

07,11,01

## Моделирование методом Монте-Карло кинетики распада и образования выделений на границах зерен общего типа в разбавленных ОЦК-сплавах Fe–Cu

© И.Н. Карькин<sup>1,2</sup>, Л.Е. Карькина<sup>1,¶</sup>, П.А. Коржавый<sup>1,3</sup>, Ю.Н. Горностырев<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия

<sup>2</sup> Институт квантового материаловедения, Екатеринбург, Россия

<sup>3</sup> Department of Materials Science and Engineering, KTH Royal Institute of Technology, Stockholm, Sweden

¶ E-mail: Lidiya.karkina@imp.uran.ru

(Поступила в Редакцию 7 июня 2016 г.)

Кинетика распада в поликристаллическом сплаве Fe–Cu и формирование выделений на границах зерен (ГЗ) исследованы теоретически с использованием атомистического моделирования на различных временных масштабах: методом Монте-Карло, реализующим диффузионное перераспределение атомов Cu, и методом молекулярной динамики, обеспечивающим атомную релаксацию кристаллической решетки. Показано, что при малом размере зерна ( $D \sim 10$  nm) распад в объеме подавлен, а когерентно связанные с матрицей обогащенные Cu выделения преимущественно образуются на ГЗ. Размер и состав выделений существенно зависят от типа ГЗ: мелкие выделения (1.2–1.4 nm) имеют средний состав Fe–40 at.% Cu и образуются вблизи малоугловых границ зерен, более крупные выделения размером до 4 nm со средним составом Fe–60 at.% Cu формируются вблизи границ зерен общего типа и тройных узлов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 14-12-00673).

DOI: 10.21883/FTT.2017.01.43958.237

### 1. Введение

Легирование является важным инструментом в дизайне материалов, обеспечивающим эффективный способ управления структурным состоянием и свойствами сплавов [1]. Использование легирующих элементов играет особую роль в формировании прочностных свойств низкоуглеродистых сталей [1–3]. Существенный интерес вызывает формирование ультрадисперсных выделений, которые обеспечивают повышение прочностных свойств при сохранении пластичности [4]. В последнее десятилетие особое внимание привлекает использование Cu в качестве легирующего элемента, что позволяет реализовать в стали высокую прочность и вязкость разрушения [5] благодаря формированию наноразмерных, обогащенных медью частиц в матрице  $\alpha$ -Fe [6,7].

Кинетика распада пересыщенных твердых растворов Fe–Cu, Fe–Cu–Mn, Fe–Cu–Ni исследовалась экспериментально во многих работах как при отжиге [8–10], так и при облучении [11–13]. Установлено, что формирование выделений Cu в матрице ОЦК-Fe происходит в несколько стадий [8,10,14]. Сначала образуются нановыделения с ОЦК-решеткой, содержащие до 50–70 at.% меди [3,13,14]. Затем с увеличением размера наблюдается их перестройка в плотноупакованную фазу с решеткой  $9R$  (двойникованная по каждой девятой плоскости ГЦК-решетка), и при дальнейшем увеличении размера выделений в них реализуется ГЦК-структура.

Существенное влияние ОЦК-выделений Cu на механические свойства  $\alpha$ -Fe стимулировало теоретические исследования термодинамики и кинетики распада твердых растворов Fe–Cu. Для моделирования распада использовались методы различного масштабного уровня: метод фазовых полей [15,16], статистическая стохастическая теория [17,18], метод Монте-Карло [19,20]. Широкое распространение получило использование комбинированных подходов, сочетающих атомистическое моделирование и *ab initio* расчеты [21,22], обеспечивающие корректную параметризацию свободной энергии и межатомных взаимодействий в зависимости от магнитного состояния матрицы Fe. Все эти методы дают правильное качественное описание кинетики распада, но не согласуются с экспериментальными данными по составу выделений, предсказывая образование частиц с концентрацией Cu, близкой к 100 at.%. Методами атомистического моделирования исследованы (см., например, [23–25]) взаимодействие дислокаций с наноразмерными выделениями Cu в матрице ОЦК-Fe и его вклад в твердорастворное упрочнение.

В перечисленных выше работах проводилось моделирование распада системы Fe–Cu в идеальной решетке. В то же время хорошо известно, что в реальном сплаве определяющую роль в зарождении новой фазы играют границы зерен (ГЗ). Атомистическое моделирование структуры и свойств ГЗ в основном проведено в металлах и сплавах с ГЦК-решеткой (см. работы [26,27])

**Таблица 1.** Энергия образования ( $\Delta E_f$ ) и деформация решетки вблизи атома Cu в матрице ОЦК-Fe

Метод расчета	$\Delta E_f$ (relax), eV	$\Delta E_f$ (nonrelax), eV	$\Delta R_1/R_{10}$ , %	$\Delta R_2/R_{20}$ , %
MD, EAM-потенциал [38]	0.43	0.44	0.17	0.008
<i>Ab initio</i> [40]	0.50	0.53	+0.4, +1.18	-0.04, -0.38

