

УДК 539.21

©1995

МНОЖЕСТВЕННОСТЬ СТРУКТУР ГРАНИЦ ЗЕРЕН И РЕШЕТКА ЗЕРНОГРАНИЧНЫХ СДВИГОВ

Т.И.Мазилова, И.М.Мизайловский

Украинский национальный научный центр
Харьковский физико-технический институт
Поступило в Редакцию 26 мая 1994 г.

Проведено компьютерное моделирование атомных структур симметричных наклонных границ зерен с осью разориентации [110] и обратной плотностью совпадающих узлов $\Sigma = 9$, соответствующих различным состояниям взаимных жестких трансляций решеток смежных зерен. Обнаружены вырожденные метастабильные конфигурации границ, которые можно представить как совокупность ориентированных вдоль оси разориентации полиэдров Бернала — тетраэдров и пятиугольных бипирамид. Установлена корреляция между компонентами жесткого сдвига решеток множественных структур границы и базисными векторами решетки зернограничных сдвигов.

Границы зерен обычно характеризуются пятью степенями свободы, определяющими ось и угол разориентации и положение плоскости границы. Однако, как было показано в [1], эти параметры однозначно определяют атомную структуру лишь в некоторых частных случаях границ с низкими значениями обратной плотности совпадающих узлов Σ . Для большинства большеугловых границ зерен, исследованных методами компьютерного моделирования, характерна множественность структур, отличающихся векторами жесткой трансляции решеток смежных зерен. В частности, два типа структур границ зерен с $\Sigma = 9$ обнаружены экспериментально в сплавах с ГЦК решеткой [2]. Возможность существования ряда атомных конфигураций границы непосредственно вытекает из модели структурных единиц, развитой в [1]. Векторы жестких трансляций, соответствующие различным метастабильным конфигурациям границы, не могут быть представлены в виде линейной комбинации базисных векторов полной решетки наложений (ПРН), и, следовательно, зернограничные дислокации, ограничивающие участки с различной атомной структурой [2], являются частичными.

Вспомогательная решетка ПРН, введенная для описания атомной структуры большеугловых границ зерен, играет важную роль при рассмотрении атомных перестроек, контролирующих различные зернограничные явления. При анализе релаксационных процессов в ядрах межзеренных границ особый интерес представляют элементарные смещения решеток смежных зерен, сопровождающие межзеренное проскальзывание. Для геометрического описания элементарных атомных

перестроек при проскальзывании и миграции границ в работах [3,4] были введены представления о решетке зернограницных сдвигов (РЗС). Векторы этой решетки определяются взаимной ориентацией плоскости границы базисных векторов ПРН. В рамках геометрической модели элементарные атомные смещения решеток смежных зерен при проскальзывании и миграции границ определяются векторами РЗС. Период решетки зернограницных сдвигов много меньше периода кристаллической решетки. В связи с этим вопрос о физическом смысле применения столь мелкоадресных решеток к настоящему времени остается в значительной мере открытым.

В данной работе методом математического моделирования проанализированы атомные конфигурации ядер межзеренных границ в вольфраме, соответствующие различным состояниям взаимной жесткой трансляции решеток смежных зерен, и проведено сопоставление с результатами геометрической теории зернограницных сдвигов.

Исследовалась большеугольная специальная симметричная граница наклона с обратной плотностью совпадающих узлов $\Sigma = 9$ в ОЦК решетке. Расчетная ячейка содержала 840 взаимодействующих объемных атомов и 504 поверхностных атома. Протяженность кристаллита вдоль оси разориентации [110] составляла шесть атомных слоев (три периода идентичности). На плоскостях, огравляющих кристаллит и пересекающихся вдоль направления [110], задавались гибкие граничные условия, на гранях (110) — циклические граничные условия. Применялся метод молекулярной динамики. В качестве центрального парного потенциала межатомного взаимодействия был взят потенциал Джонсона [5]. Использовался блок программ, разработанный ранее для описания структуры и свойств линейных и планарных дефектов в металлах с ОЦК решеткой [6,7]. Контрольные компьютерные эксперименты по определению энергии образования вакансий и векторов жестких трансляций решеток, соответствующих минимуму энергии границы, обнаружили удовлетворительное соответствие с известными результатами машинных расчетов [6].

