

01,11,10

## Диффузия по несимметричным границам зерен с осью разориентации [110]

© А.В. Векман, Б.Ф. Демьянов

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

E-mail: weckman@list.ru

Поступила в Редакцию 26 апреля 2024 г.

В окончательной редакции 26 апреля 2024 г.

Принята к публикации 27 апреля 2024 г.

Методами компьютерного моделирования проведено исследование зернограницной самодиффузии по несимметричным границам зерен с осью разориентации [110]. Угол разориентации несимметричных границ соответствует углу разориентации специальной границы зерен  $\Sigma 11(113)$ . Расчет проводился с использованием парного потенциала Морзе и многочастичного потенциала Клери–Розато. Показано, что структуру несимметричных границ можно описать в модели структурных единиц — все границы содержат структурные элементы характерные для границы  $\Sigma 11(113)$ . Проведен расчет коэффициентов зернограницной диффузии и построены аррениусовские зависимости, по которым определены энергии активации диффузии. Зависимости имеют от двух до трех линейных участков. Обнаружено, что при высоких температурах зернограницная область аморфизируется раньше прилегающих зерен. Это позволяет утверждать, что границы плавятся при более низких температурах, которые составили от 0.91 до 0.98 температуры плавления.

**Ключевые слова:** границы зерен, компьютерное моделирование, зернограницная диффузия, зернограницное плавление.

DOI: 10.61011/FTT.2024.05.58069.105

### 1. Введение

Хорошо известно, что скорость диффузии по границам зерен (ГЗ) значительно выше, чем внутри зерна [1]. Высокая скорость диффузии по ГЗ обусловлена значительным избыточным свободным объемом, и повышенной энергией атомов в области границы. Литературные данные по диффузии достаточно обширны. Однако, объектом исследования чаще всего являются хорошо изученные специальные границы с низким индексом обратной плотности совпадающих узлов  $\Sigma$ . Следует отметить, что экспериментальное исследование диффузии затрудняется тем, что интерпретация экспериментальных результатов иногда неоднозначна из-за неоднородности структуры границ и невозможности строгой аттестации границ. Компьютерное моделирование процессов диффузии позволяет исследовать ГЗ имеющие точные значения оси и угла разориентации, плоскости залегания границы и других ее параметров. Кроме того компьютерный эксперимент позволяет обнаружить эффекты которые не удастся получить экспериментальными методами. Так в работе [2] исследование диффузии по ГЗ с малыми значениями  $\Sigma$  показало, что в диффузионное движение зависит от структуры границы, а зависимости Аррениуса имеют линейный вид для всех границ и всех направлений. Однако вблизи температуры плавления [3] диффузия становится практически независимой от структуры границы, а аррениусовская зависимость изменяет свой наклон. Такой же результат зафиксировали авторы [4–5] которые исследовали специальные границы

наклона границы  $\Sigma 5$  с осью разориентации [100]. Наличие нескольких линейных участков температурной зависимости было обнаружено в работе [6] при исследовании симметричных границам зерен наклона в интерметаллиде  $\text{Ni}_3\text{Al}$ .

В других работах, например, [7] зависимости Аррениуса имеют линейный характер во всем интервале температур, а энергия активации и предэкспоненциальный множитель коэффициента диффузии сильно анизотропны и зависят от угла разориентации ГЗ. Подобный результат получен в работе [8] при исследовании специальных границ  $\Sigma 5(012)$  и  $\Sigma 5(013)$ . А в работе [9] отмечается анизотропия диффузии водорода по специальной ГЗ  $\Sigma 19$  в ОЦК железе, связанная со строением границы.

Исследованию диффузии по несимметричным границам зерен было проведено в работе [10]. В качестве объектов исследования выбрана специальная ГЗ  $\Sigma 5(013)$  в никеле и серия несимметричных границ с таким же углом разориентации. Показано, что коэффициент самодиффузии сильно зависит от плоскости залегания границы при низкой температуре, но практически не зависит при высокой температуре. Энергия активации диффузии по симметричной границе значительно выше, чем по несимметричным.

### 2. Структура несимметричных границ зерен

Настоящая работа посвящена изучению диффузии по несимметричным границам зерен в алюминии с уг-

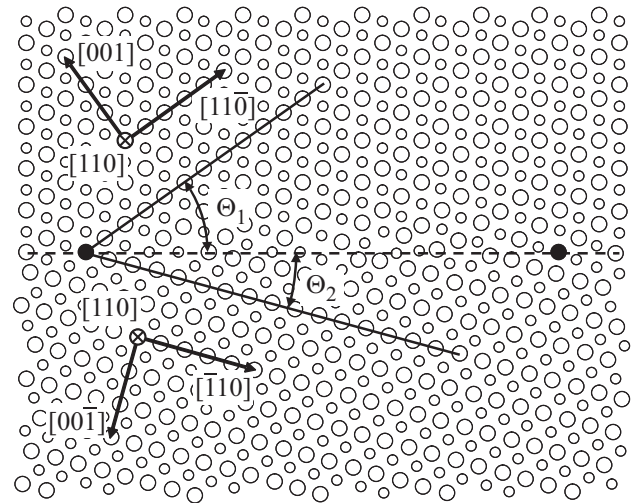
**Таблица 1.** Кристаллографические параметры ГЗ: обратная плотность совпадающих узлов ( $\Sigma$ ), плоскость залегания границы ( $hkl$ ) и углы разориентации несимметричных границ ( $\Theta_1, \Theta_2$ )

$\Sigma$	$hkl$	$\Theta_1, ^\circ$	$\Theta_2, ^\circ$
51	1110	8.0494	42.4293
33	118	10.0249	40.4538
19	116	13.2627	37.2161
27	115	15.7932	34.6856
9	114	19.4712	31.0076
11	113	25.2394	25.2394
41	338	27.9384	22.5405
33	225	29.4962	20.9826
3	112	35.2644	15.2144
17	223	43.3139	7.1649
17	334	46.6861	3.7927

