01,14

Влияние зернограничных сегрегаций на прочность в бикристаллах Al, легированного Mg и Ni. Результаты MD-моделирования

© Л.Е. Карькина, И.Н. Карькин

Институт физики металлов УрО РАН,
Екатеринбург, Россия

E-mail: lidiakarkina@gmail.com

Поступила в Редакцию 28 января 2026 г.
В окончательной редакции 20 февраля 2026 г.
Принята к публикации 20 февраля 2026 г.

С использованием атомистического моделирования изучено влияние упорядоченных зернограничных сегрегаций в сплавах Al−3 at.%Mg и Al−3 at.%Ni на разрушение по границам зерен (ГЗ). Показано, что для симметричных и асимметричных границ зерен специального типа Σ5 с осью наклона ⟨001⟩ сопротивление разрушению по ГЗ для сплава Al−Ni существенно возрастает по сравнению с Al. Для Al−Mg влияние сегрегаций Mg на ГЗ является слабо выраженным, не однозначным и зависит от типа плоскости в пределах ширины ГЗ, по которой происходит разрушение.

Ключевые слова: сегрегации, границы зерен, атомистическое моделирование, зернограничное разрушение.

DOI: 10.61011/FTT.2026.02.62713.9028

1. Введение

Границы зерен (ГЗ) оказывают существенное влияние на такие свойства материалов, как прочность, пластичность, сопротивление к разрушению, на коррозионную стойкость и т.д. Структура ГЗ и их влияние на прочностные характеристики сплавов, образование сегрегаций, фазовые превращения интенсивно изучались в последние десятилетия как экспериментально, так и теоретически, с привлечением методов моделирования различного масштабного уровня [1–3]. Хотя проблема сегрегаций на границах зерен привлекает внимание исследователей уже много лет, их влияние на структуру и свойства границ зерен остается предметом дискуссий. Роль сегрегации по границам зерен становится особенно важной в ультрамелкозернистых материалах, где доли атомов по границам зерен и в объеме сопоставимы [2,3]. В этом случае образование сегрегаций на границах зерен существенно изменяет условия фазового равновесия [4–6] и термической стабильности микроструктуры [7,8]. Сплавы Al−Mg и Al−Zn являются яркими примерами существенной зависимости сегрегации от химического состава легирующих элементов. В частности, для системы Al−Mg было замечено, что атомы Mg имеют тенденцию к образованию гетерогенных агломераций на границах зерен [4,9], что приводит к дополнительному упрочнению. Однако природа наблюдаемых особенностей сегрегации до сих пор точно не известна.

Методы компьютерного моделирования, такие как теория функционала плотности, молекулярная динамика и другие, являются важным дополнением к экспериментальным наблюдениям за поведением сегрегации на границах зерен. Результаты атомистического моделирования сегрегации примесей на границах зерен позволяют идентифицировать важные параметры, связанные с характеристиками границ зерен (энергия, структура и избыточный объем), а также с характеристиками атома примеси (энтальпия растворения, ионный радиус). Например, в [4] показано, что в Al сплавах сегрегация на ГЗ таких примесей, как Zn, Mg, Cu, могут существенно повысить стабильность ультрамелких зерен в сплавах по сравнению с чистым Al. В ряде теоретических работ [5–8] исследовали декогезию на ГЗ в Al, декорированных указанными выше примесями. Основное внимание уделялось исследованию специальных симметричных ГЗ, разделяющих два зерна по плоскости с низкими индексами Миллера. Даже в этих случаях были получены противоречивые результаты. Так в работах [6,8] было показано, что сегрегация Mg приводит к небольшому возрастанию зернограничной декогезии, тогда как в [5,7] было получено уменьшение когезионной прочности ГЗ Al, декорированного Mg. В [9] показано, что эффект упрочнения или разупрочнения зависит от концентрации примесных атомов, помещенных в энергетически выгодные позициях вблизи ГЗ: для изолированной примеси атомы Mg демонстрируют охрупчивающий эффект, при увеличении концентрации — упрочняющий.

В [10] было установлено, что в процессе сегрегации легирующих элементов область вблизи границы зерна может испытывать структурную реконструкцию. Более того, как показано в [10,11], даже образование тонких (однослойных) сегрегаций может приводить к значительному изменению структуры ГЗ. Характер реконструкции ГЗ зависит от типа границы, а также от особенностей химической связи между атомами легирующего элемента и матрицы. Для ГЗ общего типа или границ, отклоняющихся от специальных симметричных ГЗ, ситуация является еще более сложной. Недавно было

установлено [12–14], что формирование сегрегаций легирующих элементов может вызывать нано-фасетирование асимметричной ГЗ. Сложные процессы перестройки ГЗ приводят к изменению ряда ее свойств, в частности, усложняются процессы проскальзывания по ГЗ [12].

При атомистическом моделировании зернограничного разрушения мы использовали хорошо апробированную методику жесткого сдвига без релаксации и с релаксацией (rigid-grain-shift (RGS) methodology and RGS + relaxations [15]). В этой схеме путь разрушения FP (fracture path) задается или плоскостью, или более сложной поверхностью с учетом симметрии ГЗ. Эта модель применима в том случае, когда зернограничный рост трещины происходит значительно быстрее скорости диффузии примесей как в матрице, так и по ГЗ. Такое условие реализуется при деформации в области умеренных температур. В обзоре [16] рассмотрены различные варианты деформирования наноструктурированных (NS) материалов, связанные, главным образом, с процессами, происходящими на ГЗ: зернограничное проскальзывание и зарождение микротрещин в тройных стыках зерен, обусловленных передачей деформации по ГЗ из одного зерна в другое. Раскрытие трещин по ГЗ в этом случае происходит в плоскости границы соседнего зерна и определяется главным образом зернограничной деформацией первого зерна [17]. При моделировании раскрытия трещин по ГЗ в NS материалах методика жесткого сдвига является, по-видимому, предпочтительной.

В настоящей работе изучена зернограничная декогезия в бикристаллах Al и сплавах Al−3 at.%Mg и Al−3 at.%Ni для симметричных и асимметричных границ зерен специального типа с осью наклона $\langle 001 \rangle$ после формирования сегрегаций на ГЗ, реализуемых с использованием MD/MC-моделирования. Полученные результаты позволили выяснить поведение Mg и Ni при зернограничном разрушении бикристаллов алюминиевых сплавов, содержащих упорядоченные зернограничные сверхструктуры.

