

УДК 538.931

АТОМИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ САМОДИФФУЗИИ В ГРАНИЦАХ ЗЕРЕН НИКЕЛЯ

© 2024 г. М. Г. Уразалиев¹*, М. Е. Ступак¹, В. В. Попов¹

¹Федеральное государственное бюджетное учреждение науки

«Институт физики металлов имени М.Н. Михеева

Уральского отделения Российской академии наук», Екатеринбург, Россия

*E-mail: urazaliev@imp.uran.ru

Поступила в редакцию 02.05.2024

После доработки 13.05.2024

Принята к публикации 31.05.2024

Методами атомистического моделирования проведен расчет коэффициента самодиффузии для симметричных границ зерен наклона и для границ зерен общего типа в никеле. Специальные границы зерен наклона построены в модели бикристалла, а границы зерен общего типа — в модели нанокристалла. Коэффициент самодиффузии представлен в виде температурной зависимости. Определены значения энергии активации самодиффузии.

Ключевые слова: диффузия по границам зерен, нанокристалл, никель, коэффициент самодиффузии, моделирование молекулярной динамики

DOI: 10.31857/S0367676524090034, EDN: OELQKZ

ВВЕДЕНИЕ

Самодиффузия в поликристаллических металлических материалах протекает наиболее быстро по границам зерен (ГЗ), дислокациям и другим внутренним поверхностям раздела. Среди путей ускоренной диффузии наибольший интерес представляет диффузия по границам зерен, так как она напрямую связана с такими процессами, как ползучесть, рост зерна, рекристаллизация, сверхпластичность и спекание.

Хотя в настоящее время можно исследовать атомные структуры некоторых ГЗ с использованием современных методов, таких как просвечивающая электронная микроскопия высокого разрешения, прямое экспериментальное наблюдение диффузии по ГЗ в атомном масштабе чрезвычайно сложно. Моделирование процессов зернограничной самодиффузии дополняет экспериментальные исследования диффузии в ГЗ и делает возможным построение физической теории зернограничной диффузии.

Моделирование в теоретических исследованиях диффузии наиболее часто основано на континуальном методе исследования [1, 2], который по-прежнему актуален при рассмотрении системы границ зерен на больших масштабах, недоступных пока компьютерному атомистическому моделированию методом молекулярной динамики.

В континуальном приближении атомы отсутствуют, а среда является некоторой непрерывной субстанцией. В последние десятилетия прогресс в области вычислительной техники сделал возможным проводить диффузионные расчеты методом молекулярной динамики и получать удовлетворительную статистику на основе атомистических моделей.

Ряд исследований выявил сильную зависимость самодиффузии по ГЗ от характера ГЗ (например, малоугловые, высокоугловые, двойниковые, специальные, общего типа) [1–5]. Поэтому представляет интерес исследование самодиффузии по границам различных типов.

Моделирование зернограничной диффузии в модели бикристалла в ГЦК металлах для специальных ГЗ было проведено в ряде работ [6–15]. Во всех этих работах показано, что аналогично объемной диффузии, зернограничная диффузия контролируется преимущественно миграцией точечных дефектов. Кроме того, в работе [6] показано, что коэффициенты диффузии в специальных ГЗ с разным углом разориентации могут отличаться на несколько порядков.

Работы, в которых бы моделировалась зернограничная самодиффузия в никеле, почти отсутствуют в литературе, и только в работе [10] выполнено моделирование зернограничной диффузии в никеле для симметричной ГЗ и ассиметричных ГЗ наклона $\Sigma 5(310)$.

Для исследования зернограничной диффузии в поликристалле, содержащем набор различных типов границ зерен (преимущественно границ общего типа), подходит так называемая модель нанокристалла, то есть поликристалла со средним размером зерен порядка 10 нм со случайной ориентацией кристаллитов. Использование модели нанокристалла в атомистическом моделировании выгодно в вычислительном отношении.

Работы по исследованию самодиффузии в нанокристаллах железа и меди методом молекулярной динамики проводились в работах [16–18]. Эти работы в основном посвящены влиянию среднего размера зерна на зернограничную диффузию, и показано, что размерный эффект не имеет значительного влияния на зернограничную диффузию, особенно начиная со среднего размера зерна ~6 нм.

В дополнение к существующим работам по моделированию [16–18] имеется работа по экспериментальному исследованию самодиффузии в нанокристаллическом никеле [19].

Основная цель настоящей работы заключается в исследовании самодиффузии в границах зерен никеля на основе атомистических моделей нанокристалла (НК) и бикристалла.

Задачами работы являются расчет структуры и энергии ГЗ, энергии образования вакансий и коэффициента самодиффузии в бикристалле никеля на примере специальных ГЗ наклона $\langle 110 \rangle$: $\Sigma 9(114)$, $\theta = 38.942^\circ$; $\Sigma 11(113)$, $\theta = 50.479^\circ$; $\Sigma 3(111)$, $\theta = 109.471^\circ$; $\Sigma 11(332)$, $\theta = 129.521^\circ$ и $\Sigma 9(221)$, $\theta = 141.058^\circ$, а также построение нанокристалла никеля с границами зерен со случайной разориентацией и расчет коэффициента самодиффузии в нем.

