

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ГРАНИЦ ЗЕРЕН НАКЛОНА ОБЩЕГО И СПЕЦИАЛЬНОГО ТИПА ДЛЯ ГЦК КРИСТАЛЛОВ

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

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

В настоящее время общепризнанно, 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 ГЗ, их структурных и энергетических характеристиках и процессов перестройки под внешним воздействием весьма важны для создания материалов с заранее запланированными свойствами.

Исследование границ зерен экспериментальными методами дают важные данные об атомной структуре и свойствах ГЗ, но являются трудоемкими. В связи с этим исследования методами компьютерного моделирования, как дополнение к эксперименту, имеют важное значение.

Результаты, получаемые методами компьютерного моделирования, во многом зависят от выбранной модели используемой для описания строения ГЗ. Предлагаемая нами модель, основывается на модели решетки совпадающих узлов (PCY), которая была предложена Кронбергом и Уилсоном [1] еще в XIX веке и не потеряла актуальности до настоящего времени. В этой работе впервые было указано на то, что при определенных углах разориентации одного кристалла относительно другого, часть узлов кристаллической решетки одного из них, совпадает с частью узлов решетки другого. Важным преимуществом модели PCY является экспериментально подтвержденное хорошее согласие модели с электронно-микроскопическими изображениями высокого разрешения, на некотором расстоянии от плоскости ГЗ. Отличие от модели PCY наблюдается только в тонком слое, где непосредственно контактируют атомы двух различных зерен.

Однако модель PCY обладает определенными недостатками. Во-первых, эта модель ориентирована на описание структуры так называемых специальных границ. Во-вторых, модель PCY использует чисто геометрический подход, не учитывающий всевозможные отклонения связанные с резким повышением энергии, из-за сильно сблизившихся атомов. И, наконец, при исследовании ГЗ общего типа решетка совпадающих узлов, строго говоря, просто отсутствует. Несмотря на вышеизложенные недостатки, модель PCY

очень удобна для моделирования ГЗ если не следовать строгой кристаллогеометрии этой модели, а использовать ее как стартовую, применяя различные процедуры релаксации. К ним относятся внедрение дополнительных атомов в области с избыточным свободным объемом и удаление атомов из областей со стесненным объемом.

Построение стабильной структуры ГЗ основывающиеся на модели PCY встречается у многих авторов [2-4]. Принципиальным отличием представленной методики от уже существующих, является не только удаление сблизившихся атомов, т.е. внесения вакансий в область ГЗ, но и добавление атомов в области избыточного свободного объема, тем самым удаление вакансий из области ГЗ.

Методика построения стабильных или метастабильных конфигураций атомов в ГЗ состоит в следующем:

1. определение областей с избыточным свободным объемом. На рисунке 1а такой участок имеет номер 3;
2. внесение в области с избыточным объемом дополнительных атомов в узлы соприкасающихся решеток;
3. определение пар сблизившихся атомов и удаление одного из этих атомов. На рисунке 1а участок со стесненным объемом обозначен номер 1;
4. перемещение оставшегося атома в точный геометрический центр между этими двумя атомами.

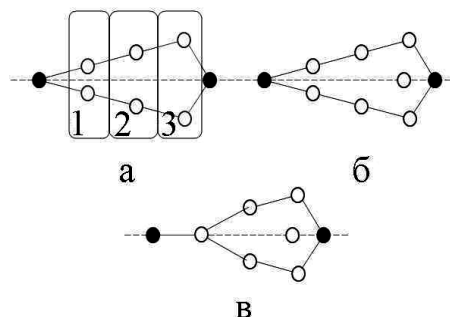


Рисунок 1 – Структурный элемент ГЗ в модели PCY (а), после внесения дополнительного атома (б) и внесения распределенной вакансии (в)

