

Осцилляции атомной плотности в окрестности симметричных границ зерен в металлах

© Е.И. Луговская, Т.И. Мазилова, И.М. Михайловский

Научный центр "Харьковский физико-технический институт",
61108 Харьков, Украина

E-mail: astr@ktts.kharkov.ua

(Поступила в Редакцию 11 августа 2000 г.
В окончательной редакции 9 ноября 2000 г.)

Методами молекулярной динамики исследованы осцилляционные особенности атомной релаксации на симметричных границах зерен в металлах. Немонотонный характер изменения атомной плотности обнаружен в различных метастабильных состояниях границ. Показано, что амплитуды, периоды и характер затухания осцилляций в этих состояниях практически идентичны. Предложенная континуальная модель деформационного отклика поверхностных слоев на действие линейно распределенных сил позволила удовлетворительно описать осцилляционную зернограничную релаксацию.

В работах [1,2] методами высокоразрешающей полевой ионной микроскопии и компьютерного моделирования было показано, что на симметричных специальных (соизмеримых) границах зерен наряду с явлением взаимного жесткого смещения решеток смежных кристаллитов [3] существует коллективный вид зернограничной релаксации, заключающийся в жесткой трансляции атомных плоскостей, параллельных плоскости границы. Жесткие зональные смещения отдельных плоскостей в ядре границы достигают величин порядка межплоскостных расстояний и, следовательно, должны учитываться в расчетах решеточных сумм в моделях жесткой зернограничной релаксации. Введение в рассмотрение зональных сдвигов атомных плоскостей позволяет дать полное описание атомного строения соизмеримых границ с помощью ограниченного числа параметров, характеризующих трансляционное состояние приграничных плоскостей.

Особый интерес представляют жесткие зональные сдвиги атомных плоскостей, приводящие к осцилляции плотности в приграничной области, наблюдаемой не только в металлах, но и в ковалентных и ионных кристаллах [1,3]. Осцилляционные особенности изменения атомной плотности вблизи границ зерен должны оказывать существенное воздействие на кинетику образования и миграции точечных дефектов, что может проявляться, в частности, в несовпадении значений структурной и диффузионной ширины границ зерен [4] и осцилляционном взаимодействии решеточных дислокаций с симметричными соизмеримыми границами [5].

Характер осцилляций плотности зависит от ряда макро- и микроскопических параметров, определяющих структуру и микротопографию границ зерен [3], что существенно затрудняет выяснение физической природы этого явления. В связи с этим в настоящей работе проведены исследования особенностей изменения осцилляционных характеристик плотности в окрестности одной и той же границы, находящейся в различных структурных состояниях. Методами компьютерного моделирования исследовались атомное строение и поле дилатации границы $38.9^\circ[110]$ в металлах с ОЦК-решеткой, в которой

ранее был обнаружен ряд метастабильных конфигураций ядер [6], соответствующих различным значениям векторов жесткого сдвига решеток смежных зерен.

Расчетный бикристалл состоял из 40 атомных плоскостей $\{114\}$ и содержал 1350 атомов. Компьютерные расчеты проводились с использованием метода молекулярной динамики в приближении парных потенциалов по методике, описанной в [5,6]. Жесткие смещения решеток смежных зерен в плоскости границы осуществлялись вдоль оси x , ориентированной вдоль направления $[\bar{2}21]$. Ось y была параллельна оси разориентации $[110]$, а ось z нормальна к плоскости границы. Исследовалась специальная (соизмеримая) симметричная граница зерен $(1\bar{1}4)$, разориентированных на 38.9° относительно оси $[110]$, генерирующая решетку совпадающих узлов с обратной плотностью совпадений Σ , равной 9.