При исследовании самодиффузии в бикристалле предполагался вакансионный механизм самодиффузии. Эта модель не может использоваться при слишком высоких температурах, при которых ГЗ становятся сильно разупорядоченными и понятие точечных дефектов может потерять смысл [20]. Таким образом, наши расчеты относятся к диффузии при относительно низких и средних температурах, при которых ГЗ имеют хорошо определенную упорядоченную структуру. При исследовании самодиффузии в нанокристалле предполагался механизм самодиффузии посредством сильно делокализованных вакансий, который также называется механизмом избыточного свободного объема [21]. Результаты моделирования сравниваются с имеющимися экспериментальными результатами.

МЕТОДЫ

Расчеты проводились с использованием программы LAMMPS [22]. В качестве визуализатора для анализа структур использовалась программа OVITO [23]. В простом случае вполне можно

использовать потенциалы Морзе [24], однако в нашем случае для расчетов использовался потенциал погруженного атома для никеля [25]. Выбор этого потенциала обусловлен тем, что рассчитанные период решетки, значения упругих модулей, энергии когезии и энергии образования вакансий достаточно близки к экспериментальным значениям, как показано в [26].

Для нахождения конфигурации соответствующей минимальной энергии использовался так называемый метод молекулярно-статического моделирования.

При моделировании бикристалла система содержала два блока, моделирующих зерна. Для каждого блока использовались периодические граничные условия по всем трем направлениям. Структуру и энергию ГЗ для каждой взаимной ориентировки блоков получали для различных начальных конфигураций в результате поиска локального минимума энергии методом сопряженных градиентов [27]. В дальнейшем анализировали структуру, соответствующую глобальному минимуму энергии. Схема трехмерного периодического расчетного блока моделирования, содержащего бикристалл, и поиск ГЗ с минимальной энергией образования подобны используемым в работе [28].

Энергию ГЗ, E_{gb} , рассчитывали с помощью выражения:

$$E_{gb} = \frac{E_p - N_{\text{atom}} E_{\text{coh}}}{2S}, \quad (1)$$

где E_p — полная потенциальная энергия бикристалла после минимизации энергии, N_{atom} — число атомов в системе, E_{coh} — энергия когезии (энергия связи, приходящаяся на один атом решетки идеального кристалла), S — площадь ГЗ. Наличие двух границ учитывает удвоенная площадь S в знаменателе.

В работе были рассчитаны энергии образования вакансий в разных позициях в исследуемых ГЗ и на разном расстоянии от плоскости границы.

Энергию образования вакансий рассчитывали по формуле:

$$E_v = E_f - (N_0 - 1) \frac{E_i}{N_0}. \quad (2)$$

Здесь E_i — начальная энергия системы до удаления атома, N_0 — общее число атомов, E_f — энергия системы после удаления атома. Член E_i/N_0 — энергия, приходящаяся на один атом.

Энергия образования вакансии определялась как энергия, необходимая для удаления атома из позиции в ГЗ и создания его бесконечно далеко от ГЗ. Для расчета коэффициента диффузии применялся метод прямой молекулярной динамики. Использовался изотермоизобарический ансамбль (NPT). Изменение температуры контролировалось при помощи термостата Нозе–Гувера [29, 30].

Чтобы избежать миграции ГЗ, использовали фиксированные условия на границах моделируемого блока, которые реализовывались путем отключения термостата в атомах на краях блока моделирования, находящихся в области шириной около 0.5 нм.

Коэффициент самодиффузии рассчитывали на основании среднего квадратичного смещения в диапазоне температур от 850 К до 1200 К. Предварительно границу отжигали в течение 0.5 нс. Время моделирования самодиффузии составляло 5 нс для бикристалла и 1 нс для нанокристалла.

Нанокристалл построен на основе алгоритма Вороного в программе ATOMSK [31]. Зерна в нанокристалле разориентированы случайным образом, средний размер зерна составляет 8 нм. Блок моделирования содержит 7334 89 атомов никеля. Использовали периодические граничные условия во всех направлениях. Полученную модель нанокристалла нагревали, подвергали выдержке при постоянной температуре (отжигу) и охлаждали подобно тому, как это делалось в работе [32].

Расчет самодиффузии по специальным ГЗ в бикристалле проводили в плоскости границ зерен в двух направлениях: в направлении оси наклона (направление z) и перпендикулярно ей (направление x). На основании исследований энергий образований точечных дефектов в различных материалах, выполненных в работах [33, 34], ширину ГЗ полагали равной ~ 1.5 нм.