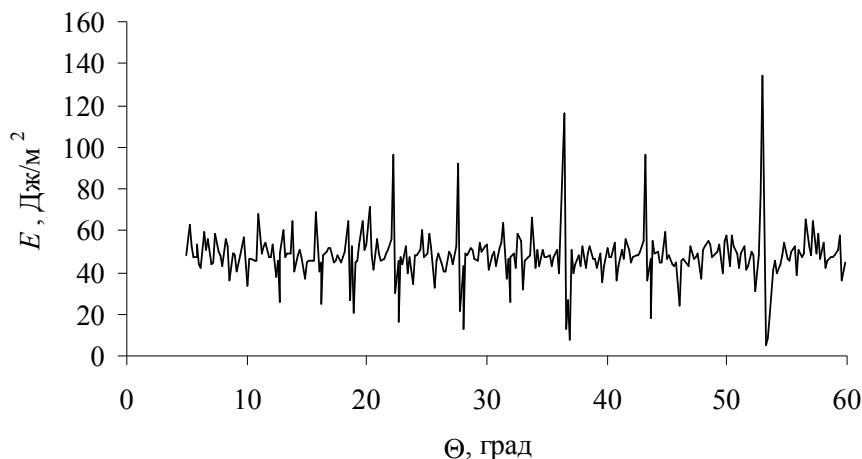


Рисунок 2 – Зависимость энергии симметричных ГЗ от угла разориентации в модели РСУ

Критерием для определения, какие атомы считать сильно сблизившимися, а также какие области имеют значительный избыточный объем служит значение потенциальной энергии ГЗ.

Для апробации предложенной методики был проведен ряд расчетов. В качестве объекта исследования был исследован бикристалл алюминия с различными углами разориентации. Ось разориентации соответствовала кристаллогеометрическому направлению [100]. Размер расчетного блока составил: в направлении оси разориентации $16 \cdot a$ (a - параметр решетки); в направлении перпендикулярном оси разориентации в плоскости ГЗ $40 \cdot a$; в направлении перпендикулярном плоскости ГЗ $16 \cdot a$. На расчетную ячейку накладывались жесткие граничные условия. Межатомное взаимодействие в работе аппроксимировалось парным эмпирическим потенциалом Морза:

$$\varphi(r) = D \left[\beta^2 \exp^{-2\alpha r} - 2\beta \exp^{-\alpha r} \right], \quad (1)$$

где D , α , β – параметры, определяемые

из набора экспериментальных данных по энергии сублимации, параметрам решетки, объемным модулям упругости и энергиям упорядочения, определяют функцию взаимодействия между атомами, находящимися на расстоянии r друг от друга [5]. Энергия ГЗ определялась как разность между энергией идеального кристалла и кристалла с дефектом, отнесенная к единице её площади.

На рисунке 2 представлены расчетные значения энергии симметричных ГЗ с осью разориентации [100] от угла разориентации построенных в модели РСУ. Из графика видно, что энергии ГЗ находятся в пределах от 40 до 60 Дж/м². Столь высокие значения энергий объясняются наличием областей сильного сжатия, чередующихся с областями идеального кристалла и областями сильного растяжения вдоль плоскости границы. Границы со столь высокими значениями энергии на практике не встречаются.

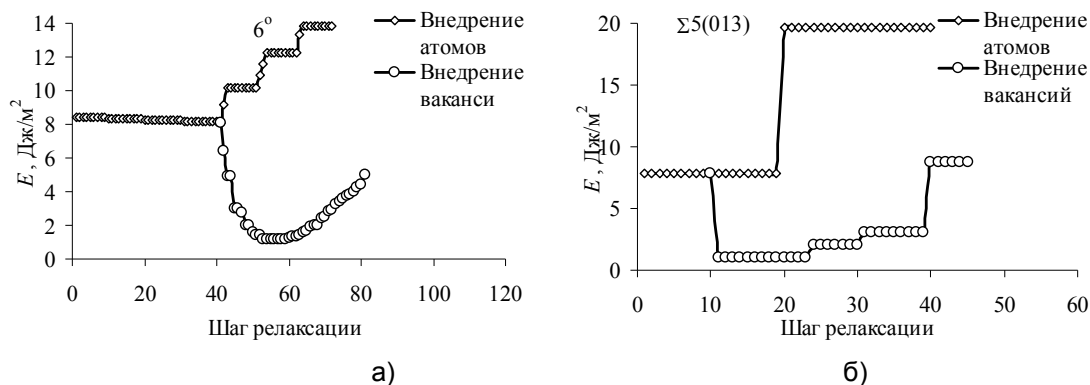


Рисунок 3 – Изменение зернограничной энергии в процессе построения границы общего (а) и специального (б) типа