2. Метод моделирования

Атомистическое моделирование процесса разрушения в бикристаллах Al, сплавов Al−3 at.%Mg и Al−3 at.%Ni проводилось для симметричных ГЗ наклона $\Sigma 5\{012\}$ и $\Sigma 5\{013\}$ с углом разориентировки $\theta = 36.87^\circ$ (рис. 1, *a, b, e, f, i, k*), соответствующих минимальному значению упругой энергии для Al [18], а также для двух асимметричных границ зерен специального типа $\Sigma 5\{010\}/\{340\}\langle 001 \rangle$ и $\Sigma 5\{110\}/\{710\}\langle 001 \rangle$ (рис. 1, *c, d, g, h, l, m*). Энергия рассматриваемых асимметричных ГЗ для Al отличается на величину менее 10 % от энергии симметричных ГЗ $\Sigma 5\{210\}$ и $\Sigma 5\{310\}$ с той же осью наклона $\langle 001 \rangle$ [18]. Обе асимметричные границы сконструированы из двух типов плоскостей: низко индексные плотно упакованные в ГЦК-решетке плоскости {110} и {100} с одной стороны ГЗ; и высоко индексные плоскости {710} и {340} —- с другой стороны.

При моделировании Al−Mg сплава мы использовали потенциал Lee et al [19]; для Al−Ni сплава — EAM/alloy потенциал [20]. Используемые потенциалы правильно описывают многие физические свойства как чистого Al, так и сплавов Al−Mg, Al−Ni. В частности, потенциалы дают значения энергии образования и взаимодействия точечных дефектов и их комплексов близкие к результатам, полученным при *ab initio* расчетах [21]. Данные для точечных дефектов являются необходимыми входными параметрами при моделировании кинетики формирования выделений в сплавах. Численная реализация осуществлялась с использование пакета LAMMPS (Sandia National Laboratories) [22].

Во всех случаях плоскость YZ совпадала с плоскостью границы, ось OZ параллельна оси наклона $\langle 100 \rangle$ (см. рис. 1). Кристаллит содержал два зерна, разделенных рассматриваемой границей, расположенной в его центре. Во всех случаях размер зерен вдоль направления OX, перпендикулярного плоскости ГЗ, составлял ~ 20 nm. В двух взаимно перпендикулярных направлениях OY и OZ в плоскости ГЗ применялись периодические граничные условия. Длина периода вдоль этих направлений была кратна трансляции вдоль заданных кристаллографических направлений. При моделировании кристаллит содержал $\sim (4-8) \cdot 10^4$ атомов в зависимости от типа границы зерен. В расчетах шаг по времени составлял 1.5 fs.

Формирование сегрегаций и структурные изменения на ГЗ моделировались с использованием комбинированного MD/MC подхода при $T = 450$ K. Мы использовали схему Метрополиса [11], которая на каждом шаге MC дополнительно включала релаксацию MD кристаллита с атомом растворенного вещества в новой пробной позиции, а вероятность атомного скачка определялась с учетом изменения энергии вследствие релаксации. Подобная поэтапная релаксация в MD/MC-моделировании играет важную роль в корректном описании структурной перестройки границ зерен в сплавах с плотно упакованной ГЦК-решеткой, включая сплавы Al−Mg и Al−Ni. В Al-матрице взаимодействие примесных атомов с границами зерен приводит к их структурной реконструкции в процессе сегрегации и образование высокоупорядоченных сегрегационных сверхструктур (в классификации [23]). Возникновение ЗГ сверхструктур контролируется несколькими факторами, включая кристаллографические параметры ГЗ, характеристики растворенного или примесного атома, энергию, связанную с распределением примесного атома вблизи участков ГЗ, и другие.

В структуре ГЗ (рис. 1) тонкими зелеными линиями выделены структурные единицы [18], которые определяют локальную атомную конфигурацию границы. На рис. 1, *a–d* представлены фрагменты кристаллитов, содержащие симметричные и асимметричные ГЗ для Al. Геометрия асимметричных границ может быть описана на языке искаженных структурных единиц *B* и *C* [18],

