

ДВУМЕРНАЯ АТОМНАЯ МОДЕЛЬ МИГРАЦИИ НЕСОРАЗМЕРНОЙ МЕЖЗЕРЕННОЙ ГРАНИЦЫ НАКЛОНА

В.Г. Кульков, А.С. Поляков

Филиал ГОУВПО "Московский энергетический институт (ТУ)", г. Волжский, Россия

Изучение миграционной подвижности межзеренных границ является весьма актуальным вопросом теории рекристаллизации. Миграция границ играет существенную роль в процессах пластической деформации поликристаллических материалов. Она также является основным механизмом релаксации неравновесной структуры нанокристаллических материалов, особенно в свежеприготовленных образцах. Представления о механизмах этого явления достаточно подробно разработаны для специальных границ. Относительно границ зерен общего типа этого утверждать нельзя. В значительной степени это связано с отсутствием универсальной модели их атомного строения. В особенности это относится к границам с неравновесной структурой.

В работах [1, 2] рассматривались процессы проскальзывания по границам, обладающим несоизмерной атомной структурой. Несоразмерность вводилась как иррациональное отношение периодов трансляции контактирующих в границе кристаллографических плоскостей. Возникающие локальные атомные конфигурации удобно описывать неким геометрическим параметром несоизмерения (*misfit parameter*). Границы наклона с осью, являющейся кристаллографическим направлением для обоих зерен, имеют несоизмерность в одном направлении, перпендикулярном оси. Такая несоизмерность была названа одномерной. Двумерный параметр несоизмерения возникает в границах с двумя различными характерными иррациональными отношениями периодов трансляции в границе. В приведенных типах границ параметр несоизмерения вводится как расстояние между ближайшими проекциями атомных рядов, принадлежащих различным зернам, на плоскость границы. Характерной особенностью несоизмерных границ, отличающей их от всех остальных, является равномерное распределение атомов по пара-

метру несоизмерения. Далее понятие несоизмерных границ было расширено и на другие типы границ [3], например, границы кручения. Параметр несоизмерения в них по-прежнему имеет равномерное распределение, хотя иррациональное отношение периодов здесь не обязательно. Все приведенные выше типы границ имеют δ -образное распределение атомной плотности в направлении, перпендикулярном плоскости границы, что и отвечает двумерности параметра несоизмерения. Отказ от этого, т. е. привлечение к рассмотрению класса границ с равномерным распределением атомов в нормальном к границе направлении, означает переход к трехмерной несоизмерности [4]. В работе [5] предложена классификация межзеренных границ на основе рассмотрения геометрической картины наложения в плоскости границы следов кристаллографических направлений и плоскостей. Согласно этой классификации несоизмерные границы с различными типами несоизмерности занимают большую часть всех типов межзеренных границ.

В настоящей работе предлагается атомная модель миграции несоизмерной межзеренной границы наклона с углом наклона, отличным от специального. Такая граница содержит параллельные плотноупакованные ряды, принадлежащие граничным поверхностям зерен с простой кубической структурой. Ориентация границы такова, что одна из сопрягающихся плоскостей является вицинальной, а другая – произвольной. Согласно классификации [5], данный класс границ имеет обозначение p . Примером такой границы может служить поверхность сопряжения плоскостей $(m01)$ и $(n01)$ простой кубической решетки, где m, n – иррациональные числа, причем, $n \gg 1$. Первую плоскость отнесем к одноименному зерну, его атомная структура в приграничной зоне "атомно рыхлая". Вторая плоскость является вицинальной и относится ко второму зерну.

Модель миграции границы

Ось z направим нормально к плоскости границы в сторону второго зерна, а x – вдоль границы нормально к плотноупакованным рядам граничных плоскостей. Каждому атому первого зерна сопоставим его дистанцию ζ – расстояние до геометрической плоскости границы (рис. 1). Говоря об атомах, будем иметь в виду следы атомных рядов, параллельных границе и нормальных плоскости рисунка. Выделим в верхнем зерне слой толщины Δz , в который попадают $\Delta N = n\Delta z$ атомов, на единицу длины границы вдоль оси x . Здесь $n = \Delta N / \Delta z = a^{-2}$ – плотность атомов, a – параметр решетки. Энергия атомов в поверхностном слое каждого кристалла $W(z)$ складывается из энергии взаимодействия с соседними атомами своего зерна $W_1(z)$ и энергии взаимодействия с атомами смежного зерна $W_2(z)$. При наличии термодинамической движущей силы миграции энергия всех атомов первого зерна больше, чем второго на постоянную величину ΔW (рис. 2). В этих условиях атомы первого кристаллита, обладающие повышенной энергией и расположенные в пределах слоя толщины z_1 , удаляются диффузионным путем к стокам на поверхности второго кристаллита. Стоками считаем вакантные атомные ряды, расположенные в позициях ступенек.

