

01;05.1;11;12

©1995

## ОСОБЕННОСТИ АТОМНОГО СТРОЕНИЯ ГРАНИЦ ЗЕРЕН ВБЛИЗИ УСТУПОВ И ТРОЙНЫХ СТЫКОВ

*Т.И.Мазилова, И.М.Мизайловский*

Уступы и тройные стыки границ зерен играют существенную роль в формировании физико-механических свойств поликристаллических материалов [1,2]. Из-за затрудненности прохождения зернограницных дислокаций через эти дефекты решетки при механико-термическом воздействии происходит локальное повышение напряжений. Как следствие, возможен переход границ в неравновесное состояние, характеризующееся нарушением регулярности расположения зернограницных дислокаций, формированием диполей зернограницных дисклинаций [3] и нанофасетированием пристыковой области границ [2]. Аномалии механических свойств, наблюдаемые в нанокристаллических материалах, в значительной мере объясняются неоднородностью зернограницных сдвигов, связанной с повышенной плотностью тройных стыков и микрофасеток [4]. Нарушения регулярности распределения структурных элементов границ зерен являются привнесенными и могут быть частично устранены отжигом при повышенных температурах. К собственным особенностям строения границ следует отнести нарушения состояния жесткой трансляции решеток смежных зерен [5].

В настоящей работе методами полевой ионной микроскопии определены локальные жесткие смещения решеток смежных зерен в окрестности уступов и тройных стыков специальных большеугловых границ зерен в вольфраме. Для определения взаимных сдвигов зерен использовался метод непрямого увеличения [6], позволяющий регистрировать локальные сдвиги вблизи линейных и планарных дефектов величиной до 0.01 нм.

На рис. 1 приведены ионно-микроскопические изображения бикристалла вольфрама с разориентацией относительно оси [110] на угол  $19^\circ$ . Вблизи линии уступа, ограничивающей плоские участки границы, наблюдается сопряжение граней (121) смежных зерен. Сопоставление средних значений радиусов кольцевых атомных ступенек сопрягающихся граней позволяет с помощью метода непрямого увеличения

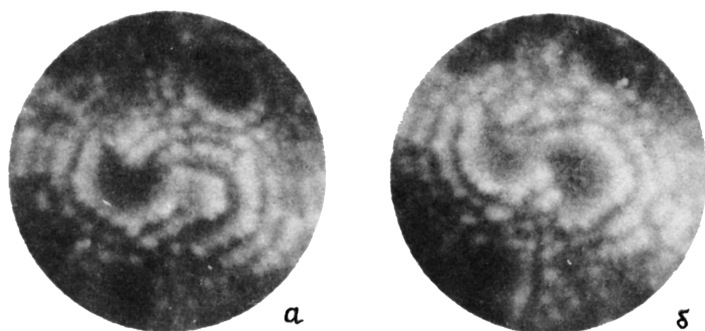


Рис. 1. Полевые ионно-микроскопические изображения границы зерен с уступом. Микрофотографии (а) и (б) получены последовательно в процессе полевого испарения.

определить величины жесткого сдвига вдоль направления  $[121]$ . Граница в пределах интервала Брэндона соответствует специальной границе с обратной плотностью совпадающих узлов  $\Sigma$ , равной 33. В процессе полевого испарения приблизительно  $5 \cdot 10^3$  атомных слоев обнаруживается непостоянство величины вектора жесткого сдвига, проявляющееся, в частности, в непостоянстве соотношений средних радиусов кривизны центральных атомных ступенек  $(121)$  сопрягающихся зерен. Среднее значение компоненты сдвига вдоль направления  $[121]$  составляет 0.07 нм. В том числе наблюдаются состояния границ с нулевым сдвигом, соответствующим зеркально-симметричной конфигурации границы (рис. 1, б). Аналогичные особенности трансляционного состояния границ зерен обнаруживаются также вблизи тройных стыков большеугловых границ зерен. Такая конфигурация симметричных границ зерен характеризуется повышенной энергией нарушения, связанной с силами отталкивания между ближайшими к плоскости границы атомными слоями. Вдали от тройных стыков и уступов нулевые значения векторов жесткого сдвига характерны лишь для границ  $\Sigma 3$  [6].

