

ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР ГРАНИЦ ЗЕРЕН НАКЛОНА В АЛЮМИНИИ

А.В. Векман, А.С. Драгунов, Н.В. Адарич, Б.Ф. Демьянов

Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова,
г. Барнаул, Россия

До настоящего времени нет стройной теории описывающей границы зерен (ГЗ) в кристаллических телах. Существующие модели, от островной модели Мотта до модели структурных единиц описывают лишь те или иные свойства границ. Кроме того, отсутствует единый подход к описанию границ общего и специального типа. Исследование зерно-границной диффузии, сверхпластичности и других свойств так или иначе связанных с границами зерен непосредственно связано с их структурой. Исследование структуры границ зерен экспериментальными методами связано с определенными трудностями. Поэтому в последние десятилетия на первый план вышли теоретические методы и в первую очередь методы компьютерного моделирования. В нашей работе проведено исследование структуры и энергии симметричных границ зерен наклона с осями разориентации [100], [110], [111] в алюминии.

Модель РСУ

При моделировании систем из многих частиц в первую очередь встает вопрос о выборе исходной конфигурации атомов. Для границ зерен такой исходной конфигурацией может служить модель решетки совпадающих узлов (РСУ) [1]. В данной модели два сопрягающихся кристалла поворачиваются на определенные углы вокруг общей оси, образуя тем самым область границы зерна.

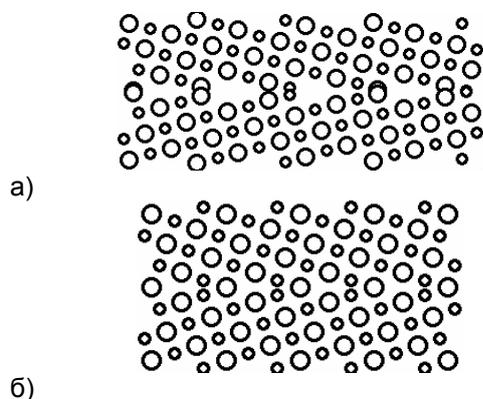


Рисунок 1 – Структура ГЗ с осью разориентации [100]: а) общего типа $\Theta = 30^\circ$; б) специального типа $\Sigma 5 (013) \Theta = 36,87^\circ$

На рис. 1, а представлен участок границы общего типа с углом разориентации $\Theta = 30^\circ$, а на рис. 1, б – граница специального типа $\Sigma 5 (013) \Theta = 36,87^\circ$. Ось разориентации обеих границ [100]. Из рисунка видно, что на границе общего типа существуют как области сжатия, в которых атомы сближаются на расстояние меньше первой координационной сферы, так и области разряжения, в которых соседние атомы находятся на расстояниях гораздо больших данного параметра. Области растяжения и сжатия дают большой вклад в энергию дефекта.

Для расчета энергии границы был выбран парный потенциал Морза.

$$\varphi_{kl}(r_{ij}) = D_{kl} \left[\beta_{kl}^2 \exp^{-2\alpha_{kl}r_{ij}} - 2\beta_{kl} \exp^{-\alpha_{kl}r_{ij}} \right],$$

где D_{kl} , α_{kl} , β_{kl} - параметры, определяемые из набора экспериментальных данных по энергии сублимации, параметрам решетки и объемным модулям упругости для алюминия. Процедура нахождения параметров потенциала описана в работе [2].

Модельный бикристалл, используемый для расчетов энергии, содержит расчетную ячейку, имеющую размер вдоль оси разориентации равный $16 \cdot a = 6,48$ нм ($a = 0,405$ нм - параметр решетки алюминия), вдоль плоскости дефекта перпендикулярно оси разориентации $16 \cdot a = 6,48$ нм, вдоль нормали к плоскости ГЗ достаточный (~ 3 нм), чтобы при дальнейшем увеличении энергия ГЗ практически не изменялась. Энергия ГЗ определялась как разность энергий идеального кристалла и кристалла с дефектом. При расчетах энергии радиус межатомного взаимодействия ограничивался третьей координационной сферой. В случае аперриодической структуры, которая наиболее часто встречается в общих ГЗ, рассчитанная энергия имеет смысл средней энергии, определенной на некотором участке дефекта. Средняя энергия определялась с учетом всей площади расчетной ячейки. Угол разориентации зерен изменялся в пределах от 5° до 60° с интервалом $0,2^\circ$.

