

Ступак Максим Евгеньевич

Атомистическое моделирование зернограничной диффузии в вольфраме

Цели и задачи проекта:

Цель работы – Исследование корреляции между параметрами зернограничной диффузии и энергией границ зерен методом атомистического моделирования в вольфраме.

Для достижения поставленной цели будут решены следующие задачи:

1. Оценка потенциала межатомного взаимодействия, наиболее подходящего для задач настоящего исследования. Оценка включает в себя расчет и сопоставление с экспериментом таких свойств, как: параметр решетки, энергия связи, энергия образования точечных дефектов, модули упругости и расчет коэффициента объёмной диффузии.
2. Моделирование симметричных границ зерен (ГЗ) наклона $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$, $\langle 111 \rangle$ и получение нескольких предварительных конфигураций атомов, соответствующих минимумам энергии для каждой разориентировки.
3. Расчет энергии образования точечных дефектов в исследуемых ГЗ. Расчет энергий образования вакансий в различных позициях в ГЗ. Расчет энергий образования собственных межузельных атомов в ГЗ. Расчет энергий образования и энергии сегрегации примесных атомов внедрения железа в ГЗ вольфрама.
4. Расчет коэффициентов зернограничной самодиффузии по вакансионному механизму и по межузельному механизму. Определение энергии активации самодиффузии. Определение доминирующего механизма зернограничной самодиффузии.
5. Расчет коэффициентов диффузии атомов внедрения железа вдоль ГЗ вольфрама. Определение энергии активации диффузии.
6. Исследование связи энергии активации зернограничной диффузии с энергией ГЗ.

Ожидаемые результаты:

В результате выполнения проекта ожидается, что будут получены:

- Конфигурации широкого спектра симметричных ГЗ (в количестве 113), соответствующие минимальной энергии образования для границ наклона $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$ в вольфраме. Данные об образовании точечных дефектов в исследуемых границ зерен. Установлены температуры стабильности ГЗ (т.е. температуры при которых ГЗ не деградирует).
- Новые расчетные данные зернограничной диффузии в исследуемых высокоугловых границах зерен в вольфраме. Определен доминирующий механизм самодиффузии. Сравнение результатов коэффициента самодиффузии и примесной диффузии с имеющимися экспериментальными данными. Исследование связи энергии активации зернограничной диффузии с энергией ГЗ.