Коэффициенты зернограничной самодиффузии D_x , D_z , в направлениях перпендикулярном и параллельном оси наклона, рассчитывались на основании среднего квадратичного смещения атомов в ГЗ по формулам:

$$D_x = \frac{\langle x_i^2(t) \rangle}{2t} \cdot \frac{n}{N}, D_z = \frac{\langle z_i^2(t) \rangle}{2t} \cdot \frac{n}{N}, \quad (3)$$

где $\langle x_i^2(t) \rangle$ и $\langle z_i^2(t) \rangle$ – среднее квадратичное смещений атомов в соответствующих направлениях вдоль зернограничной плоскости за время t , n – количество атомов в ГЗ в блоке моделирования, N – число атомов, приходящихся на 1 вакансию в условиях равновесия. Множитель n/N добавлен, чтобы учесть, что количество атомов в ГЗ в блоке моделирования отличается от количества атомов, приходящихся на 1 вакансию. Предварительно в ГЗ создавалась 1 вакансия в позиции с минимальной энергией образования.

Количество атомов, приходящихся на 1 вакансию, рассчитывалось как величина обратная равновесной концентрации вакансий, C_v :

$$N = \frac{1}{C_v}. \quad (4)$$

При расчете равновесной концентрации вакансий мы предполагали, что в реальном материале вакансий с минимальной энергией образования подавляющее большинство. С учетом этого

равновесная концентрация вакансий рассчитывалась по формуле:

$$C_v = \exp\left(-\frac{E_{vmin}}{kT}\right), \quad (5)$$

где E_{vmin} – минимальная энергия образования вакансии в границе зерна, T – абсолютная температура.

Эффективный коэффициент самодиффузии в нанокристалле рассчитывали по следующей формуле:

$$D_{eff} = \frac{\langle r_i^2 \rangle}{6t}, \quad (6)$$

где $\langle r_i^2 \rangle$ – среднее квадратичное смещение, t – время моделирования.

Согласно уравнению Максвелла–Гарнетта, эффективный коэффициент самодиффузии равен [35]

$$D_{eff}(d) = \frac{D_{gb}[2gD_{gb} + (3 - 2g)D_l]}{(3 - g)D_{gb} + gD_l}, \quad (7)$$

где D_{gb} – коэффициент зернограничной диффузии, D_l – коэффициент объемной диффузии, g – доля междолинных атомов.

С учетом того, что $D_{gb} \gg D_l$, выражение (7) приводится к виду:

$$D_{eff}(d) \approx \frac{2g}{3 - g} D_{gb} = \frac{2\delta}{d - \delta} D_{gb}. \quad (8)$$

Поскольку в случае поликристалла с условно одинаковыми кубическими зернами $g = \frac{3\delta}{d}$, выражение (8) может быть преобразовано к виду [36]:

$$D_{eff}(d) = \frac{2\delta}{d - \delta} D_{gb}, \quad (8a),$$

откуда следует, что

$$D_{gb} = \frac{D_{eff}(d - \delta)}{2\delta}, \quad (9)$$

где d – средний размер зерна, δ – ширина зернограничной области.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Пример блока моделирования представлен на рис. 1. Структура исследованных границ зерен в модели бикристалла представлена на рис. 2. ГЗ с осью $[1\bar{1}0]$ в бикристалле подвергались МД отжигу для того, чтобы проверить термическую устойчивость при конечных температурах, при которых структура ГЗ не разрушается. В ходе этой процедуры выявлено, что все рассматриваемые ГЗ устойчивы до 1200 К в течение всего времени моделирования. В табл. 1 приведены параметры рассматриваемых в настоящей работе ГЗ.

Так как в НК представлены в основном ГЗ общего типа с относительно несовершенной структурой с разной разориентацией, а объемная доля ГЗ