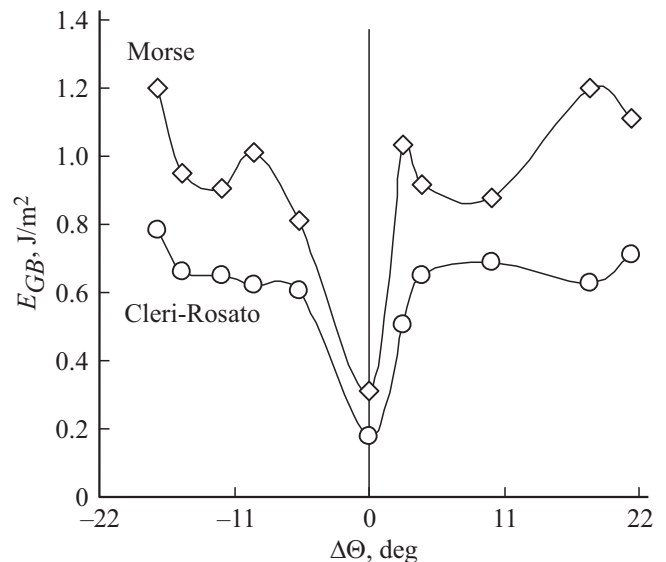
лом разориентации  $\Theta = 50.48^\circ$  в интервале температур  $0.45T_m < T < T_m$ , где  $T_m$  — температура плавления. Данный угол был выбран в связи с тем что он является углом разориентации симметричной границы наклона  $\Sigma 11(113)$  с осью разориентации  $[110]$ , которая выделена на энергетических кривых [11–13]. На рис. 1 представлена схема построения несимметричных ГЗ изучаемых в данной работе, при этом оси лабораторной системы координат располагались следующим образом: ось  $Ox$  совпадает с осью разориентации границы; ось  $Oy$  — вдоль плоскости границы перпендикулярно оси разориентации; ось  $Oz$  — перпендикулярно плоскости ГЗ. Данные границы сформированы поворотом верхнего кристалла на углы  $\Theta_1$ , значения которых соответствуют специальным границам зерен, а  $\Theta_2$  берется такой, чтобы в сумме этих двух углов получалось значение  $\Theta = 50.48^\circ$ . Углы  $\Theta_1$  равны половине углов разориентации симметричных границ зерен, которые в модели РСУ являются специальными ГЗ с обратной плотностью совпадающих узлов  $\Sigma$ . Значения  $\Sigma$  и соответствующие им углы  $\Theta_1$  приведены в табл. 1. В таблице также приведены значения углов  $\Theta_2$  и индексы Миллера ( $hkl$ ) плоскости залегания границы относительно верхнего кристалла, которые мы будем использовать для идентификации границ.

В качестве исходной конфигурации атомов вблизи ГЗ использовалась простая геометрическая процедура как в модели РСУ, т.е. две половинки бикристалла поворачиваются вокруг оси, проходящей через один из атомных рядов. При этом угол поворота одного из сопрягающихся кристаллических блоков не зависит от другого.

Расчеты проводились с использованием парного потенциала Морзе [14] и многочастичного потенциала Клери–Розато [15]. Параметры потенциала Морзе взяты из [16], а Клери–Розато из [15]. Сравнение данных, полученных при использовании двух разных потенциалов, показало, что структура ГЗ не зависит от выбора вида потенциала [17]. Простое геометрическое построение



**Рис. 1.** Построение несимметричных границ зерен.



**Рис. 2.** Энергия несимметричных границ зерен.

границы предполагает, что часть атомов в области ГЗ находятся на расстоянии, отличающемся от равновесного, в результате чего граница имеет высокое значение энергии. Введение дополнительных атомов и вакансий стабилизирует структуру границы и значительно понижает ее энергию [18]. Данная процедура называется вакансионной релаксацией [19–20]. После вакансионной релаксации проводится смещение атомов под действием межатомных сил, которое дополнительно понижает энергию ГЗ и стабилизирует ее структуру.

Для сравнения энергий исследуемых ГЗ на рис. 2 изображены зависимость энергии ГЗ от параметра  $\Delta\Theta = \Theta_1 - \Theta/2$ . Значению  $\Delta\Theta = 0$  соответствует симметричная граница  $\Sigma 11(113)$ , а остальные несимметричные ГЗ. Видно, что ГЗ  $\Sigma 11(113)$ , являющаяся специальной, имеет значительно более низкую энергию,