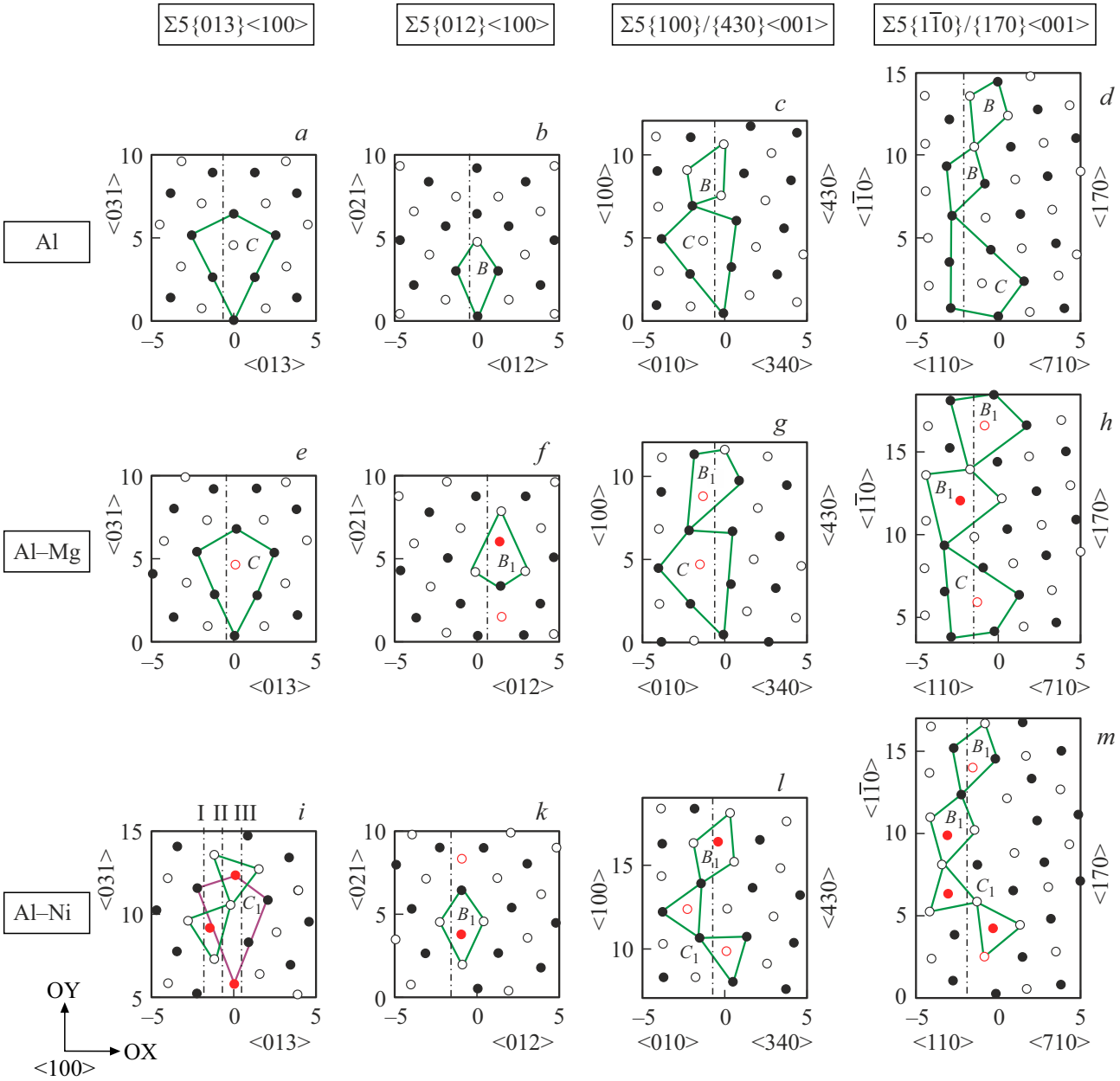

Рис. 1. Фрагменты кристаллитов со специальными симметричными (a, b, e, f, i, k) и асимметричными (c, d, g, h, l, m) ГЗ с осью наклона $\langle 001 \rangle$ для Al, Al–3 at.%Mg и Al–3 at.%Ni после 10^6 MD/MC шагов релаксации [10–14]. Светлые и темные кружки соответствуют атомам в ближайших {001} плоскостях. Черным цветом обозначены атомы Al, красным — примесные атомы (Mg или Ni). Тонкими зелеными линиями выделены структурные элементы. Размерность координатных осей приведена в Å.

характерных для симметричных ГЗ $\Sigma5\{210\}$ и $\Sigma5\{310\}$. Для ГЗ $\Sigma5\{010\}/\{340\}\langle 001 \rangle$ структурные единицы B, C чередуются; каждая пара со смещением $1/2\langle 001 \rangle$ вдоль оси наклона. Для ГЗ $\Sigma5\{110\}/\{710\}\langle 001 \rangle$ структурные единицы B, C чередуются в последовательности C, B, B.

Показанные на рис. 1, a–d конфигурации ГЗ для Al использовались в качестве стартовых конфигураций при проведении MD/MC моделирования в сплавах Al–Mg и Al–Ni, которое приводит к структурной реконструкции ГЗ в процессе сегрегации и формировании ЗГ сверхструктур из примесных атомов. Для всех типов ГЗ в сплавах происходит столь же закономерное чередование структурных единиц, как и в Al. Для Al–Mg структурная единица C изменяется незначительно, атомы Mg располагаются в его центре; структурная единица $B \to B_1$ (рис. 1, e–h). Структурную единицу B_1 можно рассматривать как искаженную в той или иной степени структурную единицу B с примесным атомом, расположенным в ее центре. Во всех случаях границ зерен для Al–Mg после завершения MD/MC-релаксации и реконструкции границ образуется одноатомный (рис. 1, e–g) или близкий к одноатомному (рис. 1, h) слой атомов Mg.

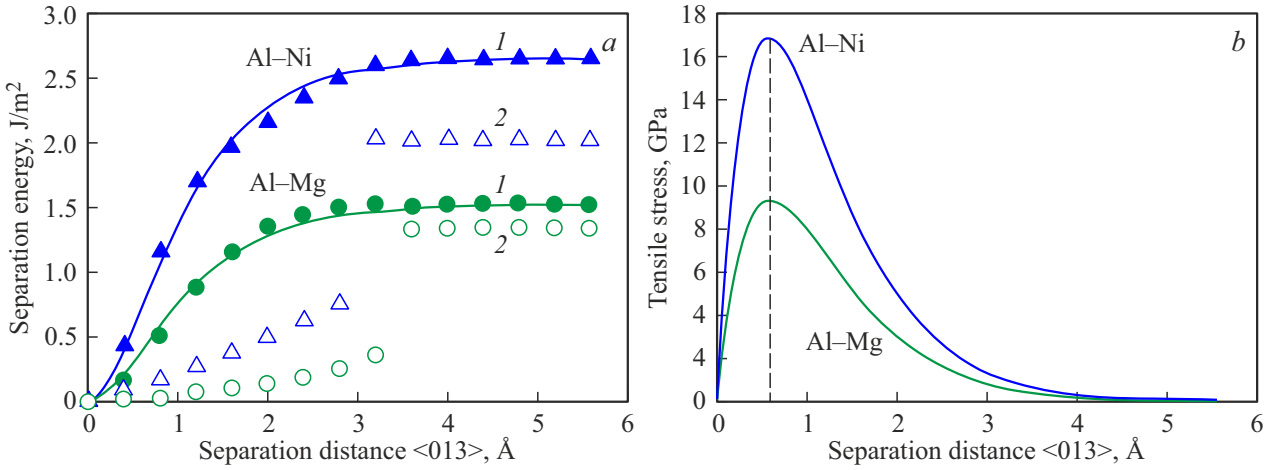

Рис. 2. Изменение энергии сепарации (a) и теоретического растягивающего напряжения (b) при раскрытии трещины по ГЗ $\Sigma5\{013\}\langle100\rangle$ в сплавах Al–Mg и Al–Ni. *1* — без учета релаксации, *2* — с учетом релаксации. Синие точки и кривые относятся к Al–Ni, зеленые — к Al–Mg.

