

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ГРАНИЦ ЗЕРЕН ОБЩЕГО ТИПА В ЗОЛОТЕ

Кожанов А.В., Векман А.В., Демьянов Б.Ф.

Алтайский государственный технический университет, 656099, г.Барнаул, пр. Ленина, 46

Известно, что границы зерен (ГЗ) являются одним из важнейших дефектов кристаллов, так как они оказывают влияние на многие свойства поликристаллических материалов. В настоящее время активно ведется изучение структуры и свойств ГЗ. В связи с тем, что на сегодняшний день имеется далеко не полное представление об атомной структуре ГЗ и их влиянии на физико-механические свойства поликристаллов, изучение ГЗ остается актуальной проблемой.

Даже при помощи современной высокоразрешающей электронной микроскопии не удается получить необходимую точность в исследованиях ГЗ на атомном уровне, поэтому важное значение имеют теоретические модели. В настоящее время для изучения атомной структуры и других свойств дефектов широко используется компьютерное моделирование, так как оно позволяет выявлять закономерности недоступные экспериментальной дефектоскопии.

В настоящей работе представлены результаты компьютерного моделирования границ в золоте. Исследовались симметричные границы наклона в плоскости упаковки (111) с осями разориентации  $[\bar{1}01]$  и  $[11\bar{2}]$ . Структура ГЗ приведена на рис.1. Совпадающий узел обозначен буквой А. Ось ОХ направлена вдоль плоскости дефекта, ось ОУ направлена вдоль оси поворота, ось ОZ – перпендикулярно плоскости дефекта. Расчеты общих границ проводились в диапазоне углов от  $0^\circ$  до  $90^\circ$  с шагом в  $1^\circ$ . Расчеты специальных границ проводились отдельно. Для этого указывался угол, подсчитанный по индексам Миллера с точностью до  $0,00001^\circ$ .

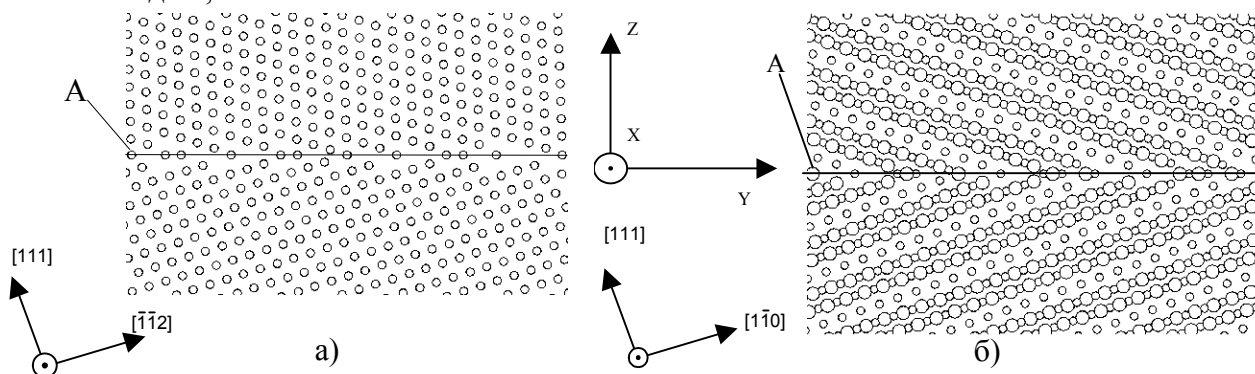


Рис.1. Структуры ГЗ в проекции на плоскости  $(\bar{1}01)$  и  $(11\bar{2})$ : а) с осью разориентации  $[\bar{1}01]$ , б) с осью разориентации  $[11\bar{2}]$ .

### Методика расчетов

Энергия ГЗ вычисляется как разность энергии кристалла содержащего ГЗ и энергии идеального кристалла. Для расчета энергии ГЗ используется парный потенциал межатомного взаимодействия Морза. Данная методика вычисления энергии ГЗ описана в работе [1]. Радиус действия потенциала ограничивается пределами трех координационных сфер ГЦК-решетки.

В связи с тем, что границы зерен в общем случае имеют аperiодическую структуру, имеет смысл вычислять среднюю энергию по всей площади расчетной ячейки. При построении расчетной ячейки использовались жесткие граничные условия по всем трем направлениям осей координат. По оси Y в плоскости (111) имеется период идентичности

равный  $a \cdot \sqrt{2}$ . Для увеличения точности расчетная ячейка выбрана в размере четырех параметров идентичности.

Так как ГЗ не имеет дальнедействующих полей напряжений в направлении нормальном плоскости границы по оси OZ берутся в расчет только атомы в пределах трех координационных сфер ГЦК-решетки от  $-a \cdot \sqrt{6}/2$  до  $a \cdot \sqrt{6}/2$ . Для оси OX выбран размер в 90 параметров решетки, что для золота равен 36,72 нм. Данный размер выбран в связи с тем, что по оси OX период идентичности наблюдается только в специальных границах, и для получения необходимой точности этот размер является вполне достаточным, как видно на графике зависимости относительной энергии РСУ от длины расчетной ячейки  $L$  (рис.2). Таким образом, в расчетную ячейку входит от 4888 до 6696 атомов. В зависимости от направления разориентации и угла наклона.