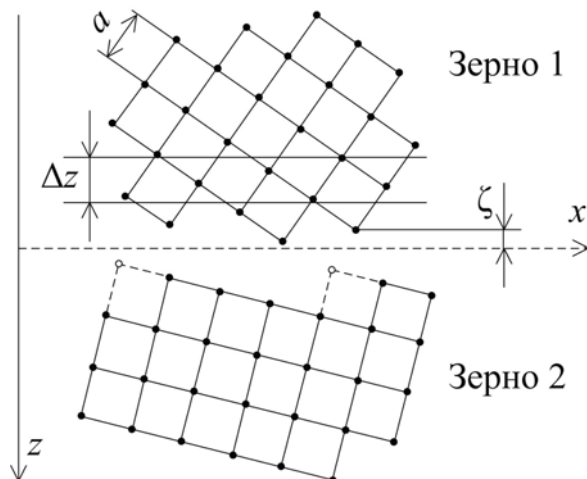


Рисунок 1 – Атомная структура в области границы

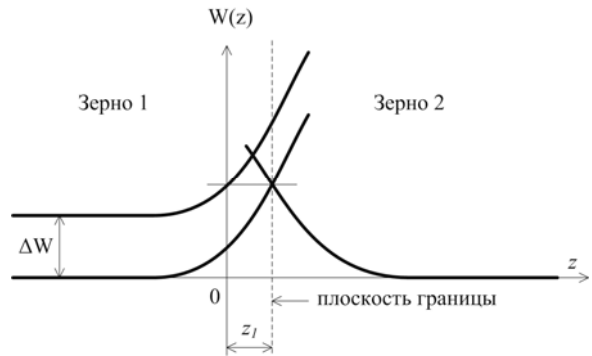


Рисунок 2 – Энергетический профиль границы

Введем $f(z)$ – функцию распределения атомов первого зерна по дистанциям, численно равную вероятности того, что атом находится в своем зерне, т. е. его переход еще не произошел. Для функции распределения можно записать кинетическое уравнение: $\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{f}{\phi}$. В установившемся режиме миграции границы, когда $z = z_0 + vt$, где v – скорость миграции, это уравнение имеет вид:

$$\frac{df}{dz} v = -\frac{f}{\phi} \tag{1}$$

Решением этого уравнения с граничным условием $f(0) = 1$ является функция (рис. 3):

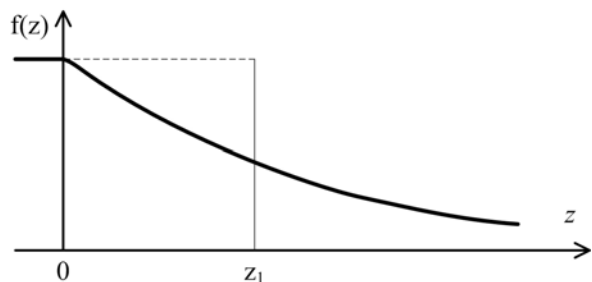


Рисунок 3 – Функция распределения атомов по дистанциям

$$f(z) = \exp\left(-\int_0^z \frac{d\zeta}{v\phi(\zeta)}\right) \tag{2}$$

Ограничиваясь приближением постоянного времени релаксации τ и используя для функции распределения условие [1]

$$z_1 = \int_0^{\infty} f(\zeta) d\zeta, \text{ получаем:}$$

ДВУМЕРНАЯ АТОМНАЯ МОДЕЛЬ МИГРАЦИИ НЕСОРАЗМЕРНОЙ МЕЖЗЕРЕННОЙ ГРАНИЦЫ НАКЛОНА

$$v\phi = z_1. \quad (3)$$

Время релаксации найдем как время диффузионного перемещения атомного ряда. Расстояние между стоками и истоками, которыми являются заполненные и вакантные атомные ряды, если их число одинаково, в среднем может быть найдено как

$$l = (2N_1)^{-1}. \quad (4)$$

Количество истоков можно найти из выражения

$$N_1 = n \int_0^{\infty} f(z) dz = \frac{v\phi}{a^2}, \quad (5)$$

что дает

$$l = \frac{a^2}{2v\phi}. \quad (6)$$

Во всех реальных ситуациях значения термодинамических сил таковы, что величина z_1 мала по сравнению с a . В пределах слоя z_1 зависимость $W(z)$ можно считать линейной:

$$W(z) = \bar{\epsilon} z. \quad (7)$$

Избыточную среднюю энергию, приходящуюся на один атом-исток найдем из выражения

$$E = \frac{n \int_0^{\infty} W(z) f(z) dz}{n \int_0^{\infty} f(z) dz} = \bar{\epsilon} z_1 \quad (8)$$