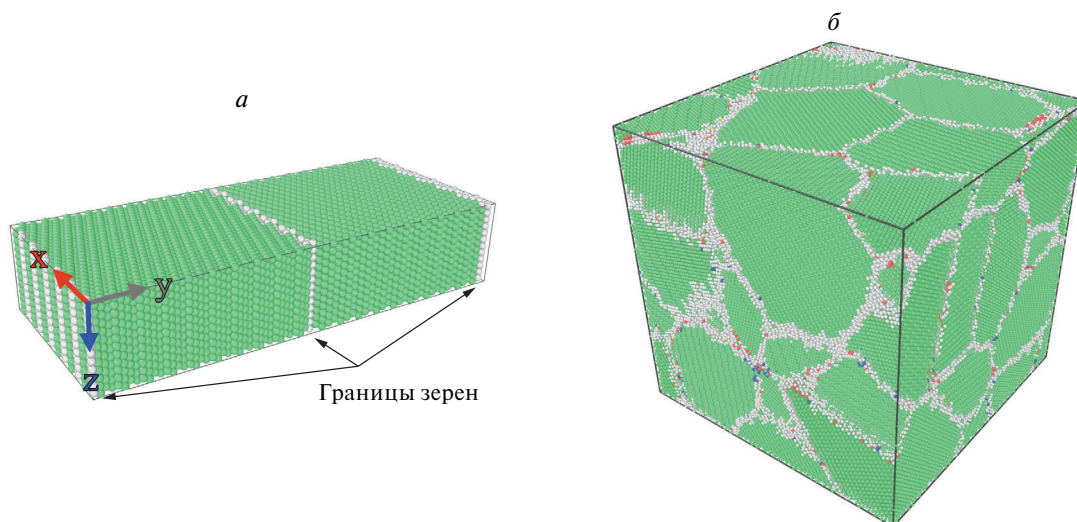


Рис. 1. Модель бикристалла (а) и нанокристалла (б) никеля, используемая в настоящей работе, визуализированная с помощью анализатора структуры CNA [37] в программе OVITO. Зеленым цветом обозначена ГЦК решетка атомов никеля, синим и красным – ОЦК и ГПУ соответственно. Серым цветом обозначены остальные атомы (зернограничная сетка).

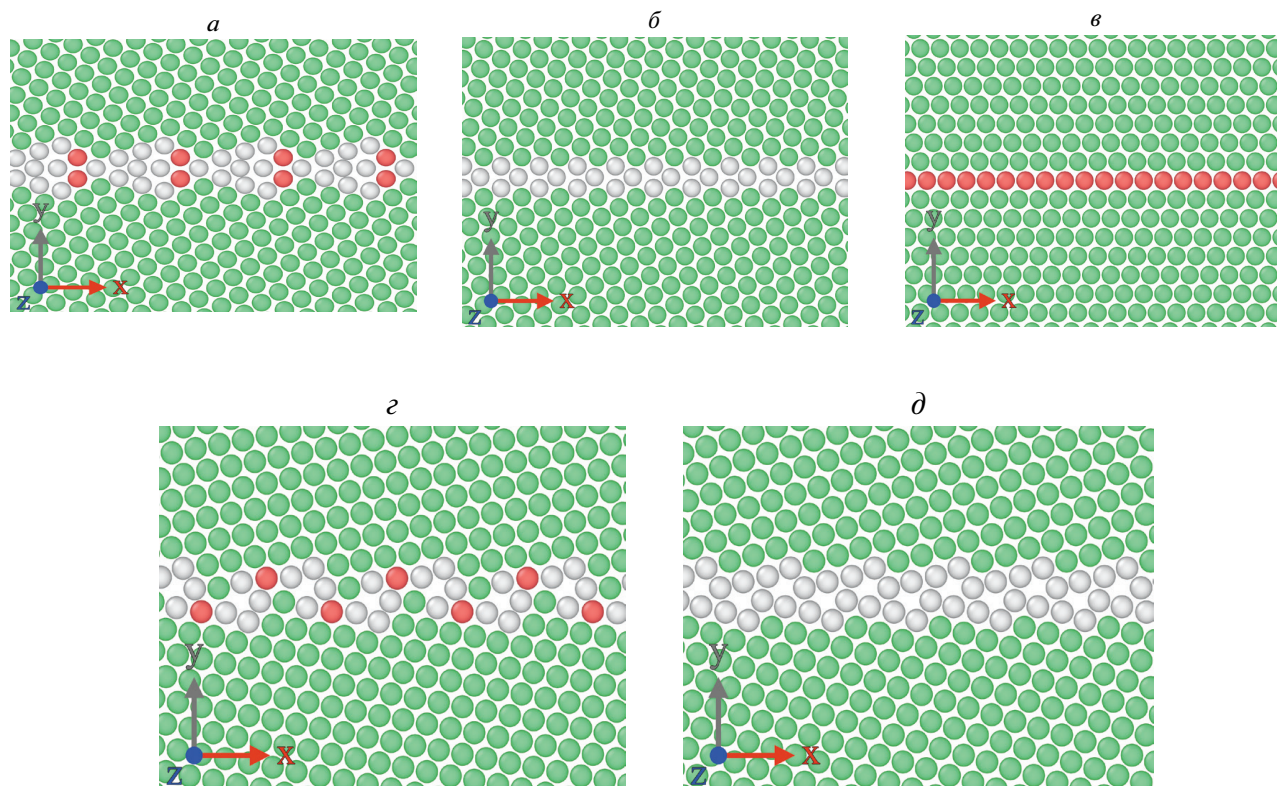


Рис. 2. Структура исследуемых в настоящей работе ГЗ: $\Sigma 9(114)$ (а), $\Sigma 11(113)$ (б), $\Sigma 3(111)$ (в), $\Sigma 11(332)$ (г), $\Sigma 9(221)$ (д). Структура визуализирована с помощью анализатора структуры CNA [37] в программе OVITO. Зеленым цветом обозначена ГЦК решетка атомов никеля, синим и красным – ОЦК и ГПУ соответственно. Серым цветом обозначены остальные атомы (зернограничная сетка), красным – решетка ГПУ.