и ссылки в них). Работы по моделированию ГЗ материалов с ОЦК-решеткой немногочисленны. Энергия, структура и прочность ряда симметричных специальных границ зерен с осями наклона  $\langle 100 \rangle$  и  $\langle 110 \rangle$  в ОЦК-Fe и сплаве Fe–Cr изучены в [28]. В частности, с использованием метода молекулярной статики рассчитаны энергии взаимодействия изолированной примеси замещения с ГЗ различного типа, а также с помощью моделирования методом Монте-Карло (МС) исследована кинетика формирования выделений вблизи границ зерен в сплавах Fe–5 at.% Cr и Fe–10 at.% Cr. Энергия и структура симметричных и несимметричных ГЗ в  $\alpha$ -Fe, а также взаимодействие атомов углерода, вакансий и атомов внедрения с границами зерен изучены в [29–34]. Взаимодействие атомов Cu с ГЗ наклона  $\Sigma 3$  исследовано в [35] с использованием *ab initio* расчетов. В настоящее время в литературе отсутствуют данные о влиянии ГЗ на кинетику протекания распада в сплаве Fe–Cu.

В данной работе с использованием комбинированного подхода, включающего молекулярно-динамическое (MD) и МС-моделирование, изучена кинетика формирования выделений на ГЗ различного типа в поликристаллах сплава Fe–Cu. Показано, что в нанокристаллическом сплаве обогащенные медью выделения формируются преимущественно на большеугловых ГЗ общего типа и вблизи тройных стыков.

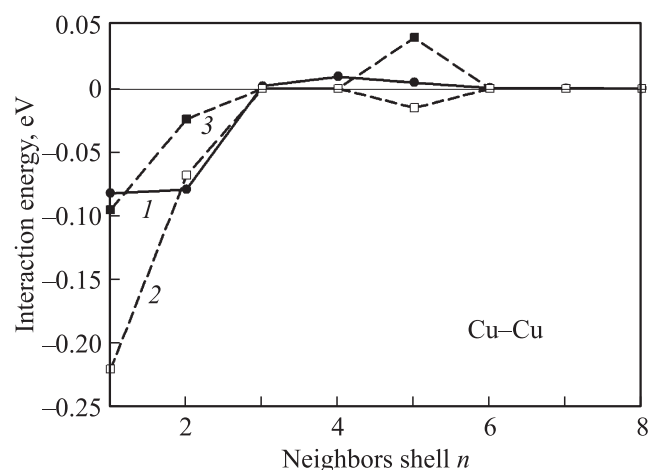
## 2. Метод моделирования

В настоящее время разработано несколько многочастичных EAM-потенциалов (EAM — embedded atom method), описывающих межатомные взаимодействия в системе Fe–Cu [24,36–38]. Нами используется потенциал, предложенный в работе [38], который корректно описывает многие физические свойства как чистых металлов (ОЦК-Fe и ГЦК-Cu), так и ОЦК-сплава Fe–Cu. В частности, этот потенциал дает энергии образования и взаимодействия точечных дефектов и их комплексов, близкие к результатам, полученным в *ab initio* расчетах [39,40]. Эти данные являются необходимыми входными параметрами для моделирования кинетики образования выделений в матрице сплава.

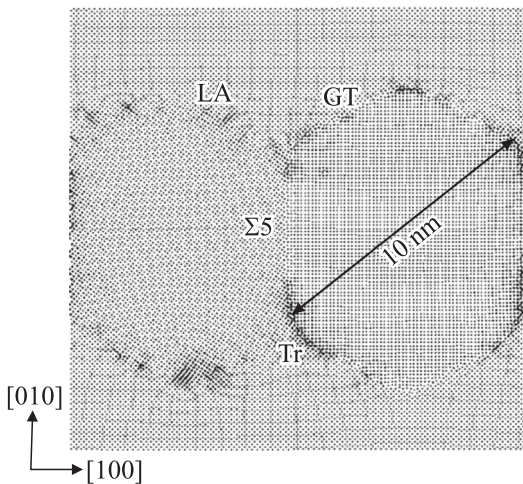
На рис. 1 показана энергия взаимодействия между двумя атомами Cu в ОЦК-Fe. Кривая 1 соответствует результатам MD-расчетов с межатомным потенциалом [38], используемым в настоящей работе, кривые 2 и 3 — результатам *ab initio* расчетов [39] для ферромагнитного и парамагнитного состояний Fe. Все зависимости демонстрируют притяжение атомов Cu,

расположенных на первой и второй координационных сферах, с близкими значениями; с увеличением номера координационной сферы энергия взаимодействия быстро уменьшается по абсолютной величине. Притяжение атомов Cu на близких расстояниях приводит к их объединению в кластеры и формированию выделений. Используемый межатомный потенциал (построенный для ферромагнитного состояния) недооценивает Cu–Cu-взаимодействие на первой координационной сфере, что приводит к некоторому занижению температуры распада. Для потенциала [38] атомистическое MD-моделирование устойчивости нановыделений Cu в решетке  $\alpha$ -Fe относительно ОЦК-9R-превращения в зависимости от размера выделений проведено в работе [41]. Установлено, что выделения сохраняют ОЦК-структуру до размера  $D \sim 4$  nm.

