Ф И З И К А

УДК 544.022.342, 544.022.344.2

М. Ю. Тихончев, А. Б. Муралев, В. В. Светухин

ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СИММЕТРИЧНО НАКЛОННЫХ ГРАНИЦ В СПЛАВЕ FeCr: МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ СТАТИКИ[1]

Аннотация.

Актуальность и цели. Знание структуры и энергетических характеристик межзеренных границ (ГЗ – граница зерна) важно для понимания таких явлений, происходящих в материалах, как рост зерен, зернограничная диффузия, сегрегация примесей, деформация и разрушение. Отдельно следует отметить влияние ГЗ на процессы радиационного повреждения материалов. Традиционно ГЗ рассматриваются как стоки для точечных дефектов и примесных атомов. Однако детальные исследования механизмов взаимодействия ГЗ с указанными дефектами на атомарном уровне начали проводиться сравнительно недавно. Целью работы является получение количественных оценок, характеризующих энергетические свойства симметрично наклонных границ в α-Fe, содержащем хром.

Материалы и методы. Моделирование проводилось методом молекулярной статики. Для описания межатомного взаимодействия использовали модифицированную версию многочастичного потенциала, предложенного А. Каро и другими и хорошо воспроизводящего кривую энтальпии смешения случайного ферро-магнитного сплава FeCr.

Результаты. Получены значения удельных энергий пяти межзеренных границ ∑5(210), ∑5(310), ∑17(410), ∑13(510) и ∑17 (530) с одной осью вращения [001]. Оценены размеры соответствующих им зернограничных областей в чистом железе при нулевой температуре и в бинарном сплаве Fe-9 ат. % Cr при температурах 0 и 300 К. Рассчитаны энергии связи с зернограничной областью вакансии собственных междоузленных атомов (СМА) и замещающего атома Cr в железе. При этом рассмотрено два типа собственных междоузельных конфигураций: гантель с ориентацией <110> из двух атомов железа и гантель смешанного Fe-Cr типа той же ориентации.

Выводы. Для чистого железа при нулевой температуре отмечено удовлетворительное согласие результатов расчетов с результатами других исследователей. Установлено, что при переходе от чистого железа к сплаву Fe-9 ат. % Cr происходит небольшое повышение удельной энергии ГЗ на ~0,1 Дж/м^2. С повышением температуры сплава до 300 К удельная энергия ГЗ снижается на 0,1–0,2 Дж/м^2. Для всех типов рассмотренных ГЗ ширина зернограничной области составляет ~1 нм и слабо меняется с изменением состава и температуры. Отмечены скачкообразные изменения большинства полученных оценок энергии связи с зернограничной областью вакансии, собственных междоузленных атомов и замещающего атома Cr по мере удаления от ГЗ, вплоть до периодической

[1] Работа выполнена при поддержке Минобрнауки в рамках государственного задания на 2012–2014 гг., федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009–2013 годы», а также при частичной поддержке гранта РФФИ: проекты № 12-08-97076 и 13-01-00945.

смены знака в случае вакансии и атома замещения. Обнаружена высокая положительная связь (~3 эВ) СМА обеих конфигураций с зернограничными областями всех рассматриваемых типов. Присоединение к зернограничной области вакансии также следует рассматривать как энергетически выгодное (энергия связи 0,3–1 эВ). Эти результаты обосновывают свойство зернограничной области аккумулировать точечные дефекты в процессе радиационного повреждения материала, наблюдаемое в численных экспериментах, проведенных различными исследователями. При этом накопление междоузельных атомов происходит более интенсивно как по причине более высокой энергии связи, так и вследствие их высокой подвижности.

Ключевые слова: граница зерна, энергия формирования, энергия связи, метод молекулярной статики.

M. Yu. Tikhonchev, A. B. Muralev, V. V. Svetukhin

ENERGY PROPERTIES OF TWIN GRAIN BOUNDARIES IN THE FeCr ALLOY: MOLECULAR STATICS SIMULATION

Abstract.

Background. Knowledge of the structure and energy characteristics of the grain boundaries (GB - grain boundary) is important for understanding such phenomena as grain growth , grain-boundary diffusion , segregation of impurities , deformation and destruction, which occur in materials. It is important to note the role of GB in radiation damage of materials. GBs are commonly considered as the sinks for point defects and impurity atoms. However, detailed studies of these mechanisms at the atomic level have been started only recently. The aim of the work is to obtain quantitative estimates which characterize the energy properties of twin grain boundaries in α-Fe containing chromium.

Materials and methods. The simulation was performed using the molecular statics method. To describe the interatomic interaction the authors used a modified version of multiparticle potential, offered by A. Caro and others. This potential well-reproduces the curve of mixing enthalpy of random ferromagnetic FeCr alloy.

Results. The specific energies were evaluated for five grain boundaries: Σ5(210), Σ5(310), Σ17(410), Σ13(510) and Σ17(530) with one rotation axis [001]. The sizes of the corresponding grain boundary regions in pure iron at zero temperature and in the binary Fe- 9at. % Cr alloy at temperatures between 0 and 300 K were obtained. The binding energies of the vacancy, self-interstitial atom (SIA) and substitutional Cr atom to the GB in pure Fe were estimated. Two SIAs configurations were considered. These configurations were <110> Fe-Fe and <110> Fe-Cr dumbbells.

Conclusions. Satisfactory agreement between the obtained results and the results of other researchers were observed for pure iron at zero temperature. Fe-9at.%Cr alloy was found to demonstrate the specific energy higher by ~0.1 J/m2 than that of pure Fe. With rising temperature up to 300K the GB specific energy decreases by 0.1 – 0.2 J/m2. The GB region width is ~ 1 nm for all GBs and it varies slightly with composition and temperature. In most cases, the sharp changes of binding energy with increasing distance to the GB were observed. In the case of a vacancy or substitutional atom, these changes occur with a change of sign. High positive binding energy (~3 eV) of the SIAs of both considered configurations was registered for all GB types. Attraction of a vacancy to the GB region is also assumed as energetically favorable (the binding energy is 0.3 – 1eV). These results explain the property of the grain boundary region to accumulate point defects during material radiation

damage process which were observed in the numerical experiments performed by different researchers. At that, accumulation of self interstitial atoms is more intense due to its high binding energy and high mobility.