Жесткая трансляция решеток осуществлялась вдоль оси x , лежащей в плоскости границы и перпендикулярной направлению [110], и оси z , нормальной к плоскости границы. В направлении оси разориентации в соответствии с известными данными, полученными ранее методами машинного моделирования [6] и полевой ионной микроскопии [8], компонента вектора жесткой трансляции U_z принималась равной нулю. С целью уменьшения затрат машинного времени в большинстве экспериментов определялись конфигурации и энергии границ с векторами трансляции U_x , близкими либо равными векторами РЗС. Величина U_y определялась минимизацией энергии бикристалла с фиксированным значением U_x .

В качестве исходной конфигурации, относительно которой отсчитывались жесткие сдвиги решеток, выбрана зеркально-симметричная атомная структура после атомной релаксации, представленная на рис. 1. Были определены атомные структуры и энергии границ со значениями $U_x \leq 3.16 \text{ \AA}$, что соответствует величине $6b_x$, где b_x — ориентированный вдоль оси x базисный вектор РЗС. В результате проведенных исследований помимо известной конфигурации с компо-

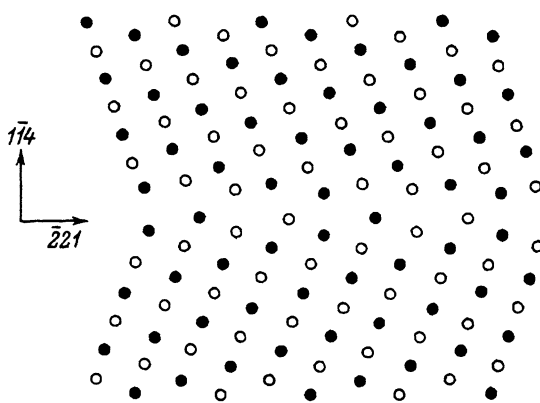


Рис. 1. Атомная структура зеркально-симметричной границы наклона $\Sigma 9$ ($1\bar{1}4$) после атомной релаксации.

Светлые и черные кружки соответствуют атомам, лежащим в соседних плоскостях (110).

нентами жесткой трансляции $U_x = 2.08$ и $U_y = 0.67 \text{ \AA}$ [6], на границе $\Sigma 9$ обнаружена метастабильная атомная структура с $U_x = 2.58$ и $U_y = 0.60 \text{ \AA}$. Энергии границы в этих состояниях жесткой трансляции относятся как 1 : 0.955 для первой и второй конфигурации соответственно. На рис. 2 приведены эти метастабильные структуры в проекции на плоскость (110). Даны координаты двух соседних атомных слоев, соответствующих периоду идентичности границы в направлении оси разориентации. На зеркально-симметричной границе ($b_x = 0$, рис. 1) планарная плотность атомов соответствует плотности на исходной границе. Жесткий сдвиг $b_x = 2.08 \text{ \AA}$ после поатомной релаксации приводит к конфигурации с нулевой атомной плотностью в плоскости границы (рис. 2, а). Сдвиг на величину $b_x = 2.58 \text{ \AA}$ в противоположность этому сопровождался практически полной коалесценцией двух плоскостей (114) и удвоением планарной атомной плотности. Конфигурация границы можно представить как систему ориентированных вдоль оси [110] цепочек плотноупакованных полиэдров Бернала — тетраэдров и пятиугольных бипирамид, для первого (рис. 2, а) и второго (рис. 2, б) трансляционного состояний. В соседних цепочках полиэдры смещены на величину вектора $(1/2) [110]$. Эти метастабильные состоя-