В табл. 1 представлены энергия растворения атома Cu в решетке  $\alpha$ -Fe и относительные значения деформации решетки вблизи изолированного атома Cu. Энергия растворения вычислялась по формуле  $\Delta E_f = E(n\text{Fe} + 1\text{Cu})_{\text{bcc}} - nE(\text{Fe})_{\text{bcc}} - E(\text{Cu})_{\text{fcc}}$ , где  $E(n\text{Fe} + 1\text{Cu})_{\text{bcc}}$  — энергия кристаллита, содержащего  $n$  атомов Fe и один атом Cu,  $E(\text{Fe})_{\text{bcc}}$  и  $E(\text{Cu})_{\text{fcc}}$  — энергии связи ОЦК-Fe и ГЦК-Cu. Как видно из табл. 1, значения энергии растворения, рассчитанные методом MD с использованием EAM-потенциала [38], близки к полученным с использованием *ab*



**Рис. 1.** Эффективная энергия взаимодействия между двумя атомами Cu в зависимости от расстояния для первых восьми ближайших координационных сфер в ОЦК-Fe. Кривая 1 представляет результаты MD-расчетов с межатомным потенциалом [38], используемым в настоящей работе, кривые 2 и 3 — результаты *ab initio* расчетов [39] для ферромагнитного и парамагнитного состояний Fe соответственно.



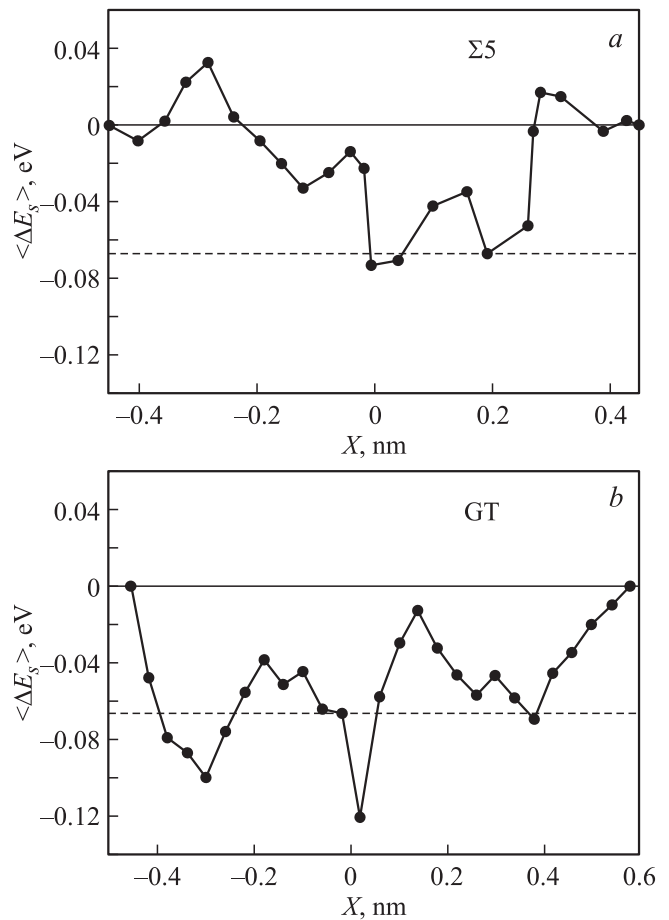
**Рис. 2.** Проекция на плоскость (001) кристаллита, содержащего две ГЗ  $\Sigma 5$ , две малоугловые ГЗ LA, две высокоугловые ГЗ GT и два тройных узла Tr.

*initio* методов [40]. Незначительное изменение энергии растворения атома Cu при учете атомной релаксации (6% в расчетах *ab initio* и 2% для EAM-потенциала) указывает на малый вклад упругих деформаций в энергию растворения. Этот вывод согласуется также с малой величиной деформации решетки  $\alpha$ -Fe на первой и второй координационных сферах ( $\Delta R_1/R_{10}$  и  $\Delta R_2/R_{20}$ ) вблизи атома Cu (табл. 1). Незначительное изменение энергии вследствие атомной релаксации получено также при расчете энергии взаимодействия двух атомов Cu в решетке  $\alpha$ -Fe (рис. 1). С учетом этого обстоятельства, при моделировании распада сплава Fe–Cu мы проводили MD-релаксацию кристаллита через  $10^5$  шагов МС, что оказалось достаточным для предотвращения накопления упругих напряжений в системе.

Для изучения взаимодействия атомов Cu с ГЗ наклона различного типа в  $\alpha$ -Fe был построен кристаллит, содержащий несколько зерен; ранее подобный кристаллит использовался в наших работах по моделированию сегрегаций на ГЗ в сплаве на основе Al [42,43]. Проекция кристаллита на плоскость (001) показана на рис. 2. Первоначально в центре кристаллита строилась вертикальная специальная несимметричная граница наклона  $\Sigma 5[001]\{710\}/\{110\}$  в схеме решетки совпадающих узлов [26,44]. Дополнительная минимизация энергии этой границы осуществлялась путем относительного смещения кристаллитов на один из векторов зернограничных сдвигов и дополнительного смещения в направлении, перпендикулярном плоскости ГЗ. Размер кристаллита вдоль направления, перпендикулярного ГЗ  $\Sigma 5$ , выбирался таким образом, чтобы при использовании периодических условий на границе кристаллита образовалась вторая граница  $\Sigma 5$  противоположного знака. Два зерна, разделенные специальной границей, помещались внутри третьего зерна (рис. 2), ограниченного плоскостями  $\sim \{350\}$ . Таким образом, формировались два тройных