На рис. 2 представлена энергия границ зерен в модели РСУ для осей разориентации [100], [110] и [111]. Средняя энергия ГЗ со-

ставляет: для границ с осью разориентации [100] и [110] порядка 50 Дж/м^2 , для границ с осью разориентации [111] порядка 20 Дж/м^2 , что гораздо выше экспериментально зафиксированных значений. Резкие провалы энергии наблюдаются для границ, соответствующих специальным разориентировкам сосед-

них кристаллов. На рисунке эти границы с обратной плотностью совпадающих узлов $\Sigma \leq 51$ отмечены маркерами.

Хотя значения энергии специальных границ гораздо ниже, чем для ГЗ общего типа, все же гораздо выше экспериментальных значений.

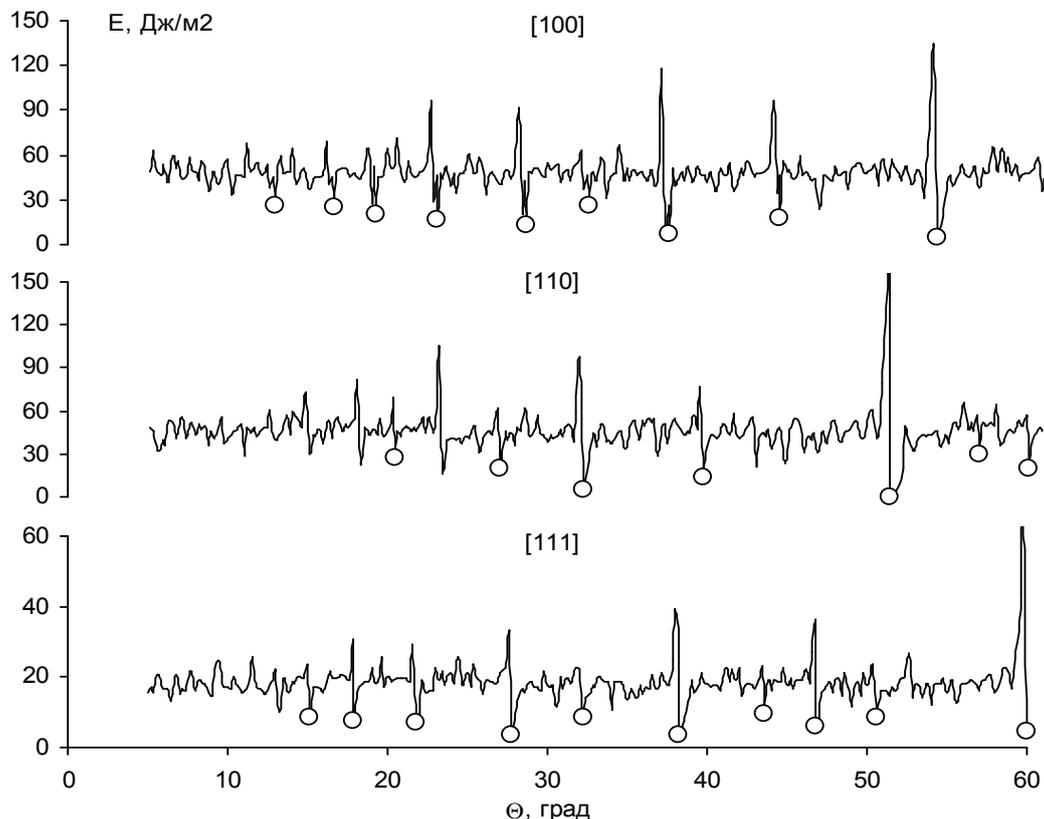


Рисунок 2 – Зависимость зернограничной энергии от угла разориентации в модели РСУ

Исключение составляют граница $\Sigma 11(113) \Theta = 50,48$ с осью разориентации [110], энергия которой в модели РСУ равна $0,412 \text{ Дж/м}^2$. Таким образом, геометрическая модель РСУ может быть в чистом виде использована лишь для ограниченного ряда границ зерен. Тем не менее, данная модель может быть использована в качестве исходной модели при моделировании.

