

АТОМНАЯ КОНФИГУРАЦИЯ СПЕЦИАЛЬНЫХ ГРАНИЦ ЗЕРЕН В ГЦК РЕШЕТКАХ МЕДИ И НИКЕЛЯ

М.Д. Старостенков., Е.Г. Харина*, Р.Ю. Ракитин

Алтайский государственный технический университет, Барнаул, Россия

*Кузбасская государственная педагогическая академия, Новокузнецк, Россия

Введение

Физико-химические свойства поликристаллических материалов в значительной степени отличаются от монокристаллов. Эти различия обусловлены наличием границ зерен, играющих важную роль в физических процессах, которые прямо или косвенно связаны со свободной энергией границ зерен [1]. Соответственно границы зерен являются одним из важнейших дефектов кристаллов.

В настоящее время активно ведется изучение структуры и свойств границ зерен. В связи с тем, что на сегодняшний день имеется далеко не полное представление об атомной структуре ГЗ и их влиянии на физико-механические свойства поликристаллов, изучение ГЗ остается актуальной проблемой. Даже при помощи современной высокоразрешающей электронной микроскопии не удается получить необходимую точность в исследовании ГЗ на атомном уровне, поэтому важное значение приобретают теоретические модели. В последние годы для изучения атомной структуры и других свойств дефектов широко используется компьютерное моделирование, так как оно позволяет выявлять закономерности недоступные экспериментальной дефектоскопии [2]. В частности из методов компьютерного моделирования используются методы вариационной квазистатики и молекулярной динамики.

Границы зерен могут возникать в материалах при деформации, рекристаллизационном отжиге, кристаллизации и влиять на такие важные процессы как пластичность, диффузия, рекристаллизация, разрушение, упрочнение и т.д. Поэтому несомненно, что изучение свойств ГЗ необходимо для управления этими процессами. А также представление о ГЗ как о наноструктурной прослойке (ширина порядка 10 нм) в объемном материале и ее детальное изучение, позволяет глубже проникнуть в суть строения и процессов, протекающих в наноматериалах. Вблизи ГЗ диффузионный процесс протекает гораздо интенсивнее, чем в объеме зерна. Однако до настоящего времени нет однозначных представлений о механизмах реализующих зернограничную диффузию.

Ранее в [3, 4] атомная конфигурация границ зерна наклона исследовалась в упорядоченных сплавах с использованием метода вариационной квазистатики. Было показано, что состояние решетки в металлах и сплавах, характеризуется сложными трехмерными смещениями атомов. Смещения имели сдвиговую и нормальную составляющие. Характерной особенностью атомных смещений является их осциллирующая зависимость расстояния до дефекта. В [5] методом молекулярной динамики исследовалась атомная структура и механизмы диффузии в трехмерных металлах Ni, Al, Cu вблизи асимметричных ГЗ с осями наклона вдоль направлений $\langle 111 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$, а в [6] аналогичные исследования проводились для симметричных границ зерен в трехмерном Ni в направлении $\langle 111 \rangle$. В структуре ГЗ явно прослеживались зернограничные дислокации (ЗГД). На графике зависимости логарифма коэффициента диффузии от обратной температуры наблюдался излом, что является отклонением от закона Аррениуса. Невыполнение закона Аррениуса объясняется наличием нескольких механизмов диффузии.

В данной работе исследуется атомная конфигурация и процессы диффузии имеющие место в ГЦК-решетках чистых Cu и Ni вблизи симметричной ГЗ наклона ориентированной в направлении $\langle 111 \rangle$.

1. Модель эксперимента

Граница зерна создавалась, подобно методике [6], путем поворота структурных блоков зерен (для Ni и Cu) на угол $\alpha = 7^\circ$. В применяемой модели вводится декартова система координат: ось x направлена перпендикулярно плоскости межзеренной границы вглубь ГЗ, ось y – направлена вдоль границы зерна, перпендикулярно оси наклона, ось z – вдоль оси наклона. Заходящие за линию границы зерна атомы удалялись (рис. 1, а). Затем удалялись также атомы, которые находились ближе, чем $0,7r_1$ (r_1 – радиус первой координационной сферы), удаление происходило из левого зерна, что равносильно удалению из правого зерна.

