

## САМОДИФФУЗИЯ ВДОЛЬ СПЕЦИАЛЬНЫХ ГРАНИЦ ЗЕРЕН НАКЛОНА В ОЦК-ВОЛЬФРАМЕ

Ступак М. Е.<sup>1</sup>, Уразалиев М. Г.<sup>1</sup>, Попов В. В.<sup>1</sup>

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

## SPECIAL GRAIN BOUNDARY SELF-DIFFUSION IN BCC-TUNGSTEN

Stupak M. E.<sup>1</sup>, Urazaliev M. G.<sup>1</sup>, Popov V. V.<sup>1</sup>

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

Thermal stability of grain boundaries in tungsten has been studied by the method of molecular dynamics, and the coefficient of grain boundary self-diffusion for  $\Sigma 11(332)[11\bar{0}]$  and  $\Sigma 3(112)[11\bar{0}]$  boundaries has been calculated.

Методами компьютерного моделирования проведен расчет зернограницной самодиффузии в симметричных границах  $\Sigma 11(332)[11\bar{0}]$  и  $\Sigma 3(112)[11\bar{0}]$  поликристаллического вольфрама. Расчеты проведены с помощью программного комплекса LAMMPS [1] с использованием потенциала погруженного атома [2]. В качестве визуализатора использовалась программа OVITO [3].

В молекулярно-динамического (МД) моделирования применялся блок, содержащий границу зерен (ГЗ), полученный с помощью молекулярно-статического (МС) моделирования [4]. Для проверки термической стабильности при конечных температурах проводился термический отжиг с использованием изотермо-изобарического ансамбля (NPT) в течение 30 нс с шагом 2 фс. Для предотвращения миграции ГЗ применялись фиксированные условия на краях блока моделирования. Определена критическая температура границ зерен, при которых ГЗ теряет свою изначальную структуру.

При расчетах зернограницной самодиффузии предполагалось, что она протекает по вакансионному механизму. Данное предположение базируется на результатах проведенных ранее мессбауэровских исследований [5]. Коэффициент зернограницной диффузии рассчитывался на основании среднего квадратичного смещения. Расчет диффузии проводился в течение 20 нс, с шагом 1 фс. Коэффициенты самодиффузии по рассмотренным границам зерен представлены в виде Аррениусовских зависимостей (рис. 1).

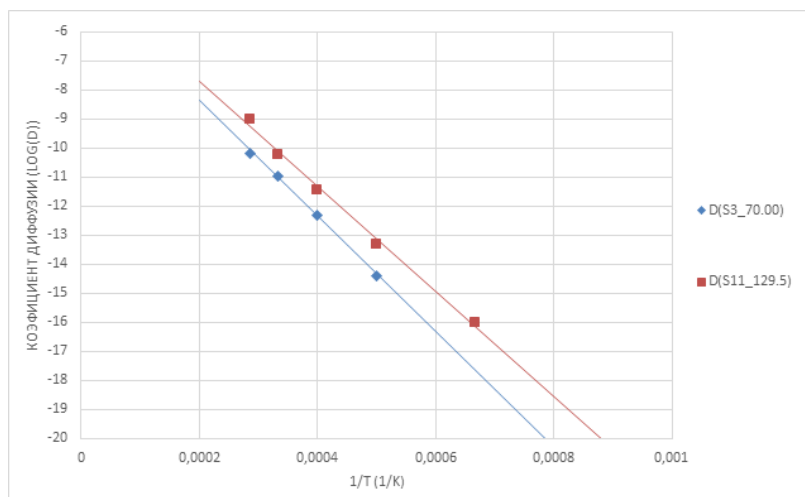


Рис. 1. Коэффициент зернограничной самодиффузии в ГЗ  $\Sigma 11(332)[11\bar{0}]$  и  $\Sigma 3(112)[11\bar{0}]$ .

*Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России (тема «Функция», номер госрегистрации г.р. № 122021000035-6).*

*При проведении работ был использован суперкомпьютер «Уран» ИММ УрО РАН.*

1. Plimton S., “Fast parallel algorithms for short rangemolecular dynamics” J. Comp. Phys. 117, 1–19(1995).
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. 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.
4. Ступак М.Е., Уразалиев М.Г., Попов В.В. Структура и энергия симметричных границ наклона  $\langle 110 \rangle$  в поликристаллическом W // ФММ. 2020. Т. 121. № 8. С. 877–883.
5. Popov V.V. Mossbauer spectroscopy of interfaces in metals // Phys. Met. Metallogr. 2012. V. 113. № 13. P. 1257–1289.