Вакансионная релаксация

Высокие энергии ГЗ в модели РСУ обусловлены чередованием областей разряжения и сжатия. Введение дополнительных атомов в области разряжения и удаление лишних атомов из областей сжатия приводят к значительному уменьшению зернограничной энергии. В нашей работе проведение вакансионной релаксации проводилось в два

этапа. На первом этапе в область разряжения вводились дополнительные атомы. Процедура введения атомов заключалась в следующем: атомные плоскости одного из кристаллов были искусственно продлены в область другого. Глубина проникновения составляла $0,01 \cdot a$, где a – параметр решетки. Затем эти атомы перемещались в область границы зерна.

Если введенный таким образом атом понижает энергию ГЗ, то его оставляли. В противном случае атом вовсе удалялся за пределы кристалла. На втором этапе определялись пары атомов расстояние между которыми меньше некоторого r_{\min} , один из атомов удалялся, а второй смещался в плоскость границы зерна. Удаление атомов из ядра ГЗ дополнительно понижает энергию дефекта.

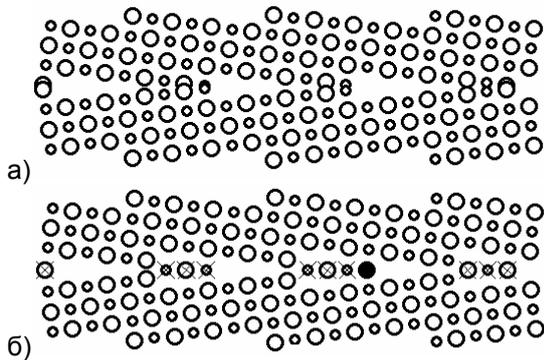


Рисунок 3 – Вакансионная релаксация ГЗ $\Theta = 15^\circ$ с осью разориентации 100. а) модель РСУ; б) после проведения минимизации энергии

Результаты проведения процедуры вакансионной релаксации приведены на рис. 3 для ГЗ $\Theta = 15^\circ$ с осью разориентации [100]. На рис. 3, а представлен участок границы в модели РСУ, а на рис. 3, б – после проведения вакансионной релаксации. Полностью заштрихован атом, который был внесен в область границы на первом этапе, а перечеркнутые – перемещенные в область границы на втором этапе. Тестовые расчеты показали, что зависимость энергии от параметра r_{\min} имеет вид кривой с единственным минимумом, соответствующим стабильной конфигурации атомов. Данное обстоятельство позволило использовать метод золотого сечения для поиска минимума функции $E = f(r_{\min})$.

