



УДК 538.953

DOI 10.17073/0368-0797-2025-2-139-147

Оригинальная статья
Original article

ИНИЦИАЦИЯ ПЛАВЛЕНИЯ НА ГРАНИЦАХ ЗЕРЕН НАКЛОНА В АУСТЕНИТЕ В ЗАВИСИМОСТИ ОТ УГЛА РАЗОРИЕНТАЦИИ

И. В. Зоря¹, Г. М. Полетаев², Ю. В. Бебихов³, А. С. Семенов³

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 Политехнический институт Северо-Восточного федерального университета им. М.К. Аммосова (Россия, 678170, Республика Саха (Якутия), Мирный, ул. Тихонова, 5)

✉ zorya.i@mail.ru

Аннотация. С помощью молекулярно-динамического моделирования проведено исследование влияния угла разориентации и энергии границ зерен наклона с осями разориентации $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$ на температуру плавления и характер начальной инициации плавления на границе зерен в аустените. Показано, что при постепенном нагревании плавление начинается от границ зерен, там, где имеются нарушения кристаллической структуры и, соответственно, атомы находятся в менее глубоких потенциальных ямах. В случае большеугловых границ плавление начинается одновременно вдоль всей границы, в случае малоугловых – в ядрах зернограницных дислокаций. Получены зависимости температуры плавления моделируемых расчетных ячеек от угла разориентации зерен и избыточной энергии. Для осей разориентации $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$ результаты оказались аналогичными. В области малых углов разориентации (менее 15°) температура плавления с ростом угла падает почти линейно, затем, для большеугловых границ, снижение становится менее интенсивным. Эти зависимости коррелируют с энергией образования границ зерен или со связанной с ней величиной избыточной энергии расчетной ячейки. Главным количественным критерием, определяющим влияние дефектов на снижение температуры плавления, является избыточная энергия, то есть разность энергий рассматриваемой структуры и идеального кристалла, которую еще можно интерпретировать как энергию образования рассматриваемой структуры. Температура плавления линейно уменьшается с ростом избыточной энергии. Очевидно, что данный эффект, то есть влияние границ зерен на температуру плавления, становится существенным только для материалов с очень высоким содержанием границ зерен, например, для материалов с нанокристаллической структурой.

Ключевые слова: молекулярная динамика, плавление, граница зерен, угол разориентации, аустенит

Благодарности: Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект FZMM-2023-0003) и Российского научного фонда (проект № 24-22-00092).

Для цитирования: Зоря И.В., Полетаев Г.М., Бебихов Ю.В., Семенов А.С. Инициация плавления на границах зерен наклона в аустените в зависимости от угла разориентации. *Известия вузов. Черная металлургия.* 2025;68(2):139–147.
<https://doi.org/10.17073/0368-0797-2025-2-139-147>

INITIATION OF MELTING AT TILT GRAIN BOUNDARIES IN AUSTENITE DEPENDING ON THE MISORIENTATION ANGLE

I. V. Zorya¹, G. M. Poletaev², Yu. V. Bebikhov³, A. S. Semenov³

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 Mirny Polytechnic Institute (branch) of North-Eastern Federal University (5 Tikhonova Str., Mirnyi, Republic of Sakha (Yakutia) 678170, Russian Federation)

✉ zorya.i@mail.ru

Abstract. Using molecular dynamics simulation, the authors studied the influence of misorientation angle and energy of tilt grain boundaries with the misorientation axes $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ and $\langle 111 \rangle$ on the melting temperature and nature of early initiation of melting at grain boundaries in austenite. It is shown that with gradual heating, melting begins from the grain boundaries, where there is a violation of the crystal structure and, accordingly, the atoms are located in less deep potential wells. In the case of large-angle boundaries, melting begins simultaneously along the entire boundary,

in the case of small-angle boundaries – in the cores of grain-boundary dislocations. Dependences of the melting temperature of the simulated calculation cells on the angle of grain misorientation and excess energy were obtained. For the misorientation axes $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ and $\langle 111 \rangle$, the results were similar. In the region of small misorientation angles (less than 15°), the melting point decreases almost linearly with increasing angle, then, for large-angle boundaries, the decrease becomes less intense. These dependences correlate with the energy of grain boundary formation or with the associated excess energy of the calculation cell. The main quantitative criterion determining the effect of defects on a decrease in melting temperature is excess energy, that is, the energy difference between the considered structure and the ideal crystal, which can also be interpreted as the energy of the considered structure formation. The melting point decreases linearly with increasing excess energy. Obviously, the effect of grain boundaries on the melting point becomes significant only for materials with a very high content of grain boundaries, for example, for materials with a nanocrystalline structure.

Keywords: molecular dynamics, melting, grain boundary, misorientation angle, austenite

Acknowledgements: The research was supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (project FZMM-2023-0003) and the Russian Science Foundation (project No. 24-22-00092).

For citation: Zorya I.V., Poletaev G.M., Bebikhov Yu.V., Semenov A.S. Initiation of melting at tilt grain boundaries in austenite depending on the misorientation angle. *Izvestiya. Ferrous Metallurgy*. 2025;68(2):139–147. <https://doi.org/10.17073/0368-0797-2025-2-139-147>

ВВЕДЕНИЕ

В последние десятилетия большое внимание уделяется нанокристаллическим материалам, к которым относят поликристаллы со средним размером зерна менее 100 нм. Эти материалы обладают необычными физико-механическими свойствами, что связано, главным образом, с большой, по сравнению с обычным крупнозернистым состоянием, объемной долей границ зерен, тройных стыков и других дефектов [1–3]. Сверхмалые размеры зерен получают разными способами, которые включают, как правило, интенсивную пластическую деформацию. Иногда такие материалы получают путем спекания нанопорошков, конденсации из газовой фазы и т. д. Однако общими свойствами нанокристаллических материалов являются высокая степень неравновесности структуры и большие значения избыточной (или запасенной) энергии [1–3]. Избыточная энергия, то есть отличие свободной энергии материала от энергии идеального кристалла при той же температуре (или, другими словами, энергия, которая может потенциально выделиться при трансформации структуры, например, при рекристаллизации), в нанокристаллических материалах обусловлена наличием высокой плотности дефектов: границ зерен, тройных стыков, дислокаций, дисклинаций и др. При этом набор дефектов и их тип в значительной степени зависят от метода получения нанокристаллической структуры и последующей обработки [1–4].

