

Атомный механизм диффузии по малоугловым границам кручения в ГЦК металлах

Мартынов А.Н., Полетаев Г.М., Старостенков М.Д.

E-mail: gmpoletaev@mail.ru

Алтайский государственный технический университет, пр. Ленина 46, 656038 Барнаул

Atomic mechanism of diffusion over low-angle twist boundaries in FCC metals

Martynov A.N., Poletaev G.M., Starostenkov M.D.

Altai State Technical University, Lenin st. 46, 656038 Barnaul

Методом молекулярной динамики исследуется атомный механизм диффузии по малоугловым границам кручения (100), (110), (111) в ГЦК металлах Ni, Cu, Al. Показано, что диффузия по границам кручения осуществляется посредством образования цепочек смещенных атомов вдоль ядер зернограницных винтовых дислокаций, инициирующихся, как правило, вблизи узлов дислокационной сетки.

Ключевые слова: граница кручения, механизм диффузии, винтовая дислокация, дислокационная сетка, молекулярная динамика.

The atomic mechanism of diffusion over low-angle twist boundaries (100), (110), (111) in fcc metals Ni, Cu, Al is studied by the method of molecular dynamics. It is shown that self-diffusion over twist grain boundaries takes place by the formation of the chains of displaced atoms along the nuclei of screw grain boundary dislocations, initiated, as a rule, near knots of dislocation net.

Keywords: twist boundary, diffusion mechanism, screw dislocation, dislocation net, molecular dynamics.

1. Введение

Границы зерен по положению оси разориентации делятся на два типа, представляющих собой крайние случаи: границы наклона и кручения. В случае границ наклона ось разориентации, то есть ось, вокруг которой одно кристаллическое зерно повернуто относительно другого, лежит в плоскости границы. В случае границ кручения – ось разориентации перпендикулярна этой плоскости. В действительности, границы зерен в поликристаллах могут содержать оба компонента: наклона и кручения. Такие границы называются смешанными. Более изученными, как с точки зрения атомной структуры, так и с точки зрения процессов, происходящих с их участием, являются границы наклона. Большинство работ, посвященных границам зерен, относятся именно к таким границам. Относительно границ кручения информации в литературе существенно меньше.

Структура границ описывается с помощью различных моделей. При малых углах разориентации удобнее пользоваться дислокационной моделью – граница зерен представляется в виде периодически расположенных дислокаций (дислокационной стенки или сетки). При повышении угла разориентации расстояние между ядрами дислокаций уменьшается, и при некотором зна-

чении угла ядра дислокаций сливаются друг с другом. Границы, имеющие угол разориентации больше этого значения, называются большеугловыми и описываются уже с использованием других структурных моделей, среди которых наиболее популярными являются модели структурных единиц и решетки совпадающих узлов. Относительно структуры малоугловых границ кручения в литературе говорится, что она аналогична структуре малоугловых границ наклона, за исключением того, что дислокации в границах кручения не краевые, как в границах наклона, а винтовые. В случае малых углов разориентации ядра винтовых дислокаций, соединяясь особым образом, образуют сетку с квадратными, прямоугольными или гексагональными ячейками [1-6].

Диффузия по границам зерен, как известно, протекает значительно интенсивнее, чем в объеме зерен. Несмотря на длительную историю исследования диффузии по границам зерен, представление о механизмах зернограницной диффузии до настоящего времени остается неполным. Как правило, полагается, что диффузия по границам зерен осуществляется посредством миграции вакансий или междоузельных атомов в плоскости границы. Вместе с тем, авторами работ [7], путем расчета энергии активации атомных скачков в различных направлениях в границе, показано, что миграция вакансии или междоузельного атома в межзеренной границе

может иметь длиннопериодический характер, то есть включать одновременно несколько атомных перескоков, происходящих «без остановки». Исследования атомных механизмов диффузии по границам наклоне в ГЦК металлах, проведенные нами ранее с помощью метода молекулярной динамики, показали, что перемещения атомов в границе, как правило, не единичные, а коллективные, представляющие собой цепочки смещенных атомов «один за другим» [8-10]. В работах [8-10] было выяснено, что важную роль при этом играют изломы на зернограницных краевых дислокациях – цепочки атомных смещений начинаются и заканчиваются, как правило, на изломах дислокаций.