На рис. 1 приведена атомная структура границы $(1\bar{1}4)38.9^\circ[110]$ в бикристалле вольфрама, спроектированная на плоскость (110) . Такая конфигурация реализована после жесткого сдвига решеток смежных зерен вдоль направления $[\bar{2}21]$ на 0.258 nm и последующей поатомной релаксации бикристалла. На рис. 1 кружками отмечены атомы в ядре границы с повышенной избыточной энергией. Максимальная энергия нарушения в ядре составляет 0.70 eV/atom . При жестком сдвиге на 0.206 nm было реализовано метастабильное состояние границы, описанное ранее в [2,5]. Конфигурации ядер границы зерен $\Sigma 9 (1\bar{1}4)38.9^\circ[110]$ в этих состояниях существенно различаются: при сдвиге 0.258 nm в центре ядра происходит полная коалесценция двух плоскостей $(1\bar{1}4)$ (рис. 1), в то время как при сдвиге 0.206 nm в ядре частично коалесцированы две пары атомных плоскостей, параллельные плоскости границы [2]. Однако основные закономерности зернограничной релаксации в этих структурных состояниях близки. На рис. 2 приведены графики, иллюстрирующие осцилляционный характер атомной релаксации вблизи границ зерен, находящихся в метастабильных состояниях, характеризующихся жесткими сдвигами, равными 0.258 (кривая 1) и 0.206 nm (кривая 2). Здесь N — номер атомного слоя $(1\bar{1}4)$. Со-

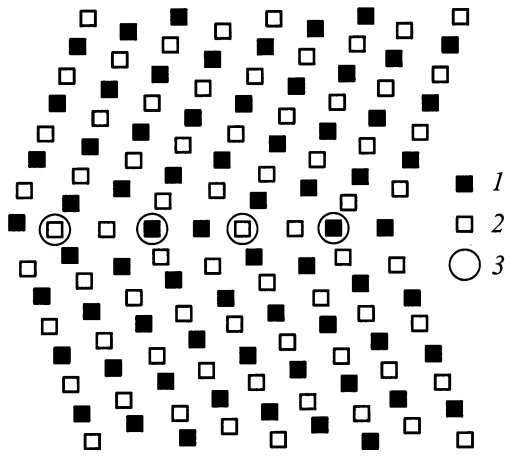


Рис. 1. Расположение атомов в окрестности границы зерен $\Sigma 9(1\bar{1}4)38.9^\circ[110]$. 1, 2 — атомы в двух смежных плоскостях (110), 3 — атомы с повышенной энергией отталкивания.

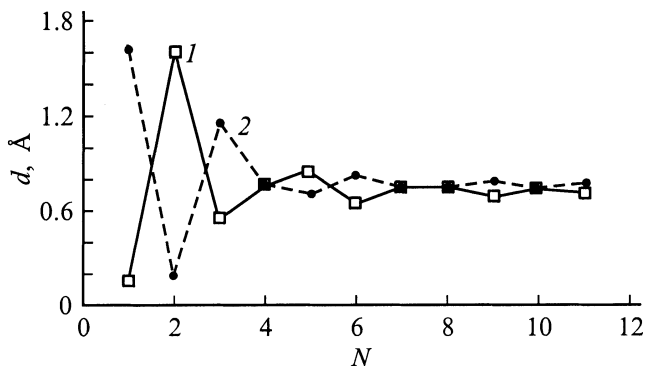


Рис. 2. Осцилляции межплоскостных расстояний вблизи границ зерен, находящихся в метастабильных состояниях с жесткими сдвигами решеток смежных зерен, равными 0.258 (1) и 0.206 nm (2).

поставление этих графиков показывает, что амплитуды, периоды и характер затухания в этих метастабильных состояниях практически идентичны. Отличаются только фазы осцилляций межплоскостных расстояний.

Происхождение осцилляций межплоскостных расстояний в приграничной области обычно связывают с особенностями локальных изгибов атомных плоскостей в окрестности ядер краевых зернограничных дислокаций [3]. Силами, приводящими к образованию структурных зернограничных дислокаций, являются силы когезии, действующие между смежными кристаллитами и генерирующие соответствующее поле релаксационных смещений. В рамках такой модели удается качественно описать осцилляции плотности и зернограничную коалесценцию атомных плоскостей. Однако на рассматриваемой в настоящей работе границе $\Sigma 9(1\bar{1}4)38.9^\circ[110]$ и других симметричных соизмеримых границах зерен с высокой плотностью совпадающих узлов структурные зернограничные дислокации отсутствуют. Ввиду того что

осцилляционный характер изменения атомной плотности в приграничной области практически не зависит от особенностей атомного строения ядра (рис. 2), в настоящей работе предпринята попытка проанализировать зернограничную релаксацию феноменологически в рамках линейной теории упругости.