Структура такой границы показана на рис. 1, б. По завершении конструирования структуры бикристалла с ГЗ в центре из него вырезался блок в виде прямоугольного параллелепипеда. К границам расчетного блока накладывались жесткие граничные условия вдоль направлений x и y , и периодические –

вдоль z . В завершении выполнялась процедура динамической релаксации в течение 10 пс компьютерного времени, с последующем охлаждением бикристалла до 0 К. Полученная картина структуры ГЗ приводится на рис. 1, в. Этапы конструирования и рисунки для меди аналогичны рисункам для никеля.

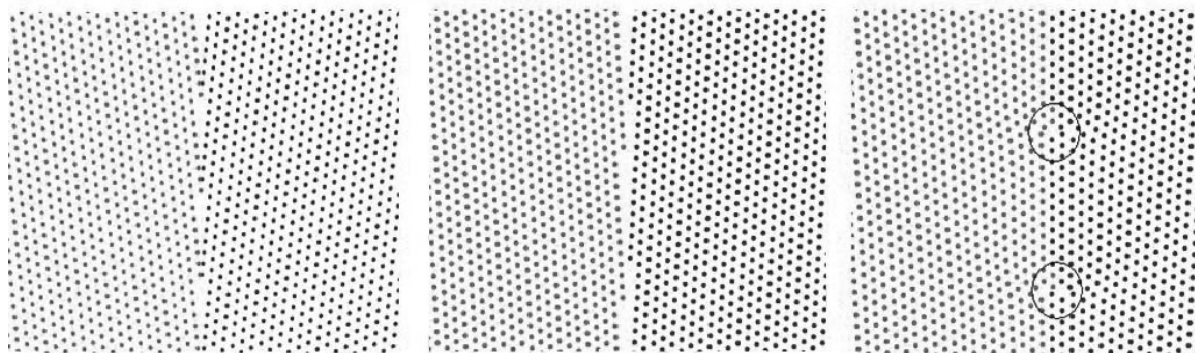


Рисунок 1 - Этапы конструирования ГЗ для угла 7° . а) стартовый, б) после удаления, в) после процедуры первичной релаксации

Созданные по такой процедуре расчетные блоки применялись как стартовые в последующих экспериментах. Задавалась определенная температура, включался метод молекулярной динамики, система выдерживалась при данной температуре в течение 70 пс компьютерного времени. Затем для исключения тепловых смещений атомов прово-

дилась процедура охлаждения расчетного блока до 0 К. Коэффициенты диффузии вблизи ГЗ вычислялись после выполнения молекулярно-динамического эксперимента для малых ячеек размером $5 \times 5 \times 5 \text{ \AA}^3$.

В методе молекулярной динамики средние коэффициенты диффузии вдоль осей x , y и z можно найти по формулам[6]:

$$D_x = \frac{1}{N} \frac{\sum_{i=1}^N (x_{0i} - x_i)^2}{2t}; \quad D_y = \frac{1}{N} \frac{\sum_{i=1}^N (y_{0i} - y_i)^2}{2t}; \quad D_z = \frac{1}{N} \frac{\sum_{i=1}^N (z_{0i} - z_i)^2}{2t}, \quad (1)$$

здесь x_{0i} , y_{0i} и z_{0i} – координаты начального положения i -го атома; x_i , y_i и z_i – координаты i -го атома в момент времени t , N – число атомов в расчетном блоке.