Настоящая работа посвящена исследованию с помощью метода молекулярной динамики атомного механизма самодиффузии по малоугловым границам кручения (100), (110), (111) в ГЦК металлах Ni, Cu, Al.

2. Описание модели

Граница кручения создавалась в середине расчетного блока путем поворота двух ГЦК кристаллов (двух половин блока) на угол разориентации θ вокруг оси, перпендикулярной границе (рис.1). Рассматривались три варианта плоскости границы (на рис.1 плоскость границы выделена серым цветом): (100), (110), (111). Получающийся расчетный блок обрезался таким образом, чтобы он приобрел форму параллелепипеда и не содержал по краям пустот (на рисунке конечный расчетный блок отмечен пунктирным контуром). Затем проводилась динамическая релаксация структуры, в ходе которой бикристалл переходил в равновесное состояние, при этом температура расчетного блока повышалась. В завершении релаксации выполнялась процедура охлаждения до 0 К.

Получаемая атомная структура границ зерен проверялась на стабильность путем нагрева до температуры близкой к температуре плавления и выдержки в течение относительно продолжительного времени (500 пс).

Граничные условия задавались по всем осям жесткие, то есть крайним атомам расчетного блока не позволялось двигаться. Такой тип условий позволяет сохранить положение границы зерен с заданными изначально геометрическими параметрами. Количество атомов в расчетном блоке составляло от 30000 до 40000. Шаг интегрирования по времени движения частиц в методе молекулярной динамики варьировался от 1 до 10 фс.

Межатомные взаимодействия описывались многочастичными потенциалами Клери-Розато [11]. В этом случае потенциальная энергия i -го атома находится с помощью выражения

$$U_i = \sum_{j=1}^N A \exp\left(-p\left(\frac{r_j}{r_0} - 1\right)\right) - \sqrt{\sum_{j=1}^N \xi^2 \exp\left(-2q\left(\frac{r_j}{r_0} - 1\right)\right)}$$

Здесь A , p , q , ξ , r_0 – параметры потенциала; r_{ij} – расстояние между i -м и j -м атомами; N – число атомов в расчетном блоке. Параметры потенциалов были взяты из работы [11].

Для исследования атомного механизма диффузии проводились компьютерные эксперименты продолжительностью 100-500 пс при различных температурах расчетного блока от 300 К до температуры плавления. Температура расчетного блока задавалась через началь-

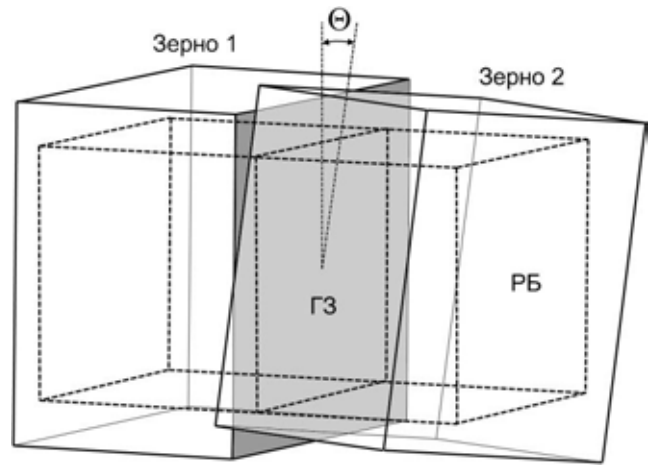


Рис. 1. Схема создания расчетного блока с границей кручения. θ – угол разориентации; ГЗ – граница зерен (серым цветом выделена плоскость в границе); РБ – конечный расчетный блок (отмечен пунктирным контуром).

ные скорости атомов в соответствии с распределением Максвелла. При этом суммарный импульс атомов в расчетном блоке был равен нулю.

Атомный механизм диффузии исследовался преимущественно с помощью визуализатора атомных смещений относительно начальных положений. Смещения атомов визуализировались программой непосредственно в процессе компьютерного эксперимента, что позволяло не только наблюдать смещения атомов в динамике, но и судить о преобладании того или иного механизма. Такой метод исследования механизма диффузии (метод непосредственного наблюдения) является более эффективным, чем, например, косвенный метод, заключающийся в сравнении рассчитанных значений энергии активации миграции атома в разных направлениях [12].