узла (Tr), которые соединяют ГЗ трех типов: асимметричную ГЗ  $\Sigma 5$ , ГЗ общего типа (GT) с углом разориентации  $45^\circ$  и малоугловую ГЗ (LA) с углом разориентации  $8.13^\circ$ . Подобная структура позволяет реализовать MD при периодических граничных условиях вдоль всех трех кристаллографических направлений в кристаллите. Размер всей системы составляет  $\sim 20$  nm в направлениях [100] и [010] и  $\sim 10$  nm в направлении [001], которое совпадает с осью наклона для всех границ зерен. Построенная таким образом ячейка моделирования содержит около 250 000 атомов. Релаксация полученной структуры проводилась в два этапа: отжиг при  $T = 960$  K ( $5 \cdot 10^5$  временных шагов) и последующее охлаждение с шагом 100 K до  $T = 0$  K с релаксацией на каждом шаге по температуре ( $10^5$  шагов).

Для атомов Cu вблизи асимметричной ГЗ  $\Sigma 5$  и ГЗ общего типа методом MD-EAM-моделирования рассчитывалась энергия сегрегации  $\Delta E_s(X)$ . Атом Cu помещался в различные позиции вдоль направлений, перпендикулярных плоскости выбранных границ, и проводилась релаксация кристаллита при  $T = 0$  K. Величина  $\Delta E_s(X)$  определялась как разность энергий кристаллита



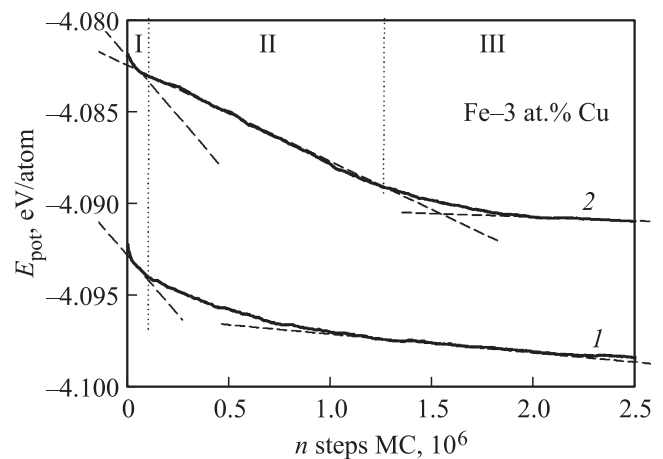
**Рис. 3.** Средняя сегрегационная энергия  $\langle \Delta E_s \rangle$  атомов Cu в зависимости от расстояния от примесных атомов до ГЗ в направлении, перпендикулярном плоскости границы, для асимметричной ГЗ  $\Sigma 5$  (a) и ГЗ общего типа GT (b).

с атомом Cu в данной точке  $X$  вблизи ГЗ и вдали от ГЗ, где атом считался не взаимодействующим с границей. При MD-моделировании установлено, что все изученные ГЗ содержат как энергетически выгодные, так и энергетически невыгодные позиции, число которых зависит от типа ГЗ. Поэтому, чтобы оценить склонность к образованию сегрегаций на данной ГЗ, были усреднены значения энергии сегрегации вдоль границ на заданном расстоянии  $X$  от плоскости границы. Полученные таким образом значения  $\langle \Delta E_s \rangle$  представлены на рис. 3. Усредненные значения немонотонно зависят от расстояния  $X$ , что отмечалось ранее в [28,29] при анализе деформации вблизи ГЗ в ОЦК-металлах. Точка  $X = 0$  соответствует геометрическому положению центра границы. Штриховой линией на рис. 3 отмечен уровень энергии  $kT$  для температуры  $T = 775$  К, используемой при моделировании сплавов Fe–Cu. Хотя для ГЗ обоих типов взаимодействие с атомами Cu в целом носит характер притяжения, величина средней сегрегационной энергии для ГЗ  $\Sigma 5$  меньше, чем для ГЗ GT (ср. рис. 3, *a* и *b*). Кроме того, для ГЗ  $\Sigma 5$  сегрегационные энергии в целом не выходят за уровень, соответствующий  $kT$ , тогда как для ГЗ GT они лежат существенно ниже  $kT$ . Можно отметить, что величина энергии сегрегации в Fe–Cu значительно меньше, чем в Al-сплавах [42,43].

В настоящей работе кинетика формирования сегрегаций Cu на ГЗ в построенном кристаллите исследовалась комбинированным методом с использованием MC [45] и MD-моделирования. В начальной конфигурации атомы Cu были случайно распределены по позициям в кристаллите (рис. 2) в соответствии с заданной средней концентрацией. Моделирование проводилось при двух температурах (775 и 975 К) и для двух концентраций Cu (1.5 и 3 at.%). На каждом шаге MC случайно выбирался атом типа 1 (Fe) и типа 2 (Cu) и проводился их последующий обмен при данной температуре в соответствии с алгоритмом Метрополиса [45]. При расчетах мы использовали MD-релаксацию кристаллита сплава Fe–Cu через  $10^5$  шагов MC. Полное число MC шагов составляло  $2.5 \cdot 10^6$ .