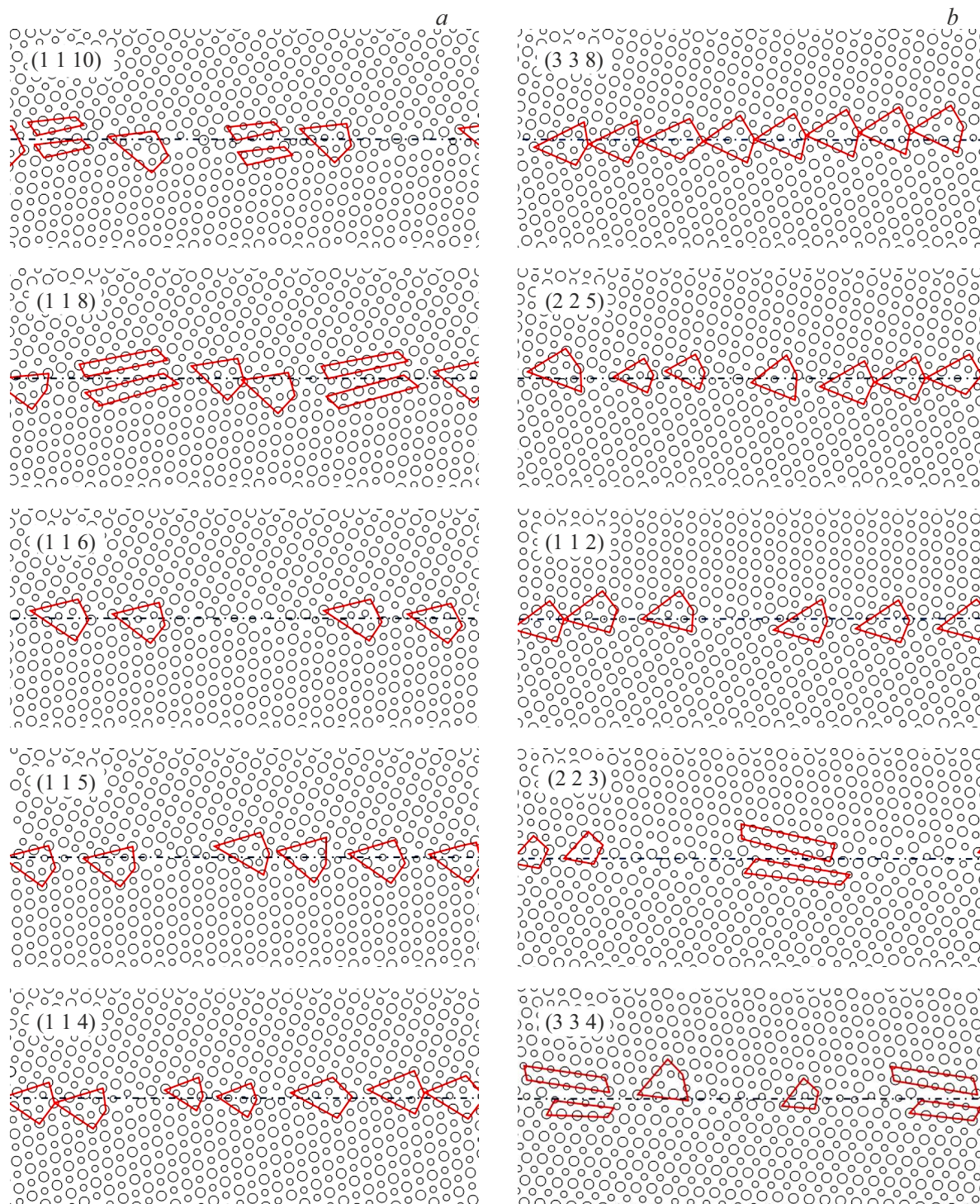


Рис. 3. Структура несимметричных границ зерен: а)  $\Theta_1 < \Theta/2$ ; б)  $\Theta_1 > \Theta/2$ .

чем несимметричные границы как при использовании парного, так и многочастичного потенциала.

В работах [17,21] было показано, что симметричная граница  $\Sigma 11(113)$  состоит из одинаковых структур элементов, которые строго чередуются друг с другом. Изучение структуры несимметричных границ показало, что все они содержат такие же структурные элементы

(рис. 3), которые являются деформированными и развернутыми относительно плоскости границы, причем, чем больше разница между  $\Theta_1$  и  $\Theta_2$ , тем более деформированы эти элементы. Расстояние между элементами изменяется от минимального до нескольких параметров решетки. Некоторые границы содержат в своей структуре небольшое количество базовых структурных элемен-

тов границы  $\Sigma 3(112)$ . Границы углы  $\Theta_1$  и  $\Theta_2$  которых сильно отличаются, имеют в своей структуре участки, где примыкают почти идеальные кристаллы. Границы (116) и (223) содержат в своей структуре достаточно большие участки, которые не удалось описать в рамках модели структурных единиц.