3. Результаты и обсуждение

Ранее [13] было проведено исследование структуры рассматриваемых границ. Была осуществлена идентификация винтовых дислокаций в малоугловых границах кручения в ГЦК металлах. Так, было показано, что границы (100) содержат квадратную сетку винтовых

дислокаций $\frac{1}{\sqrt{2}} \langle 110 \rangle$; границы (110) – прямоугольную сетку винтовых дислокаций двух типов: $\frac{1}{\sqrt{2}} \langle 110 \rangle$ и

$1 \langle 100 \rangle$; границы (111) – гексагональную сетку винтовых дислокаций $\sqrt{\frac{3}{8}} \langle 112 \rangle$. На рис.2 изображены наложения идентичных атомных плоскостей с разных сторон границы зерен. Для наглядности линиями показаны атомные ряды обеих плоскостей (они, конечно, не един-

ственные, – можно выделить несколько направлений атомных рядов). Под идентичными плоскостями понимаются плоскости, атомы в которых при $\theta=0^\circ$ при наложении совпадают.

С увеличением угла разориентации размеры ячеек дислокационной сетки уменьшались. При некотором угле ядра дислокаций начинали перекрываться, и было невозможно отделить одну дислокацию от другой. Переходный угол от малоугловых к большеугловым грани-

цам четко выделить не удалось, как это, например, было сделано ранее для границ наклона [8].

Следует заметить, что рассматриваемая в настоящей работе атомная структура относится к структурно «чистым» границам зерен. В реальных поликристаллах границы зерен являются эффективными стоками различных дефектов: дислокаций, вакансий, междоузельных атомов и их комплексов. Очевидно, что внесенный дефект должен оказывать влияние на диффузионную проницаемость границы. Более того, внесенный дефект

