет
ORCID: 0000-0001-5748-813X
E-mail: zorya.i@mail.ru

Irina V. Zorya, Cand. Sci. (Eng.), Assist. Prof., Head of the Chair of Heat-Gas-Water-Supply, Water Disposal and Ventilation, Siberian State Industrial University
ORCID: 0000-0001-5748-813X
E-mail: zorya.i@mail.ru

Геннадий Михайлович Поletaев, д.ф.-м.н., профессор, заведующий кафедрой высшей математики и математического моделирования, Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова
ORCID: 0000-0002-5252-2455
E-mail: gmpoletaev@mail.ru

Gennadii M. Poletaev, Dr. Sci. (Phys.-Math.), Prof., Head of the Chair of Advanced Mathematics and Mathematical Modeling, Polzunov Altai State Technical University
ORCID: 0000-0002-5252-2455
E-mail: gmpoletaev@mail.ru

Роман Юрьевич Ракитин, к.ф.-м.н., доцент, директор колледжа, Алтайский государственный университет
ORCID: 0000-0002-6341-2761
E-mail: gmpoletaev@mail.ru

Roman Yu. Rakitin, Cand. Sci. (Phys.-Math.), Assist. Prof., Director of College, Altai State University
ORCID: 0000-0002-6341-2761
E-mail: gmpoletaev@mail.ru

ВКЛАД АВТОРОВ

CONTRIBUTION OF THE AUTHORS

И. В. Зоря – постановка задачи, анализ литературных источников, обработка результатов и написание основного текста статьи.

I.V. Zorya – problem statement, analysis of literary sources, processing of results and writing the main text of the article.

Г. М. Поletaев – постановка задачи и разработка компьютерной модели, анализ литературных источников, обработка результатов, редактирование финальной версии статьи.

G.M. Poletaev – problem statement and development of a computer model, analysis of literary sources, processing of results, editing of the final text.

Р. Ю. Ракитин – создание компьютерной модели, проведение расчетов и получение результатов, получение рисунков и графиков для статьи.

R.Yu. Rakitin – creation of a computer model, carrying out calculations and obtaining results, obtaining drawings and graphs.

Поступила в редакцию 25.09.2021
После доработки 28.10.2021
Принята к публикации 28.10.2021

Received 25.09.2021
Revised 28.10.2021
Accepted 28.10.2021