Другая ситуация наблюдается в сплаве Al–Ni. Уже для симметричной границы $\Sigma5\{310\}\langle001\rangle$ атомы Ni образуют двойной слой вблизи ГЗ (рис. 1, i); ее положение смещается и изменяется форма структурного элемента $C \to C_1$. Еще более сложную конфигурацию, многослойную по атомам Ni, приобретают асимметричные ГЗ. В результате после завершения MD/MC-релаксации границы зерен в Al–Ni приобретают ступенчатую форму, состоящую из нанофасеток (рис. 1, l, m). Как обсуждалось в [11–14], характер структурной реконструкции ГЗ и форма границ зерен в сплавах в значительной степени определяется энергией сегрегации примесного атома и наиболее энергетически выгодной его позицией вблизи ГЗ.

3. Результаты моделирования

В схеме жесткого сдвига энергия сепарации E^i_{sep} при раскрытии трещины на расстояние X_i, нормальное к плоскости трещины, вычислялась как разность энергий бикристалла при заданном сдвиге E_i и в стартовой конфигурации E_0, отнесенную к площади границы зерна:

$$E^i_{\text{sep}} = (E_i - E_0)/S. \qquad (1)$$

Энергия разрушения определялась как [6]:

$$E_{\text{frac}} = \lim_{i\to\infty}(E_i - E_0)/S. \qquad (2)$$

Аппроксимация зависимости $E^i_{\text{sep}}(X_i)$ для кривой без учета релаксации проводилась с использованием выражения [6]:

$$E^i_{\text{sep}}(X_i) = E_{\text{frac}} - E_{\text{frac}}(1 + X_i/\lambda)\exp(-X_i/\lambda), \qquad (3)$$

где λ — характерная сепарационная длина. Теоретическое растягивающее напряжение вычислялось по формуле $\sigma = \partial E^i_{\text{sep}}/\partial X_i$; максимальное растягивающее напряжение в соответствии с (3) тогда равно $\sigma_{\max} = E_{\text{frac}}/(e\lambda)$.

3.1. Разрушение вдоль симметричных ГЗ $\Sigma5\{013\}\langle100\rangle$ и $\Sigma5\{012\}\langle100\rangle$

На рис. 1, a, b, e, f, i, k вертикальной штрих пунктирной линией обозначены плоскости, по которым проводился разрез при раскрытии трещин для симметричных ГЗ $\Sigma5$ в Al и сплавах Al–Mg, Al–Ni, содержащих сверхструктуры зернограничных сегрегаций. Атомы примеси образуют однослойные цепочки для всех вариантов, кроме границы $\Sigma5\{013\}\langle100\rangle$ для Al–Ni (рис. 1, i), где атомы Ni образуют двухслойные цепочки. В последнем случае возможны два различных сечения (I или II) для раскрытия трещин вблизи ГЗ. Сечения I и III являются эквивалентными.

На рис. 2, a, 3, a представлены кривые изменения энергии сепарации E^i_{sep} (формула (1)) в сплавах Al–Mg и Al–Ni для симметричных границ зерен $\Sigma5\langle100\rangle$. Для кривых, полученных без учета релаксации (кривые *1*), проведена аппроксимация в соответствии с формулой (3), и вычислено теоретическое растягивающее напряжение. Кривые зависимости $\sigma(X_i)$ представлены на рис. 2, b, 3, b. В таблице представлены значения энергии декогезии E_{frac}, максимального растягивающего напряжения $\sigma_{\max}$ для Al и его сплавов Al–Mg и Al–Ni для двух типов симметричных ГЗ $\Sigma5$. Даны также известные литературные данные энергии декогезии для тех же ГЗ, полученные в *ab initio* расчетах.

Из сопоставления кривых для Al–Mg и Al–Ni на рис. 2, a и 3, a видно, что в целом кривые для Al–Ni идут выше, чем для Al–Mg, как без релаксации, так и с учетом релаксации. Для обеих границ зерен изменение энергии декогезии E_{frac} при релаксации существенно выше для сплава Al–Ni по сравнению с Al–Mg; однако на малых расстояниях, до момента образования двух свободных поверхностей при сепарации, изменение энергии при релаксации сопоставимо для обоих сплавов.

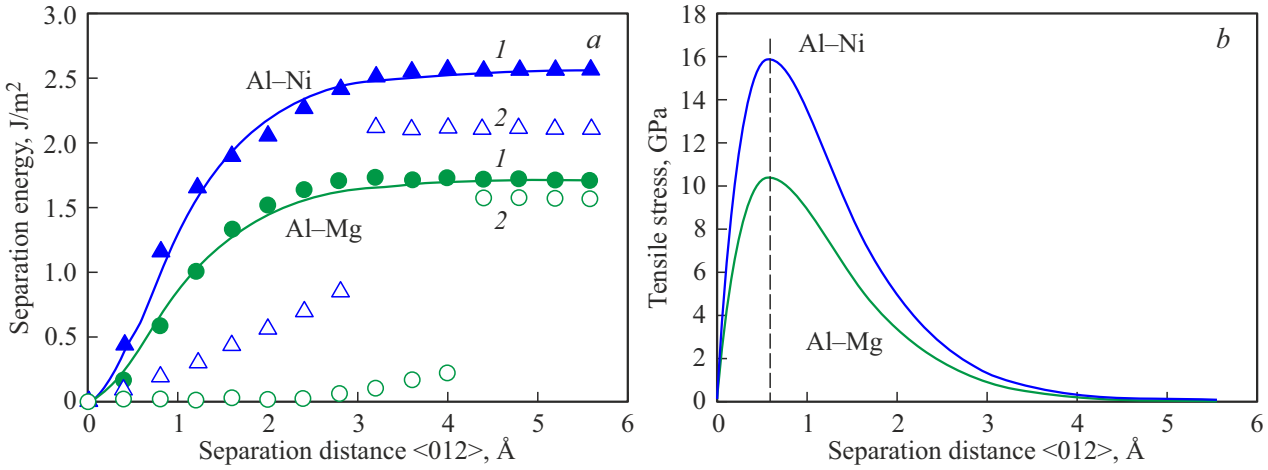

Рис. 3. Изменение энергии сепарации (*a*) и теоретического растягивающего напряжения (*b*) при раскрытии трещины по ГЗ $\Sigma5\{012\}\langle100\rangle$ в сплавах Al–Mg и Al–Ni (сечение I). *1* — без учета релаксации, *2* — с учетом релаксации. Синие точки и кривые относятся к Al–Ni, зеленые — к Al–Mg.