Таблица 1. Параметры исследуемых ГЗ, количество атомов в блоке моделирования: энергия ГЗ ($E_{ГЗ}$), энергия активации самодиффузии (Q) по направлению вдоль ($\parallel$) и перпендикулярно ($\perp$) оси наклона ГЗ, минимальная энергия образования вакансии (E_{vac}).

Σ	Θ	Плоскость	Кол-во атомов	$E_{ГЗ}$, мДж/м ²	E_{vac} , эВ	Q , эВ/атом	
						$\perp$	$\parallel$
9	38.94	(114)	260 64	970	1.14	1.48	1.78
11	50.48	(113)	253 44	469	1.3	1.69	1.93
3	109.5	(111)	201 60	68	1.6	2.28	2.73
11	129.52	(332)	254 88	1058	0.8	2.35	2.07
9	141.06	(221)	207 36	1277	0.91	2.29	2.01

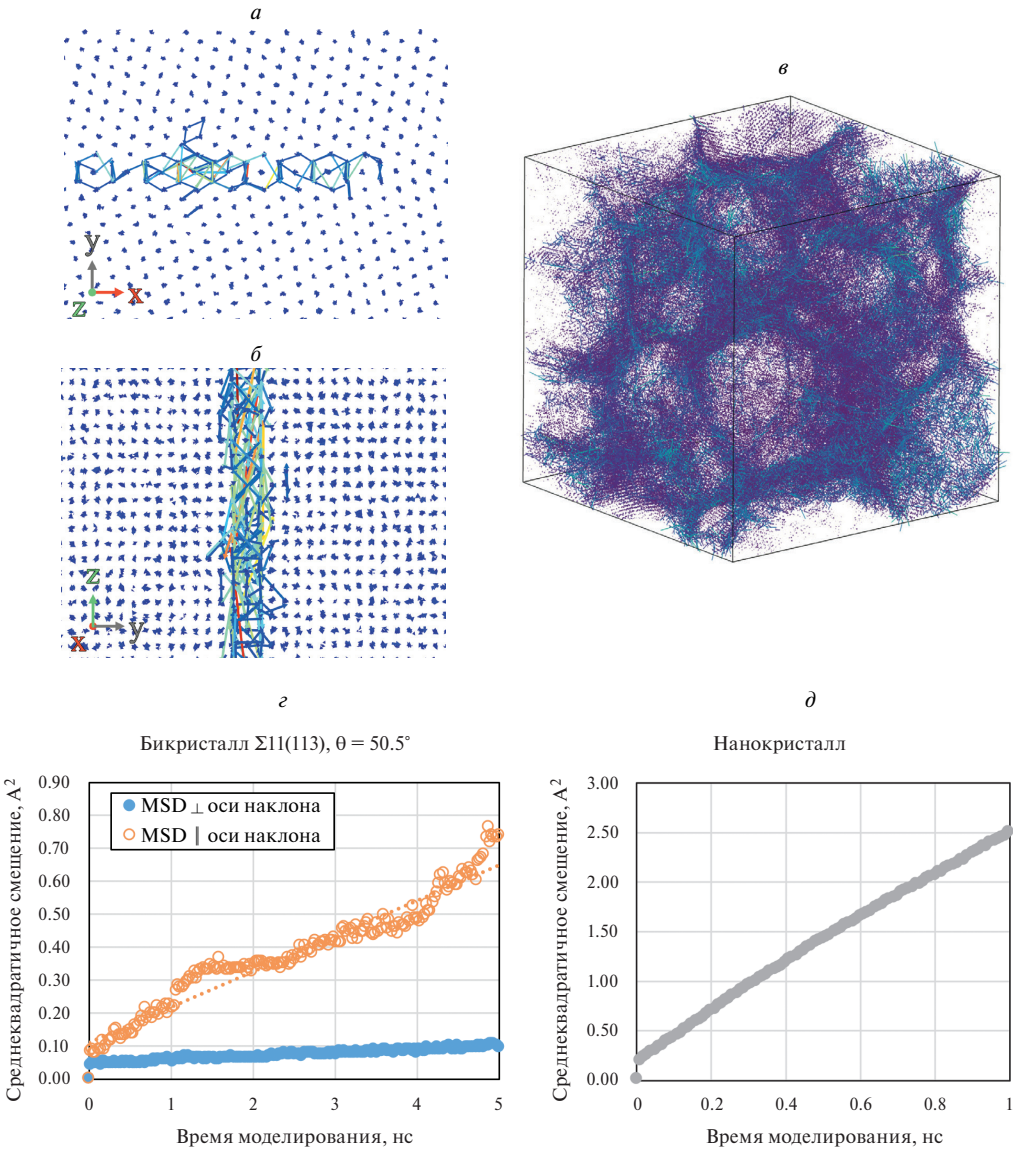


Рис. 3. Пример траектории смещения атомов при температуре 1100К в ГЗ $\Sigma 11(113)$ с разных ракурсов (а, б), в нанокристалле (в) и график зависимости среднеквадратичного смещения (г, д) для бикристалла и нанокристалла соответственно. Смещения визуализированы с помощью модификатора Displacement vector в программе OVITO.