### 3. Результаты MC-моделирования

На рис. 4 представлено изменение потенциальной энергии в зависимости от числа шагов MC-моделирования для сплава Fe–3 at.% Cu при температуре  $T = 775$  К. Начальное состояние отвечает однородному случайному распределению атомов Cu, замещающих Fe в идеальной ОЦК-решетке (размер кристаллита  $10 \times 10 \times 10$  nm) и решетке нанозеренного поликристалла (кривые 1 и 2 соответственно). Процесс формирования обогащенных Cu выделений может быть охарактеризован несколькими стадиями (I–III на рис. 4), которые различаются скоростью изменения потенциальной энергии. Стадия I является быстрой и заканчивается через  $\sim 10^5$  шагов MC-моделирования. Для идеальной

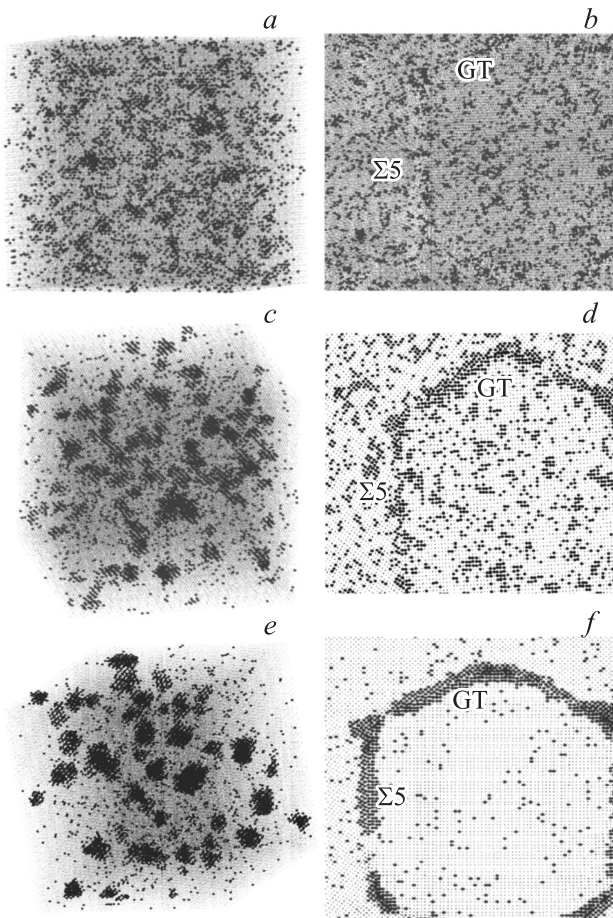


**Рис. 4.** Изменение потенциальной энергии кристаллитов в зависимости от числа шагов MC-моделирования для сплава Fe–3 at.% Cu,  $T = 775$  К. 1 — кристаллит с идеальной решеткой, 2 — кристаллит, показанный на рис. 2.

решетки за стадией I и достаточно продолжительной переходной стадией (где скорость изменения энергии постоянно уменьшается) следует стадия III, которая характеризуется низкой скоростью процессов распада (кривая 1 на рис. 4). В случае поликристалла между стадиями I и III можно выделить еще стадию II с промежуточным постоянным значением скорости процессов формирования выделений.

На рис. 5 представлены типичные распределения атомов Cu для сплава Fe–3 at.% Cu ( $T = 775$  К) после завершения стадий I, II или III MC-моделирования для кристаллитов с идеальной решеткой (рис. 5, *a, c, e*) и поликристалла (рис. 5, *b, d, f*). В последнем случае показана средняя часть кристаллита, чтобы представить все рисунки приблизительно в одном масштабе. На стадии I зарождаются мелкие кластеры Cu, однородно распределенные в объеме материала (рис. 5, *a, b*). Наблюдаются относительно крупные кластеры размером  $\sim 0.8$  nm, содержащие 8–15 атомов Cu, и мелкие кластеры размером  $\sim 0.4$  nm, содержащие 3–5 атомов Cu. Среднее расстояние между кластерами порядка 4 nm. На переходной стадии и стадии III в идеальном кристалле (рис. 5, *c, e*) происходит постепенный рост частиц, которые достигают размера 1.5–2.0 nm. В течение стадии III MC-моделирования главным образом возрастает размер больших кластеров, но сохраняются также и мелкие кластеры, среднее расстояние между кластерами несколько увеличивается. Другой сценарий реализуется для поликристаллита. На стадии II происходит рост выделений на границах зерен, тогда как число кластеров в объеме зерна уменьшается (рис. 5, *d*). На стадии III формируется существенно неоднородное распределение атомов Cu: примесные атомы сегрегируют на границах зерен. В объеме зерна остаются единичные выделения.