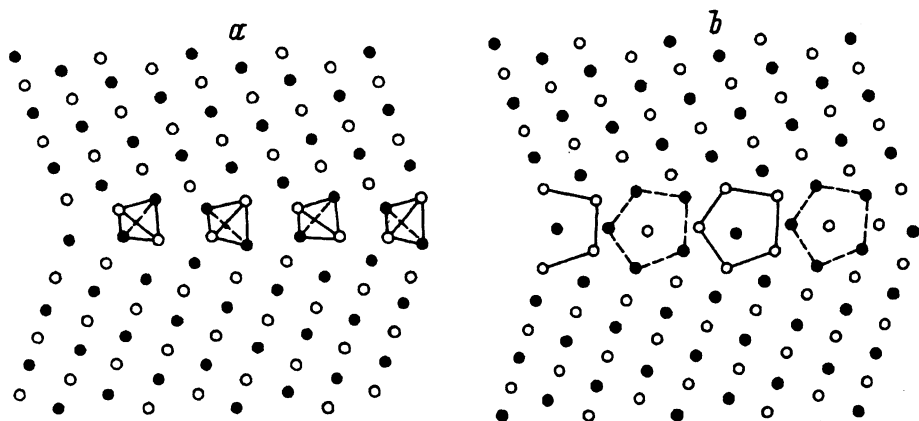


Рис. 2. Метастабильные конфигурации границ $\Sigma 9$ ($1\bar{1}4$), соответствующие значениям жестких смещений решеток смежных зерен в плоскости границы U_x , равным 2.08 (а) и 2.58 \AA (б).

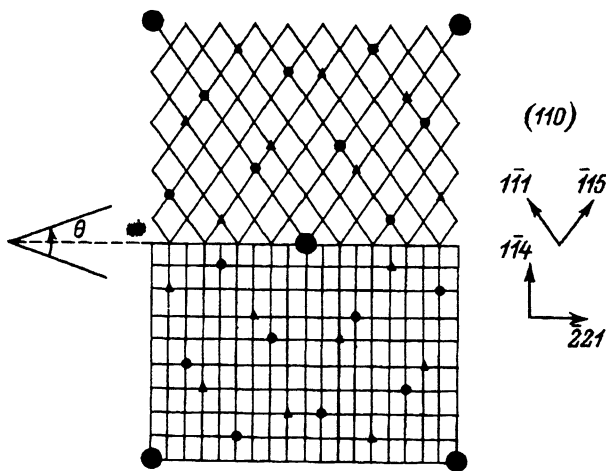


Рис. 3. Геометрическая схема симметричной границы Σ_9 ($1\bar{1}4$).

ния характеризуются приблизительно одинаковыми значениями энергии нарушения и, таким образом, могут рассматриваться как энергетически вырожденные.

Помимо метастабильных конфигураций границ зерен обнаружены структуры, находящиеся в состоянии неустойчивого равновесия, характеризующемся равенством нулю первой и второй производной энергии нарушения по x -компоненте вектора жесткого сдвига. Одной из этих границ является стартовая зеркально-симметричная граница с U_x равной нулю (рис. 1). Второе лабильное состояние реализуется при значениях компонент жесткого сдвига $U_x = 1.03$ и $U_y = 0.5 \text{ \AA}$. Лабильные состояния границ зерен в компьютерных экспериментах «поддерживались» возвращающими силами, возникающими на боковых гранях бикристалла вследствие применения гибких граничных условий. В реальных материалах такая ситуация может реализоваться вблизи уступов и тройных стыков зерен — на участках границ, в которых затруднена сдвиговая релаксация. Все остальные состояния жесткой трансляции в исследованной области оказались полностью неустойчивыми и разрушались в компьютерных экспериментах путем самопроизвольных (безактивационных) зернограничных сдвигов в процессе релаксации за время меньше 10^{-12} с.