Кривые растягивающего напряжения, а также значения σ_{max} также значительно выше для сплава Al–Ni.

В таблице представлены численные значения E_{frac}, σ_{max} для Al и его сплавов Al–Mg и Al–Ni, полученные при MD расчетах с использованием потенциалов [19,20].

Энергия декогезии E_{frac} (J/m^2), σ_{max} (GPa) при раскрытии трещины в Al–Mg и Al–Ni сплавах вблизи симметричных границ зерен $\Sigma5$

ГЗ $\Sigma5\{013\}\langle100\rangle$			
Материал	E_{frac} Без релаксации С релаксацией	E_{frac} *ab initio*	σ_{max}
Al	1.68 1.59	1.64 [21] 1.48	–
Al–Mg	1.52 1.34	1.62 [21] 1.60	9.34
Al–Ni sec II	2.59 1.94	–	16.1
Al–Ni sec I	2.65 2.02	–	16.8
ГЗ $\Sigma5\{012\}\langle100\rangle$			
Материал	E_{frac} Без релаксации С релаксацией	E_{frac} *ab initio*	σ_{max}
Al	1.75 1.73	1.76 [9] 1.57	–
Al–Mg	1.71 1.57	1.73–1.66 [9] 1.56–1.59	10.5
Al–Ni	2.56 2.11	–	16.0

Даны также литературные данные *ab initio* расчета E_{frac}. Во всех случаях верхнее число — значение E_{frac} без релаксации, нижнее — с учетом релаксации. Для ГЗ $(013)\langle100\rangle$ *ab initio* расчеты демонстрируют слабое упрочнение $\sim(5-7)\,\%$ при сегрегации атомов Mg на ГЗ (с учетом релаксации) и столь же слабое разупрочнение (без релаксации) по сравнению с ГЗ в Al. MD расчеты с потенциалом [19] также дают слабое разупрочнение. Для ГЗ $(012)\langle100\rangle$ *ab initio* расчеты для Al и Al–Mg практически не отличаются. MD расчеты дают слабое разупрочнение в пределах $\sim(5-10)\,\%$. Таким образом, можно считать, что изменения энергии декогезии в сплаве Al–Mg по сравнению с Al для симметричных ГЗ $\Sigma5$ обоих типов являются несущественными. Значения E_{frac} находятся в пределах ошибки как расчетной, так и ошибки измерения.

Иная ситуация получена для сплава Al–Ni (потенциал [20]). Для обоих типов симметричных ГЗ сегрегации Ni существенно упрочняют ГЗ, увеличивая значения E_{frac} приблизительно на $(20-35)\,\%$. Значение σ_{max} возрастает на $\sim40\,\%$. К сожалению, в настоящее время отсутствуют данные по *ab initio* расчету декогезии в сплаве Al–Ni. Таким образом, можно утверждать, что при MD расчетах сегрегации Ni дают значительное упрочнение границ зерен по сравнению с Al.

3.2. Разрушение вдоль асимметричных ГЗ $\Sigma5\{010\}/\{340\}\langle001\rangle$ и $\Sigma5\{110\}/\{710\}\langle001\rangle$

Уже на рис. 1 видно, что атомные плоскости, параллельные плоскости асимметричных ГЗ, и состоящие из примесных атомов Mg или Ni, чередуются с плоскостями, заполненными атомами Al, создавая сложную картину взаимодействующих между собой атомов. Внутри полосы, соответствующей ширине ГЗ (атомы, расположенные внутри структурных единиц на рис. 1),

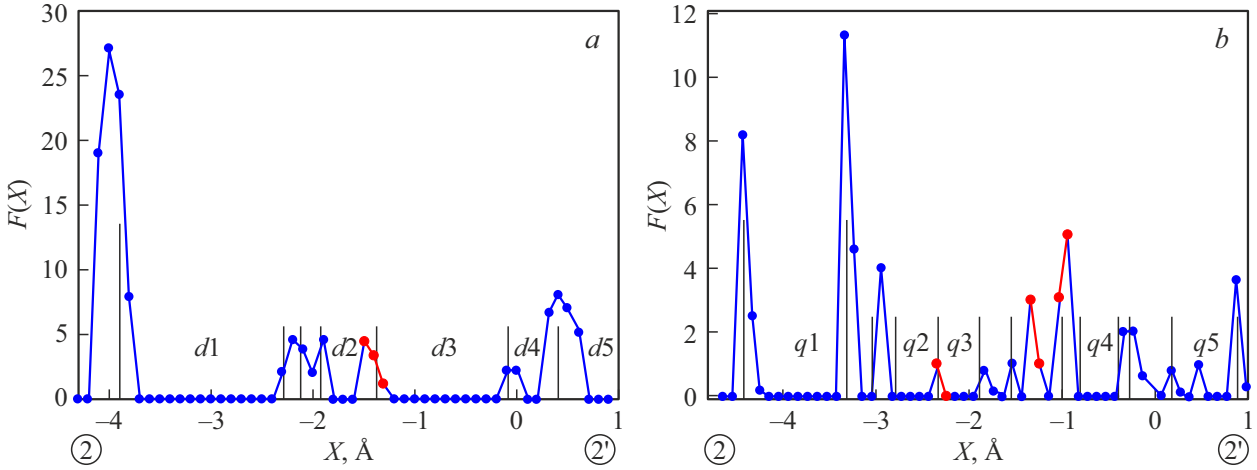

Рис. 4. Функция распределение атомов по ширине ГЗ $\Sigma5\{010\}/\{340\}\langle001\rangle$ (*a*) и ГЗ $\Sigma5\{110\}/\{710\}\langle001\rangle$ (*b*) для Al и сплава Al–Mg [24]. Черные вертикальные линии соответствуют Al, синие и красные точки — сплаву Al–Mg.