Уникальные свойства наноматериалов во многом обусловлены высокой объемной долей поверхности и других границ раздела (межфазных, межзеренных). Одним из таких свойств, важных с точки зрения эксплуатации и технологии изготовления наноматериалов, является зависимость температуры плавления от эффективного размера: размера зерна, толщины пленки, диаметра наночастицы. Наиболее хорошо изучена зависимость температуры плавления наночастиц от их размера. В настоящее время известно, что температура плавления круглых наночастиц обратно пропорциональна их диаметру, что было продемонстрировано как экспериментально [5–9], так и с помощью моле-

кулярно-динамического (МД) моделирования [10–14], а также объяснено в теоретических работах [15–20].

Что касается материалов с нанокристаллической структурой, то в работах [21–25] с помощью МД моделирования было показано, что плавление в них не является гомогенным процессом, оно начинается, как правило, со свободных поверхностей и границ зерен. Уменьшение среднего размера зерна приводит к уменьшению температуры плавления нанокристаллических серебра [22; 23] и алюминия [24; 25]. В работах [14; 26] также наблюдается уменьшение температуры плавления наночастиц никеля с нанокристаллической структурой по сравнению с монокристаллическими частицами.

Рассматриваемое явление снижения температуры плавления в зависимости от среднего размера зерна в нанокристаллическом материале по сравнению с монокристаллическими наночастицами сложнее и менее изучено, поскольку обуславливается наличием дефектов не одного типа, как, например, поверхности в случае частиц, а широкого спектра границ зерен разных типов с разной энергией и других дефектов. В настоящем исследовании внимание сконцентрировано на влиянии угла разориентации и, соответственно, энергии границ зерен наклона на температуру плавления и характер инициации плавления на границе. Рассматриваются границы наклона с осями разориентации $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$. В качестве объекта исследования выбран аустенит в связи с его широким практическим применением.

ОПИСАНИЕ МОДЕЛИ

Для описания межатомных взаимодействий в молекулярно-динамической модели использовался ЕАМ потенциал [27], где он был получен на основе сопоставления с экспериментальными данными и *ab initio* расчетами различных свойств аустенита. Данный потенциал хорошо воспроизводит широкий спектр механических и структурно-энергетических свойств, он прошел успешную апробацию при моделировании различных процессов, включая процессы плавления [27–29].

Расчетные ячейки имели форму параллелепипеда с размерами примерно $9,9 \times 10,8 \times 13,5$ нм и содержали около 118 000 атомов (рис. 1). Граница зерен наклона создавалась в середине расчетной ячейки путем поворота двух кристаллов, двух половин ячейки, на угол разориентации θ вокруг оси $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ или $\langle 111 \rangle$, которая совпадала с осью x на рис. 1. Для удержания границы зерен в центре расчетной ячейки в течение моделирования вдоль оси z (сверху и снизу расчетной ячейки на рис. 1) использовались фиксированные граничные условия: атомы, окрашенные в темно-серый цвет, оставались неподвижными в течение моделирования. Вдоль других осей использовались периодические граничные условия. Таким образом, в расчетной ячейке находилось две параллельных и аналогичных границы зерен. На рис. 1 с помощью визуализатора кристаллических фаз на основе метода CNA (*Common Neighbor Analysis*) [30] изображен пример расчетной ячейки, содержащей две границы, одну посередине и вторую

на краю ячейки, с осью разориентации $\langle 111 \rangle$ и углом разориентации 30° (далее – $\langle 111 \rangle 30^\circ$). После поворота кристаллов и процедуры удаления лишних атомов проводилась релаксация структуры в течение 20 пс при постоянной температуре 1000 К. При этом атомы смещались в положения, соответствующие минимуму энергии. Расчетная ячейка (рис. 1) получена после процедуры структурной релаксации.

Угол разориентации θ для границ $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$ варьировался от 0 до 30° . Таким образом, половина рассматриваемых границ (до 15°) относилась к малоугловым границам, то есть к границам с различными геометрически необходимыми зернограничными дислокациями, а другая половина (после 15°) – к большеугловым границам. Как будет показано ниже, основной характеристикой, влияющей на процесс плавления, является энергия границы, которая для большеугловых границ, как правило, примерно одинакова, в связи с чем, например, большинство углов между границами в тройных стыках близки к 120° [31; 32]. Именно поэтому для всех рассматриваемых типов границ наклона в настоящей работе ограничились углом разориентации 30° .

В модели использовался NPT канонический ансамбль в сочетании с термостатом Нозе-Гувера. При плавлении происходит увеличение удельного объема вследствие разрушения кристаллической решетки, поэтому важным было поддержание давления постоянным и равным нулю. При изменении температуры тепловое расширение учитывалось, в том числе и для фиксированных областей на границах расчетной ячейки (темно-серые области на рис. 1). При использовании метода молекулярной динамики шаг интегрирования по времени составлял 2 фс.

Для определения температуры плавления использовался метод постепенного нагревания с построением зависимости средней потенциальной энергии атома от температуры, который часто используется в подобных задачах [10 – 14; 26; 33 – 35]. Температура повышалась линейно со скоростью 10^{12} К/с путем соответствующего увеличения модулей скоростей атомов через определенный шаг по времени (5 пс в данном случае).

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

На рис. 2 показаны примеры зависимостей средней потенциальной энергии атома от температуры для расчетных ячеек с границами $\langle 111 \rangle 6^\circ$ (кривая 3) и $\langle 111 \rangle 30^\circ$ (кривая 4), а также для монокристаллического аустенита (кривые 1 и 2) при постепенном повышении температуры со скоростью 10^{12} К/с в интервале от 1500 до 2300 К. С ростом температуры средняя энергия атома для одной и той же фазы растет почти линейно в связи с увеличением тепловых колебаний атомов и тепловым расширением. Резкое увеличение средней энергии атома на графиках соответствует фазовому переходу, то есть плавлению.