В соответствии с геометрической теорией зернограничных сдвигов ПРН является подрешеткой РЗС, и базисные вектора ПРН можно разложить по векторам РЗС. Для границы Σ_9 с осью разориентации $[110]$ базисными являются вектора ПРН $(1/18)[1\bar{1}\bar{5}]$, $(1/18)[3\bar{3}\bar{3}]$ и $(1/18)[\bar{1}\bar{1}\bar{7}1]$ (см., например, [9]). Решетка зернограничных сдвигов может быть построена проектированием этих векторов на плоскость границы ($1\bar{1}4$) и нормаль к ней

$$(1/18)[1\bar{1}\bar{5}] = (1/18)[\bar{1}\bar{1}\bar{4}] + (1/18)[2\bar{2}\bar{1}],$$

$$(1/18)[3\bar{3}\bar{3}] = (1/18)[1\bar{1}\bar{4}] + (1/18)[2\bar{2}\bar{1}],$$

$$(1/18)[\bar{1}\bar{1}\bar{7}1] = (1/2)[\bar{1}\bar{1}0] + (1/18)[\bar{2}\bar{2}1].$$

На рис. 3 приведена геометрическая схема симметричной границы наклона $\Sigma 9, (1\bar{1}4)$, $\theta = 38.9^\circ$ [110]. Треугольники и малые черные кружки соответствуют узлам решеток смежных зерен. Большими черными кружками отмечены совпадающие узлы РСУ. В верхней части рисунка изображена ПРН, в нижней — РЗС, построенная на базисных векторах $(1/18)$ [221], $(1/18)[1\bar{1}4]$ и $(1/2)$ [110]. Таким образом, базисным вектором РЗС в плоскости границы, ориентированным нормально к оси наклона [110], является вектор $(1/18)$ [221]. В вольфраме с параметром решетки $a = 3.16 \text{ \AA}$ модуль этого вектора равен 0.527 \AA .

Компоненты жесткой трансляции в направлении, нормальном к плоскости метастабильных и лабильных границ, оказались меньше соответствующего базисного вектора РЗС $(1/18)$ [1 $\bar{1}4$]. Таким образом, в процессе релаксации в машинных экспериментах наблюдается разрушение РЗС, а следовательно, и РСУ и ПРН. Несмотря на это, как показало сопоставление данных, полученных методом математического моделирования, с результатами геометрического рассматривания РЗС, метастабильным и лабильным структурам соответствуют компоненты векторов сдвига в плоскости границы, кратные базисному вектору $b_x = (1/18)$ [221]. Вырожденные метастабильные состояния реализуются при значениях векторов жесткого сдвига U_x приблизительно равных 4 и 5 b_x , лабильные состояния — при 0 и 2 b_x . Среднее значение невязки между векторами сдвига и ближайшими векторами РЗС, выраженной в единицах атомного диаметра (2.74 \AA), составляет 0.97%, что на порядок меньше соответствующих значений, полученных при сопоставлении векторов жесткого сдвига в металлах с векторами ПРН [10]. Таким образом, полученные результаты свидетельствуют о существовании корреляции между компонентами жесткого сдвига множественных структур большеугловой границы зерен и базисными векторами РЗС.

Список литературы

- [1] Wang G.J., Sutton A.P., Vitek V. // Acta Met. 1984. V. 32. N 7. P. 1093–1104.
- [2] Forwood C.T., Clarebrough L.M. // Acta Met. 1982. V. 30. N 7. P. 1443–1451.
- [3] Рыбин В.В., Перевезенцев В.Н. // ФТТ. 1975. Т. 17. № 11. С. 3188–3193.
- [4] Орлов А.Н., Перевезенцев В.Н., Рыбин В.В. Границы зерен в металлах. М.: Металлургия, 1980. 156 с.
- [5] Johnson R.A. // Phys. Rev. B. 1983. V. 27. N 4. P. 2014–2018.
- [6] Бойко В.С., Кириллов В.А., Орлов А.Н. // ЖТФ. 1987. Т. 57. № 8. С. 1488–1496.
- [7] Бойко В.С., Мазилова Т.И. // ФТТ. 1992. Т. 34. № 7. С. 2244–2250.
- [8] Михайловский И.М. // ФТТ. 1982. Т. 24. № 11. С. 3210–3215.
- [9] King A.H. // Acta Met. 1982. V. 30. N 2. P. 419–428.
- [10] Bruggeman G.A., Bishop G.H. // J. Appl. Phys. 1973. V. 44. N 10. P. 4468–4472.