

ЭНЕРГИИ ОБРАЗОВАНИЯ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ В ГРАНИЦАХ ЗЕРЕН ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО ВОЛЬФРАМА

Ступак М. Е.¹, Уразалиев М. Г.¹, Попов В. В.¹

¹) Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения,
г. Екатеринбург, Россия
E-mail: shay92@yandex.ru

FORMATION ENERGIES OF POINT DEFECTS IN GRAIN BOUNDARIES OF POLYCRYSTALLINE TUNGSTEN

Stupak M. E.¹, Urazaliev M. G.¹, Popov V. V.¹

¹) M.N. Mikheev Institute of Metal Physics of the Ural Branch of the Russian Academy of
Sciences

Molecular-static simulation of grain boundaries in polycrystalline W has been carried out, and values of energy and width of boundaries for various misorientation angles have been calculated. Energies of formation of vacancies and interstitials have been obtained.

Методами компьютерного моделирования проведен расчет энергии образования точечных дефектов (вакансий и межузельных атомов) в симметричных границах наклона $\langle 110 \rangle$ поликристаллического W. Расчеты проведены с помощью программного комплекса LAMMPS [1] с использованием потенциала погруженного атома [2]. В качестве визуализатора использовалась программа OVITO [3].

Структура и энергия ГЗ для каждой границы рассчитывалась для различных начальных конфигураций посредством поиска локального минимума энергии методом сопряженных градиентов. Для дальнейшего анализа использовалась структура, соответствующая глобальному минимуму энергии. Были рассчитаны энергии образования вакансий в разных позициях в границе зерна и на разном расстоянии от плоскости границы и проанализирована зависимость энергии образования вакансии от расстояния от плоскости границы. Пример зависимости энергии образования вакансии от расстояния плоскости границы для границы $\Sigma 11$ (113)[1-10] показан на рисунке.

Проведено сравнение минимальной энергии образования вакансий и внедренных атомов во всех рассмотренных границах. Проанализирована релаксация структуры границ при образовании вакансий и внедренных атомов. Показано, что чем более значительна релаксация структуры, сопровождающая образование точечного дефекта, тем меньше энергия его образования.

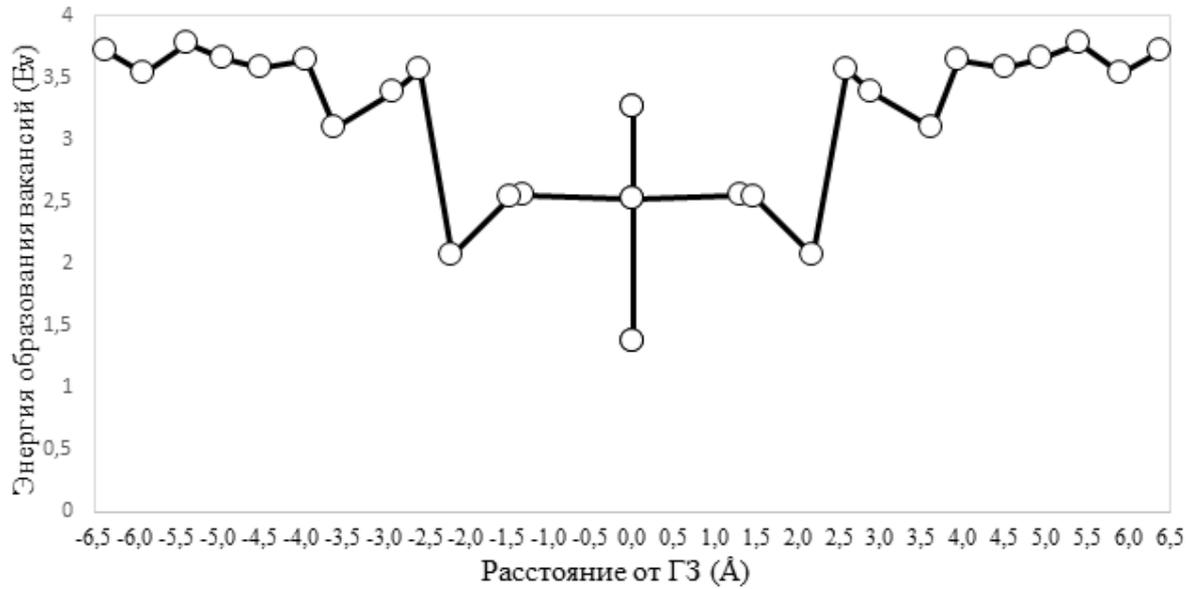


Рис. 1. Зависимость энергии образования вакансий от расстояния от границы для $\Gamma_3 \Sigma_{11} (113)[1-10]$

1. <http://lammps.sandia.gov>
2. Marinica M.-C., Ventelon L., Gilbert M.R., Proville L., Dudarev S.L., Marian J., Benceux G., Willaime F. Interatomic potentials for modelling radiation defects and dislocations in tungsten // J. Phys.: Condens. Matter. 2013. V. 25. P. 395502.
3. A. Stukowski, Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO – the Open Visualization Tool Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 18 (2010), 015012