Здесь использованы выражения (3) и (7). Движение одного атомного ряда происходит диффузионным путем в поле градиента его энергии. Пусть v_1 – скорость атомного ряда. Согласно соотношению Эйнштейна $v_1 = uF$, где $u = D/kT$ – подвижность, D – зернограничный коэффициент самодиффузии, $F = E/l$ – силовое поле (градиент энергии для атомного ряда). Время перехода атома найдем как $\phi = l/v_1$. Отсюда с учетом соотношений (3), (4), (6) и (8), получаем:

$$\tau = \frac{a^4 kT}{4D\alpha z_1^3}. \quad (9)$$

Скорость миграции границы можно определить как $v = Ja^2$, где a^2 – добавляемая к нижнему зерну площадка, J – полный поток атомов от истока к стоку через толщину границы δ , его значение может быть определено следующим образом:

$$J = \frac{D\delta}{a} \frac{dC(x)}{dx}. \quad (10)$$

Химический потенциал атомов равен их средней энергии, определяемой из (8). Связывая его с концентрацией вакансий в границе $E = kT \ln(C/C_0)$, найдем избыточную

концентрацию $DC = \bar{\epsilon} C_0 z_1 / kT$. Здесь учтено, что $E \ll kT$. В одномерном случае $dC(x)/dx = DC/l$. С учетом изложенного выше:

$$\frac{dC(x)}{dx} = \frac{2\bar{\epsilon} C_0 \phi}{a^2 kT} \quad (11)$$

Принимая во внимание выражения (10) и (11), получаем выражение для скорости миграции границы:

$$v = \frac{2D\delta C_0 (\Delta W)^2}{a\alpha kT}. \quad (12)$$

Обсуждение результатов

Полученное выражение (12) устанавливает параболическую зависимость скорости миграции границы v от величины термодинамической движущей силы ΔW . Такая взаимосвязь обусловлена действием двух факторов. С одной стороны, количество атомов с повышенной энергией, которым необходимо удалиться с поверхности одного зерна и достраивать другое, определяется шириной области z_1 . Согласно (7) эта величина пропорциональна величине термодинамической силы. С другой стороны, средняя энергия таких атомов согласно (8) также пропор-

циональна термодинамической силе. Нелинейная зависимость скорости миграции от термодинамической движущей силы неоднократно наблюдалась в эксперименте [6]. Такая же зависимость имеет место и в экспериментах по измерению скорости зернограничного проскальзывания, что подтверждается моделью, развитой в [4].

Эффективная миграционная подвижность границы согласно (12) экспоненциально зависит от температуры. Энергия активации процесса равна энергии активации диффузии вакансий. Кроме того, величина предэкспоненциального множителя зависит от концентрации вакансий в границе C_0 . Эта величина определяет так называемый свободный объем межзеренной границы. По сравнению со специальными границами свободный объем несоизмеримых границ, как и вообще границ зерен общего типа, имеет большую величину. Это в особенности относится к неравновесным границам [7].

Выводы

1. Энергетическое состояние атомов в несоизмеримой границе наклона можно описать при помощи дистанции атомов – расстояния от нерелаксированного положения атома до плоскости границы. Распределение атомов по дистанциям имеет равномерный характер.

2. Кинетика миграции межзеренной границы определяется диффузионным массопереносом вдоль границы атомов из мест с повышенной энергией к стокам в растущем зерне. Стационарное распределение атомов по

дистанциям определяется из решения кинетического уравнения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Даринский Б.М., Сайко Д.С., Федоров Ю.А. Скольжение по границе, образующей несоизмеримую структуру // Изв. Вузов. Физика. – 1987. – №9. – С. 53-57.
2. Даринский Б.М., Муштенко С.В., Сайко Д.С. Несоразмерные межкристаллитные границы. Точечные дефекты // Конденсированные среды и межфазные границы. 2000. – Т. 2. № 4. – С. 333-338.
3. Даринский Б.М., Кульков В.Г. Межкристаллитное скольжение вдоль границ, образованных плотноупакованными плоскостями // Поверхность. – 1993. – №5. – С. 153-156.
4. Кульков В.Г. Межзеренное проскальзывание по границе, сопрягающей плотноупакованную и некристаллографическую плоскости // Вестник МЭИ. – 2005. – №5. – С. 96-100.
5. Даринский Б.М., Федоров Ю.А. Классификация межкристаллитных границ // ФТТ. – 1992. – Т. 34. – №7. – С. 2053-2058.
6. Бокштейн Б.С., Копецкий Ч.В., Швиндлерман Л.С. Термодинамика и кинетика границ зерен в металлах. – М.: Металлургия, 1986. – 224 с.
7. Чувильдеев В.Н. Неравновесные границы зерен в металлах. Теория и приложения. – М.: Физматлит, 2004. – 304 с.