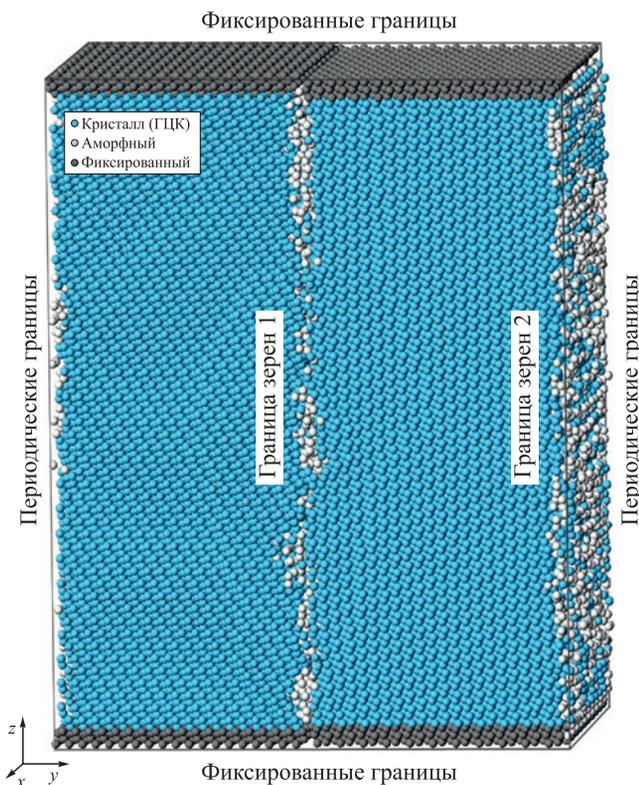


Рис. 1. Пример расчетной ячейки, содержащей две границы наклона $\langle 111 \rangle 30^\circ$ (голубым цветом показаны атомы, ближайшее окружение которых соответствует ГЦК кристаллической решетке аустенита; белым – кристаллическая решетка не идентифицирована; темно-серым – атомы, которые оставались неподвижными в течение моделирования)

Fig. 1. Example of a calculation cell containing two tilt boundaries $\langle 111 \rangle 30^\circ$ (blue – atoms whose immediate environment corresponds to the FCC crystal lattice of austenite; white – crystal lattice was not identified; dark gray – atoms remained stationary during the simulation)

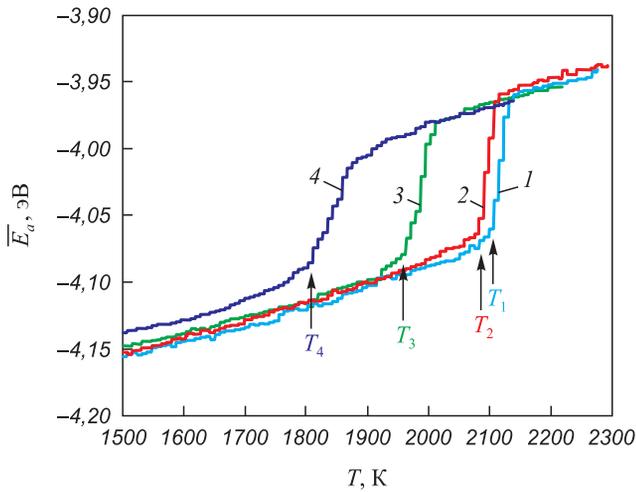


Рис. 2. Зависимости средней потенциальной энергии атома от температуры при нагревании со скоростью 10^{12} К/с: 1 – для монокристаллического аустенита с зафиксированными вдоль оси z границами; 2 – с периодическими граничными условиями со всех сторон; 3 – для расчетной ячейки с двумя границами наклона $\langle 111 \rangle 6^\circ$; 4 – с двумя границами наклона $\langle 111 \rangle 30^\circ$ при соответствующих температурах плавления T_1, T_2, T_3 и T_4

Fig. 2. Dependences of the average potential energy of an atom on temperature when heated at a rate of 10^{12} K/s: 1 – for monocrystalline austenite with boundaries fixed along z axis; 2 – with periodic boundary conditions on all sides; 3 – for a computational cell with two tilt boundaries $\langle 111 \rangle 6^\circ$; 4 – with two tilt boundaries $\langle 111 \rangle 30^\circ$ at corresponding melting temperatures T_1, T_2, T_3 and T_4

Структура в зафиксированных областях (рис. 1), как уже говорилось выше, оставалась кристаллической и после плавления, что, очевидно, оказывает влияние на процесс и температуру плавления всей расчетной ячейки. Однако мы вынуждены были использовать фиксированные границы ввиду важности удержания границ зерен с изначально заданными характеристиками в ячейке в течение всего моделирования. Для монокристаллического аустенита, то есть расчетной ячейки без каких-либо дефектов, было проведено дополнительное исследование влияния фиксированных границ на температуру плавления. На рис. 2 приведены зависимости средней энергии атома от температуры для монокристалла: при наличии фиксированных границ (кривая 1) и в случае периодических границ со всех сторон (кривая 2). Как можно видеть, плавление в случае наличия фиксированных границ, действительно, происходило при большей температуре по сравнению со случаем использования периодических условий со всех сторон. Тем не менее, отличие это было небольшим и слабо влияло на качественные результаты исследования.

В случае наличия границ зерен в расчетной ячейке плавление протекало гетерогенно, то есть инициировалось на границе, после чего фронт кристалл–жидкость двигался от границ в центр зерен с конечной скоростью, зависящей, как известно, от температуры. Величина скорости – порядка нескольких десятков

метров в секунду [36; 37]. Статичной двухфазности, то есть одновременного пребывания части расчетной ячейки в жидком состоянии, а другой – в кристаллическом, в течение сравнительно продолжительного времени не наблюдалось: фронт всегда двигался в том или ином направлении. В связи с этим определяли температуру плавления по моменту начала фазового перехода (показан стрелками на рис. 2), который, в свою очередь, определяли по пересечению аппроксимационных прямых до и после начала плавления.