Key words: grain boundary, formation energy, binding energy, molecular statics method.

Введение

Знание структуры и энергетических характеристик межзеренных границ (ГЗ – граница зерна) важно для понимания таких явлений, происходящих в материалах, как рост зерен, зернограничная диффузия, сегрегация примесей, деформация и разрушение (см., например, работу [1] и дальнейшие ссылки в ней). Отдельно следует отметить влияние ГЗ на процессы радиационного повреждения материалов. Традиционно ГЗ рассматриваются как стоки для точечных дефектов и примесных атомов. Однако детальные исследования механизмов взаимодействия ГЗ с указанными дефектами на атомарном уровне начали проводиться сравнительно недавно.

В работе [1] Zhang et al., используя многочастичный потенциал межатомного взаимодействия на основе модифицированного аналитического метода погруженного атома [2], рассчитали удельные энергии для 27 различных симметрично наклонных ГЗ (СНГЗ) в α-Fe. Однако их оценки оказались несколько завышенными по сравнению с более поздними исследованиями (см., например, работы [3–5]). В 1999–2001 гг. Perez and Smith [6, 7] на основе потенциала Финниса – Синклера одними из первых провели молекулярно-динамическое (МД) моделирование каскадов атомных смещений возле СНГЗ в чистом железе. Была установлена склонность произведенных в каскаде точечных дефектов (вакансий и СМА – собственных междоузельных атомов) аккумулироваться в тонком слое, прилегающем к ГЗ. Аналогичный вывод был сделан и в недавней работе [8]. Martino et al. [9] провели МД-моделирование каскадов атомных смещений возле СНГЗ в железе, содержащем примесный фосфор. Моделирование проведено на основе многочастичного межатомного взаимодействия для энергий первично-выбитого атома (ПВА) 0,5–6 кэВ в интервале температур 400–700 °С. Было установлено, что ГЗ является барьером на пути движения и рекомбинации точечных дефектов, которые скапливаются и сохраняют стабильность вблизи ГЗ. Отмечена тенденция к миграции междоузельного фосфора в направлении к ГЗ. В работе [10] методом МД исследовалась диффузия одиночной вакансии в приграничной зоне ГЗ в α-Fe. В работе [11] расчетным путем из первых принципов проведено исследование магнитных свойств ГЗ в железе и никеле. В работе [5] проведены расчеты из первых принципов магнитных и некоторых энергетических свойств ГЗ в чистом Fe и бинарном сплаве FeCr. В работе [12] Псахье и другие провели молекулярно-динамическое моделирование формирования радиационно-поврежденных областей в кристаллитах ванадия с СНГЗ. Установлено, что ГЗ служат барьером для распространения каскадов атомных смещений и аккумулируют значительную долю радиационных дефектов. В работе [13] Terentyev et al. применили метод Монте-Карло для исследования сегрегации Cr в сплавах Fe-xCr, x = 5, 10, 14 ат. %, в температурном интервале 300–900 К. В работе [14] проведено расчетное исследование особенностей прохождения каскадов через границу раздела фаз ГПУ Zr и ОЦК Nb и пороговых энергий смещения в межфазной области.

Настоящая работа посвящена исследованию ряда энергетических свойств симметрично наклонных ГЗ в сплаве Fe-9 ат. % Cr. Исследование проводится путем моделирования методом молекулярной динамики. Выбор сплава обусловлен тем, что высокохромистые феррито-мартенситные сплавы рассматриваются в качестве кандидатных материалов первой стенки и элементов бланкета будущих реакторов синтеза [15–17].

1. Метод моделирования

Симметрично наклонная или двойниковая ГЗ представляет собой плоскость зеркальной симметрии между двумя монокристаллами и считается наиболее простым типом ГЗ. Такие ГЗ нарушают трансляционную инвариантность в направлении, перпендикулярном ее плоскости. В направлениях, параллельных границе, трансляционная симметрия сохраняется (рис. 1). В настоящем исследовании мы ограничились рассмотрением пяти типов СНГЗ для ОЦК структуры: ∑5(210), ∑5(310), ∑17(410), ∑13(510) и ∑17 (530) с одной осью вращения [001]. В дальнейшем для краткости будем обозначать их как (210), (310), (410), (510) и (530) соответственно Модельные бикристаллиты строили так, чтобы ось *Z* была коллинеарна оси вращения монокристаллов, ось *X* – нормаль к СНГЗ, ось *Y* – третья ось декартовой системы координат. На граничных плоскостях, перпендикулярных ГЗ, использовали периодические граничные условия. Координаты атомов, попадающих в слои шириной ~0,6 нм, прилегающие к границам параллельным ГЗ, фиксировали после построения бикристаллита и не меняли в ходе дальнейших расчетов. Таким образом, на граничных плоскостях параллельных ГЗ использовались жесткие граничные условия (рис. 2).

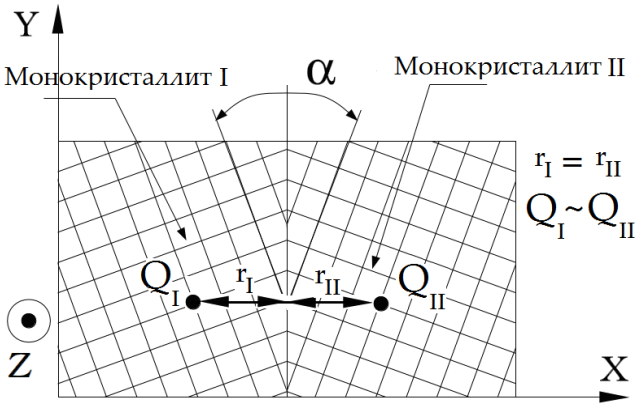


Рис. 1. Схематичное изображение симметрично наклонной границы зерна

Рассматривали два типа кристаллита: чистое железо и случайный бинарный сплав Fe-9 ат. % Cr. Для железа использовали многочастичный потенциал из работы [18]. Для описания межатомного взаимодействия в системе FeCr использовали модифицированную версию многочастичного потенциала, предложенного А. Каро и др. [19]. Описание модифицированной версии этого потенциала можно найти в работе авторов [20]. Параметры модельных бикристаллитов представлены в табл. 1.