относительно велика, при моделировании диффузии в модели НК нет необходимости искусственно создавать вакансии. Вместо этого все дефекты, посредством которых осуществляется самодиффузия, возникают самостоятельно при проведении МД моделирования.

Расчет самодиффузии проводился для температур в диапазоне от 850 К до 1200 К. Пример траектории смещения атомов и значение среднеквадратичного смещения для температуры 1100 К (для бикристалла и нанокристалла) приведены на рис. 3. Температурные зависимости рассчитанных коэффициентов зернограничной самодиффузии представлены на рис. 4.

Представленные температурные зависимости коэффициента диффузии (рис. 4) свидетельствуют о более быстрой диффузии в нанокристалле (+), чем в специальных границах. Энергия активации самодиффузии по ГЗ в нанокристалле была значительно меньше (0.56 эВ/атом), чем энергии активации самодиффузии по специальным ГЗ наклона (1.48–2.32 эВ/атом). Различие между диффузией в бикристалле и нанокристалле может объясняться наличием в нанокристалле большой объемной доли тройных стыков.

Кроме того, механизм диффузии в каждом случае различный. Самодиффузия в специальных ГЗ протекает по вакансионному механизму. Самодиффузия в нанокристалле, по-видимому, протекает по другому механизму. В работе [16] было впервые высказано предположение о возможности

реализации самодиффузии в нанокристалле по механизму избыточного свободного объема. Наличие избыточного свободного объема в ГЗ нанокристалла связано с наличием небольших свободных областей. Именно посредством этих областей, по-видимому, и осуществляется самодиффузия.

В ходе нашего исследования сделана попытка сравнить самодиффузию, протекающую по вакансионному механизму, с самодиффузией по механизму избыточного свободного объема.

Следует отметить особенности самодиффузии в двойниковой ГЗ $\Sigma 3(111)$ с углом разориентации 109.5° . Диффузия в данной границе проходит медленнее всего. Минимальная энергия образования вакансий в данной ГЗ имеет значения близкие к энергии образования вакансии в объеме. Вакансиям менее выгодно образовываться в ГЗ $\Sigma 3(109.5)$, чем в других исследуемых ГЗ наклона, поэтому коэффициент самодиффузии в ГЗ $\Sigma 3(111)$ меньше, а энергия активации самодиффузии выше, чем в других ГЗ. Энергия двойниковых ГЗ минимальна относительно других ГЗ наклона. Двойниковая ГЗ обладает зеркальной симметрией. Вследствие этого ярко выраженная зернограничная область с отличной структурой в ней отсутствует. Имеется лишь атомная плоскость (рис. 2в), совпадающая с зернограничной кристаллографической плоскостью (111).

Энергия активации самодиффузии в симметричных ГЗ в модели бикристалла соответствуют диапазону значений 1.48–2.32 эВ/атом. Экспериментальное исследование самодиффузии никеля

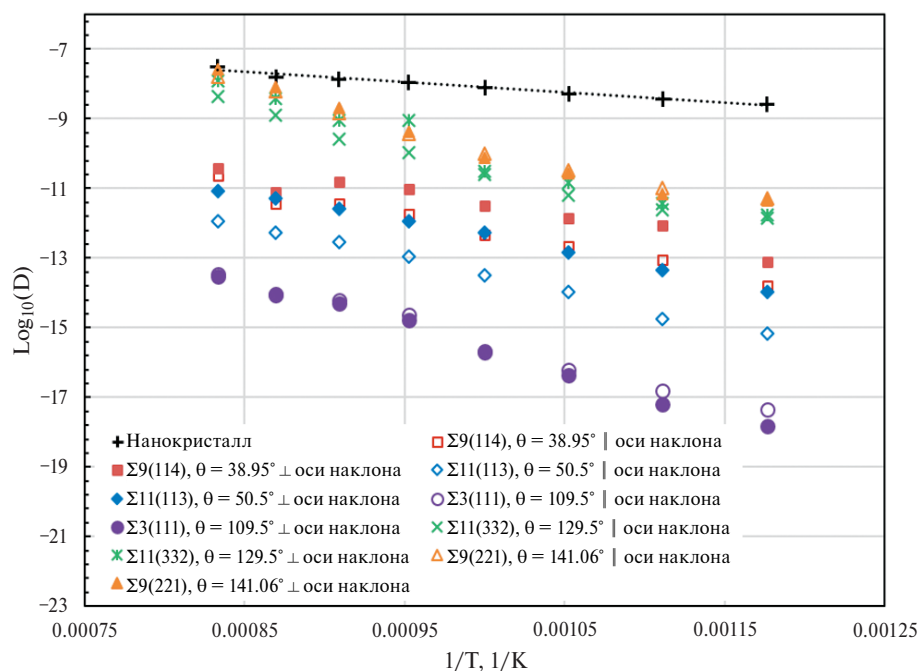


Рис. 4. Температурная зависимость коэффициента самодиффузии в исследуемых в настоящей работе ГЗ никеля.