На рис. 2 хорошо видно, что плавление ячейки, содержащей большеугловую границу $\langle 111 \rangle 30^\circ$, происходит при существенно более низкой температуре (1835 К), чем в случае малоугловой границы $\langle 111 \rangle 6^\circ$ (2013 К), что подтверждает влияние типа границы зерен на плавление. Энергия образования и, соответственно, степень нарушения кристаллической структуры в случае большеугловой границы выше.

На рис. 3 с использованием визуализатора кристаллических фаз изображена расчетная ячейка в плоскости yz , содержащая две большеугловые границы $\langle 111 \rangle 30^\circ$ в разные моменты плавления. В основе визуализатора лежит метод CNA (*Common Neighbor Analysis*) [30], позволяющий определить принадлежность каждого атома к той или иной кристаллической структуре путем анализа расположения соседних атомов. В рассматриваемом случае атом считался принадлежащим к ГЦК решетке, если более 75 % его ближайших соседей располагались вблизи узлов идеального ГЦК кристалла (с учетом теплового расширения) в пределах заданной погрешности 25 % от радиуса первой координационной сферы. Атомы, не удовлетворяющие этим условиям, а также условиям принадлежности к ГПУ решетке, считались принадлежащими к аморфной структуре (на рис. 3 показаны белым цветом).

На рис. 3, а изображена начальная структура ячейки с двумя параллельными границами $\langle 111 \rangle 30^\circ$ после первичной структурной релаксации. В случае большеугловой границы дефект выглядит почти сплошным. Нарушение кристаллической структуры наблюдается вдоль всей границы. С ростом температуры плавление начиналось на границе почти равномерно вдоль нее (рис. 3, б), кроме областей вблизи зафиксированных границ (сверху и снизу расчетной ячейки), что является очевидным, поскольку в этих местах сказывается влияние зафиксированной кристаллической структуры на границах.

При дальнейшем увеличении температуры фронт кристалл–жидкость двигался от границ в остальной объем (рис. 3, в). Аморфной фазы (белые атомы) при этом становилось все больше. Можно заметить, что инициация плавления на границе происходила даже при меньшей температуре по сравнению со значением, найденным по графику (рис. 1) для всей расчетной ячейки. Дело в том, что на температуру плавления всей расчетной ячейки влияет плотность в ней границ зерен. В работах [22 – 25] наблюдалась такая зависимость:

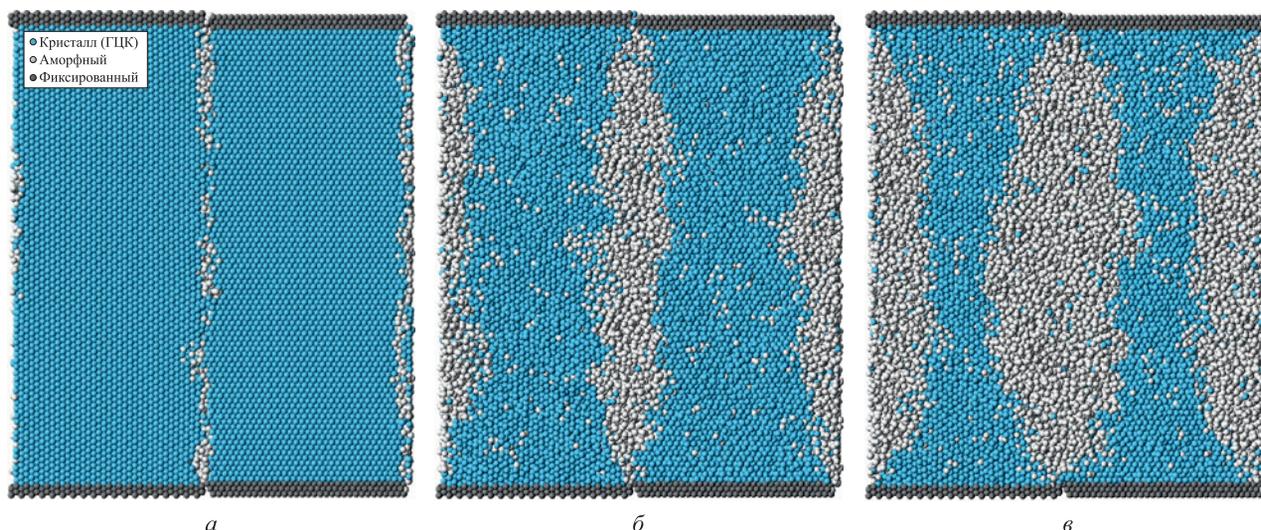


Рис. 3. Плавление от большеугловых границ зерен $\langle 111 \rangle 30^\circ$ в процессе нагревания со скоростью 10^{12} К/с:

a – начальная структура расчетной ячейки в плоскости *yz*; *б* и *в* – структура расчетной ячейки при достижении температуры 1810 и 1830 К

Fig. 3. Melting from large-angle grain boundaries $\langle 111 \rangle 30^\circ$ during heating at a rate of 10^{12} K/s:

a – initial structure of the calculation cell at *yz* plane; *б* and *в* – structure of the calculation cell when temperature reaches 1810 and 1830 K

по мере уменьшения среднего размера зерна в серебре или алюминии с нанокристаллической структурой температура плавления снижалась. В рассматриваемом случае это означает, что, например, при увеличении размера ячейки вдоль оси *y* следует ожидать снижения влияния границы зерен на температуру плавления.

Плавление с границ зерен начинается по причине сравнительно более легкого разрушения кристаллической структуры вблизи них из-за того, что атомы в дефектах находятся в менее глубоких потенциальных ямах по сравнению с чистым кристаллом и им легче их покинуть в результате тепловых колебаний. Атомы

вблизи фронта кристалл–жидкость со стороны кристаллической фазы также находятся в сравнительно менее глубоких потенциальных ямах, чем в объеме кристалла, из-за более беспорядочного расположения атомов со стороны расплава. Кроме того, в расплаве более интенсивная самодиффузия и больше свободного объема по сравнению с кристаллом, что также является причиной более легкого разрушения кристалла вблизи фронта кристалл – жидкость, чем внутри объема кристалла, и причиной движения фронта.