На рис. 6 представлено распределение атомов Cu в поликристалле в конце стадии III MC-моделирования для



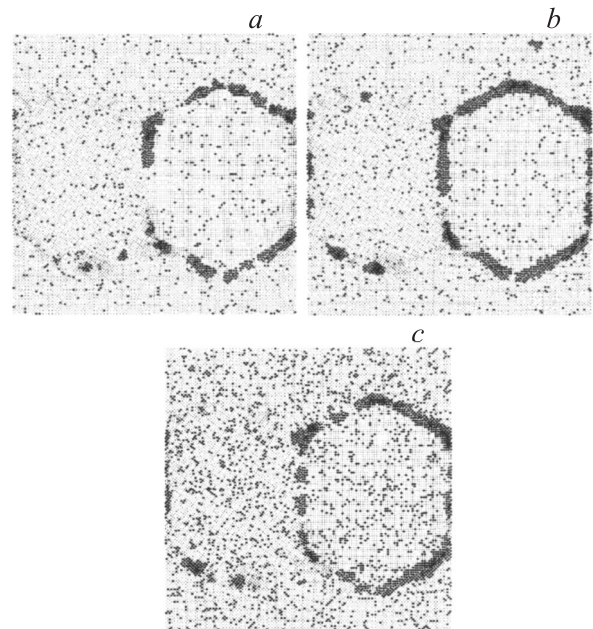
**Рис. 5.** Распределение атомов Cu для сплава Fe–3 at.% Cu ( $T = 775$  K) после завершения стадии I (*a, b*), переходной стадии для идеальной решетки (*c*), стадии II для поликристалла (*d*) и стадии III (*e, f*) МС-моделирования. *a, c, e* — идеальная решетка, *b, d, f* — кристаллит с границами зерен (рис. 2). Атомы Fe показаны мелкими точками, атомы Cu — крупными.

различной средней концентрации атомов Cu и различных температур МС-моделирования. Средняя концентрация атомов Cu в объеме зерна уменьшается до  $\sim 0.4$  at.% для  $T = 775$  K (рис. 6, *a, b*) независимо от стартовой средней концентрации в объеме и до  $\sim 1.0$  at.% для  $T = 975$  K, достигая значения, близкого к равновесному для данной температуры. Концентрация атомов Cu возрастает преимущественно вблизи большеугловых ГЗ и тройных стыков. Плотность атомов Cu вблизи малоугловых ГЗ существенно ниже, а в объеме зерна остаются отдельные атомы и небольшие кластеры. При более высокой температуре  $T = 975$  K (рис. 6, *c*) атомы Cu сегрегируют преимущественно вблизи большеугловых ГЗ общего типа. Ширина слоя атомов Cu несколько больше вблизи тройных стыков ГЗ, однако в среднем она не превышает 5–6 атомных слоев (по каждой стороне от ГЗ).

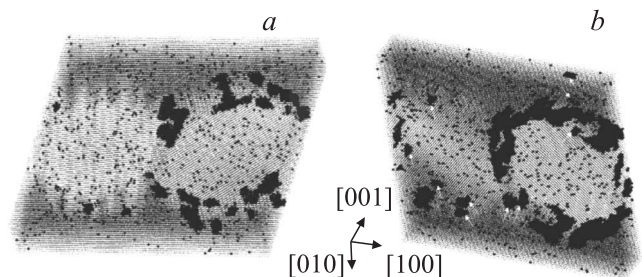
Необычной особенностью формирования сегрегации Cu на ГЗ в Fe является крайняя неоднородность

в распределении примесных атомов по ГЗ, которая хорошо видна в изометрической проекции кристаллита (рис. 7). При больших временах моделирования на ГЗ (преимущественно большеугловых) образуются компактные выделения Cu, при этом внутри зерен кластеры Cu отсутствуют. Выделения касаются друг друга, образуя сложный узор на ГЗ. Анализ свидетельствует о том, что все они имеют ОЦК-решетку и когерентно связаны с матрицей.

На ГЗ можно выделить кластеры Cu нескольких размеров. Небольшие по величине кластеры (помечены стрелками на рис. 7, *b*) со средним размером 1.4 nm образуются главным образом вблизи зернограничных дислокаций малоугловой ГЗ. Форма их близка к сферической, кластеры содержат 50–70 атомов Cu (табл. 2). Средняя



**Рис. 6.** Распределение атомов Cu в кристаллите с двумя зернами на стадии III МС-моделирования. *a* — в сплаве Fe–1.5 at.% Cu,  $T = 775$  K; *b* — в сплаве Fe–3 at.% Cu,  $T = 775$  K; *c* — в сплаве Fe–3 at.% Cu,  $T = 975$  K. Рисунки даны в проекции на плоскость (001), перпендикулярную оси наклона ГЗ.



**Рис. 7.** Распределение атомов Cu в кристаллите с двумя зернами для сплавов Fe–1.5 at.% Cu (*a*) и Fe–3 at.% Cu (*b*),  $T = 775$  K (изометрическая проекция).