в специальных границах зерен наклона дает среднее значение энергии активации 1.74 эВ/атом [39], что лежит в диапазоне значений, полученных в настоящей работе.

Экспериментальное исследование зернограницной самодиффузии в нанокристаллическом никеле было выполнено в работе [19], и было показано, что энергия активации зернограницной диффузии в нанокристаллическом никеле (0.48 эВ/атом) значительно меньше энергии активации зернограницной самодиффузии в крупнозернистом поликристалле никеля (1.03 эВ/атом [40]).

Энергия активации зернограницной диффузии в нанокристалле никеля, определенная в настоящем исследовании на основании результатов моделирования, составляет 0.56 эВ/атом. Это также много меньше энергии активации зернограницной диффузии в крупнозернистом поликристаллическом никеле и удовлетворительно согласуется с экспериментальным значением, полученным в работе [19], особенно с учетом того, что в этой работе исследовался никель со значительно большим размером зерен (~ 70 нм), чем тот, для которого проводилось моделирование (~ 8 нм).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Методами компьютерного моделирования выполнен расчет структуры и энергии ГЗ и энергии образования вакансий в пяти симметричных границах наклона $\langle 110 \rangle$ в Ni. Показано, что наиболее совершенную структуру и наименьшую энергию имеет двойниковая граница $\Sigma 3(111)[1\bar{1}0]$. Эта ГЗ имеет наибольшую минимальную энергию образования вакансии по сравнению с другими ГЗ.

Выполнено моделирование самодиффузии в исследуемых специальных ГЗ и построены температурные зависимости коэффициентов зернограницной самодиффузии, на основании которых определены энергии активации. Показано, что диффузия наиболее медленно протекает в двойниковой ГЗ. Энергия активации самодиффузии для этой ГЗ наибольшая.

Показано, что имеющееся в литературе экспериментальное значение энергии активации самодиффузии по специальным ГЗ наклона лежит в диапазоне значений, полученных в настоящей работе.

Построен нанокристалл никеля с границами зерен со случайной ориентацией. Показано, что самодиффузия по ГЗ в нанокристалле протекает более интенсивно по сравнению со специальными симметричными ГЗ наклона. В качестве возможных причин этого можно предполагать большую объемную долю тройных стыков в нанокристалле, а также различие механизмов диффузии: в специальных ГЗ наклона диффузия протекает исключительно по вакансионному механизму, а в ГЗ в нанокристалле, по-видимому, реализуется механизм

избыточного свободного объема, что проиллюстрировано в дополнительных материалах в [41,42].

Сравнение рассчитанной энергии активации зернограницной диффузии в нанокристалле удовлетворительно согласуется с экспериментальным значением.

Работа выполнена в рамках темы государственного задания Минобрнауки России «Функция», номер госрегистрации 122021000035-6. При проведении работ был использован суперкомпьютер «Уран» ИММ УрО РАН.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Кульков В.Г. // Изв. РАН. Сер. физ. 2020. Т. 84. № 9. С. 1232; Kul'kov V.G. // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2020. V. 84. No. 9. P. 1043.
2. Звягинцева А.В. // Изв. РАН. Сер. физ. 2020. Т. 84. № 9. С. 1290; Zvyginceva A.V. // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2020. V. 84. No. 9. P. 1097.
3. Mishin Y., Herzig C. // Mater. Sci. Eng. A. 1999. V. 260. P. 55.
4. Kaur I., Mishin Y., Gust W. Fundamentals of grain and interphase boundary diffusion. John Wiley, 1995. 5536 p.
5. Budke E., Herzig C., Prokofjev S., Shvindlerman L.S. // Mater. Sci. Forum. 1996. V. 207. P. 465.
6. Suzuki A., Mishin Y. // Interface Sci. 2003. V. 11. P. 131.
7. Nomura M., Adams J.B. // J. Mater. Res. 1992. V. 7. P. 3202.
8. Koblinski P., Wolf D., Phillpot S.R., Gleiter H. // Philos. Mag. A. 1999. V. 79. P. 2735.
9. Sorensen M.R., Mishin Y., Voter A.F. // Phys. Rev. B. 2000. V. 62. No. 6. P. 3658.
10. Mendelev M.I., Zhang H., Srolovitz D.J. // J. Mater. Res. 2005. V. 20. P. 1146.
11. Mishin Y., Asta M., Li J. // Acta Mater. 2010. V. 58. P. 1117.
12. Bai X.M., Voter A.F., Hoagland R.G. et al. // Science. 2010. V. 327. P. 1631.
13. Bai X.M., Vernon L.J., Hoagland R.G. et al. // Phys. Rev. B. 2012. V. 85. P. 214103.
14. Uberuaga B.P., Vernon L.J., Martinez E., Voter A.F. // Sci. Reports. 2015. V. 5. No. 1. P. 9095.
15. Mohammadzadeh R., Mohammadzadeh M. // J. Appl. Phys. 2018. V. 124. Art. No. 035102.
16. Wang Y.J., Gao G.J.J., Ogata S. // Phys Rev. B. 2013. V. 88. Art. No. 115413.
17. Mohammadzadeh M., Mohammadzadeh R. // Comput. Mater. Sci. 2017. V. 129. P. 239.
18. Mohammadzadeh R. // J. Appl. Phys. 2019. V. 125. No. 13. P. 135103.
19. Bokstein B.S. // NSMs. 1995. V. 6. P. 873.