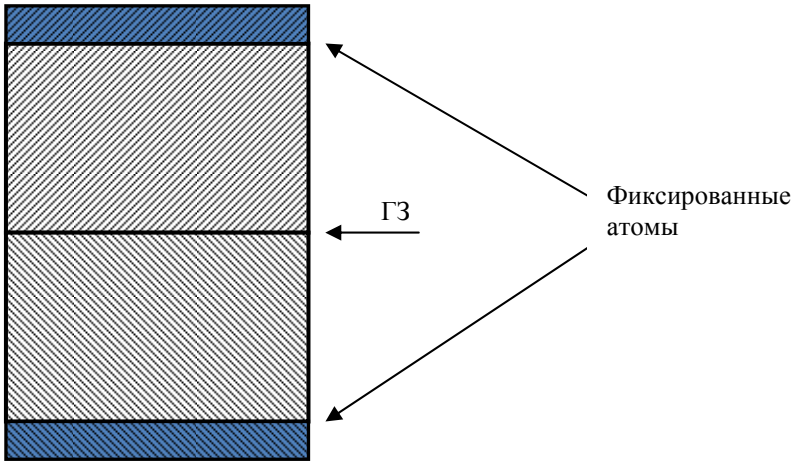


Рис. 2. Схема задания расчетной области с симметрично наклонной границы зерна

Таблица 1

Характеристики рассматриваемых ГЗ

Тип ГЗ	Размер бикристалла, $a_0 \times a_0 \times a_0$	Число атомов	Чистое Fe, $T = 0$ K		Fe-9 ат. % Cr			
					$T = 0$ K		$T = 300$ K	
			γ_{GB}, Дж/м^2	w_{GB}, Å	γ_{GB}, Дж/м^2	w_{GB}, Å	γ_{GB}, Дж/м^2	w_{GB}, Å
(210)	80,5×58,1×59,0	550706	1,12 (1,39 [21])	13,8	1,18 ± ± 0,02[1]	11,9 ± ± 1,3	1,11 ± ± 0,04	11,7 ± ± 1,2
(310)	82,2×60,1×59,0	582920	1,01 (1,63 [11], 0,99 [21])	9,4	1,11 ± ± 0,02	9,3 ± 0,3	0,91 ± ± 0,01	9,8 ± 0,3
(410)	82,5×57,7×59,0	560028	1,10 (1,11 [21])	10,6	1,16 ± ± 0,02	10,0 ± ± 0,5	1,08 ± ± 0,02	10,2 ± ± 0,3
(510)	81,6×61,2×59,0	587640	1,01 (1,84 [21])	9,8	1,07 ± ± 0,02	9,8 ± 0,2	0,95 ± ± 0,02	10,1 ± ± 0,5
(530)	81,6×58,3×59,0	559320	1,14 (1,28 [6])	8,2	1,25 ± ± 0,02	10,2 ± ± 1,3	1,16 ± ± 0,02	10,2 ± ± 0,6

Примечание. T – температура, γ_{GB} – удельная энергия границы, w_{GB} – ширина зернограничной области. В скобках представлены результаты других исследователей.

После построения составного бикристалла методом молекулярной статики проводили релаксацию системы при нулевой температуре. Этот метод заключается в проведении классического расчета методом молекулярной динамики, на каждом шаге которого компоненты скорости каждого из атомов, несовпадающие по направлению с соответствующими компонентами силы, действующими на этот атом, обнулялись. Таким путем находится конфигурация системы, соответствующая минимуму потенциальной энергии системы. При необходимости изменения температуры или состава размер релаксиро-

[1] Здесь и далее погрешности носят статистический характер и определяются как одно стандартное отклонение (1σ) для выборочного среднего.

ванного бикристаллита изменялся в соответствии с параметром решетки (a_0), который обеспечивает используемый потенциал в идеальном монокристалле такого же состава и температуры. Измененный бикристаллит релаксировали с использованием термостата Берендсена в течение 10 пс.

2. Результаты

Удельную энергию границы рассчитывали по формуле

$$\gamma_{GB} = (E_{GB} - E_c \cdot n) / S , \quad (1)$$

где E_{GB} – энергия модельного бикристаллита; E_c – энергия связи идеального кристалла на один атом; n – число атомов в системе; S – площадь ГЗ в модельном бикристаллите.

В ходе релаксации бикристаллита атомы в нескольких атомных слоях, прилегающих с обеих сторон к ГЗ, заметно смещаются из узлов кристаллических решеток. Эти атомные слои образуют зернограничную область. Размер зернограничной области определялся методом, основанным на анализе потенциальной энергии кристаллита в прилегающих к ГЗ областях (см., например, работу [12]). В этом методе исследуемый бикристаллит разбивается начиная от ГЗ на тонкие слои, параллельные плоскости распространения ГЗ. В каждом таком слое вычисляется значение потенциальной энергии E_p, приходящееся на один атом. Слои, не содержащие атомов, игнорируются. Граница зернограничной области определяется как плоскости посередине между двумя слоями, в которых отклонение E_p от E_c соответственно превышает и не превышает заданной величины ΔE. В данной работе мы рассматривали слои шириной 0,2 Å и ΔE = 0,01 эВ. Оценки удельных энергий рассматриваемых ГЗ и размеров зернограничных областей представлены в табл. 1. В табл. 1 также приводятся оценки удельной энергии ГЗ в чистом железе, полученные ранее другими исследователями. Несмотря на имеющиеся отличия, в целом наблюдается удовлетворительное согласие наших расчетов с результатами других исследователей. Согласно полученным результатам происходит небольшое (на 0,06–0,11 Дж/м^2) повышение энергии ГЗ при переходе от чистого железа к сплаву Fe-9 ат. % Cr. С повышением температуры до 300 К удельная энергия ГЗ снижается на 0,07–0,2 Дж/м^2. Ширина зернограничной области составляет ~1 нм для ГЗ всех рассматриваемых типов и слабо меняется с изменением состава и температуры системы.

Для практически важных приложений, связанных с изучением радиационной повреждаемости, представляют интерес энергии формирования точечных дефектов (вакансии и СМА) и энергии замещения атомов матрицы примесными атомами, а также энергии связи дефектов с зернограничной областью.