можно выделить несколько плоскостей, параллельных границе, отличающихся межплоскостными расстояниями. Межплоскостные расстояния распределены очень неравномерно, также неравномерно происходит заполнение атомами Al и примесными атомами ближайших атомных плоскостей. В [24] детально проанализированы число сечений для ГЗ различного типа, межплоскостное расстояние между ними и характер заполнения атомами матрицы и примесными атомами. Чтобы понять их взаимное расположение, в работе [24] были построены функции распределения атомов $F(X)$ двух сортов по ширине границ зерен. Для каждого сплава и каждой из асимметричных границ зерен были выделены атомы, в пределах ширины границы (направление X) на единичной трансляции вдоль Y и Z направлений в плоскости границ. Для выделенных атомов вычисляли долю атомов данного сорта, расположенную на интервале $dX = 0.1$ Å, в зависимости от координаты X вдоль направления, перпендикулярного плоскости ГЗ по ее ширине границы. На рис. 4 даны функции $F(X)$ для наиболее простых случаев асимметричных ГЗ для сплава Al–Mg. Значения функции и точки нанесены синим и красным цветом для атомов матрицы и примеси в сплавах. На этих же рисунках для сравнения черным цветом представлены данные для Al, полученные аналогичным образом. Каждый столбик для черных атомов Al, отделенный от другого столбика промежутком, представляет атомную плоскость, параллельную плоскости границы. Слева на рисунках расположены плоскости {001} и {110}. Они более плотно упакованы (высота столбиков выше), и межплоскостное расстояние ($d1$, $q1$ на рис. 4, *a, b*) больше. Справа высота столбиков уменьшается, уменьшаются также межплоскостные расстояния ($d5$, $q5$ и $d3$, $q3$), что соответствует менее плотно упакованным плоскостям {340} и {710}. Из сопоставления точек для чистого Al и сплава Al–Mg видно, что присутствие атомов примеси в границе „размывает“ каждую из плоскостей, что приводит как к изменению межплоскостных расстояний, так и в некоторых случаях к слиянию плоскостей. Для ГЗ $\Sigma5\{010\}/\{340\}\langle001\rangle$ (рис. 4, *a*) для наиболее плотноупакованных плоскостей (сечений) можно установить соответствие между сечениями для Al и Al–Mg. Расстояние между двумя близко расположенными слоями Mg мало, ~ 0.09 Å. Для Al $\Sigma5\{110\}/\{710\}\langle001\rangle$ (рис. 4, *b*) различие между сечениями в Al и Al–Mg больше и сохраняется только вблизи крайних точек по ширине ГЗ. Три слоя атомов Mg (красные точки на рис. 4, *b*) достаточно далеко отстоят один от другого. Расстояние между атомными слоями составляет ~ 0.53 Å и ~ 0.26 Å при движении слева направо на рис. 4, *b*. Еще более сложная ситуация получена для сплава Al–Ni. Атомы Ni еще сильнее, чем Mg, влияют на уменьшение межплоскостных расстояний внутри ГЗ и слиянию некоторых плоскостей [24].

Для всех указанных выше сечений обеих асимметричных границ было вычислено изменение энергии сепарации E^i_{sep}, аналогичное представленным на рис. 2, 3, для симметричных ГЗ. Однако форма кривых зависимости $E^i_{\text{sep}}(X_i)$ близка к кривым на рис. 2, 3 только для нескольких сечений с достаточно большим межплоскостным расстоянием (например, сечения $d1$ и $d3$ на рис. 4, *a*). Остальные кривые $E^i_{\text{sep}}(X_i)$ имеют сложный, часто не монотонный характер изменения. Связано это, во-первых, с тем, что на рис. 1 для асимметричных ГЗ представлены сверхструктуры с полностью упорядоченным регулярным заполнением позиций атомами Al и примесными атомами в двух слоях, параллельных оси наклона $\langle001\rangle$. Для других сечений вдоль оси наклона заполнение не является столь регулярным, что обусловлено методом получения данной сверхструктуры (MD/MC при $T = 450$ K). Во-вторых, отмеченное выше неравномерное, часто пересекающееся расположение различных атомных плоскостей, параллельных плоскости ГЗ, приводит к сложной картине изменения меж-

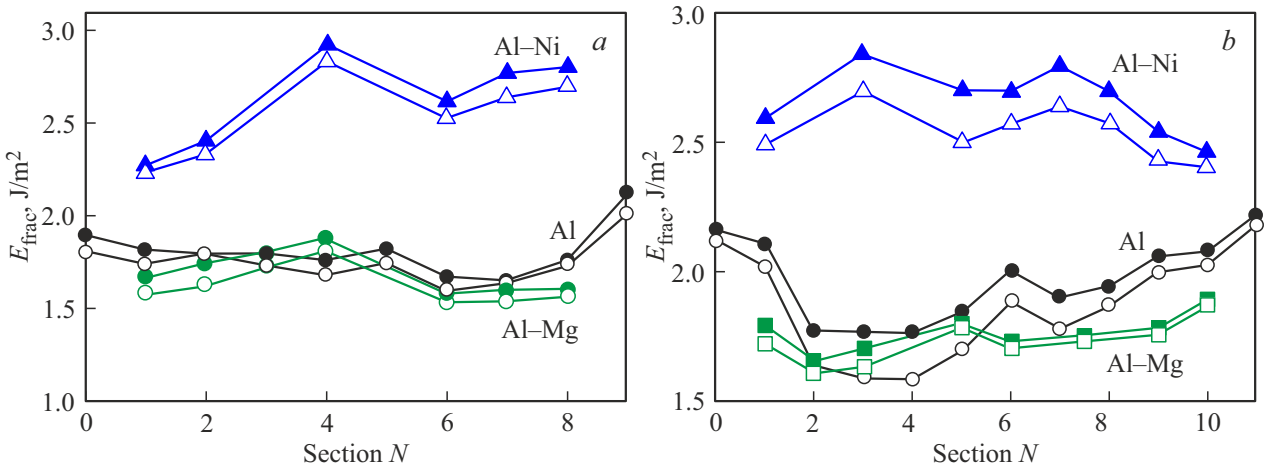

Рис. 5. Зависимость энергии декогезии от номера сечения для ГЗ $\Sigma5\{010\}/\{340\}\langle001\rangle$ (*a*) и для ГЗ $\Sigma5\{110\}/\{710\}\langle001\rangle$ (*b*). Черные точки соответствуют Al, синие треугольники — сплаву Al–Ni, зеленые точки — сплаву Al–Mg. Заштрихованные символы — без релаксации, не заштрихованные — с учетом релаксации.