**Таблица 2.** Характеристики кластеров Cu на границах зерен в конце III стадии MC-моделирования для сплава Fe–3 at.% Cu

T, K	Мелкие кластеры		Крупные кластеры	
	Средний размер, nm	Средняя концентрация, at. %	Средний размер, nm	Средняя концентрация, at. %
775	1.4	40–60	3.2	55–70
975	1.2	30–40	4.0	60–80

для всех этих выделений концентрация атомов Cu составляет 40–60 at.%. На большеугловых границах  $\Sigma 5$  и GT выделения имеют форму цилиндра с осью, перпендикулярной плоскости границы, высотой 5–6 атомных слоев по обе стороны границы, диаметр которого изменяется в пределах от 2.4 до 4.0 nm. Концентрация Cu уменьшается от оси цилиндра (90–100 at.% Cu) к его периферии (25–40 at.% Cu). При повышении температуры от 775 до 975 K вблизи большеугловых ГЗ концентрация примесных атомов уменьшается на ГЗ  $\Sigma 5$  и возрастает на GT ГЗ. Таким образом, полученные результаты показывают, что эволюция распределения атомов Cu во время отжига в мелкозернистом поликристалле является сложной и стадия обогащения ГЗ примесными атомами сменяется зернограницным распадом с образованием выделений на ГЗ.

#### 4. Заключение

С использованием комбинированного подхода, включающего молекулярно-динамическое моделирование и моделирование методом Монте-Карло, изучена кинетика формирования выделений в сплавах Fe–1.5 at.% Cu и Fe–3 at.% Cu при температурах 775 и 975 K. При атомистическом MC-моделировании впервые продемонстрирована возможность распада бинарного сплава Fe–Cu с образованием нановыделений, локализованных вблизи границ зерен. Показано, что при рассматриваемом размере зерна ( $\sim 10$  nm) распад в объеме зерна в существенной степени подавлен. С увеличением размера зерна и насыщением границ зерен распад в объеме зерна постепенно будет доминировать над зернограницным распадом [46].

Установлено, что с увеличением концентрации Cu в сплаве атомы примеси заполняют сначала большеугловые ГЗ специального типа, а затем появляются сегрегации вблизи зернограницных дислокаций, образующих малоугловую границу, а также отдельные кластеры внутри зерна. Показано, что размер выделений существенно зависит от типа границ зерен. Мелкие выделения образуются вблизи малоугловых ГЗ, а более крупные выделения — вблизи ГЗ общего типа и тройных узлов. Все кластеры имеют ОЦК-решетку и когерентно связаны с матрицей. Средняя толщина сегрегационного слоя составляет 0.7 nm для ГЗ  $\Sigma 5$  и порядка 1.0 nm для ГЗ общего типа GT (рис. 6). Малая толщина сегрегационного слоя обусловлена небольшими значениями

сегрегационных энергий атомов Cu вблизи ГЗ (рис. 3) и малым деформационным вкладом в энергии различных конфигураций атомов Cu в ОЦК-матрице Fe.

Установленная при MC-моделировании зависимость размера зернограницных выделений от типа границ зерен может играть существенную роль в практических вопросах, касающихся прочностных и пластических свойств упрочненных выделениями сплавов Fe–Cu [47,48]. В частности, на большеугловых ГЗ выделения могут достигать критического размера раньше, чем в объеме зерен. Этот вопрос, однако, требует дальнейшего изучения. Таким образом, атомистическое MC-моделирование впервые продемонстрировало возможность распада бинарного сплава с образованием нановыделений вблизи границ зерен, размер и концентрационный состав которых зависят от типа границ зерен.

#### Список литературы

- [1] W.C. Leslie, E. Hornbogen. In: Physical metallurgy / Eds R.W. Cahn, P. Haasen. North Holland, N.Y. (1983). V. 2. P. 1555.
- [2] H.J. Kestenbach, S.S. Campos, E.V. Morales. Mater. Sci. Technol. **22**, 615 (2006).
- [3] D. Isheim, R.P. Kolli, M.E. Fine, D.N. Seidman. Scripta Mater. **55**, 35 (2006).
- [4] K.B. Kang, O. Kwon, W.B. Lee, C.G. Park. Scripta Mater. **36**, 1303 (1997).
- [5] S. Vaynman, R.S. Guico, M.E. Fine, S.J. Maganello. Met. Trans. A **28**, 1274 (1997).
- [6] S. Schmauder, P. Binkele. Comput. Mater. Sci. **24**, 42 (2002).
- [7] T. Harry, D.J. Bacon. Acta Mater. **50**, 195; 209 (2002).
- [8] S.R. Goodman, S.S. Brenner, J.R. Low. Met. Trans. **4**, 2371 (1973).
- [9] F. Maury, N. Lorenzelli, C.-H. de Novion, P. Lagarde. Scripta Met. Mater. **25**, 1839 (1991).
- [10] P.J. Othens, M.L. Jenkins, G.D.W. Smith. Phil. Mag. A **70**, 1 (1994).
- [11] A. Barby, T.N. Le, N. Lorenzelli, F. Maury, C.-H. de Novion. Ann. Chim. Fr. **16**, 333 (1991).
- [12] P. Auger, P. Pareige, M. Akamatsu, D. Blavette. J. Nucl. Mater. **225**, 225 (1995).
- [13] H.A. Hardouin Duparc, R.C. Dole, M.L. Jenkins, A. Bardu. Phil. Mag. Lett. **71**, 325 (1995).
- [14] A. Deschamps, M. Militzer, W.J. Poole. ISIJ Int. (Jpn) **41**, 196 (2001).
- [15] T. Nagano, M. Enomoto. Scripta Mater. **55**, 223 (2006).
- [16] T. Koyama, H. Onodera. Mater. Sci. Forum **539–543**, 2383 (2007).