Средний коэффициент диффузии рассчитывается как среднее арифметическое коэффициентов D_x , D_y и D_z :

$$D = \frac{1}{3} (D_x + D_y + D_z) \quad (2)$$

2. Результаты эксперимента

Используя компьютерный эксперимент, можно проследить за атомными смещениями после проведения процедуры первичной релаксации. На рис. 2, а показаны диаграммы атомных смещений вблизи ГЗ для чистого Ni, а на рис. 2, б – для чистой Cu.

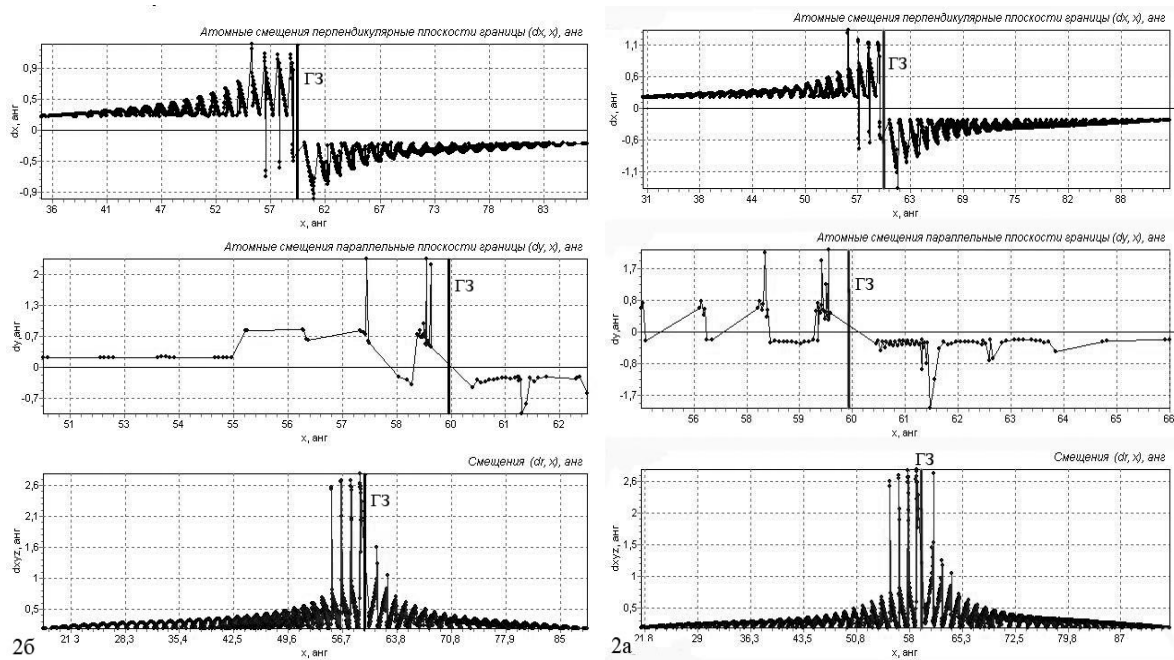


Рисунок 2 - Диаграммы атомных смещений в Ni (а) и Cu (б) после процедуры первичной релаксации с границей наклона [111]. Верхний рисунок – смещения перпендикулярные плоскости границы, средний – параллельные плоскости границы, нижний – в объеме блока

На рис. 3 (3,а для Ni; 3,б для Cu) приведена зависимость логарифма коэффици-

ента диффузии от обратной температуры по трем направлениям.