В настоящем исследовании рассчитаны энергии связи с зернограничной областью вакансии, СМА и Cr как атома замещения. Все оценки проведены в матрице чистого Fe при нулевой температуре. Наиболее энергетическая выгодная собственная междоузельная конфигурация в железе и хроме имеет вид гантели с ориентацией <110> (см., например, работы [18, 22] и дальнейшие ссылки в них). Поэтому здесь рассматриваются только гантельные конфигурации с ориентацией <110> двух типов: Fe-Fe и Fe-Cr. Энергия связи рассчитывалась как разность

$$E_{GB}^{B} = E_{bulk}^{f} - E_{GB}^{f} \quad (2)$$

энергий формирования вдали от ГЗ (E_{bulk}^{f}) и вблизи ГЗ (E_{GB}^{f}). Энергии формирования вакансии и СМА рассчитывали по формуле

$$E_{GB}^{f} = E_{GB}^{d} - E_{GB} + k \cdot E_{c}, \quad (3)$$

где E_{GB}^{d} – энергия релаксированного бикристаллита с точечным дефектом (вакансия или СМА); E_{GB} – энергия релаксированного бикристаллита без точечных дефектов,

$$k = \begin{cases} +1 \text{ для вакансии,} \\ -1 \text{ для СМА,} \end{cases}$$

E_c – энергия связи на один атом идеального кристалла Fe (E_c^{Fe}) для случая вакансии или СМА типа Fe-Fe либо Cr (E_c^{Cr}) для СМА смешанного типа Fe-Cr. Вблизи ГЗ энергия формирования СМА зависит от его ориентации относительно границы. Мы рассматривали все неэквивалентные ориентации и в качестве искомой энергии выбирали наименьшее из полученных значений.

Энергию замещения вычисляли по формуле

$$E_{\mathrm{Cr}}^{subst} = E_{\mathrm{Fe+1Cr}} - E_{\mathrm{Fe}} + E_c^{\mathrm{Fe}} - E_c^{\mathrm{Cr}}, \quad (4)$$

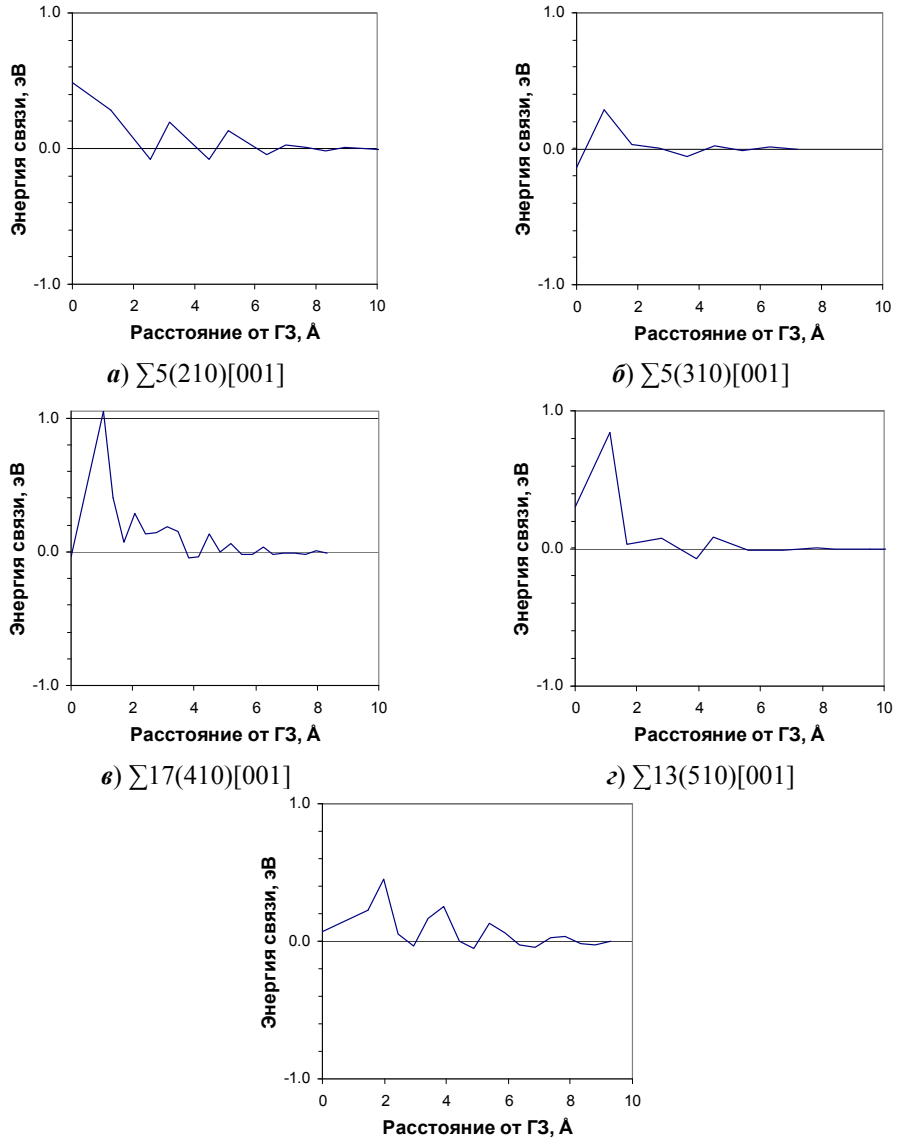
где $E_{\mathrm{Fe+1Cr}}$ – энергия кристаллита железа с одним атомом замещения хрома, E_{Fe} – энергия кристаллита железа, содержащего такое же количество атомов.

Для используемого потенциала значения E_c составляют –4,013 эВ/атом для Fe [18] и –3,837 эВ/атом для Cr [22]. В монокристалле Fe релаксированная энергия формирования вакансии равна 1,72 эВ [18], энергии формирования СМА с ориентацией <110> составляют 3,51 и 3,31 эВ для гантелей Fe-Fe и Fe-Cr соответственно [20], энергия замещения одного атома железа атомом хрома равна –0,108 эВ [20].

Полученные энергии связи с зернограничной областью вакансии, СМА двух типов и атома замещения Cr представлены на рис. 3–6 соответственно.