- [17] K.Yu. Khromov, F. Soisson, A.Yu. Stroeve, V.G. Vaks. *ЖЭТФ* **112**, 414 (2011).
- [18] V.G. Vaks, F. Soisson, I.A. Zhuravlev. *Phil. Mag.* **93**, 3084 (2013).
- [19] F. Soisson, A. Barbu, G. Martin. *Acta Mater.* **44**, 3789 (1996).
- [20] N. Castin, M.I. Pascuet, L. Malerba. *J. Chem. Phys.* **135**, 064502 (2011)
- [21] J.Z. Liu, A. van de Walle, G. Ghosh, M. Asta. *Phys. Rev. B* **72**, 144109 (2005).
- [22] O.I. Gorbatov, I.K. Razumov, Yu.N. Gornostyrev, V.I. Razumovskiy, P.A. Korzhavyi, A.V. Ruban. *Phys. Rev. B* **88**, 174113 (2013).
- [23] I.N. Karkin, Yu.N. Gornostyrev, L.E. Karkina. *Rev. Adv. Mater. Sci.* **25**, 1 (2010).
- [24] Ю.Н. Горностырев, И.Н. Карькин, Л.Е. Карькина. *ФТТ* **53**, 1317 (2011).
- [25] B. Minov, D. Terentyev, W. Van Renterghem, Y. Osetsky, M.J. Konstantinovic. *Mater. Sci. Eng. A* **597**, 46 (2014).
- [26] Y. Mishin, M. Asta, J. Li. *Acta Mater.* **58**, 1117 (2010).
- [27] X. Xie, Y. Mishin. *Acta Mater.* **50**, 4303 (2002).
- [28] D. Terentyev, X. He, A. Serra, J. Kuriplach. *Comput. Mater. Sci.* **49**, 419 (2010).
- [29] M.A. Tschopp, M.F. Horstemeyer, F. Gao, X. Sun, M. Khaleel. *Scripta Mater.* **64**, 908 (2011).
- [30] M.A. Tschopp, K.N. Solanki, F. Gao, X. Sun, M.A. Khaleel, M.F. Horstemeyer. *Phys. Rev. B* **85**, 064108 (2012).
- [31] N.R. Rhodes, M.A. Tschopp, K.N. Solanki. *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.* **21**, 035009 (2013).
- [32] Y.-N. Wen, Y. Zhang, J.-M. Zhang, K.-W. Xu. *Comput. Mater. Sci.* **50**, 2087 (2011).
- [33] S.M. Teus, V.F. Mazanko, J.-M. Olive, V.G. Gavriljuk. *Acta Mater.* **69**, 105 (2014).
- [34] S. Ratanaphan, D.L. Olmsted, V.V. Bulatov, E.A. Holm, A.D. Rollett, G.S. Rohrer. *Acta Mater.* **88**, 346 (2015).
- [35] M. Yuasa, M. Mabuchi. *J. Phys.: Condens. Matter* **22**, 505705 (2010).
- [36] G.J. Ackland, D.J. Bacon, A.F. Calder, T. Harry. *Phil. Mag. A* **75** 713 (1997).
- [37] M. Ludwig, D. Farkas, D. Pedraza, S. Schmauder. *Modell. Simul. Mater. Sci. Eng.* **6**, 19 (1998).
- [38] G. Bonny, R.C. Pasianot, L. Malerba, N. Castin. *Phil. Mag.* **89**, 3531 (2009).
- [39] O.I. Gorbatov, Yu.N. Gornostyrev, A.H. Delandar, A.V. Ruban, P.A. Korzhavyi. *J. Nucl. Mater.* **475**, 140 (2016).
- [40] C. Domain, C.S. Becquart. *Phys. Rev. B* **65**, 024103 (2001).
- [41] D. Molnar, R. Mukherjee, A. Choudhury, A. Mora, P. Binkele, M. Selzer, B. Nestler, S. Schmauder. *Acta Mater.* **60**, 6961 (2012).
- [42] L.E. Karkina, I.N. Karkin, A.R. Kuznetsov, I.K. Razumov, P.A. Korzhavyi, Yu.N. Gornostyrev. *Comput. Mater. Sci.* **112**, 18 (2016).
- [43] I.N. Karkin, L.E. Karkina, A.R. Kuznetsov, M.V. Petrik, Yu.N. Gornostyrev, P.A. Korzhavyi. *Mater. Phys. Mech.* **24**, 201 (2015).
- [44] M.A. Tschopp, D.L. McDowell. *Phil. Mag.* **87**, 3871 (2007).
- [45] Applications of the Monte Carlo method in statistical physics / Ed. K. Binder. Springer, Berlin (1984). 311 p.
- [46] И.К. Разумов. *ЖФХ* **88**, 485 (2014).
- [47] M. Mujahid, A.K. Lis, C.I. Garcia, A.J. DeArdo. *J. Mater. Eng. Perform.* **7**, 247 (1998).
- [48] A. Ghosh, Samar das, S. Chatterjee. *Mater. Sci. Eng. A* **486**, 152 (2008).