атомного взаимодействия в зависимости от изменения межплоскостного расстояния X_i при сепарации.

Мы ограничились расчетом зависимости значений энергии декогезии от номера сечения $E_{frac}(N)$, отсчитываемого от левого до правого края по ширине каждой из асимметричных ГЗ, и для каждого типа примесных атомов (рис. 5). Крайние левая и правая точки соответствуют транскристаллитному разрушению в матрице по соответствующим плоскостям. Из рис. 5 видно, что в Al разрушение по ГЗ всех типов соответствует охрупчиванию.

Иная ситуация получена для сплава Al–Mg. Кривые зависимости $E_{frac}(N)$ на рис. 5, *a, b* переплетаются между собой, значения энергии декогезии для Al и Al–Mg расположены то выше, то ниже, и близко друг от друга. Если атомы Mg расположены в ближайшем положении к данному сечению (сечение *4* на рис. 5, *a* и сечение *5* на рис. 5, *b*), энергия декогезия для сплава выше, чем для чистого Al. Однако, превышение невелико и составляет (7–8) %. Для самых низких значений E_{frac} для сплава Al–Mg, где и можно было бы ожидать разрушения по ГЗ (сечение *7* на рис. 5, *a* и сечение *2* на рис. 5, *b*) различие между значениями декогезии еще меньше $\sim 5\,\%$. Для расчетов в рамках MD подобное различие можно вообще считать несущественным. Из таблицы виден столь же небольшой вклад в упрочнение или разупрочнение в сплаве Al–Mg и для симметричных ГЗ при расчетах как в рамках MD, так *ab initio*.

Сегрегации Ni на асимметричных ГЗ рассмотренных типов существенно увеличивает энергию декогезии. Локальные пики на кривых зависимости энергии декогезии от номера сечения для асимметричных ГЗ отвечают плоскостям, расположенным в непосредственной близости от примесных атомов. В точках максимума значения E_{frac} увеличиваются в $\sim (1.7–1.8)$ раза. Таким образом, можно утверждать, что сегрегации атомов Ni на ГЗ любого типа увеличивают их прочность.

4. Обсуждение результатов

С целью выяснения особенностей разрушения по границам зерен проведено атомистическое моделирование раскрытия трещин в рамках методики жесткого сдвига [15] в бикристаллах Al и сплавах Al–3 at.%Mg и Al–3 at.%Ni для симметричных и асимметричных границ зерен, содержащих упорядоченные зернограничные сегрегации. Из сопоставления данных в таблице и на рис. 2, 3, 5 видно, что для всех изученных типов ГЗ энергия декогезии E_{frac} выше в среднем в ~ 1.5 раза для сплава Al–Ni, чем для Al–Mg. Еще более заметно различие для значения σ_{max} (превышение в среднем в 1.7 раза). Однако для каждого из сплавов, значения E_{frac} и σ_{max} различаются в пределах $\sim 5\,\%$ в зависимости от типа ГЗ. На рис. 5 хорошо видно, что значения энергии декогезии в Al (черные точки) близки к соответствующим значениям сплава Al–Mg, но значительно ниже, чем для сплава Al–Ni. Таким образом, MD расчеты показывают, что легирование Mg существенно не изменяет прочностные свойства рассмотренных симметричных и асимметричных границ, тогда как для сплава Al–Ni формирование зернограничных сегрегации на ГЗ приводит к значительному увеличению их прочности.

Интересно отметить, что при сопоставлении результатов для Al и сплавов Al–Mg, Al–Ni было установлено, что сопротивление проскальзыванию по ГЗ для сплавов существенно возрастает по сравнению с Al [12,13]. Это возрастание может быть больше или меньше для одного или другого сплава в зависимости от направления сдвига в рассматриваемых плоскостях. Например, при скольжении вдоль оси наклона $\langle100\rangle$ для ГЗ $\Sigma5\{013\}$

значения энергии нестабильного зернограничного дефекта упаковки γ_{us} (максимальное значение энергии вдоль выбранного направления сдвига) возрастают в сплаве Al–Mg по сравнению с Al в ~ 2 раза, для ГЗ $\Sigma5\{012\}$ — в ~ 3.5 раза. В сплаве Al–Ni — для обеих ГЗ γ_{us} возрастает в ~ 3 раза. Таким образом, влияние Mg и Ni в Al сплавах является не однозначным на характеристики проскальзывания и разрушения по границам зерен.

В [11] на основании MD/MC и *ab initio* моделирования было высказано предположение о влиянии Mg и Ni на микроскоспические механизмы, влияющие на особенности реконструкции ГЗ при формировании упорядоченных зернограничных сегрегаций, что влияет в свою очередь на свойства проскальзывания и декогезии в этих Al сплавах. Факторами, существенно определяющими развитие процесса фасетирования, являются особенности химической связи между легирующим элементом и атомами матрицы. Из расчета радиальной функции распределения атомов Al около атома легирующего элемента было показано, что сегрегации Mg приводят к значительному увеличению расстояния Mg-Al до ближайших соседей; это особенно выражено в случае специальной асимметричной ГЗ $\Sigma5\{010\}/\{340\}\langle001\rangle$. Ионный радиус как Mg, так и Ni превосходит ионный радиус Al, но лишь в случае Mg деформационный вклад во взаимодействие с атомами матрицы и ГЗ является доминирующим [14]. В сплаве Al–Mg, в котором взаимодействие атомов Mg с ГЗ контролируется деформационным механизмом, атомам Mg энергетически выгодно располагаться в позициях вблизи центров структурных единиц, где наблюдаются наибольшие деформации и локальное расширение решетки. Это было проиллюстрировано в работе [14] также расчетом распределения локальных деформаций, определяемых через изменение длин связей в решетке. Предполагается, что присутствие направленных связей, как в сплаве Al–Ni, значительно изменяет структуру и свойства ГЗ. Однако, для Al–Ni требуется дополнительное *ab initio* исследование.