### 3. Методика исследования изотропии атомных перескоков атомов

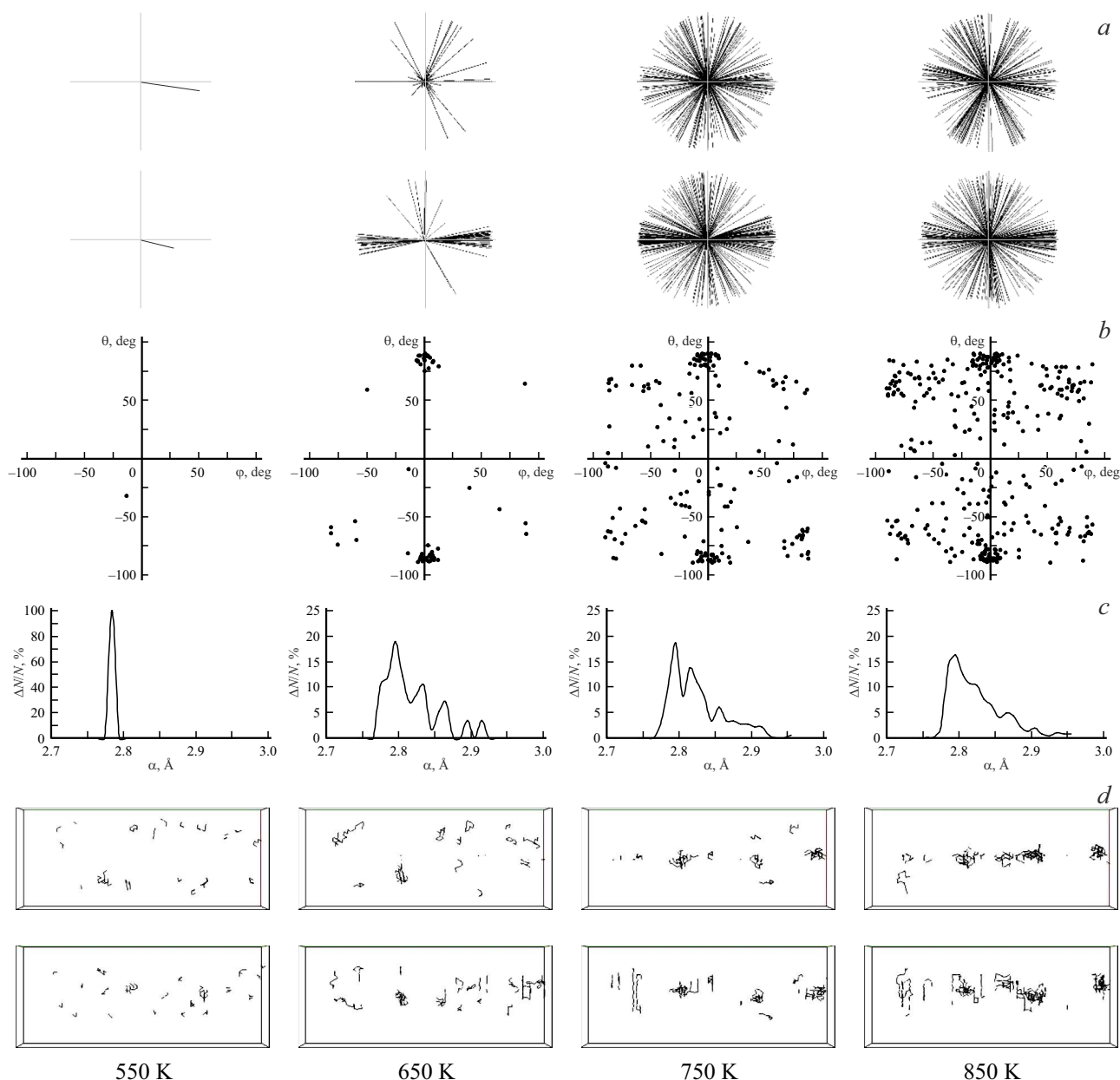
Как показано в работе [22] выделяют три основных механизма зернограничной самодиффузии: вакансионный, трубочный и миграция атомов по зернограничным вакансиям. При вакансионном механизме вакансии мигрируют по местам атомов в структурной единице. Направления перескоков отражают атомную конфигурацию структурных единиц. Данный механизм реализуется в ГЗ с низким значением избыточного объема и достаточно однородным по распределению. Миграция атомов по зернограничным вакансиям, образование которых происходит за счет перестройки структуры ГЗ при тепловом движении атомов, это блуждание атомов из одной структурной единицы в другую. Образование зернограничной вакансии может происходить в любой области структурной единицы, поэтому направления перескоков по распределенным вакансиям имеют хаотический характер. Трубочный механизм — это механизм, при котором осуществляется перемещение атомов по тем ГЗ в которых имеются каналы с повышенным, по сравнению со средним значением, локальным свободным объемом. Для определения механизмов самодиффузии отслеживалось индивидуальное движение атомов. Направление и величина скачка представляется в виде отрезка, соединяющего начальное и конечное положения атома. Для анализа всей совокупности перемещений атомов в работе использовался следующий прием: в течении некоторого интервала времени отслеживались все скачки атомов в области дефекта. Определялись координаты начального и конечного положения атомов. Затем, все отрезки совмещались точками своих начальных положений, в результате, получалась трехмерная фигура, дающая наглядное представление об изотропии элементарных перескоков атомов в процессе диффузии. Полученные фигуры были названы ежами [23]. На рис. 4, *a* представлены проекции ежей на плоскость перпендикулярную оси разориентации (верхняя проекция) и плоскость ГЗ (нижняя проекция) для специальной ГЗ  $\Sigma 11(113)$  при различных температурах. Однако использование ежей хотя и удобно для наглядного представления об изотропии перескоков, все же недостаточно для проведения анализа. При проведении анализа мы использовали картины, названные нами картами изотропии, которые строились следующим образом. В сферической системе координат направление перескоков определяется углом  $\varphi$ , отсчитываемым от оси разориентации в плоскости ГЗ, и углом  $\theta$  от направления перпендикуляра к плоскости границы. Каждый

перескок отмечался точкой на плоскости координатами которой являются углы  $\varphi$  (горизонтальная ось) и  $\theta$  (вертикальная ось). Карты изотропии перескоков для границы  $\Sigma 11(113)$  изображены на рис. 4, *b*. Если точка попадает в область карты с координатами  $\varphi$  близкими к нулю, то такой перескок совершается вдоль оси разориентации границы, а если этот угол близок к  $\pi/2$  — перпендикулярно ей. Если угол  $\theta$  близок к нулю, то перескоки совершаются перпендикулярно плоскости границы, а если этот угол близок к  $\pi/2$  — то в плоскости ГЗ.

Из рисунка видно, что при низких температурах (550 К и 650 К) наблюдается явно выраженная анизотропия перескоков. Наибольшее число перескоков соответствует углам  $\varphi \approx 0^\circ$  и  $\theta \approx 90^\circ$ , что соответствует перескокам в плоскости границы вдоль оси разориентации. Данное обстоятельство обусловлено строением границы, которая состоит из коротких структурных элементов и в границе отсутствуют каналы для беспрепятственного движения атомов. По мере увеличения температуры все более проявляется хаотическая компонента. Если при температуре 650 К перескоков под углом к оси разориентации гораздо меньше чем под углом к ней, то уже при 750 К таких перескоков гораздо больше, чем вдоль оси, что свидетельствует о смене механизма диффузии. По длине скачка атома  $a$  можно судить о доле перемещений атомов по вакансионному механизму. При вакансионном механизме длина скачка равна межатомному расстоянию. На рис. 4, *c* приведены функции распределения количества скачков от их длины, выраженные в процентах при различных температурах. Видно, что с увеличением температуры доля скачков соответствующих межатомному расстоянию уменьшается, тогда как доля более длинных скачков значительно возрастает. Это так же свидетельствует о значительной доле перескоков по механизму миграции атомов по зернограничным вакансиям.

В процессе самодиффузии по вакансионному механизму происходит последовательное перемещение атомов на одно межатомное расстояние. Вакансия же, вызывающая данную серию перескоков, может перемещаться на большие расстояния. Совокупность всех перескоков за определенный интервал времени при определенной температуре создает трехмерную картину траекторий движения вакансий, которая проецировалась на плоскость перпендикулярную к оси разориентации ГЗ (верхняя проекция) и на плоскость границы (нижняя проекция) в зависимости от температуры (рис. 4, *d*). При низких температурах движение атомов имеет явно выраженный вакансионный характер, причем скачки в границе практически отсутствуют. При повышении температуры увеличивается доля перескоков в границе, при этом атомы двигаются преимущественно вдоль оси разориентации. При дальнейшем увеличении температуры практически все скачки лежат в плоскости границы, но наряду с диффузией вдоль оси разориентации наблюдается большое количество хаотичных перемещений атомов.