Для большинства полученных оценок наблюдаются скачкообразные изменения по мере удаления от ГЗ. Причем в случае вакансии и атома замещения эти скачки происходят со сменой знака. Из полученных результатов следует, что вакансия имеет положительную энергию связи с ГЗ (210), (510) и (530) (0,5; 0,3 и 0,1 эВ соответственно), нулевую энергию связи – с ГЗ (410) и небольшую отрицательную (–0,08 эВ) энергию связи для (310). Максимальное значение энергии связи с межзеренной областью составляет 0,5; 0,3; 1; 0,9 и 0,5 эВ для границ (210), (310), (410), (510) и (530) соответственно. Наименьшие значения не опускаются ниже –0,08 эВ для всех ГЗ. СМА обоих типов имеют положительную энергию связи с межзеренной областью, достигающую 2,6–3,0 эВ. При этом максимальное значение E_{GB}^{B} для гантелей Fe-Fe превосходит соответствующее значение для смешанных Fe-Cr СМА на

0,1–0,2 эВ для (210), (510), (530). Для (410) E_{GB}^{B} для СМА типа Fe-Cr на 0,1 эВ превосходит E_{GB}^{B} для СМА типа Fe-Fe. В случае ГЗ (310) оценки максимальной энергии связи для СМА обоих типов совпадают с точностью до ~0,01 эВ. Энергия связи замещающего атома Cr положительна для ГЗ (310) и (410) (0,07 и 0,15 эВ соответственно), и отрицательна для остальных ГЗ (–0,19; –0,12 и –0,02 эВ для (210), (510) и (530) соответственно). Максимальное значение связи с межзеренной областью не превосходит 0,07 эВ для всех границ, кроме (410) (0,15 эВ). В то же время наименьшие значения составляют –0,3 эВ для (410) и (510) и –0,2 эВ для остальных ГЗ.

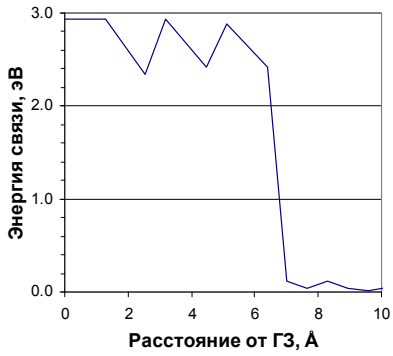


а) ∑5(210)[001] ***б***) ∑5(310)[001]

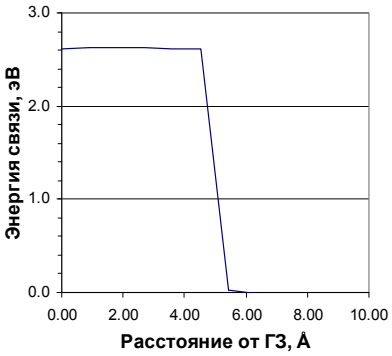
в) ∑17(410)[001] ***г***) ∑13(510)[001]

д) ∑17(530)[001]

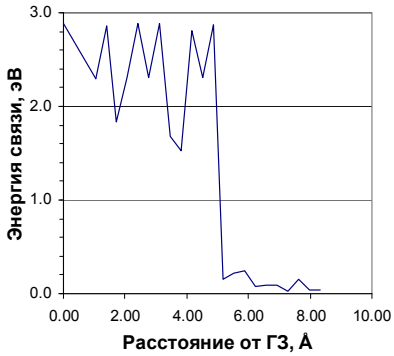
Рис. 3. Энергия связи вакансии с зернограничной областью в бикристаллите железа



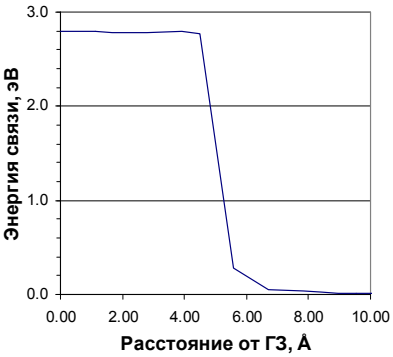
а) ∑5(210)[001]



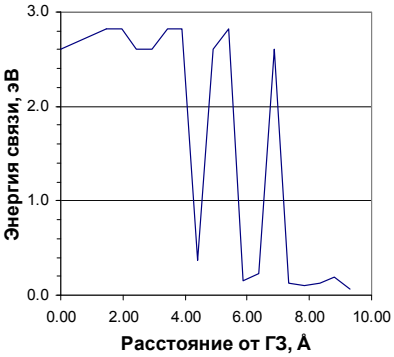
б) ∑5(310)[001]



в) ∑17(410)[001]



г) ∑13(510)[001]