Кристаллогеометрический анализ симметричной соизмеримой границы зерен этого типа [6] показывает, что граница может рассматриваться как бездислокационная ступенчатая вицинальная поверхность с террасами, лежащими вдоль сингулярных граней $\{112\}$. Расстояние между межзеренными ступеньками равно $a/2[221]$ — половине периода решетки в направлении, перпендикулярном оси разориентации. Вместе с тем на таких бездислокационных ступеньках локализованы короткодействующие силы отталкивания, возникающие в результате взаимодействия смежных зерен. Проведенный на основании данных компьютерного моделирования расчет локальных напряжений по методике, описанной в [3], показал, что в окрестности атомов с повышенной энергией нарушения на границе с жестким сдвигом 0.258 nm (рис. 1) нормальная к поверхности компонента напряжения сжатия σ_{zz} равна 31 GPa, т. е. составляет величину порядка $0.1E$, где E — модуль Юнга. Короткодействующие силы отталкивания, локализованные в основном вдоль сравнительно плотноупакованных цепочек атомов $\langle 110 \rangle$, отмеченных на рис. 1 кружками, приводят к зернограничной дилатации, ограниченной работой против дальнедействующих сил притяжения атомов смежных зерен. Принимая во внимание, что основные осцилляционные характеристики изменения атомной плотности (период осцилляций и их затухание) не зависят существенно от атомного строения ядра границы, находящейся в различных структурных состояниях, в нашем анализе заменим сложную картину взаимодействия смежных кристаллитов периодическими рядами параллельных линейных сил. Линейно распределенные силы локализованы вдоль плотноупакованных атомных цепочек на границе зерен, характеризующихся повышенной энергией (рис. 1). При этом каждый из кристаллитов рассматривается как упругий континуум, ограниченный плоской поверхностью. Расстояние L вдоль оси x между линиями приложения сил равно половине периода решетки в направлении, нормальном оси разориентации. Силы P_z , равномерно распределенные вдоль оси разориентации y , направлены вдоль оси z , нормальной к плоской поверхности, ограничивающей упругое полупространство.

Линейно распределенная сила P_z , действующая на плоскую поверхность, ограничивающую упругое полупространство, генерирует поле деформаций [7]

$$e_{xx} = \frac{2P_z(1+\sigma)}{\pi E} \frac{z}{x^2+z^2} \left(\sigma - \frac{x^2}{x^2+z^2} \right), \quad (1a)$$

$$e_{zz} = \frac{2P_z(1+\sigma)}{\pi E} \frac{z}{x^2+z^2} \left(\sigma - \frac{z^2}{x^2+z^2} \right), \quad (1b)$$

$$e_{yy} = 0, \quad (1c)$$

где P_z — величина приложенной силы, отнесенной к единице длины, σ — коэффициент Пуассона.

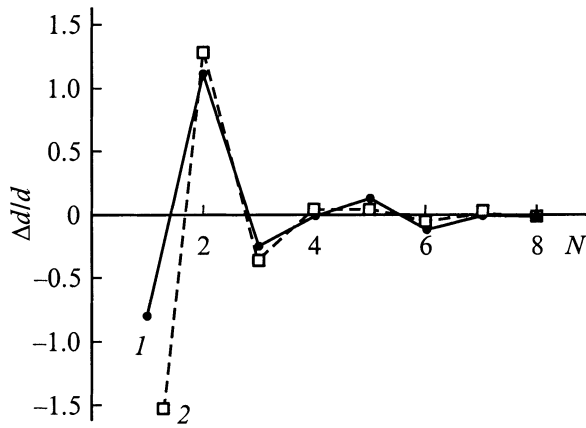


Рис. 3. Относительные изменения межплоскостных расстояний в приграничной области. 1 — расчет методом молекулярной динамики, 2 — континуальная модель.

Неограниченный ряд параллельных линейно распределенных сил при $z \gg L$ вызывает однородное сжатие кристаллита. В то же время, как следует из результатов компьютерного моделирования, на этих расстояниях обращаются в нуль все компоненты тензора напряжений. В связи с этим для обеспечения равенства нулю напряжений на больших расстояниях от поверхности следует вычесть смещения, вызываемые дальнедействующим полем напряжений. Поле смещений, создаваемое системой параллельных линейных сил, может быть определено из уравнений (1) аналогично полю смещений рядов решеточных дислокаций [8]

$$U_z = \frac{P_z(1 + \sigma)}{2\pi E} \left\{ Z \left[\frac{\sinh(Z)}{\cosh(Z) - \cos(X)} - 2\sigma + 1 \right] - 2(1 - \sigma) \ln[\cosh(Z) - \cos(X)] \right\}, \quad (2)$$

где $X = 2\pi x/L$, $Z = 2\pi z/L$.