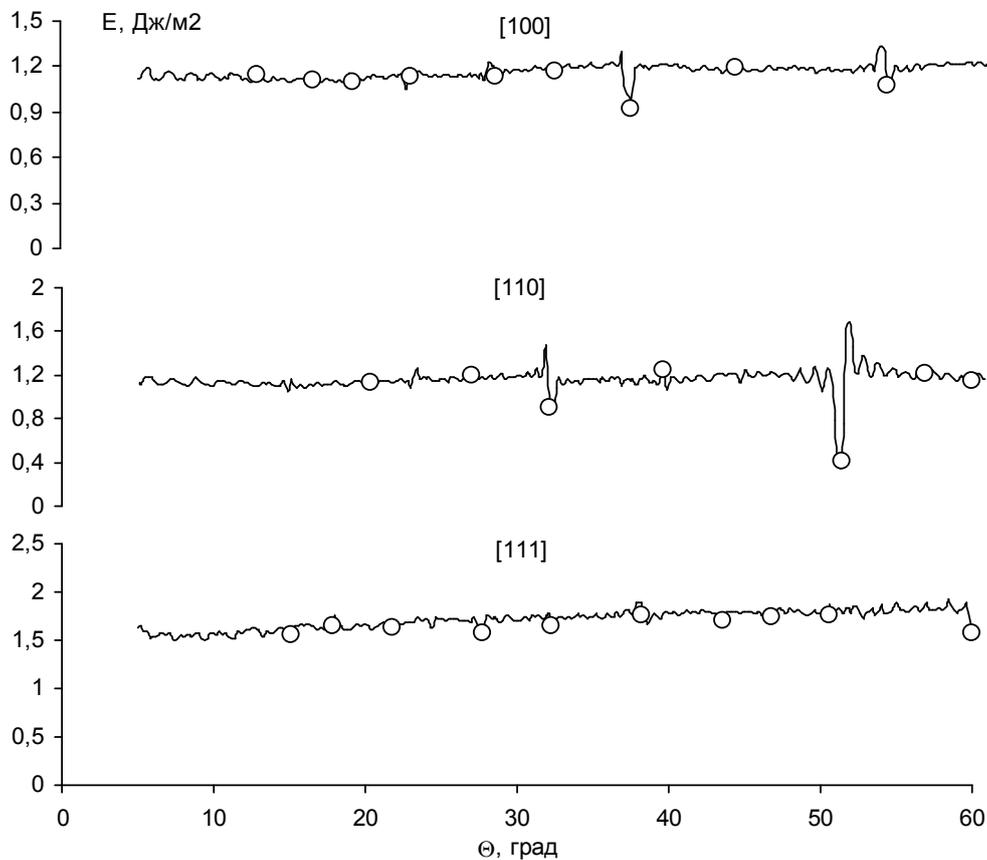


Рисунок 4 – Зависимость зернограничной энергии от угла разориентации после проведения вакансионной релаксации

На рис. 4 представлены результаты расчетов энергии ГЗ после проведения вакансионной релаксации. Из рисунка видно, что для всех осей разориентации после проведения процедуры вакансионной релаксации осцилляции значений зернограничной энергии практически полностью исчезают. На зависимостях наблюдаются незначительные (<10%)

снижение энергии в области специальных разориентировок. Исключения составляют границы $\Sigma 5 (012)[100]$ $\Theta = 53,13^\circ$, $\Sigma 5 (013)[100]$ $\Theta = 36,87^\circ$, $\Sigma 11 (113)[110]$ $\Theta = 50,48^\circ$, $\Sigma 27 (115)$ $\Theta = 31,59^\circ$, $\Sigma 3 (111)[111]$ $\Theta = 60,00^\circ$. Средняя энергия границ с осью разориентации [100] составляет $1,164 \text{ Дж/м}^2$, [110] – $1,158 \text{ Дж/м}^2$, [111] – $1,715 \text{ Дж/м}^2$.

Атомная релаксация

Проведение вакансионной релаксации недостаточно для определения устойчивых конфигураций атомов. В реальных кристаллах под действием межатомных сил наблюдается смещение атомов из узлов кристаллической решетки. В нашей модели атомная релаксация проводилась методом молекулярной статистики. В результате проведения атомной релаксации осцилляции зернограничной энергии дополнительно уменьшились (рис. 5).

Для всех трех осей разориентации энергия постепенно возрастает в интервале углов от 5° до 30-35°, что согласуется с дислокационной моделью Ван-дер-Мерве [3]. При дальнейшем увеличении угла в границах с осями разориентации [100] и [110] энергия незначительно уменьшается, а для границ типа [111] практически не зависит от угла. Средние значения энергии составили: для границ с осью разориентации [100] – 0,84 Дж/м², [110] – 0,65 Дж/м², [111] – 0,85 Дж/м². Отличие энергии вблизи границ со специальными разориентировками после проведения атомной релаксации менее выражены, чем после проведения вакансионной релаксации. Данное обстоятельство позволяет предположить, что не все границы, имеющие специальные разориентировки, имеют особые свойства.