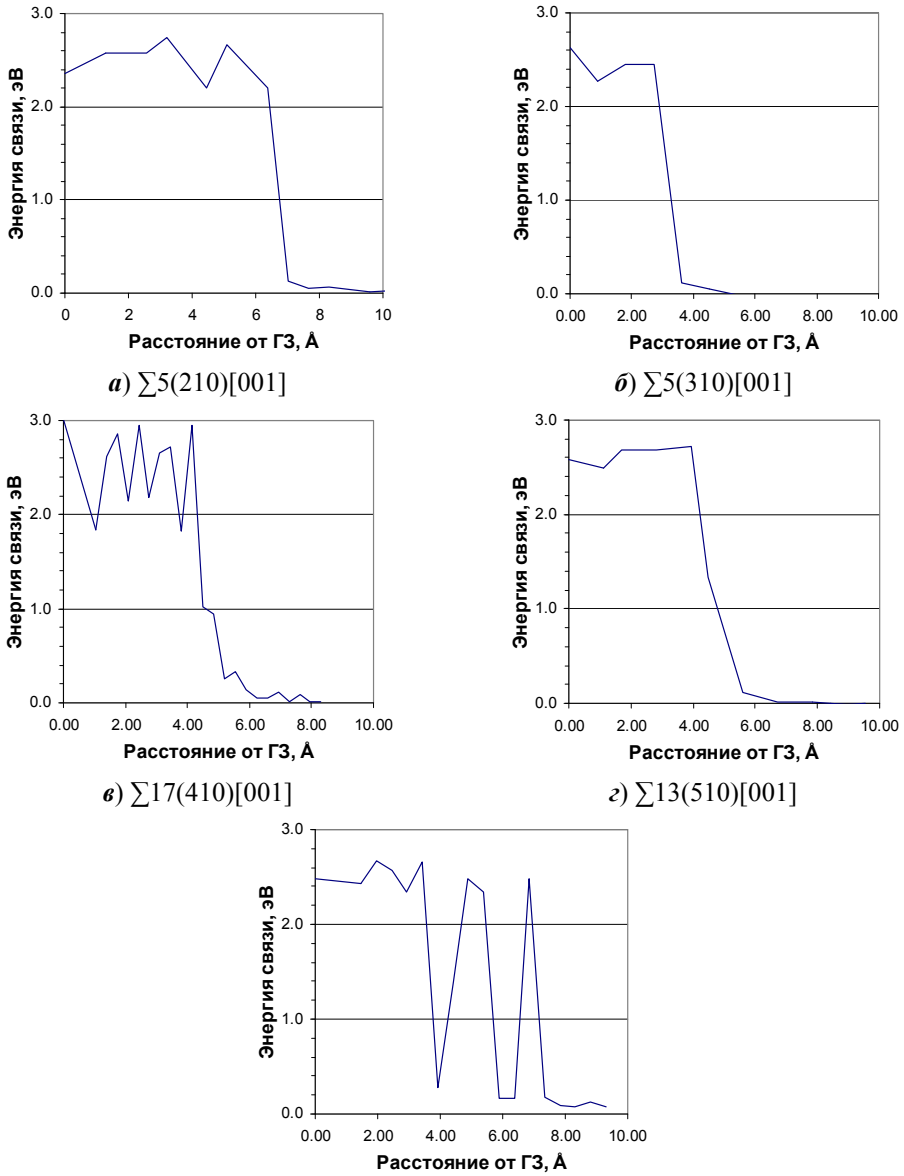


д) ∑17(530)[001]

Рис. 4. Энергия связи СМА Fe-Fe <110> с зернограничной областью в бикристаллите железа

Заключение

В работе рассмотрены модели симметрично наклонных границ в железе и случайном сплаве Fe-9 ат. % Cr. Моделирование проведено методом молекулярной статики с использованием многочастичного межатомного взаимодействия. Получены оценки удельных энергий пяти ГЗ и размеров соответствующих им зернограничных областей. Для чистого железа при нулевой температуре отмечено удовлетворительное согласие результатов расчетов с результатами других исследователей.



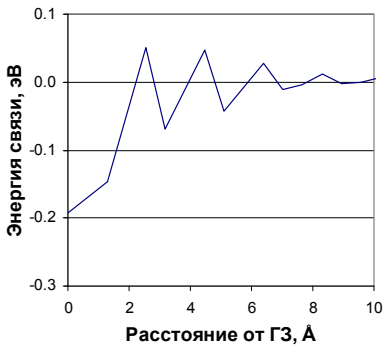
а) ∑5(210)[001] ***б***) ∑5(310)[001]

в) ∑17(410)[001] ***г***) ∑13(510)[001]

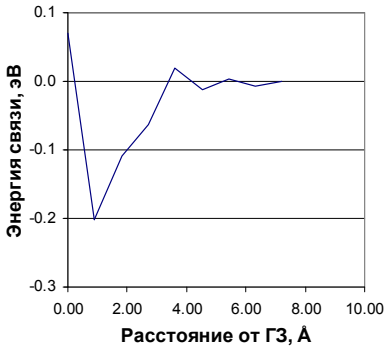
д) ∑17(530)[001]

Рис. 5. Энергия связи СМА Fe-Cr <110> с зернограничной областью в бикристаллите железа

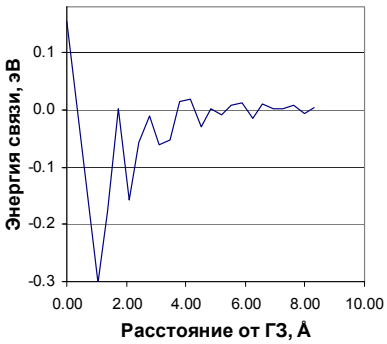
Установлено, что при переходе от чистого железа к сплаву Fe-9 ат. % Cr происходит небольшое повышение удельной энергии ГЗ на ~0,1 Дж/м^2. С повышением температуры сплава до 300 К удельная энергия ГЗ снижается на 0,1–0,2 Дж/м^2. Для всех типов рассмотренных ГЗ ширина зернограничной области составляет ~1 нм и слабо меняется с изменением состава и температуры. Для бикристалла железа рассчитаны энергии связи с зернограничной областью вакансии, двух типов междоузельных конфигураций (гантель с ориентацией <110> из двух атомов железа и гантель смешанного Fe-Cr типа той же ориентации) и замещающего атома Cr.



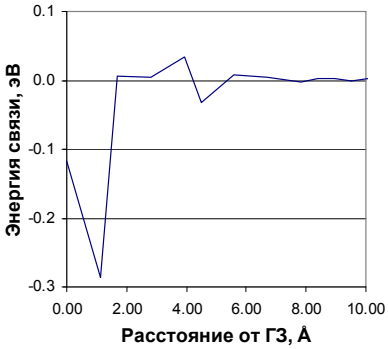
а) ∑5(210)[001]



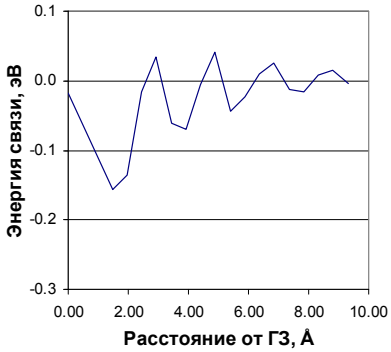
б) ∑5(310)[001]



в) ∑17(410)[001]



г) ∑13(510)[001]



д) ∑17(530)[001]

Рис. 6. Энергия связи атома замещения Cr с зернограничной областью в бикристаллите железа

Отмечены скачкообразные изменения большинства полученных оценок по мере удаления от ГЗ вплоть до периодической смены знака в случае вакансии и атома замещения. Обнаружена высокая положительная связь (~3 эВ) СМА обеих конфигураций с зернограничными областями всех рассматриваемых типов. Присоединение к зернограничной области вакансии также следует рассматривать как энергетически выгодное (энергия связи 0,3–1 эВ). Эти результаты обосновывают свойство зернограничной области аккумулировать точечные дефекты в процессе радиационного повреждения материала, отмеченное, в частности, в работах [6–9]. При этом накопление междоузельных

атомов происходит более интенсивно как по причине более высокой энергии связи, так и вследствие их высокой подвижности.