На рис. 4 изображена расчетная ячейка, содержащая две малоугловые границы $\langle 111 \rangle 6^\circ$, в разные моменты

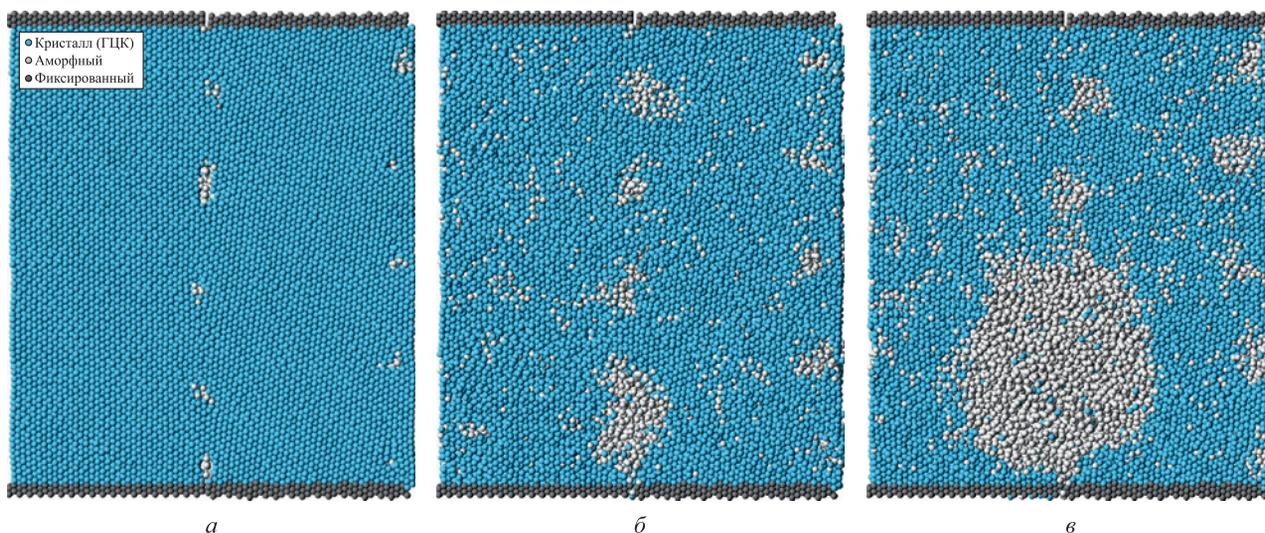


Рис. 4. Плавление от малоугловых границ зерен $\langle 111 \rangle 6^\circ$ в процессе нагревания со скоростью 10^{12} К/с:

a – начальная структура расчетной ячейки в плоскости *yz*; *б* и *в* – структура расчетной ячейки при достижении температуры 1980 и 2000 К

Fig. 4. Melting from small-angle grain boundaries $\langle 111 \rangle 6^\circ$ during heating at a rate of 10^{12} K/s:

a – initial structure of the calculation cell at *yz* plane; *б* and *в* – structure of the calculation cell when temperature reaches 1980 and 2000 K

времени в процессе нагревания. Структура малоугловых границ наклона представляет собой, как известно, набор геометрически необходимых зернограницных дислокаций (при отсутствии дополнительных внесенных дефектов). На рис. 4, а изображена стартовая структура расчетной ячейки, ядра зернограницных дислокаций хорошо различимы: это периодически расположенные вдоль границ небольшие области нарушения порядка кристаллической структуры (атомы белого цвета). Для угла разориентации 6° расстояние между дислокациями достаточно большое и хорошо видно, что структура между ними кристаллическая без каких либо нарушений. Разрушение кристаллической структуры при плавлении начиналось именно с ядер дислокаций (рис. 4, б). Инициация плавления при нагреве происходила при большей температуре, чем в случае большеугловой границы. При дальнейшем повышении температуры некоторые аморфные области росли быстрее, объединялись и распространялись в итоге на весь объем.

На рис. 5, а показана зависимость температуры плавления расчетной ячейки T_m от угла разориентации θ для

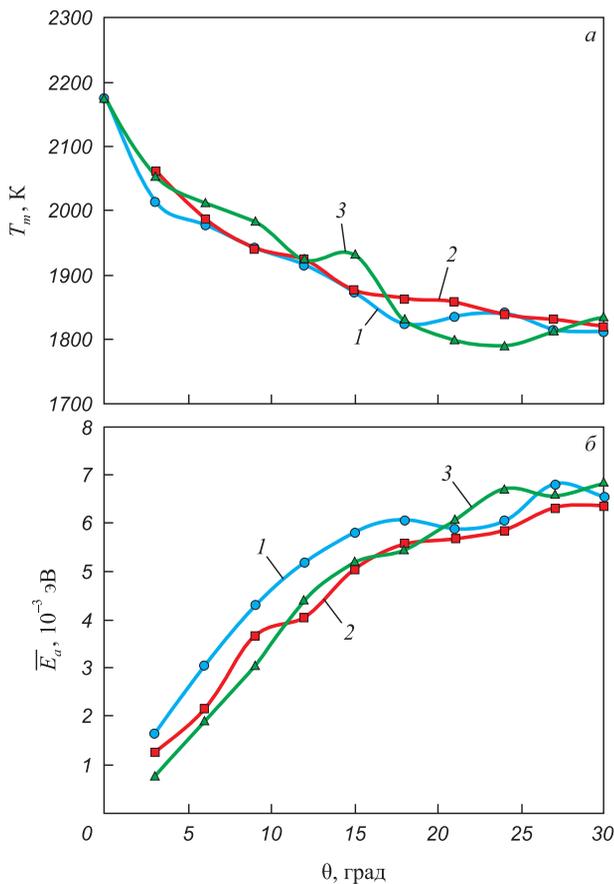


Рис. 5. Зависимости температуры плавления расчетной ячейки T_m (а) и избыточной энергии ΔE_a , приходящейся на один атом (б), от угла разориентации θ : 1 – $\langle 100 \rangle$; 2 – $\langle 110 \rangle$; 3 – $\langle 111 \rangle$

Fig. 5. Dependences of the melting point of the calculation cell T_m (а) and the excess energy per atom, ΔE_a (б), on misorientation angle: 1 – $\langle 100 \rangle$; 2 – $\langle 110 \rangle$; 3 – $\langle 111 \rangle$

всех рассмотренных границ зерен. Полученные зависимости оказались идентичными для всех трех рассмотренных осей разориентации границ $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$. Следует подчеркнуть, что специальные углы разориентации, то есть углы, для которых характерна высокая плотность совпадения структур зерен, в настоящем исследовании не рассматривались.