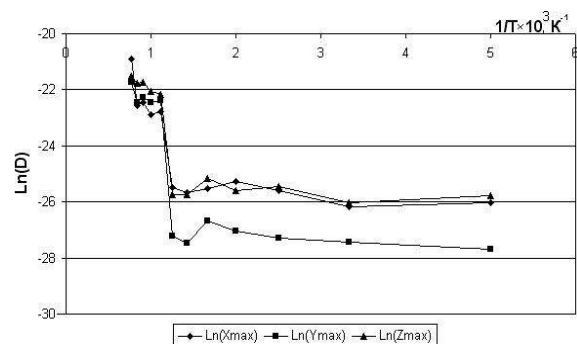
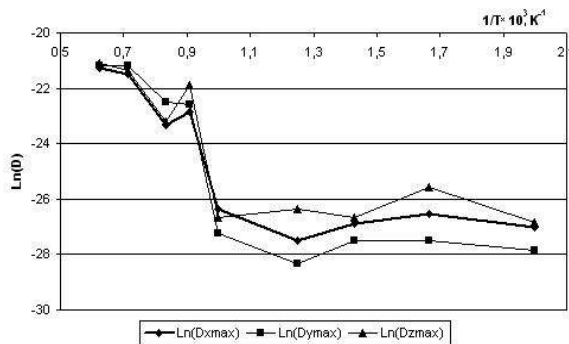


Рисунок 3 – а) Зависимость логарифмов коэффициентов диффузии от обратной температуры для Ni, б) Зависимость логарифмов коэффициентов диффузии от обратной температуры для Cu

3. Выводы и обсуждения

Согласно рис. 2,а и 2,б, диффузия в никеле протекает более интенсивно, чем в меди. Глубина проникновения для никеля составляет около 34 анг, а для меди около 29 анг, в направлении перпендикулярном плоскости границы. Данные представлены для угла разориентации зерен 7° . Для дальнейшего анализа атомных смещений требуются расчеты при больших углах разориентации, что планируется проделать в дальнейшем.

Анализ графиков 3,а и 3,б показывает лишь частичное выполнение закона Аррениу-

са, для Ni на промежутке от 1000 до 1100 К, а для меди в интервале от 700 до 1000 К. Для большей наглядности для расчетов взяты максимальные коэффициенты диффузии вдоль осей x, y, z. Вдоль оси z наблюдается наиболее интенсивная диффузия, менее интенсивная вдоль оси y, и самая слабая диффузия отмечается вдоль оси x. Данные результаты сходны с [6]. Изломы на графиках можно объяснить тем, что зернограничная диффузия в рассматриваемых металлах осуществлялась как минимум при помощи двух различных механизмов, вклад которых

существенно менялся в зависимости от температуры. У Ni включение второго механизма диффузии начинается при более низкой температуре, чем у меди.

В дальнейших исследованиях планируется изучить механизмы диффузии для более высоких значений углов разориентации, для сравнения с уже имеющимися данными, а также исследовать эти явления для других направлений осей разориентации.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Волович П.М., Барралье Л., Скворцова З.Н., Траскин В.Ю. Перколяционные модели смачивания границ зерен в поликристаллических материалах // Рос. Хим. Журнал. 2008. т. LII. №1. С. 13-20.

2. Векман А.В. Атомная структура и энергия общих границ зерен наклона типа [100] в кубических кристаллах // Автореферат к. ф.-м. н.: Барнаул, 2000. 23 с.

3. Starostenkov M.D., Demyanov B.F., Kustov S.L., Sverdlova E.G., Grakhov E.L. Computer simulation of tilt boundaries in alloys with L12 and B2 superlattices // Materials Science Forum, Prague. 1999. vols. 294-296. p. 215-218.

4. Starostenkov M.D., Demyanov B.F., Kustov S.L., Sverdlova E.G. Atomic structure and rearrangement of tilt grain boundaries S=5 in Ni3Al and NiAl // The 5th IUMRS International Conference in Asia. Bangalore, 1998. p.518.

5. Старостенков М.Д., Ракитин Р.Ю., Харина Е.Г. Атомная структура специальных границ зерен в чистом Ni в плоскостях {111} // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2008. т. 5. № 3. С. 132-135

6. Ракитин Р.Ю., Полетаев Г.М., Аксенов М.С., Старостенков М.Д. Исследования механизмов диффузии по границам зерен наклона в ГЦК металлах // Фундаментальные проблемы современного материаловедения, 2005. Т.2. №2. С. 124-129.