20. Yamakov P.V., Wolf D., Phillpot S.R., Gleiter H. // *Acta Mater.* 2002. V. 50. No. 1. P. 61.
21. Shvindlerman L.S., Gottstein G., Ivanov V.A. et al. // *J. Mater. Sci.* 2006. V. 41. P. 7725.
22. Plimpton S. // *J. Comput. Phys.* 1995. V. 117. No. 1. P. 1.
23. Stukowski A. // *Mater. Sci. Eng.* 2010. V. 18. Art. No. 015012.
24. Семенов М.Ю., Королев И.П., Арестов В. // *Изв. РАН. Сер. физ.* 2021. Т. 85. № 7. С. 948; *Semenov M.Yu., Korolev I.P., Arestov V.* // *Bull. Russ. Acad. Sci. Phys.* 2021. V. 85. No. 7. P. 728.
25. Stoller R.E., Tamm A., Béland L.K. et al. // *J. Chem. Theory Comput.* 2016. V. 12. No. 6. P. 2871.
26. Уразалиев М.Г., Ступак М.Е., Попов В.В. // *Физ. металл. металловед.* 2021. Т. 122. С. 713; *Urazaliev M.G., Stupak M.E., Popov V.V.* // *Phys. Metals. Metallogr.* 2021. V. 122. P. 665.
27. Polyak B.T. // *USSR Comput. Math. Math. Phys.* 1969. V. 9. No. 4. P. 94.
28. Tschopp M.A., Solanki K.N., Gao F. et al. // *Phys. Rev. B.* 2012. V. 85. Art. No. 064108.
29. Nosé S. // *J. Chem. Phys.* 1984. V. 81. No. 1. P. 511.
30. Hoover W.G., Holian B.L. // *Phys. Lett. Sect. A.* 1996. V. 211. P. 253.
31. Hirel P. // *Comput. Phys. Comm.* 2015. V. 197. P. 212.
32. Wagih M., Schuh C.A. // *Scripta Mater.* 2023. V. 237. Art. No. 115716.
33. Starikov S., Mrovec M., Drautz R. // *Acta Mater.* 2020. V.188. P. 560.
34. Frolov T., Olmsted D., Asta M. et al. // *Nature Commun.* 2013. V. 4. No. 1. Art. No. 1899.
35. Maxwell-Garnett J.C., Larmor J.Xii // *Philos. Trans. Royal Soc. Lond. A. Contain. Pap. Math. Phys. Char.* 1904. V. 203. No. 359–371. P. 385.
36. Hart E.W. // *Acta Metallurg.* 1957. V. 5. No. 10. P. 597.
37. Faken D., Jónsson H. // *Comput. Mater. Sci.* 1994. V. 2. No. 2. P. 279.
38. Fultz B., Frase H. // *Hyperfine Interact.* 2000. V. 130. P. 81.
39. Canon R.F., Stark J.P. // *J. Appl. Phys.* 1969. V. 40. No. 11. P. 4366.
40. Бокштейн С.З., Кишкин С.Т., Мишин Ю.М., Разумовский И.М. // *Докл. АН СССР.* 1985. Т. 280. № 5. С. 1125.
41. https://drive.google.com/drive/folders/117hFltef46fj3GGeHexiGVwocHSHv4J-?usp=drive_link
42. <http://dx.doi.org/10.13140/RG.2.2.23789.60641>

Atomistic simulation of self-diffusion in nickel grain boundaries

M. G. Urazaliev^{1,*}, M. E. Stupak¹, B. B. Popov¹

¹*M.N. Mikheev Institute of Metal Physics of the Ural Branch
of the Russian Academy of Sciences, Ekaterinburg, 620108, Russia*

**e-mail: urazaliev@imp.uran.ru*

The self-diffusion coefficient for symmetrical tilt boundaries and for the general type of grain boundaries in nickel has been calculated by atomistic simulation methods. The special tilt grain boundaries have been simulated in the bicrystal model, and the general type of grain boundaries in the nanocrystal model. The self-diffusion coefficient is presented as a temperature dependence. The activation energies of self-diffusion have been determined.

Keywords: grain boundary diffusion, nanocrystal, nickel, self-diffusion coefficient, molecular dynamics simulation