С ростом угла разориентации θ в области малых углов (менее 15°) температура плавления падает почти линейно, для большеугловых границ снижение становится менее интенсивным. Приведенные зависимости $T_m(\theta)$ коррелируют с энергией образования границы зерен или со связанной с ней величиной избыточной энергии расчетной ячейки. На рис. 5, б показаны зависимости избыточной энергии ΔE_a , приходящейся на один атом, от угла разориентации θ . Эта избыточная энергия определялась как разность средних значений потенциальной энергии атома в расчетной ячейке, содержащей пару рассматриваемых границ зерен, и в идеальном кристалле, содержащем столько же атомов.

Полученные зависимости $\Delta E_a(\theta)$ типичны для зависимостей энергии границ от угла разориентации [38 – 40]. Сначала, примерно до значения $\theta = 15^\circ$ (то есть для малоугловых границ), наблюдается почти линейный рост энергии: это обусловлено тем, что линейно растет плотность зернограницных дислокаций. При больших углах (примерно больше 15°) ядра дислокаций сливаются в один общий дефект и энергия растет с увеличением θ менее интенсивно.

Между величинами T_m и ΔE_a , благодаря приведенным зависимостям, можно заметить корреляцию. Чтобы убедиться в этом, построили зависимость $T_m(\Delta E_a)$ (рис. 6). Полученная зависимость в рамках рассматри-

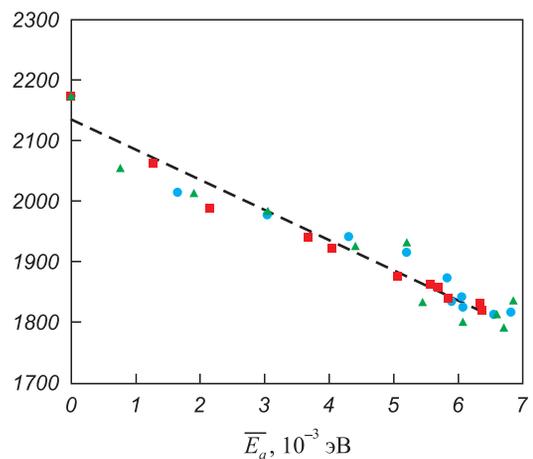


Рис. 6. Зависимость температуры плавления от избыточной энергии, приходящейся на один атом: ●, ■, ▲ – результаты модели для осей разориентации $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$, штриховая линия – линейная аппроксимация

Fig. 6. Dependence of the melting point on the excess energy per atom: ●, ■, ▲ – results of the model for misorientation axes $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ and $\langle 111 \rangle$, dashed line – linear approximation

ваемого диапазона значений $\overline{\Delta E_a}$, действительно, оказалась очень близка к линейной с уравнением аппроксимационной линии $T_m = -49\,828\overline{\Delta E_a} + 2135$ (показана штриховой линией).

Таким образом, можно сделать вывод, что главным количественным критерием, определяющим влияние дефектов на снижение температуры плавления, является избыточная энергия, то есть разность энергий рассматриваемой структуры и идеального кристалла, которую еще можно интерпретировать как энергию образования рассматриваемой структуры или энергию, которая может потенциально выделиться при трансформации структуры, например, при рекристаллизации. Линейная зависимость объясняется, по всей видимости, тем, что избыточная энергия – показатель того, насколько ниже будет работа, которую нужно затратить на разрушение кристаллической решетки при плавлении, или, другими словами, насколько ниже будет теплота плавления рассматриваемого материала.

Выводы

С помощью молекулярно-динамического моделирования проведено исследование влияния угла разориентации и энергии границ зерен наклона с осями разориентации $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$ на температуру плавления и характер начальной инициации плавления на границе зерен в аустените. Показано, что при постепенном нагревании плавление начинается от границ зерен, там, где имеются нарушения кристаллической структуры и, соответственно, атомы находятся в менее глубоких потенциальных ямах. В случае большеугловых границ плавление начинается одновременно вдоль всей границы, в случае малоугловых – в ядрах зернограницных дислокаций. Получены зависимости температуры плавления моделируемых расчетных ячеек от угла разориентации зерен и избыточной энергии. Для осей разориентации $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$ результаты оказались аналогичными. В области малых углов разориентации (менее 15°) температура плавления с ростом угла падает почти линейно, затем, для большеугловых границ, снижение становится менее интенсивным. Эти зависимости коррелируют с энергией образования границ зерен или со связанной с ней величиной избыточной энергии расчетной ячейки. Главным количественным критерием, определяющим влияние дефектов на снижение температуры плавления, является избыточная энергия, то есть разность энергий рассматриваемой структуры и идеального кристалла, которую еще можно интерпретировать как энергию образования рассматриваемой структуры. Температура плавления линейно уменьшается с ростом избыточной энергии. Очевидно, что данный эффект, то есть влияние границ зерен на температуру плавления, становится существенным только для материалов с очень высоким содержанием границ зерен, например, для материалов с нанокристаллической структурой.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ / REFERENCES