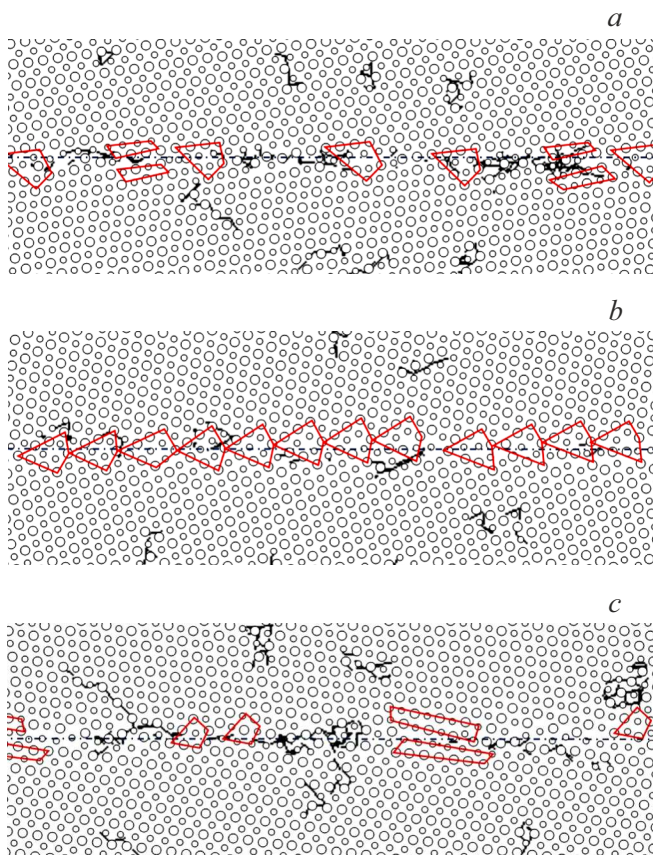
**Рис. 4.** Зависимость изотропии самодиффузии по специальной ГЗ  $\Sigma_{11}(113)$  от температуры: а) ежи; б) карты изотропии; в) длина скачков атомов; д) треки вакансий.

#### 4. Изотропия атомных перескоков атомов несимметричных границ зерен

Анализ ежей и карт анизотропии для несимметричных ГЗ показал, что для всех температур наблюдается выделенное направление перескоков вдоль оси разориентации. Однако, с увеличением температуры перескоки приобретают значительную хаотическую составляющую. По картам изотропии было определено, что для всех температур отсутствуют перескоки с углом  $\varphi = 0^\circ$ , то есть атомы не перемещаются перпендикулярно плоскости ГЗ. При самой низкой температуре несколько границ

не имеет явно выраженных направлений перескоков, это границы (1110), (118) и (112). Но по мере повышения температуры доля скачков вдоль оси разориентации все больше возрастает. В интервале температур от 650 до 750 К для всех границ значительно возрастает хаотическая составляющая в ориентации скачков. При высоких температурах, порядка 900 К, атомы совершают скачки практически в любых направлениях вдоль ГЗ, хотя статистически наибольшее количество скачков по-прежнему происходит вдоль оси разориентации.

Полную картину об изотропии движения атомов можно получить, если одновременно рассмотреть ежи, карты изотропии и треки вакансий. Изучение треков показало,



**Рис. 5.** Диаграммы перескоков атомов с наложенными на них структурными элементами: а) (1110); б) (338); в) (223).

что при низких температурах перескоки совершается в локальных областях границы. Интенсивность перескоков зависит от кристалло-геометрии границы и степени деформации структурных элементов. В частности для двух границ (1110) и (334) углы  $\Theta_1$  и  $\Theta_2$  отличаются друг от друга достаточно сильно, поэтому в их структуре есть сильно деформированные структурные элементы. С другой стороны границы содержат участки которые не удалось описать в рамках модели структурных единиц. Как следствие диффузионное движение происходит по всей плоскости границы равномерно, причем наиболее интенсивно диффузия происходит по сильно деформированным участкам границы. В качестве примера, на рис. 5, а изображена граница (0110) с наложением диффузионного движения на нее. И наоборот, граница (338) имеет в своей структуре много почти идеальных структурных элементов, поэтому большие участки данной ГЗ не подвержены диффузионному движению атомов (рис. 5, б).

По мере увеличения температуры интенсивность перескоков атомов возрастает, а ширина диффузионной зоны увеличивается. Кроме того, как показано в работе [24], решеточные вакансии в процессе диффузионного движения стекаются к границе. При больших температурах диффузионная зона имеет ширину порядка двух

параметров решетки, а перескоки совершаются почти по всей длине границы. Анализ показал, что в процессе нагрева в структуре границ образуются области с сильно деформированной структурой, в которой и происходит наиболее интенсивное движение атомов. Таким образом, смена механизма самодиффузии происходит и в несимметричных ГЗ. Однако в силу нерегулярности структуры таких границ эти изменения происходят не так явно, как для специальных ГЗ.

Как было отмечено выше две границы (116) и (223) содержат в своей структуре достаточно большие участки, которые не удалось описать в рамках модели структурных единиц. Данные участки так же являются участками границы с ускоренной диффузией даже при малых температурах (рис. 5 в).

## 5. Параметры зернограничной диффузии

Как следует из рис. 4, в, при диффузии по ГЗ расстояние перескока близко к радиусу первой координационной сферы, так как структура границы сохраняет ближний порядок. Межатомные расстояния в области границы могут уменьшаться или увеличиваться на несколько процентов, что не превышает обычные значения погрешности при экспериментальных определениях коэффициента диффузии. Поэтому предположение о длине единичного перескока равного радиусу первой координационной сферы является допустимым при исследовании механизмов диффузии в областях с избыточным и стесненным свободным объемом. Однако, энергия активации диффузии в области ГЗ может существенно понижаться. Параметры самодиффузии в данной работе находились из наблюдений за перемещением атомов в процессе нагрева кристалла, содержащего границу. Коэффициенты самодиффузии определялись по количеству перескоков атомов ( $\Gamma$ ) в соответствии с выражением  $D_{GB} = \frac{1}{6} \alpha^2 \Gamma = \frac{1}{12} a^2 \Gamma$  [25], где  $\alpha = r_1 = a\sqrt{2}/2$  — расстояние, на которое атом совершает единичный скачок. На рис. 6, а представлены результаты расчетов коэффициентов диффузии для ГЗ  $\Sigma 11(113)$  с использованием разных потенциалов. Как видно из рисунка коэффициенты диффузии имеют близкие значения. Кроме того на зависимости явно прослеживается два линейных участка, а следовательно при определенной температуре происходит смена механизма диффузии. Как было показано в работе [26] изменение наклона аррениусовской зависимости связано с перестройкой структуры данной границы.