Согласно полученным результатам присоединение с зернограничной области замещающего атома хрома нельзя однозначно трактовать как энергетически выгодное или невыгодное. Это объясняется сменой знака энергии связи при рассмотрении различных позиций в зернограничной области. Чаще эта энергия все же отрицательна. Этот результат следует сопоставить с работой [13], где получены соответствующие оценки энергии связи для границ ∑19(331), ∑9(221), ∑3(111), ∑3(112), ∑11(113) и ∑9(114) с осью вращения [110], а расчет проведен с двухполосным (two band) многочастичным эмпирическим потенциалом. Авторами этой работы установлена положительная энергия связи замещающего атома Cr со всеми рассмотренными границами. Однако и в этом случае наблюдаются отрицательные значения энергии связи для отдельных позиций вблизи ГЗ. Поэтому, учитывая различие в типах рассмотренных границ, можно признать качественное согласие наших результатов с результатами из работы [13].

Список литературы

1. **Zhang, J.-M.** Energy calculation for symmetrical tilt grain boundaries in iron / J.-M. Zhang et al. // Applied Surface Science. – 2006. – Vol. 252. – P. 4936–4942.
2. **Hu, W. Y.** Calculation of formation enthalpies and phase stability for Ru–Al alloys using an analytic embedded atom model / W. Y. Hu, B. W. Zhang, X. L. Shu, B. Y. Huang // J. Alloys Comp. – 1999. – Vol. 287. – P. 159–162.
3. **Shibuta, Y.** A Molecular Dynamics Study of the Energy and Structure of the Symmetric Tilt Boundary of Iron / Y. Shibuta, Sh. Takamoto, T. Suzuki // ISIJ International. – 2008. – Vol. 48, № 11. – P. 1582–1591.
4. **Gao, Ning.** Multiscale modelling of bi-crystal grain boundaries in bcc iron / Ning Gao, Chu-Chun Fu, M. Samaras, R. Schäublin, M. Victoria, W. Hoffelner // Journal of Nuclear Materials. – 2009. – Vol. 385. – P. 262–267.
5. **Wachowicz, E.** Cohesive and magnetic properties of grain boundaries in bcc Fe with Cr additions / E. Wachowicz, T. Ossowski, and A. Kiejna // Phys. Rev. – 2010. – Vol. B 81. – P. 094104.
6. **Javier Pérez Pérez, F.** Modelling radiation effects at grain boundaries in bcc iron / F. Javier Pérez Pérez, Roger Smith // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B. – 1999. – Vol. 153. – P. 136–141.
7. **Javier Pérez Pérez, F.** Preferential damage at symmetrical tilt grain boundaries in bcc iron / F. Javier Pérez Pérez, Roger Smith // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B. – 2001. – Vol. 180. – P. 322–328.
8. **Муралев, А. Б.** Моделирование каскадов атомных смещений в альфа-железе, содержащем симметрично-наклонную межзеренную границу / А. Б. Муралев, М. Ю. Тихончев, В. В. Светухин // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2013. – № 1 (25). – С. 144–158.
9. **Di Martino, S. F.** Modelling radiation damage effects on a bcc iron lattice containing phosphorous impurity atoms near symmetrical tilt boundaries / S. F. Di Martino, R. G. Faulkner, R. Smith // Journal of Nuclear Materials. – 2011. – Vol. 417. – P. 1058–1062.
10. **Wena, Yan-Ni.** Atomic diffusion in the Fe [0 0 1] Σ= 5 (3 1 0) and (2 1 0) symmetric tilt grain boundary / Yan-Ni Wena, Yan Zhang, Jian-Min Zhang, Ke-Wei Xu // Computational Materials Science. – 2011. – Vol. 50. – P. 2087–2095.
11. **Čák, M.** First-principles study of magnetism at grain boundaries in iron and nickel / Miroslav Čák, Mojmír Šob, and Jürgen Hafne // Phys. Rev. – 2008. – Vol. B 78. – P. 054418,

12. **Псахье, С. Г.** Развитие каскадов атомных соударений в кристалле ванадия с внутренней структурой / С. Г. Псахье, К. П. Зольников, Д. С. Крыжевич, А. В. Железняков, В. М. Чернов // Кристаллография. – 2009. – Т. 54, № 6. – С. 1053–1062.
13. **Terentyev, D.** Segregation of Cr at tilt grain boundaries in Fe–Cr alloys: A Metropolis Monte Carlo study / D. Terentyev, X. Hea, E. Zhurkin, A. Bakaev // Journal of Nuclear Materials. – 2011. – Vol. 408. – P. 161–170.
14. **Тихончев, М. Ю.** Расчетное определение пороговых энергий смещения и исследование особенностей развития каскадов атомных смещений вблизи протяженной границы раздела фаз циркония и ниобия: молекулярно-динамическое моделирование / М. Ю. Тихончев, В. В. Светухин // Вопросы материаловедения. – 2011. – № 4 (68). – С. 140–152.
15. **Bloom, E. E.** Materials to deliver the promise of fusion power – progress and challenges / E. E. Bloom, S. J. Zinkle, F. W. Wiffen // J. Nucl. Mater. – 2004. – Vol. 329. – P. 12–19.
16. **Mansur, L. K.** Materials needs for fusion, Generation IV fission reactors and spallation neutron sources – similarities and differences / L. K. Mansur, A. F. Rowcliffe, R. K. Nanstad, S. J. Zinkle, W. R. Corwin, R. E. Stoller // J. Nucl. Mater. – 2004. – Vol. 329. – P. 166–172.
17. Plasma Physics Controlled Fusion. – 2006. – Vol. 48. – B165.
18. **Ackland, G. J.** Development of an interatomic potential for phosphorus impurities in a-iron / G. J. Ackland, M. I. Mendelev, D. J. Srolovitz, S. W. Han, A. V. Barashev // J. Phys.: Condens. Matter. – 2004. – Vol. 16. – P. S2629–S2642.
19. **Caro, A.** Classical Many-Body Potential for Concentrated Alloys and the Inversion of Order in Iron-Chromium Alloys / A. Caro, D. A. Crowson, and M. Caro // Phys. Rev. Lett. – 2005. – Vol. 95. – P. 075702.
20. **Tikhonchev, M.** MD simulation of atomic displacement cascades near chromium-rich clusters in FeCr alloy / M. Tikhonchev, V. Svetukhin, E. Gaganidze // Journal of Nuclear Materials. – 2013. – Vol. 442. – P. S618–S623.
21. **Terentyev, D.** Properties of grain boundaries in BCC iron and iron-based alloys: An atomistic study / D. Terentyev, Xinfu He // Open report of the Belgian nuclear research centre SCK•CEN-BLG-1072. – Belgium, 2010. – 70 p.
22. **Wallenius, J.** Modelling of Cr precipitation in Fe-Cr alloys / J. Wallenius, P. Olsson, C. Lagerstedt, N. Sandberg, R. Chakarova, V. Pontikis // Phys. Rev. B. – 2004. – Vol. 69. – P. 094103.