Выводы

Проведено исследование ГЗ наклона с осями разориентации [100], [110], [111] в алюминии.

Использование модели РСУ для большинства ГЗ дает высокие значения энергии.

Внедрение дополнительных атомов в области растяжения и удаление атомов из областей сжатия является эффективным способом понижения зернограничной энергии.

Кривые зависимости энергии ГЗ имеют вид, согласующийся с кривой построенной в дислокационной модели Ван-дер-Мерве. На кривых наблюдаются провалы в области специальных разориентровок.

Не все специальные ГЗ являются энергетически выделенными, часть границ специального типа имеют энергию соизмеримую с энергией общих ГЗ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Kronberg M.L., Wilson F.N. Structure of high angle grain boundaries. // Trans. AIME. – 1949. – V.185. – P.506-508.
 2. Козлов Э.В., Попов Л.Е., Старостенков М.Д. Расчет потенциала Морза для твердого золота. Изв. вузов. Физика, 1972, №3, с.107-108.
- Van der Merve J.H. On the stresses and energies associated with intercrystalline boundaries. Proc. of the Phys. Soc. A, 1950, v.60, p.616-637.

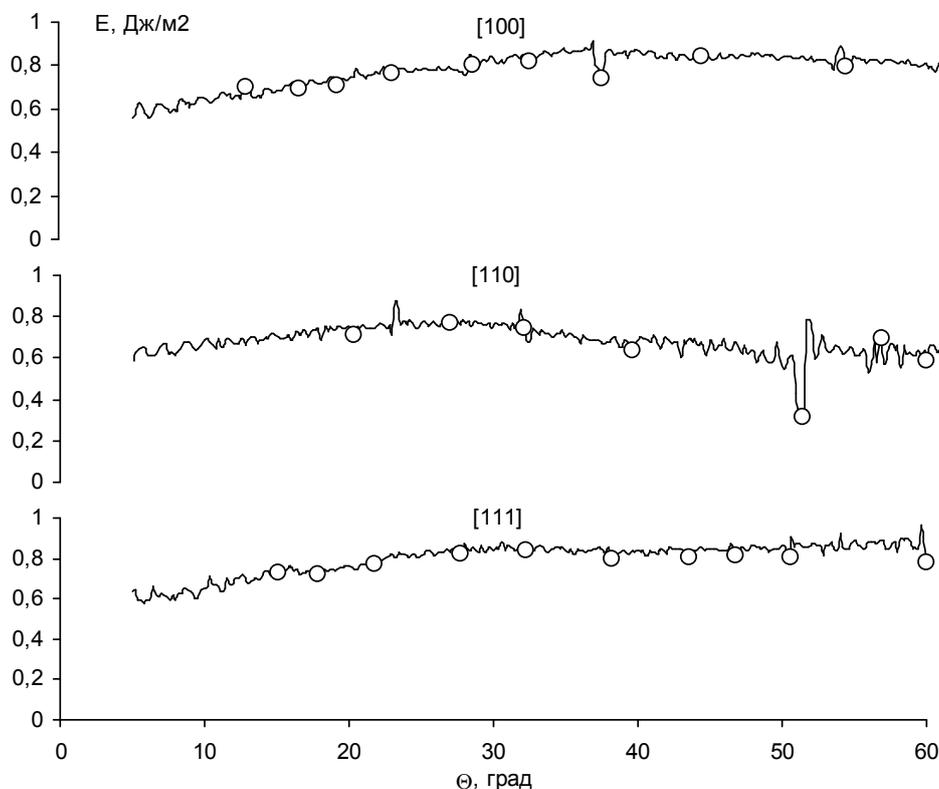


Рисунок 5 – Зависимость зернограничной энергии от угла разориентации после проведения атомной релаксации