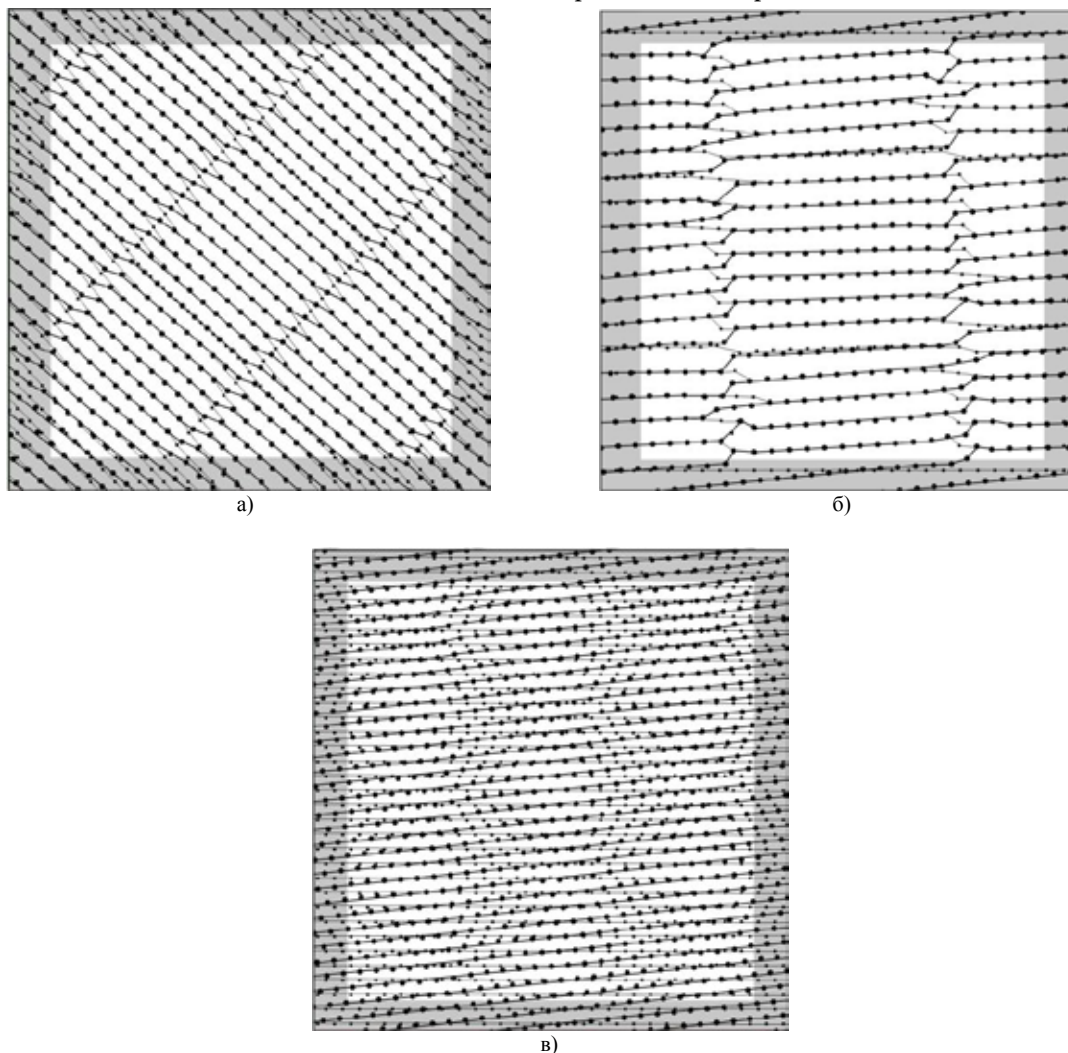


Рис. 2. Наложения идентичных атомных плоскостей с разных сторон границ кручения $\theta=6^\circ$ в Cu: а) (100), б) (110), в) (111). Атомы «ближней» плоскости изображены большими кружками, «дальней» – маленькими. Для наглядности линиями показаны атомные ряды обеих плоскостей (жирными – «ближней», тонкими – «дальней»). Атомам в серых приграничных областях в процессе структурной релаксации не позволялось двигаться (жесткие граничные условия).

может привести к появлению второстепенных механизмов диффузии.

Для структурно «чистых» границ наклона ранее было выяснено [8-10], что миграция атомов в границе, как правило, происходит с образованием цепочек смещенных атомов, начинающихся и заканчивающихся на изломах краевых зернограницных дислокаций. При этом изменяется положение изломов на одно межатомное расстояние. Единичные атомные скачки вдоль ядер дислокаций менее вероятны, так как предполагают образование пары вакансии – междоузельный атом на близком расстоянии друг от друга в прямом, без изломов, ядре дислокации. Это справедливо также при захвате дислокацией решеточных точечных дефектов – они мигриру-

ют, как правило, к излому дислокации, смещая этот излом на одно межатомное расстояние.

В структурно «чистых» границах кручения миграция атомов, как было выяснено в настоящей работе, также осуществляется посредством образования цепочек смещенных друг за другом атомов вдоль ядер зернограницных дислокаций. С помощью непосредственного наблюдения за смещениями атомов вблизи границы зерен было обнаружено, что в процессе компьютерного эксперимента положение ядер зернограницных винтовых дислокаций может колебаться. В этом случае возникают характерные параллельные цепочки атомов, смещенных в противоположных направлениях (рис. 3 а). Такое изменение местоположения ядра винтовой дислокации было,

как правило, временным, и в итоге, чаще всего, атомы возвращались на прежние позиции. Однако в некоторых случаях при возвращении дислокации на прежнее место атомы занимали не свое первоначальное местоположение, а соседних атомов. Образующаяся цепочка смещенных атомов, как правило, соединяла два соседних узла

дислокационной сетки (рис. 3 б). В этом случае в одном узле сетки возникала вакансия, в другом – междоузельный атом, причем энергия образования этих дефектов, очевидно, ниже, чем в идеальном кристалле. Энергетически выгодно, конечно, в таких условиях образование замкнутых цепочек смещенных атомов, – тогда избыточ-