References

1. Zhang J.-M. et al. *Applied Surface Science*. 2006, vol. 252, pp. 4936–4942.
2. Hu W. Y., Zhang B. W., Shu X. L., Huang B. Y. *J. Alloys Comp*. 1999, vol. 287, pp. 159–162.
3. Shibuta Y., Takamoto Sh., Suzuki T. *ISIJ International*. 2008, vol. 48, no. 11, pp. 1582–1591.
4. Gao Ning., Chu-Chun Fu, Samaras M., Schäublin R., Victoria M., Hoffelner W. *Journal of Nuclear Materials*. 2009, vol. 385, pp. 262–267.
5. Wachowicz E., Ossowski T. and Kiejna A. *Phys. Rev.* 2010, vol. B 81, p. 094104.
6. Javier Pérez Pérez F., Roger Smith *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*. 1999, vol. 153, pp. 136–141.
7. Javier Pérez Pérez F., Roger Smith *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*. 2001, vol. 180, pp. 322–328.
8. Muralev A. B., Tikhonchev M. Yu., Svetukhin V. V. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki* [University proceedings. Volga region. Physical and mathematical sciences]. 2013, no. 1, pp. 144–158.

9. Di Martino S. F., Faulkner R. G., Smith R. *Journal of Nuclear Materials*. 2011, vol. 417, pp. 1058–1062.
10. Wena Yan-Ni., Yan Zhang, Jian-Min Zhang, Ke-Wei Xu *Computational Materials Science*. 2011, vol. 50, pp. 2087–2095.
11. Čák M., Mojmír Šob, and Jürgen Hafne *Phys. Rev.* 2008, vol. B 78, p. 054418,
12. Psakh'e S. G., Zol'nikov K. P., Kryzhevich D. S., Zheleznyakov A. V., Chernov V. M. *Kristallografiya* [Crystallography]. 2009, vol. 54, no. 6, pp. 1053–1062.
13. Terentyev D., Hea X., Zhurkin E., Bakaev A. *Journal of Nuclear Materials*. 2011, vol. 408, pp. 161–170.
14. Tikhonchev M. Yu., Svetukhin V. V. *Voprosy materialovedeniya* [Problems of materials science]. 2011, no. 4(68), pp. 140–152.
15. Bloom E. E., Zinkle S. J., Wiffen F. W. *J. Nucl. Mater.* 2004, vol. 329, pp. 12–19.
16. Mansur L. K., Rowcliffe A. F., Nanstad R. K., Zinkle S. J., Corwin W. R., Stoller R. E. *J. Nucl. Mater.* 2004, vol. 329, pp. 166–172.
17. Baluc N. *Plasma Phys. Control. Fusion.* 2006, vol. 48. B165.
18. Ackland G. J., Mendelev M. I., Srolovitz D. J., Han S. W., Barashev A. V. *J. Phys.: Condens. Matter.* 2004, vol. 16, pp. S2629–S2642.
19. Caro A., Crowson D. A. and M. Caro *Phys. Rev. Lett.* 2005, vol. 95, p. 075702.
20. Tikhonchev M., Svetukhin V., Gaganidze E. *Journal of Nuclear Materials.* 2013, vol. 442, pp. S618–S623.
21. Terentyev D., Xinfu He *Open report of the Belgian nuclear research centre SCK•CEN-BLG-1072*. Belgium, 2010, 70 p.
22. Wallenius J., Olsson P., Lagerstedt C., Sandberg N., Chakarova R., Pontikis V. *Phys. Rev. B.* 2004, vol. 69, p. 094103.

Тихончев Михаил Юрьевич
кандидат физико-математических наук, начальник лаборатории, Научно-исследовательский технологический институт имени С. П. Капицы Ульяновского государственного университета (Россия, г. Ульяновск, Университетская Набережная, 1)

E-mail: tikhonchev@sv.ulsu.ru

Tikhonchev Mikhail Yur'evich
Candidate of physical and mathematical sciences, head of laboratory, Research Technological Institute named after S. P. Kapitsa of Ulyanovsk State University (1 Universitetskaya embankment, Ulyanovsk, Russia)

Муралев Артем Борисович
аспирант, Ульяновский государственный университет (Россия, г. Ульяновск, ул. Льва Толстого, 42)

E-mail: a.b.muralev@yandex.ru

Muralev Artem Borisovich
Postgraduate student, Ulyanovsk State University (42 Lva Tolstogo street, Ulyanovsk, Russia)

Светухин Вячеслав Викторович
доктор физико-математических наук, профессор, директор института, Научно-исследовательский технологический институт имени С. П. Капицы Ульяновского государственного университета (Россия, г. Ульяновск, Университетская Набережная, 1)

E-mail: slava@sv.uven.ru

Svetukhin Vyacheslav Viktorovich
Doctor of physical and mathematical sciences, professor, director of the Research Technological Institute named after S. P. Kapitsa of Ulyanovsk State University (1 Universitetskaya embankment, Ulyanovsk, Russia)

УДК 544.022.342, 544.022.344.2

Тихончев, М. Ю.

Энергетические свойства симметрично наклонных границ в сплаве FeCr: моделирование методом молекулярной статики / М. Ю. Тихончев, А. Б. Муралев, В. В. Светухин // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2014. – № 2 (30). – С. 73–87.