

ЭНЕРГИЯ СИММЕТРИЧНЫХ ГРАНИЦ ЗЕРЕН НАКЛОНА В АЛЮМИНИИ

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

Большинство используемых на практике металлических конструкционных материалов имеет поликристаллическое строение. Основными структурными элементами таких материалов являются внутренние поверхности раздела (границы зерен). В настоящее время общепризнано, что границы зерен (ГЗ) играют важную роль в обеспечении механических и многих других физических свойств кристаллических твердых тел. Однако это влияние неоднозначно и зависит от особенностей строения этих поверхностей. Знание о строении поверхностей раздела, их энергетических характеристик и процессов перестройки весьма важны для создания материалов с заранее запланированными свойствами.

В настоящей работе представлены результаты компьютерного моделирования зависимости энергии ГЗ от угла разориентации зерен, образующих границу, а также результаты исследования процессов самодиффузии в кристалле, содержащем границу зерен. Исследовались как симметричные так и несимметричные ГЗ наклона с осью разориентации [100] в алюминии. Межатомное взаимодействие аппроксимировалось парным потенциалом Морза, параметры которого определялись исходя из свойств алюминия. Процедура нахождения параметров потенциала описана в работе [1].

Широкое распространение для описания атомной структуры ГЗ получила геометрическая модель решетки совпадающих узлов (PCY) [2]. Зависимость энергии ГЗ от угла разориентации, рассчитанная для границ, структура которых соответствует модели PCY, приведена на рис. 1. Расчеты проведены в диапазоне углов от 5° до 60° с шагом $0,1^\circ$.

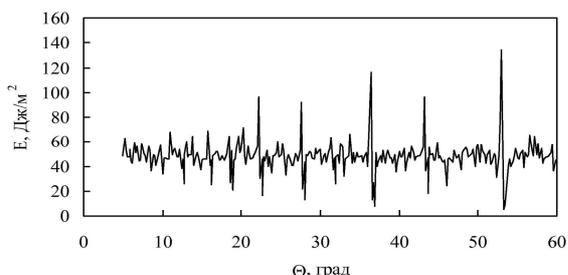


Рисунок 1 - Зависимость энергии ГЗ от угла разориентации, рассчитанная в модели PCY

Видно, что величина энергии на два порядка выше экспериментального значения для алюминия. В модели PCY энергия имеет величину в среднем 50 Дж/м^2 , тогда как эксперимент дает $0,6 \text{ Дж/м}^2$ [3]. Существенные понижения энергии, наблюдаемые для некоторых углов на рис.1, соответствуют специальным ГЗ. Высокие значения энергии в модели PCY связаны с сближением атомов при геометрическом построении ГЗ. Если удалить часть атомов из ГЗ, построенной в модели PCY, расстояние между которыми существенно меньше равновесного, то энергия дефекта может уменьшиться. Удаление атома эквивалентно введению вакансии в область ГЗ.

Нахождение равновесной структуры ГЗ в работе проводилось следующим образом. Исходная структура дефекта строится в модели PCY. На первом этапе проводится вакансионная релаксация [4], в процессе которой осуществляется внесение вакансий в область дефекта. Места, в которые необходимо внести вакансию определяются исходя из того, насколько сильно сближены атомы в исходной модели. Использовалась следующая процедура введения вакансий. Определялись пары атомов, расстояние между которыми было меньше некоторого заданного значения γ . Далее один из сблизившихся атомов удалялся из ГЗ, на его месте образовывалась вакансия. Затем второй атом смещался в симметричное положение на плоскость границы. Вакансия при этом исчезает как самостоятельный дефект. Для каждой конфигурации, возникающей при введении вакансий, проводились расчеты зернограничной энергии. На следующем шаге значение γ увеличивалось, и процедура релаксации проводилась вновь. Значения γ изменялись в диапазоне от 0 до величины параметра кристаллической решетки a с шагом $0,01a$. Описанную выше процедуру будем называть вакансионной релаксацией.

Структура ГЗ, которая соответствует минимальному значению энергии после вакансионной релаксации, выбиралась как стартовая для проведения заключительного этапа расчета равновесной атомной структуры ГЗ — атомной релаксации. В процессе атомной релаксации происходит перемещение атомов

под действием сил межатомного взаимодействия и формирование окончательной равновесной атомной структуры ГЗ. При этом энергия ГЗ дополнительно уменьшается.

Результаты расчетов зависимости энергии ГЗ в алюминии от угла разориентации после вакансионной и атомной релаксации приведены на рис. 2. Кривая 1 соответствует зависимости энергии ГЗ после проведения вакансионной релаксации, кривая 2 показывает зависимость энергии ГЗ от угла разориентации после проведения атомной релаксации.