На рис. 6, б приведены зависимости коэффициентов диффузии для несимметричных ГЗ от температуры. Каждая точка является усредненным значением коэффициента диффузии, полученным с использованием потенциала Морзе и Клеры–Розато. Для удобства эти зависимости разнесены по вертикальной оси, так как значения коэффициентов диффузии имеют близкие значения. Для границ с  $\Theta_1 < \Theta/2$  значения логарифма коэффициентов

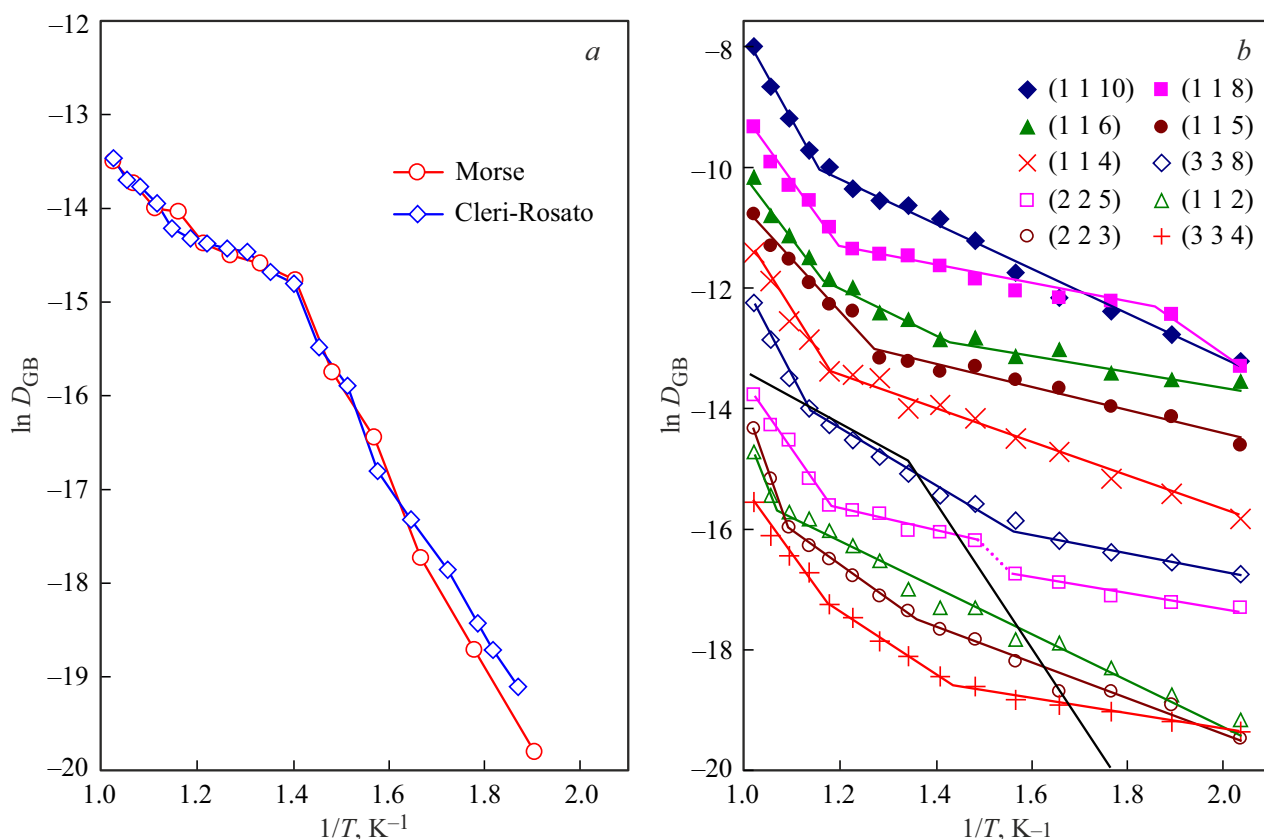


Рис. 6. Температурные зависимости  $\ln D_{GB}$ : а) специальная ГЗ  $\Sigma 11(113)$ ; б) несимметричные ГЗ.

диффузии увеличены, а для  $\Theta_1 > \Theta/2$  уменьшены путем добавления  $\pm 0.5, \pm 1.0, \pm 1.5$  и т.д. Для сравнения на рисунке приведена зависимость для симметричной ГЗ  $\Sigma 11(113)$ , значения коэффициентов диффузии для которой не изменены.

На зависимостях можно выделить высокотемпературную ( $1/T < 1.25 \cdot 10^{-3} \text{ K}^{-1}$ ) и низкотемпературную ( $1/T > 1.25 \cdot 10^{-3} \text{ K}^{-1}$ ) области. Наклоны зависимостей в высокотемпературной области для всех границ практически одинаковы. Это можно объяснить тем, что при высокой температуре структура границ утрачивает свою индивидуальность в связи с высокой подвижностью атомов. Зависимости в низкотемпературной области имеют от одного до двух линейных участков. Различный наклон графиков можно интерпретировать как изменение преимущественного механизма зернограничной диффузии при нагреве, связанного с перестройкой структуры границы. Для большинства границ наклон зависимостей увеличивается с увеличением температуры. Исключение составляет граница (118) для которой наклон уменьшается.

По графикам были определены параметры аррениусовских зависимостей зернограничной самодиффузии в низкотемпературной области. Значения параметров самодиффузии ( $D_0$  и  $Q$ ) приведены в табл. 2. Увеличение энергии активации с повышением температуры связано, видимо, с трансформацией структурных эле-

ментов границ и увеличением доли перескоков атомов по зернограничным вакансиям. Исключение составляет граница (118) у которой энергия активации уменьшается. В структуре этой границы имеются большие участки, где примыкают почти идеальные кристаллы, которые сопрягаются по разным кристаллографическим плоскостям, диффузия по которым затруднена. С повышением температуры структуры деформируются, что и приводит к облегчению диффузии.