Как было показано в [7], симметричные специальные границы с нулевым вектором сдвига вдоль плоскости границы являются лабильными и реализуются в компьютерных экспериментах благодаря наличию восстанавливающих сил, задаваемых гибкими граничными условиями. С целью выяснения особенностей атомного строения неравновесных границ с зеркально-симметричной конфигурацией было проведено математическое моделирование в рамках модели жесткой решеточной релаксации [8,9]. Энергия границы зерен равна разности энергий электростатическо-

го взаимодействия  $W$  ионов, расположенных в узлах решеток моно- и бикристаллов. Для двух полубесконечных решеток, сопрягающихся вдоль кристаллографической плоскости, энергия взаимодействия полукристаллов может быть представлена в виде [9]

$$W = 2\pi\eta \sum'_{n_1\beta_1 l_1 m_1} \sum'_{n_2\beta_2 l_2 m_2} C_{n_1\beta_1 l_1 m_1}^{(1)} C_{n_2\beta_2 l_2 m_2}^{(2)} \times \\ \times \frac{\exp\left[-\left(g_{l_1}^{(x)}\right)^2 + \left(g_{m_1}^{(y)}\right)^2\right]^{1/2} |z_{n_2} - z_{n_1}|}{\left(g_{l_1}^{(x)}\right)^2 + \left(g_{m_1}^{(y)}\right)^2} \Delta\left(g_{l_1}^{(x)} + g_{l_2}^{(x)}\right) \Delta\left(g_{m_1}^{(y)} + g_{m_2}^{(y)}\right), \quad (1)$$

где  $\Delta$  — символ Кронекера,

$$C_{n_k\beta_k l_k m_k}^{(k)} = \eta \exp\left[ig_{l_k}^{(x)} x_0^{(n_k\beta_k)}\right] \exp\left[ig_{m_k}^{(y)} y_0^{(n_k\beta_k)}\right], \quad (2)$$

$\eta$  — плотность заряда  $\beta$ -й подрешетки кристаллографической плоскости, параллельной границе;  $x_0^{(n_k\beta)}$  и  $y_0^{(n_k\beta)}$  — смещения атомов  $n$ -й плоскости  $k$ -го поликристалла ( $k = 1, 2$ ) вдоль направлений, нормального ( $x$ ) и параллельного ( $y$ ) оси разориентации;

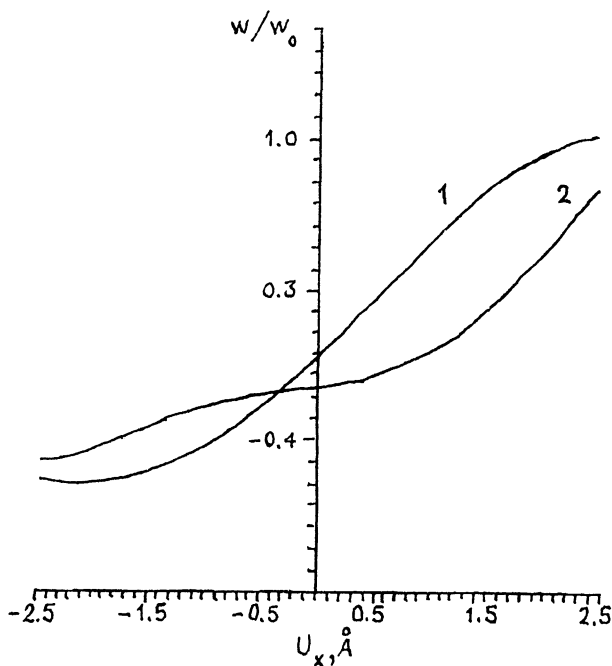
$$g_{l_1}^{(x)} = \frac{2\pi}{a_k^{(x)}} l_k, \quad g_{m_k}^{(y)} = \frac{2\pi}{a_k^{(y)}} m_k, \quad (3)$$

$a_k^{(x)}$  и  $a_k^{(y)}$  — периоды идентичности в направлениях  $x$  и  $y$   $k$ -го поликристалла;  $l_k$  и  $m_k$  — целые числа. Штрихи над знаками суммирования означают отсутствие членов с  $l = m = 0$ . Для соизмеримой симметричной границы  $a_1 = a_2$ ,  $l_1 = -l_2 = 1$ ,  $m_1 = -m_2 = m$ . На границе зерен  $\Sigma 9$ , (114) периоды идентичности  $a^{(x)}$  и  $a^{(y)}$  равны  $a\sqrt{3/2}$  и  $a\sqrt{2}$  соответственно,  $\beta = 2$ ;

$$x_0^{(n_k\beta_k)} = p_k/18 [2\bar{2}1] \quad \text{и} \quad y_0^{(n_k\beta_k)} = q_k/2 [110], \quad (4)$$

где  $p_k$  и  $q_k$  — целые числа.