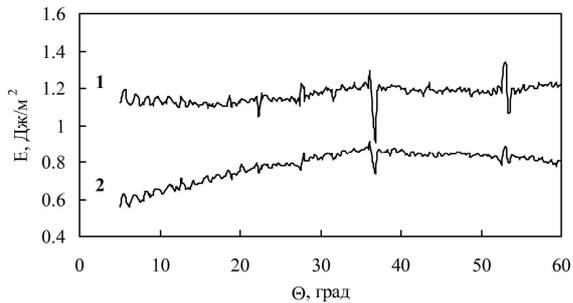


Рисунок 2 - Зависимость энергии ГЗ от угла разориентации после вакансионной релаксации (1) и после полной релаксации (2)

На втором этапе проводилось исследование самодиффузии по ГЗ, используя равновесную атомную структуру границ. Чтобы исследовать движение атомов при данной температуре проводится отжиг кристалла до достижения устойчивой конфигурации границ. Отжиг проводится на основе метода молекулярной динамики с решением ньютоновского уравнения движения для каждого атома на каждом шаге.

На каждом шаге ММД рассчитывается взаимодействие каждого атома кристалла с его соседями, расположенными ближе радиуса третьей координационной сферы

Перед проведением эксперимента в кристалл, содержащий дефект вносятся вакансии, количество которых соответствует равновесному для данной температуры. Алгоритм определения диффузионного движения атомов заключается в присвоения каждому атому его первоначального, т.н. «домашнего положения» и ожидания, когда атом сместится от этого положения на расстояние сравнимое с первой координационной сферой. Результаты обрабатываются и выводятся на экран в виде треков движения атомов в трехмерном виде.

На рис. 3, 4 показаны траектории перескоков атомов представленные в двух взаимно перпендикулярных проекциях. В первом случае траектории движения атомов проецируются на плоскость перпендикулярную плоскости ГЗ, во втором случае движение проецируется на плоскость границы. На рис. 3, 4 эти проекции обозначены как (а) и (б) соответственно. Для каждой ГЗ траектории скачков атомов приведены для двух температур — относительно низкой температуры 700 К и температуры 900 К близкой к температуре плавления алюминия $T_{пл}=930$ К.

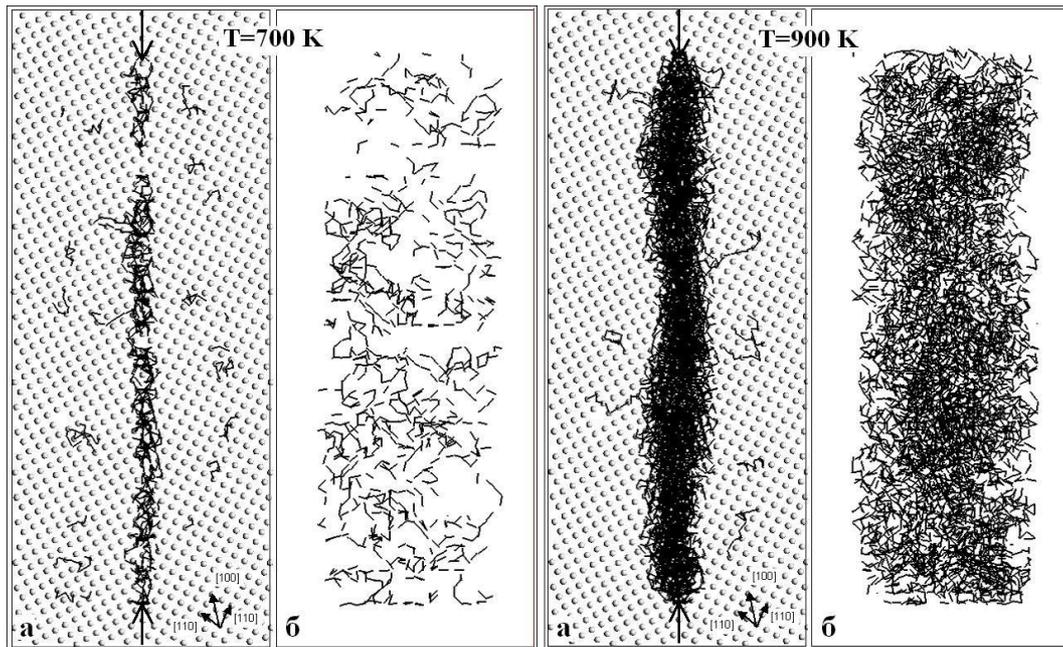


Рисунок 3 - Траектории скачков атомов в области большеугловой ГЗ общего типа $\Theta=30^\circ$, а – вид вдоль плоскости ГЗ, б - вид перпендикулярно плоскости ГЗ.