- Gleiter H. Nanostructured materials: Basic concepts and microstructure. *Acta Materialia*. 2000;48(1):1–29. [https://doi.org/10.1016/S1359-6454\(99\)00285-2](https://doi.org/10.1016/S1359-6454(99)00285-2)
- Meyers M.A., Mishra A., Benson D.J. Mechanical properties of nanocrystalline materials. *Progress in Materials Science*. 2006;51(4):427–556. <https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2005.08.003>
- Kumar K.S., Van Swygenhoven H., Suresh S. Mechanical behavior of nanocrystalline metals and alloys. *Acta Materialia*. 2003;51(19):5743–5774. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2003.08.032>
- Nazarov A.A., Murzaev R.T. A method for the construction of initial structures for molecular dynamics simulations of nanocrystals with nonequilibrium grain boundaries containing extrinsic dislocations. *Letters on Materials*. 2018;8(1):5–10. <https://doi.org/10.22226/2410-3535-2018-1-5-10>
- Castro T., Reifemberger R., Choi E., Andres R.P. Size-dependent melting temperature of individual nanometer-sized metallic clusters. *Physical Review B*. 1990;42:8548–8556. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.42.8548>
- Dick K., Dhanasekaran T., Zhang Z., Meisel D. Size-dependent melting of silica-encapsulated gold nanoparticles. *Journal of the American Chemical Society*. 2002;124(10):2312–2317. <https://doi.org/10.1021/ja017281a>
- Hirasawa M., Orii T., Seto T. Size-dependent crystallization of Si nanoparticles. *Applied Physics Letters*. 2006;88(9):093119. <https://doi.org/10.1063/1.2182018>
- Tang S., Zhu S., Lu H., Meng X. Shape evolution and thermal stability of Ag nanoparticles on spherical SiO₂ substrates. *Journal of Solid State Chemistry*. 2008;181(3):587–592. <https://doi.org/10.1016/j.jssc.2008.01.014>
- Kim H.K., Huh S.H., Park J.W., Jeong J.W., Lee G.H. The cluster size dependence of thermal stabilities of both molybdenum and tungsten nanoclusters. *Chemical Physics Letters*. 2002;354(1-2):165–172. [https://doi.org/10.1016/S0009-2614\(02\)00146-X](https://doi.org/10.1016/S0009-2614(02)00146-X)
- Qi Y., Cagin T., Johnson W.L., Goddard III W.A. Melting and crystallization in Ni nanoclusters: The mesoscale regime. *The Journal of Chemical Physics*. 2001;115:385–394. <https://doi.org/10.1063/1.1373664>
- Shim J.-H., Lee B.-J., Cho Y.-W. Thermal stability of unsupported gold nanoparticle: A molecular dynamics study. *Surface Science*. 2002;512(3):262–268. [https://doi.org/10.1016/S0039-6028\(02\)01692-8](https://doi.org/10.1016/S0039-6028(02)01692-8)
- Li X. Modeling the size- and shape- dependent cohesive energy of nanomaterials and its applications in heterogeneous systems. *Nanotechnology*. 2014;25(18):185702. <https://doi.org/10.1088/0957-4484/25/18/185702>
- Chepkasov I.V., Gafner Yu.Ya., Vysotin M.A., Redel' L.V. A study of melting of various types of Pt-Pd nanoparticles. *Physics of the Solid State*. 2017;59:2076–2081. <https://doi.org/10.1134/S1063783417100109>
- Poletaev G.M., Gafner Y.Y., Gafner S.L. Molecular dynamics study of melting, crystallization and devitrification of nickel nanoparticles. *Letters on Materials*. 2023;13(4):298–303.
- Nanda K.K., Sahu S.N., Behera S.N. Liquid-drop model for the size-dependent melting of low-dimensional systems.