## 6. Плавление несимметричных границ зерен

Высокотемпературные участки зернограничной диффузии характеризуются почти одинаковыми наклонами аррениусовской зависимости, но захватывают различные температурные интервалы. Так для ГЗ (115) этот участок начинается при температурах  $\sim 750 \text{ K}$ , для границ (112) и (223) более  $900 \text{ K}$ , а для остальных при различных температурах около  $800 \text{ K}$ . Это дает право предполагать, что плавление ГЗ также происходит при различных температурах. В работе [27] была разработана методика определения температуры плавления ГЗ и показано, что границы могут плавиться как при температуре ниже температуры плавления монокристалла, так и выше нее. В нашей работе молекулярно-динамический

**Таблица 2.** Параметры зернограничной самодиффузии в низкотемпературной области: энергия активации (в kJ/mol и eV) и предэкспоненциальный множитель ( $\text{cm}^2/\text{s}$ )

ГЗ	$Q$ , kJ/mol	$Q$ , eV	$D_0$ , $\text{cm}^2/\text{s}$
$\Theta_1 < \Theta/2$			
1110	26.9	0.277	$4.89 \cdot 10^{-09}$
118	12.1	0.125	$3.78 \cdot 10^{-10}$
	41.6	0.429	$5.69 \cdot 10^{-7}$
116	23.0	0.237	$1.92 \cdot 10^{-09}$
	9.2	0.095	$1.48 \cdot 10^{-10}$
115	13.2	0.136	$3.98 \cdot 10^{-10}$
114	20.9	0.216	$1.64 \cdot 10^{-09}$
$\Theta_1 > \Theta/2$			
338	29.5	0.304	$9.24 \cdot 10^{-09}$
	10.5	0.109	$1.86 \cdot 10^{-10}$
225	14.7	0.151	$6.47 \cdot 10^{-10}$
	8.5	0.088	$1.27 \cdot 10^{-10}$
112	26.8	0.276	$4.72 \cdot 10^{-09}$
223	39.3	0.405	$4.28 \cdot 10^{-08}$
	20.6	0.212	$1.69 \cdot 10^{-09}$
334	33.1	0.393	$3.61 \cdot 10^{-08}$
	9.6	0.099	$2.11 \cdot 10^{-10}$

эксперимент проводился до температур, при которых бикристалл, содержащий границу, полностью терял упорядоченность структуры, т.е. приходил в расплавленное состояние. Для сравнения мы провели эксперимент по плавлению монокристалла с равновесным количеством

вакансий по методике, описанной в [27] с использованием как потенциала Морзе, так и потенциала Клери–Розато.

Расчеты показали, что границы плавятся при различных температурах ниже температуры плавления монокристалла. Данные по этим температурам приведены в табл. 3.

Значения температуры плавления ГЗ  $T_{GB}$  представлены относительно температуры плавления монокристалла  $T_m$  с равновесным количеством вакансий. Самую высокую температуру плавления имеют границы (118), (338) и (112). В структуре границы (118) содержатся значительные участки с правильной атомной структурой, а значение энергии активации диффузии этой границы (табл. 2) имеет самое большое значение из всех изученных ГЗ. Структура границы (338) состоит из структурных элементов, плотно прилегающих друг к другу и лежат близко от плоскости ГЗ. Кроме того углы  $\Theta_1$  и  $\Theta_2$  имеют близкие значения, поэтому структурные элементы в этой границе являются наименее деформированными. Вследствие этого диффузионное движение атомов в области этой границы незначительно (рис. 5 b). Подобная ситуация наблюдается и для границы (112) которая содержит достаточно правильные структурные элементы, расположенные на одинаковом расстоянии друг от друга, а аррениусовская зависимость содержит один линейный участок. Самую низкую температуру имеют границы (223) и (334). Они состоят из наиболее деформированных структурных элементов и содержат большие участки, которые не удалось описать в рамках модели структурных элементов. Диффузия атомов по этим участкам протекает наиболее интенсивно (рис. 5, c), что и влияет на температуру разупорядочения зернограничного слоя. Температура плавления остальных границ составляет в среднем  $0.95T_m$ .

**Таблица 3.** Температура плавления несимметричных ГЗ ( $T_{GB}/T_m$ ), область зарождения жидкой фазы и ширина проплавленной зоны

ГЗ	Морзе			Клери–Розато		
	$T_{GB}/T_m$	Область зарождения жидкой фазы	Ширина проплавленной зоны	$T_{GB}/T_m$	Область зарождения жидкой фазы	Ширина проплавленной зоны
$\Theta_1 < \Theta/2$						
(1110)	0.951	<i>top</i>	<i>low</i>	0.962	<i>top</i>	<i>low</i>
(118)	0.977	<i>centre</i>	<i>middle</i>	0.968	<i>top</i>	<i>high</i>
(116)	0.946	<i>top</i>	<i>low</i>	0.949	<i>centre</i>	<i>middle</i>
(115)	0.954	<i>centre</i>	<i>high</i>	0.943	<i>top</i>	<i>middle</i>
(114)	0.960	<i>top</i>	<i>middle</i>	0.956	<i>centre</i>	<i>middle</i>
$\Theta_1 > \Theta/2$						
(338)	0.960	<i>centre</i>	<i>high</i>	0.987	<i>centre</i>	<i>high</i>
(225)	0.948	<i>centre</i>	<i>high</i>	0.955	<i>bottom</i>	<i>middle</i>
(112)	0.963	<i>centre</i>	<i>high</i>	0.968	<i>centre</i>	<i>high</i>
(223)	0.931	<i>bottom</i>	<i>low</i>	0.917	<i>bottom</i>	<i>low</i>
(334)	0.937	<i>bottom</i>	<i>middle</i>	0.911	<i>bottom</i>	<i>low</i>



В таблице также отражены области, в которых происходит зарождение жидкой фазы и ширина расплавленного слоя. Словом „*top*“ обозначено зерно с углом  $\Theta_1$ , „*bottom*“ — зерно с углом  $\Theta_2$ . Если жидкая фаза зарождается в плоскости границы, то „*center*“. Ширина проплавленной зоны составила „*low*“ менее двух параметров кристаллической решетки, „*middle*“ — от двух до четырех параметров решетки, „*high*“ — более четырех параметров решетки.