ЭНЕРГИЯ СИММЕТРИЧНЫХ ГРАНИЦ ЗЕРЕН НАКЛОНА В АЛЮМИНИИ

В ГЗ общего типа при обеих температурах движение атомов происходит по всему слою, распределение скачков достаточно равномерно заполняет область ГЗ, отсутствуют выделенные направления диффузии (рис.3). Движение атомов по ГЗ происходит как вдоль оси разориентации, так и перпендикулярно ей.

Самодиффузия по специальной ГЗ (рис.4) при $T=700$ К происходит вдоль параллельных трубок, представляющих области с

высоким значением избыточного объема. Однако, с увеличением температуры движение атомов существенно перестраивает границу, происходит потеря кристалличности зернограничного слоя. Структурные свойства специальной ГЗ становятся схожими с ГЗ общего типа. При $T=900$ К скачки атомов равномерно заполняют всю область ГЗ, а диффузионная ширина становится такой же как у ГЗ общего типа.

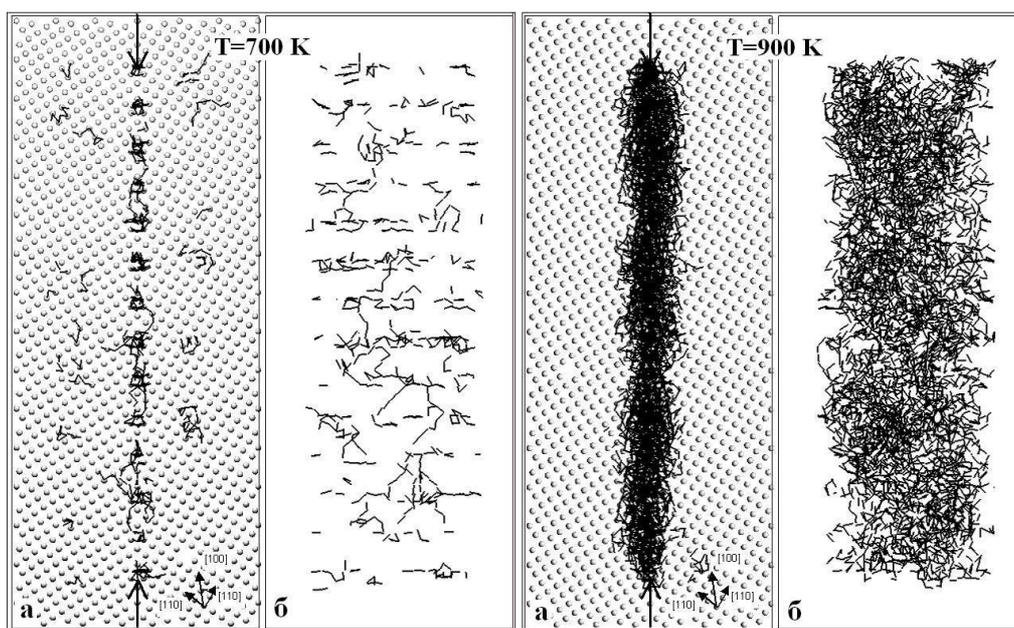


Рисунок 4 - Траектории скачков атомов в области специальной ГЗ $\Sigma=13$, а – вид вдоль плоскости ГЗ, б - вид перпендикулярно плоскости ГЗ

Проведенные исследования показали, что самодиффузия по ГЗ существенно зависит от типа границы и температуры. Самодиффузия в большеугловых ГЗ общего типа является двумерной, нет выделенных направлений преимущественного движения атомов. В специальных ГЗ при низких температурах движение атомов имеет преимущественное направление вдоль оси разориентации границы. Повышение температуры перестраивает структуру специальной ГЗ и характер диффузии становится сходным с диффузией по общим ГЗ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Козлов Э.В., Попов Л.Е., Старостенков М.Д. Расчет потенциала Морза для твердого золота. // Изв. вузов. Физика. – 1972. – №3. – С.107-108.
2. Kronberg M.L., Wilson F.H. Structure of high angle grain boundaries // Trans. AIME. – 1949. – V.185. – P.506-508.
3. Орлов А.Н., Перевезенцев В.Н., Рыбин В.В. Границы зерен в металлах. – М.: Металлургия, 1980. – 156 с.
4. Старостенков М.Д., Демьянов Б.Ф., Векман А.В. Малоугловые границы зерен в упорядоченном сплаве CuAu // Поверхность. – 2000. – №4. – С.54-58