- Physical Review A*. 2002;66:013208.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevA.66.013208>
16. Qi W.H., Wang M.P., Zhou M., Shen X.Q., Zhang X.F. Modeling cohesive energy and melting temperature of nanocrystals. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*. 2006;67(4):851–855.
<https://doi.org/10.1016/j.jpccs.2005.12.003>
 17. Luo W., Hu W., Xiao S. Size effect on the thermodynamic properties of silver nanoparticles. *The Journal of Physical Chemistry C*. 2008;112(7):2359–2369.
<https://doi.org/10.1021/jp0770155>
 18. Luo W., Deng L., Su K., Li K., Liao G., Xiao S. Gibbs free energy approach to calculate the thermodynamic properties of copper nanocrystals. *Physica B: Condensed Matter*. 2011;406(4):859–863.
<https://doi.org/10.1016/j.physb.2010.12.014>
 19. Li H., Han P.D., Zhang X.B., Li M. Size-dependent melting point of nanoparticles based on bond number calculation. *Materials Chemistry and Physics*. 2013;137(3):1007–1011.
<https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2012.11.016>
 20. Zhu J., Fu Q., Xue Y., Cui Z. Accurate thermodynamic relations of the melting temperature of nanocrystals with different shapes and pure theoretical calculation. *Materials Chemistry and Physics*. 2017;192:22–28.
<http://dx.doi.org/10.1016/j.matchemphys.2017.01.049>
 21. Phillpot S.R., Lutsko J.F., Wolf D., Yip S. Molecular-dynamics study of lattice-defect-nucleated melting in silicon. *Physical Review B*. 1989;40:2831.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.40.2831>
 22. Xiao S., Hu W., Yang J. Melting behaviors of nanocrystalline Ag. *The Journal of Physical Chemistry B*. 2005;109(43):20339–20342. <https://doi.org/10.1021/jp054551t>
 23. Xiao S., Hu W., Yang J. Melting temperature: From nanocrystalline to amorphous phase. *Journal of Chemical Physics*. 2006;125(18):184504. <https://doi.org/10.1063/1.2371112>
 24. Wejrzanowski T., Lewandowska M., Sikorski K., Kurzydowski K.J. Effect of grain size on the melting point of confined thin aluminum films. *Journal of Applied Physics*. 2014;116(16):164302. <https://doi.org/10.1063/1.4899240>
 25. Noori Z., Panjepour M., Ahmadian M. Study of the effect of grain size on melting temperature of Al nanocrystals by molecular dynamics simulation. *Journal of Materials Research*. 2015;30:1648–1660.
<https://doi.org/10.1557/jmr.2015.109>
 26. Poletaev G.M., Bebikhov Y.V., Semenov A.S. Molecular dynamics study of the formation of the nanocrystalline structure in nickel nanoparticles during rapid cooling from the melt. *Materials Chemistry and Physics*. 2023;309:128358.
<https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2023.128358>
 27. Lau T.T., Först 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 Review Letters*. 2007;98:215501.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.98.215501>
 28. Oila A., Bull S.J. Atomistic simulation of Fe–C austenite. *Computational Materials Science*. 2009;45(2):235–239.
<https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2008.09.013>
 29. Зоря И.В., Поletaев Г.М., Бибихов Ю.В., Семенов А.С. Молекулярно-динамическое исследование влияния примеси углерода на процесс кристаллизации наночастиц аустенита при быстром охлаждении. *Известия вузов. Черная металлургия*. 2024;67(4):440–448.
<https://doi.org/10.17073/0368-0797-2024-4-440-448>
 30. Tsuzuki H., Brancio P.S., Rino J.P. Structural characterization of deformed crystals by analysis of common atomic neighborhood. *Computer Physics Communications*. 2007;177(6):518–523.
<https://doi.org/10.1016/j.cpc.2007.05.018>
 31. Fortes M.A., Deus A.M. Effects of triple grain junctions on equilibrium boundary angles and grain growth kinetics. *Materials Science Forum*. 2004;455-456:648–652.
<https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/MSF.455-456.648>
 32. 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 L1(2) superstructure. *Journal of Materials Science & Technology*. 2003;19(6):593–596.
 33. Poletaev G., Gafner Y., Gafner S., Bebikhov Y., Semenov A. Molecular dynamics study of the devitrification of amorphous copper nanoparticles in vacuum and in a silver shell. *Metals*. 2023;13(10):1664. <https://doi.org/10.3390/met13101664>
 34. Poletaev G.M., Sannikov A.V., Gafner Y.Y., Gafner S.L. Molecular dynamics study of the effect of structural defects, impurities, and the presence of a shell on the melting temperature of metallic nanoparticles. *Letters on Materials*. 2024;14(4):332–339.
<https://doi.org/10.48612/letters/2024-4-332-339>
 35. Poletaev G.M., Bebikhov Yu.V., Semenov A.S., Sitnikov A.A. Molecular dynamics investigation of the effect of the interface orientation on the intensity of titanium dissolution in crystalline and amorphous aluminum. *Journal of Experimental and Theoretical Physics*. 2023;136(4):477–483.
<https://doi.org/10.1134/S1063776123040118>
 36. Chan W.-L., Averbach R.S., Cahill D.G., Ashkenazy Y. Solidification velocities in deeply undercooled silver. *Physical Review Letters*. 2009;102:095701.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.102.095701>
 37. Zhang H.Y., Liu F., Yang Y., Sun D.Y. The molecular dynamics study of vacancy formation during solidification of pure metals. *Scientific Reports*. 2017;7:10241.
<https://doi.org/10.1038/s41598-017-10662-x>
 38. Li S., Yang L., Lai C. Atomistic simulations of energies for arbitrary grain boundaries. Part I: Model and validation. *Computational Materials Science*. 2019;161:330–338.
<https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2019.02.003>
 39. 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;57(13):3694–3703.
<https://doi.org/10.1016/j.actamat.2009.04.007>
 40. Van Beers P.R.M., Kouznetsova V.G., Geers M.G.D., Tschopp M.A., McDowell D.L. A multiscale model of grain boundary structure and energy: From atomistics to a continuum description. *Acta Materialia*. 2015;82:513–529.
<https://doi.org/10.1016/j.actamat.2014.08.045>

Сведения об авторах

Information about the Authors

Ирина Васильевна Зоря, д.ф.-м.н., доцент, заведующий кафедрой теплогазоводоснабжения, водоотведения и вентиляции, Сибирский государственный индустриальный университет

ORCID: 0000-0001-5748-813X

E-mail: zorya.i@mail.ru

Геннадий Михайлович Поletaев, д.ф.-м.н., профессор, ведущий научный сотрудник, Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова

ORCID: 0000-0002-5252-2455

E-mail: gmpoletaev@mail.ru

Юрий Владимирович Бебихов, д.ф.-м.н., доцент, Политехнический институт Северо-Восточного федерального университета им. М.К. Аммосова

ORCID: 0000-0002-8366-4819

E-mail: bebikhov.yura@mail.ru

Александр Сергеевич Семенов, д.ф.-м.н., директор института, Политехнический институт Северо-Восточного федерального университета им. М.К. Аммосова

ORCID: 0000-0001-9940-3915

E-mail: as.semenov@s-vfu.ru

Irina V. Zorya, Dr. Sci. (Phys.-Math.), 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

Gennadii M. Poletaev, Dr. Sci. (Phys.-Math.), Prof., Leading Researcher, Polzunov Altai State Technical University

ORCID: 0000-0002-5252-2455

E-mail: gmpoletaev@mail.ru

Yurii V. Bebikhov, Dr. Sci. (Phys.-Math.), Assist. Prof., Mirny Polytechnic Institute (branch) of North-Eastern Federal University

ORCID: 0000-0002-8366-4819

E-mail: bebikhov.yura@mail.ru

Aleksandr S. Semenov, Dr. Sci. (Phys.-Math.), Director of the Institute, Mirny Polytechnic Institute (branch) of North-Eastern Federal University

ORCID: 0000-0001-9940-3915

E-mail: as.semenov@s-vfu.ru

Вклад авторов

Contribution of the Authors

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

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

Ю. В. Бебихов – проведение расчетов, получение результатов, получение рисунков и графиков.

А. С. Семенов – проведение расчетов, получение результатов, получение рисунков и графиков для статьи.

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

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

Yu. V. Bebikhov – performing calculations, obtaining results, obtaining drawings and graphs.

A. S. Semenov – performing calculations, obtaining results, obtaining drawings and graphs.

Поступила в редакцию 14.11.2024

После доработки 25.12.2024

Принята к публикации 10.01.2025

Received 14.11.2024

Revised 25.12.2024

Accepted 10.01.2025