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ГРАНИЦ ЗЕРЕН НАКЛОНА ОБЩЕГО И СПЕЦИАЛЬНОГО ТИПА ДЛЯ ГЦК КРИСТАЛЛОВ

Процедура внедрения атомов и вакансий в область ГЗ в соответствии с представленной методикой понижает энергию дефекта до значений сопоставимых с экспериментальными. На рисунке 3 показано понижение энергии ГЗ в процессе построения ГЗ, для ГЗ 6° и $\Sigma 5(013)$ [100]. Как видно из рисунков, количество внедренных атомов зависит от угла разориентации и типа границы. При внедрении дополнительных атомов в ГЗ общего типа, атомы добавляются в разные структурные единицы по всей длине границы. Для границ специального типа, внедрение атомов происходит во все структурные элементы. Это обусловлено тем, что ГЗ специального типа состоят из одинаковых структурных элементов. Каждая точка соответствует одному шагу релаксационной процедуры. При внедрении атомов эта процедура соответствует увеличению взаимопроникающих атомов соседних зерен. При удалении атомов один этап релаксации соответствует увеличению минимально возможного сближения атомов на $0,01 \cdot a$.

Для удобства анализа различных бикристаллов, при проведении процедуры внедрения атомов используется относительное расстояние γ/a , т.е. расстояния между сближенными атомами γ , выраженное в долях параметра кристаллической решетки a , которое изменяется в пределах от $0,4 \cdot a$ до $0,6 \cdot a$. Все зависимости имеют вид кривых с минимумом. Для ГЗ специального типа зависимости энергии имеют ступенчатый характер, что отражает правильную периодическую структуру дефекта. Ширина каждой ступеньки на энергетической зависимости соответствует межплоскостному расстоянию.

Сопоставление результатов моделирования с экспериментальными данными является важным критерием адекватности полученной модели. В случае кристаллической структуры – это сравнение полученной конфигурации атомов с электронно-микроскопическими снимками. На рисунке 4 приведены рассчитанные структуры (рисунок 4а) и экспериментальные изображения (рисунок 4б) ГЗ $\Sigma 5(012)$ и $\Sigma 5(013)$ [6]. На экспериментальные изображения наложены теоретически рассчитанные атомные конфигурации ГЗ. Видно, что между этими структурами существует хорошее совпадение, что подтверждает правильность разработанной нами модели.

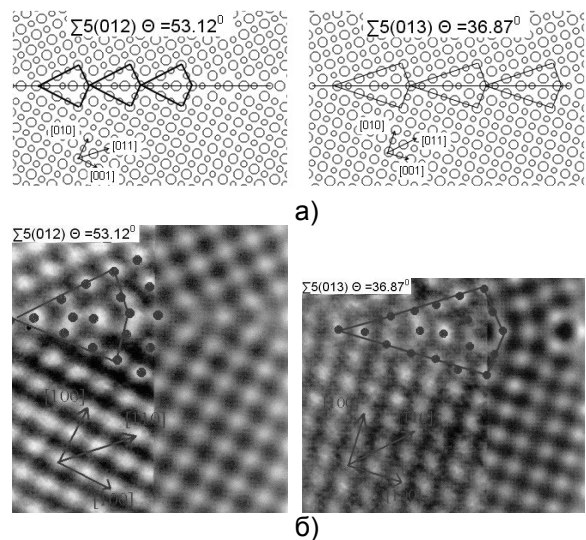


Рисунок 4 – Рассчитанные атомные конфигурации структурных единиц (а) и экспериментальные электронно-микроскопические изображения высокого разрешения (б)

Таким образом, структуры ГЗ полученные при помощи представленной методики совпадают с реальными. Главным достоинством предложенного алгоритма выступает внедрение атомов (удаление вакансий) из областей с избыточным свободным объемом 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. Guyot P, Simon J.P. Symmetrical high angle tilt boundary energy calculation in aluminum and lithium // Phys. Stat. Sol. (a). – 1976. – V.38. – P.207-216.
3. Wang G. J., Sutton A. P., Vitek V. A computer simulation study of $\langle 100 \rangle$ and $\langle 111 \rangle$ tilt boundaries: the multiplicity of structures // Acta metall. – 1984. – V.32, №7. – P.1093-1098
4. Векман А.В., Демьянов Б.Ф.. Механизмы атомной перестройки границ зерен общего типа в алюминии. // Самораспространяющийся высокотемпературный синтез: Материалы и технологии. – Новосибирск: Наука, – 2001. – С. 203-216
5. Козлов Э.В., Попов Л.Е., Старостенков М.Д. Расчет потенциала Морза для твердого золота // Изв. вузов. Физика. – 1972. – №3. – С.107-108.
6. Krakow W. Multiplicity of atomic structure for $\Sigma=17[100]$ symmetrical tilt boundaries in gold // Acta Met. – 1990. – V.38, №6. – P.1031-1036.