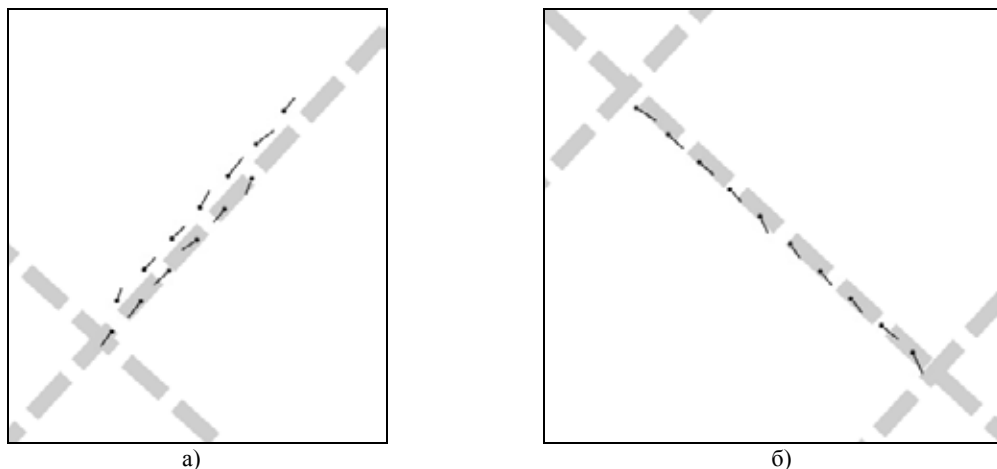


Рис. 3. Атомные смещения вблизи ядра винтовой дислокации (отмечено серой пунктирной линией) в границе кручения (100) с углом разориентации 6° в Ni при температуре 1500 К. Начальные положения атомов показаны жирными точками, смещения – отрезками. Показаны только смещения выше 1 \AA . а) Параллельные цепочки смещенных атомов при колебании местоположения ядра винтовой дислокации. б) Образование цепочки смещенных атомов от одного узла дислокационной сетки до другого.



Рис. 4. Замкнутая цепочка смещенных атомов в границе кручения (100) с углом разориентации 15° в Ni. Показаны смещения выше $0,1\text{ \AA}$.

ные точечные дефекты в ядрах дислокаций рекомбинируют. Такие замкнутые цепочки, действительно, часто наблюдались в компьютерной модели (рис. 4).

4. Заключение

С помощью метода молекулярной динамики в настоящей работе показано, что самодиффузия по структурно «чистым» (т.е. не содержащим дополнительные внесенные дефекты) границам кручения, как и по границам наклона, осуществляется, в основном, посредством образования цепочек смещенных атомов вдоль ядер зернограницных дислокаций. В границах наклона местами инициации цепочек атомных смещений выступали изломы краевых дислокаций [8-10], в границах кручения – узлы дислокационной сетки. В границах кручения, в отличие от границ наклона, цепочки смещенных атомов

чаще имеют замкнутую форму. Это связано с тем, что в таком случае рекомбинирует пара избыточных точечных дефектов – вакансия и междоузельный атом.

Литература

1. J. Friedel. Dislocations, Moscow, Mir (1967) 644 p. (in Russian)
2. J. Hirth, J. Lote. Theory of Dislocations, Moscow, Atomizdat (1972) 600 p. (in Russian)
3. M.A. Shtremel. Strength of alloys. P.1. Defects of Lattice, Moscow, Metallurgiya (1982) 280 p. (in Russian)
4. J.R. Heringa, J.Th.M. De Hosson, F.W. Schapink. Journal De Physique. 46 (C4), 293 (1985).
5. J.Th.M. De Hosson, V. Vitek. Philosophical Magazine A. 61 (2), 305 (1990).
6. S. von Alfhthan, K. Kaski, A.P. Sutton. Physical Review B. 74, 134101 (2006).
7. A. Suzuki, Y. Mishin. Interface Science. (11), 131 (2003)
8. G.M. Poletaev, M.D. Starostenkov, S.V. Dmitriev. In: Computational Materials, ed. by W.U. Oster, New York, Nova Science Publishers (2009) 265 p.
9. R.Yu. Rakitin, G.M. Poletaev, M.S. Aksenov, M.D. Starostenkov. Fundamentalniye problemi sovremennogo materialovedeniya. 1 (2), 124 (2005). (in Russian)
10. R.Yu. Rakitin, G.M. Poletaev, M.S. Aksenov, M.D. Starostenkov. Technical Physics Letters. 31 (8), 650 (2005).
11. F. Cleri, V. Rosato. Physical Review B. 48 (1), 22 (1993)
12. G.M. Poletaev, M.D. Starostenkov. Physics of the Solid State. 52 (6), 1146 (2010).
13. G.M. Poletaev, A.N. Martynov, M.D. Starostenkov. Fundamentalniye problemi sovremennogo materialovedeniya. 7 (4), 27 (2010). (in Russian)