## 7. Выводы

В работе проведено исследование зернограницной самодиффузии по несимметричным границам зерен с осью разориентации [110]. Проведено сопоставление характера самодиффузии и структуры границ. Исследованы процессы высокотемпературной зернограницной диффузии. По работе сделаны следующие выводы.

1. Все исследованные несимметричные границы состоят из таких же структурных элементов, как и специальная граница  $\Sigma 11(113)$ , которые являются деформированными и развернутыми относительно плоскости границы. Расстояние между элементами изменяется от нуля до полутора параметров решетки. Половина границ имеют в своей структуре участки, в которых зерна сопрягаются почти без искажения решеток. Для некоторых границ существуют участки, которые не удалось описать в модели структурных единиц.

2. Перескоки атомов в проекции на плоскость перпендикулярной оси разориентации показывают анизотропию перескоков для всех температур. С увеличением температуры перескоки приобретают значительную хаотическую составляющую. В проекции на плоскость ГЗ анизотропия перескоков является гораздо менее выраженной. Диффузия происходит наиболее активно по тем ГЗ структурные элементы которых наиболее деформированы. Участки границ, которые не удалось описать в рамках модели структурных единиц, также является участками с ускоренной диффузией.

3. Построены зависимости Аррениуса по которым определены параметры зернограницной диффузии. На зависимостях можно выделить высокотемпературную и низкотемпературную области. Наклоны всех графиков в высокотемпературной области одинаковые, т.к. при высокой температуре границы утрачивает свою структурную индивидуальность. В низкотемпературной области графики имеют от одного до двух линейных участков. Изменение наклона можно интерпретировать как смену преимущественного механизма самодиффузии.

4. Проведено исследование плавления по границам зерен. При высоких температурах зернограницная область аморфизируется раньше прилегающих зерен. Это позволяет утверждать, что границы плавятся при более низких температурах, которые составили от 0.91 до 0.98 температуры плавления монокристалла с равновесным количеством вакансий.

## Конфликт интересов

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

## Список литературы

- [1] В. Зайт Диффузия в металлах. ИЛ, М. (1958). 381 с.
- [2] A. Suzuki, Y. Mishin. *Interface Sci.* **11**, 1, 131 (2003).
- [3] A. Suzuki, Y. Mishin. *J. Mater. Sci.* **40**, 12, 3155 (2005).
- [4] T. Frolov, Y. Mishin. *Phys. Rev. B* **79**, 17, 174110 (2009).
- [5] T. Frolov, D.L. Olmsted, M. Asta, Y. Mishin. *Nature Commun.* **4**, 1899 (2013).
- [6] Е.Г. Харина, М.Д. Старостенков, Г.М. Полетаев, Р.Ю. Ракитин. *ФТТ* **53**, 5, 980 (2011).
- [7] R. Mohammadzadeh, M. Mohammadzadeh. *J. Appl. Phys.* **124**, 3, 035102 (2018).
- [8] И.И. Новоселов, А.Ю. Кукин, А.В. Янилкин. *ФТТ* **56**, 5, 988 (2014).
- [9] S. Yang, S.-H. Yun, T. Oda. *Fusion Eng. Des.* **131**, 105 (2018).
- [10] M.I. Mendeleev, H. Zhang, D.J. Srolovitz. *J. Mater. Res.* **20**, 5, 1146 (2005).
- [11] J.D. Rittner, D.N. Seidman. *Phys. Rev. B* **54**, 10, 6999 (1996).
- [12] E.R. Homer, S.M. Foiles, E.A. Holm, D.L. Olmsted. *Acta Mater.* **61**, 4, 1048 (2013).
- [13] А.В. Векман, А.С. Драгунов, Б.Ф. Демьянов, Н.В. Адарич. *Изв. вузов. Физика* **55**, 7, 65 (2012).
- [14] P.M. Morse. *Phys. Rev.* **34**, 1, 57 (1929).
- [15] F. Cleri, V. Rosato. *Phys. Rev. B* **48**, 1, 22 (1993).
- [16] А.И. Царегородцев, Н.В. Горлов, Б.Ф. Демьянов, М.Д. Старостенков. *ФММ* **58**, 2, 336 (1984).
- [17] А.В. Векман, Б.Ф. Демьянов. *ФТТ* **63**, 1, 55 (2021).
- [18] А.В. Векман, Б.Ф. Демьянов. *ФММ* **120**, 1, 53 (2019).
- [19] М.Д. Старостенков, Б.Ф. Демьянов, А.В. Векман. *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования* **4**, 54 (2000).
- [20] А.В. Векман, Б.Ф. Демьянов, М.Д. Старостенков. *Изв. вузов. Черная металлургия* **2**, 39 (2001).
- [21] А.В. Векман, Б.Ф. Демьянов. *ФПСМ* **14**, 4, 480 (2017).
- [22] Б.Ф. Демьянов, А.С. Драгунов, А.В. Векман. *Механизмы самодиффузии по границам зерен в алюминии. Изв. АлтГУ. 1–2 (65)*. 158 (2010).
- [23] А.С. Драгунов. Автореф. канд. физ.-мат. наук, Барнаул (2012). 23 с.
- [24] А.В. Векман, Б.Ф. Демьянов, А.С. Драгунов. *ФММ*. **116**, 6, 621 (2015).
- [25] Б.С. Бокштейн. *Атомы блуждают по кристаллу. Наука, М.* (1984). 208 с.
- [26] А.В. Векман, Б.Ф. Демьянов, И.А. Шмаков. *Изв. АлтГУ 1–2 (77)*, 141 (2013).
- [27] А.В. Векман, Б.Ф. Демьянов, А.С. Драгунов. *Изв. вузов. Физика* **58**, 12, 58 (2015).

Редактор Т.Н. Василевская