Экспериментально считается, что в алюминиевых сплавах микролегирование Mg, Zn и Cu [4] существенно улучшают их свойства. С использованием сканирующей электронной микроскопии и atom probe томографии [25–27] было установлено, что эти примеси формируют выделения вблизи ГЗ, поэтому считается, что они способствуют пластичности и увеличивают прочность ГЗ. Другим важным экспериментальным фактом является существенное влияние указанных выше примесей на формирование и стабильность ультра-мелкого зерна, декорированного примесными атомами. Именно это обстоятельство, по-существу формирует уникальные свойства Mg, Zn и Cu алюминиевых сплавов. В реальных NS поликристаллах деформационное поведение является более сложным, чем рассмотренное при атомистическом моделировании. Более реалистическая модель должна рассматривать присутствие различного типа границ зерен, а также появление спектра аккомодационных процессов. Различные варианты деформирования наноструктурированных материалов, связаны, главным образом, с процессами, происходящими на ГЗ: зернограничное проскальзывание и зарождение микротрещин в тройных стыках зерен, обусловленных передачей деформации по ГЗ из одного зерна в другое [16,17]. Однако, мы полагаем, что результаты, полученные в настоящей работе, ясно демонстрируют корреляцию между химической связью примесных атомов, их сегрегационным поведением, а также прочностными характеристиками границ зерен.

5. Заключение

С целью выяснения особенностей разрушения по границам зерен проведено атомистическое моделирование раскрытия трещин в рамках методики жесткого сдвига в бикристаллах Al и сплавах Al–3 at.%Mg и Al–3 at.%Ni для границ зерен с осью наклона $\langle001\rangle$, содержащих упорядоченные зернограничные сегрегации. Склонность к разрушению по симметричным ГЗ $\Sigma5$, а также по асимметричным ГЗ $\Sigma5\{010\}/\{340\}\langle001\rangle$ и $\Sigma5\{110\}/\{710\}\langle001\rangle$ в бикристаллах сплавов Al–Mg и Al–Ni изучена на основе анализа энергии декогезии. Установлено, что сопротивление разрушению по ГЗ для сплава Al–Ni существенно возрастает по сравнению с Al. Для Al–Mg влияние сегрегаций Mg на ГЗ является слабо выраженным, не однозначным и зависит от типа плоскости в пределах ширины ГЗ, по которой происходит разрушение.

Финансирование работы

Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России для ИФМ УрО РАН

Конфликт интересов

Авторы сообщают об отсутствии конфликта интересов.

Список литературы

[1] P.Lejček. Grain boundary segregation in metals. Springer Series Mater. Sci., N.Y. (2010).
[2] Priester L. Grain Boundaries: From Theory to Engineering. Springer Series in Mater. Sci. N.Y. (2014).
[3] B.B. Straumal, O.A. Kogtenkova, A.S. Gornakova, V.G. Sursaeva, B. Baretzky. J. Mater. Sci. **51**, 382 (2016).
[4] G. Sha, L. Yao, X. Liao, S.P. Ringer, Z.C. Duan. Ultramicroscopy **111**, 500 (2011).
[5] X. Liu, X. Wang, J. Wang, H.J. Zhang. J. Phys.: Condens. Matter. **17**, 4301 (2005).
[6] S. Zhang, O.Y. Kontsevoi, A.J. Freeman, G.B. Olson. Acta Materialia **59**, 6155 (2011).
[7] R.G. Song, M.K. Tseng, B.J. Zhang, J. Liu, Z.H. Jin, K.S. Shin. Acta Mater. **44**, 3241 (1996).
[8] V.I. Razumovskiy, A.V. Ruban, I.M. Razumovskii, A.Y. Lozovoi, V.N. Butrimb, Y.K. Vekilov. Scr. Mater. **65**, 926 (2011).

[9] D. Zhao, O. M.Løvvik, K. Marthinsen, Y. Li. Applied Physics Letters **100**, 231904 (2012).
[10] Л.Е. Карькина, И.Н. Карькин, А.Р. Кузнецов, Ю.Н. Горностырев. ФТТ **60**, 1974 (2018).
[11] L. Karkina, I. Karkin, A. Kuznetsov, Y. Gornostyrev. Metals **9**, 1319 (2019).
[12] Л.Е. Карькина, И.Н. Карькин, Ю.Н. Горностырев. ФММ **121**, 901 (2020).
[13] Л.Е. Карькина, И.Н. Карькин, Ю.Н. Горностырев. ФММ **122**, 1187–1195 (2021).
[14] Л.Е. Карькина, И.Н. Карькин, Ю.Н. Горностырев. ФММ **123**, 1079 (2022).
[15] S. Zhang, O.Y. Kontsevoi, A.J. Freeman, G.B. Olson. Acta Mater. **59**, 6155 (2011)
[16] I.A. Ovid'ko, R.Z. Valiev, Y.T. Zhu. Prog. Mater. Sci. **94**, 462 (2018)
[17] I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman. Acta Mater. **52**, 1201–1209 (2004).
[18] M.A. Tschopp, D.L. Macdowell. Philos. Mag. **87**, 3871–3892 (2007).
[19] Y.-M. Kim, N.J. Kim, B.-J. Lee. Calphad **33**, 650 (2009).
[20] G.P. P.Pun, Y. Mishin. Philos. Mag. **89**, 3245 (2009).
[21] A. Kuznetsov, L. Karkina, Yu. Gornostyrev, P. Korzhavyi. Metals **11**, 631 (2021).
[22] S. Plimpton. J. Comput. Phys. **117**, *1*, 1 (1995).
[23] C. Hu, R. Dingreville, B.L. Boyce. Comput. Mater. Sci. **232**, 112596 (2024).
[24] Л. Е.Карькина, И.Н. Карькин, Ю.Н. Горностырев. ФММ **126**, 943-949 (2025).
[25] X. Sauvage, G. Wilde, S.V. Divinski, Z. Horita, R.Z. Valiev. Mater. Sci. Eng. A **540**, 1-12 (2012).
[26] R.Z. Valiev. Nature **419**, 887 (2002).
[27] X. Sauvage, N. Enikeev, R. Valiev, Y. Nasedkina, M. Murashkin. Acta Mater. **72**, 125-136 (2014).

Редактор Ю.Э. Китаев