Для определения релаксационных сдвигов необходимо задать смещения координат атомов в смежных плоскостях, параллельных поверхности раздела. На рассматриваемой границе $\Sigma 9$ ($1\bar{1}4$) 38.9° [110] смещения атомов i -й плоскости ($1\bar{1}4$) можно представить в виде [2]

$$\mathbf{x}_i - \mathbf{x} = 2i/9[2\bar{2}1]. \quad (3)$$

На рис. 3 приведена рассчитанная по континуальной модели зависимость (кривая 2) относительного релаксационного смещения плоскостей ($1\bar{1}4$) от расстояния до границы $\Sigma 9$ ($1\bar{1}4$) 38.9° [110]. Локальные значения межплоскостных расстояний между i -м и $(i + 1)$ -м атомными слоями определялись из уравнений (2) и (3) как $d_i = d + (U_{i+1} - U_i)$. Для сравнения приведены результаты, полученные методом молекулярной динамики (кривая 1). Ввиду того что величины линейно распределенных сил не могут быть получены в рамках теории упругости, в расчетах использовались значения P_z ,

определяемые из условия максимального соответствия расчетной и экспериментальной кривых. Из рис. 3 следует, что предложенная континуальная модель, в которой атомное взаимодействие смежных кристаллитов заменяется периодическими рядами линейно распределенных сил, действующих нормально к поверхности каждого из кристаллитов, позволяет удовлетворительно описать осцилляционный характер атомной межзеренной релаксации. Исключение составляет узкий слой толщиной 1–2 межплоскостных расстояния, в котором заведомо неприменима линейная теория упругости.

Следует отметить, что аналогичная модель была предложена ранее Марченко и Паршиным [9] для свободной поверхности кристаллов. Рассмотрение релаксации как отклика поверхностных слоев на действие линейной распределенных сил позволило количественно описать ряд тонких морфологических эффектов на поверхности твердых тел — от кристаллов [10] до тугоплавких металлов [11]. Обращает на себя внимание тот факт, что удовлетворительное континуальное описание релаксационных процессов у границ зерен (рис. 3) и свободных поверхностей [8] достигается при значениях локальной деформации в направлении, перпендикулярном поверхности раздела, существенно превышающих предел применимости линейной теории упругости для макроскопической деформации. Возможность последовательного континуального описания осцилляционной поверхностной и зернограничной релаксации связана, по-видимому, с тем, что при немономтонном изменении расстояния между вицинальными (неплотноупакованными) плоскостями относительно изменение расстояний между ближайшими соседними атомами остается в пределах применимости линейной теории упругости.

Список литературы

- [1] П.А. Березняк, О.А. Великодная, Т.И. Мазилова, И.М. Михайловский. Письма в ЖЭТФ **59**, 8, 515 (1994).
- [2] Т.И. Мазилова, И.М. Михайловский. Кристаллография **42**, 5, 796 (1997).
- [3] A.P. Sutton, R.W. Balluffi. Interfaces in Crystalline Materials. Clarendon press, Oxford (1995). 819 p.
- [4] I.M. Mikhailovskij, V.B. Rabukhin, O.A. Velikodnaya. Phys. Stat. Sol. (a) **125**, 2, K65 (1991).
- [5] В.С. Бойко, И.Н. Сидоренко. ФММ **67**, 3, 444 (1989).
- [6] Т.И. Мазилова, И.М. Михайловский. ФТТ **37**, 1, 206 (1995).
- [7] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Теория упругости. Наука, М. (1965). 203 с.
- [8] D.J. Sroloviz, J.P. Hirth. Surf. Sci. **255**, 1, 111 (1991).
- [9] В.И. Марченко, А.Я. Паршин. ЖЭТФ **79**, 1, 257 (1980).
- [10] В.И. Марченко. ЖЭТФ **81**, 3, 1140 (1981).
- [11] K. Swamy, E. Bertel, I. Vilfan. Surf. Sci. Lett. **425**, 2, L369 (1999).