Принимая полуширину ядра границы, равной  $a$  [8], при суммировании можно ограничиться членами с  $n_1$  и  $n_2 \leq 3$ , для которых  $p_k = 4, 8, 12$  и  $q_k = 1, 0, 1$ . Компьютерное суммирование выполнено в предположении равенства нулю компоненты сдвига в направлении, нормальном плоскости границы.



**Рис. 2.** Зависимость приведенной энергии электростатического взаимодействия на симметричной границе  $\Sigma 9$  от величины жесткого сдвига решеток смежных зерен. 1 — зеркально-симметричная граница, 2 — граница с жестким планарным сдвигом на вектор  $1/18[\bar{2}21]$ .

На рис. 2 приведены графики зависимости  $W/W_0$  от величины жесткого сдвига решеток  $U_x$  для исходной неравновесной зеркально-симметричной конфигурации (кривая 1) и конфигурации с тангенциальным сдвигом  $T_x$  центральной плоскости на вектор  $1/18[\bar{2}21]$  (кривая 2), где  $W_0 = 6.43 \cdot \eta^2 a$ . Из рис. 2 следует, что жесткий сдвиг  $T_x$  плоскости  $(1\bar{1}4)$  приводит к снижению энергии границы и появлению точки перегиба при  $U_x = 0$ . Этот случай соответствует конфигурации неустойчивого равновесия границ при  $U_x = 0$  в компьютерных экспериментах с использованием методов молекулярной динамики [7]. Обнаруженные методом полевой ионной микроскопии лабильные состояния границ зерен с нулевым вектором сдвига удерживаются, по-видимому, благодаря затрудненности сдвиговой релаксации в окрестности тройных стыков и уступов на границах зерен. В компьютерных экспериментах такая ситуация реализуется благодаря возвращающим силам на границах модельных кристаллов.

Таким образом, в настоящей работе показано, что большеугловые границы зерен в окрестности уступов и тройных стыков находятся в особом состоянии трансляции решеток смежных зерен. Релаксация на таких участках границ может осуществляться путем жесткого сдвига атомных слоев в плоскости границы.

Работа поддерживается Фондом фундаментальных исследований Комитета по вопросам науки и технологии Украины.

### Список литературы

- [1] *Gryaznov V.G., Trusov L.I.* // Nanostruct. Mater. 1992. V. 1. N 9. P. 251-256.
- [2] *Lazarenko A.S., Mikhailovskij I.M., Rabukhin V.B., Velicodnaya O.A.* // Acta metall. mater. 1995. V. 43. N 2. P. 639-643.
- [3] *Mikhailovskij I.M., Rabukhin V.B.* // Phys. Stat. Sol. (a). V. 119. P. K113-K115.
- [4] *Поздняков В.А., Глезер А.М.* // Письма в ЖТФ. 1995. Т. 21. В. 1. С. 31-36.
- [5] *Forwood C.T., Clarebrough L.M.* // Phil. Mag. A. 1985. V. 51. N 4. P. 589-606.
- [6] *Михайловский И.М.* // ФТТ. 1982. Т. 24. № 11. С. 3210-3215.
- [7] *Мазилова Т.И., Михайловский И.М.* // ФТТ. 1995. Т. 37. № 1. С. 206-210.
- [8] *Клинггер Л.М., Горбунов Д.А.* // Структура и свойства внутренних поверхностей раздела в металлах / Под ред. Б.С.Бокштейна. М., 1988. С. 29-47.
- [9] *Герасименко В.И., Михайловский И.М., Полтинин П.Я. и др.* // ФММ. 1989. Т. 68. № 4. С. 806-811.

Национальный научный центр  
"Харьковский  
физико-технический институт"  
Украина

Поступило в Редакцию  
11 июля 1995 г.