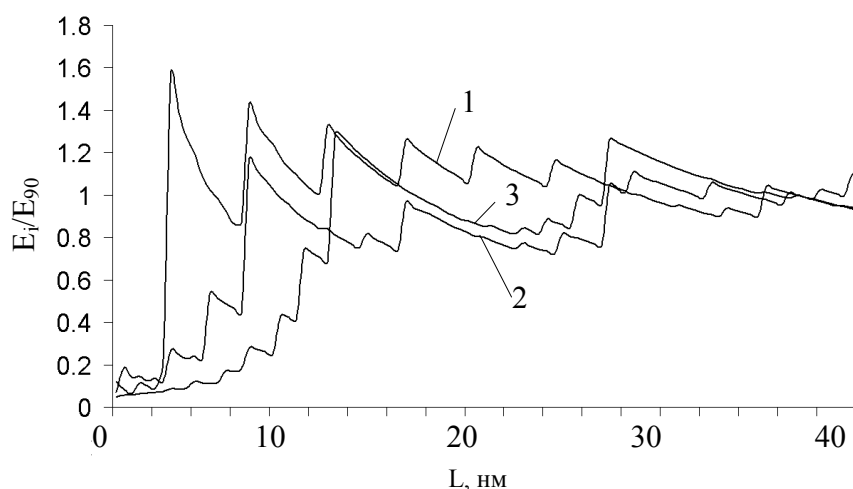


Рис. 2. Зависимость относительной энергии РСУ от длины расчетной ячейки для оси разориентации  $[\bar{1}01]$ . 1–  $\Theta=20^\circ$ ; 2 -  $\Theta=40^\circ$ , 3 -  $\Theta=60^\circ$

При образовании ГЗ наклона с использованием геометрической процедуры часть атомов, принадлежащих разным зернам сближаются на расстояния меньше, чем радиус первой координационной сферы, что увеличивает энергию дефекта. Такая граница должна релаксировать. Релаксация ГЗ проводилась последовательно в два этапа. На первом этапе осуществлялась жесткая вакансионная релаксация, при которой часть атомов в области ГЗ замещается вакансиями [2]. На втором этапе проводилась полная релаксация методом молекулярной статики [3].

#### Результаты и их обсуждение

На рис. 3 представлена зависимость относительной энергии ГЗ от угла разориентации релаксированной границы. За единицу принято среднее значение энергии ГЗ. Кривая (1) показывает значения относительной энергии для направления разориентации  $[\bar{1}01]$ , кривая (2) соответственно для направления  $[11\bar{2}]$ . Круглыми маркерами помечены участки, где значение угла разориентации близко к значениям углов спецграниц по направлению  $[\bar{1}01]$ , и квадратными маркерами показаны такие же участки для направления  $[11\bar{2}]$ . В данной работе рассматривались специальные границы, в которых плотность совпадающих узлов  $\Sigma < 50$ .

Как видно из графика, энергия ГЗ монотонно возрастает с увеличением угла от  $0^\circ$  до  $60^\circ$ . Для границ с осью разориентации  $[\bar{1}01]$  энергия уменьшается после угла  $60^\circ$ , что

свидетельствует о существовании для данной ГЗ структурного фазового перехода [4]. В случае ГЗ с осью разориентации  $[11\bar{2}]$  фазовое превращение не происходит.

Плавное увеличение энергии ГЗ указывает на энергетически более предпочтительное возникновение границ общего типа с углами разориентации  $<10^\circ$ .

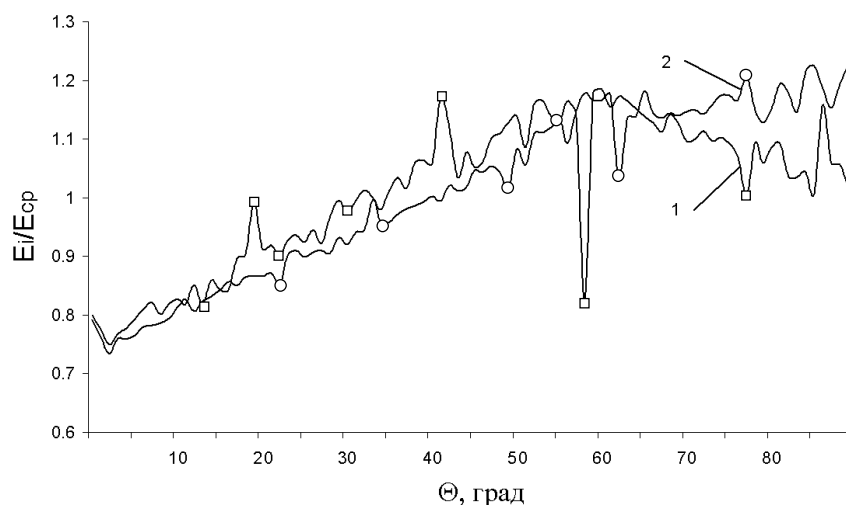


Рис. 3. Зависимость относительной энергии ГЗ от угла разориентации

Из рисунка видно, что обратная плотность совпадающих узлов не является единственным критерием энергетической выгоды спецграниц. Например, границы  $\Theta=18,44^\circ$ ,  $\Theta=42,61^\circ$  и  $\Theta=78,46^\circ$  имеют энергию, превышающую энергию границ общего типа в данном диапазоне углов. Энергии границ  $\Theta=14,04^\circ$ ,  $\Theta=22,62^\circ$ ,  $\Theta=31,42^\circ$ ,  $\Theta=34,23^\circ$  и  $\Theta=55,01^\circ$  имеют значения сопоставимые с энергией общих границ. С другой стороны, границы  $\Theta=55,76^\circ$ ,  $\Theta=59,04^\circ$ ,  $\Theta=62,96^\circ$  и  $\Theta=78,69^\circ$  имеют энергию существенно ниже энергии общих ГЗ. Выгодность геометрических и энергетических характеристик данных границ указывает на большую вероятность их появления в реальных кристаллах.

На рис. 4 изображены атомные смещения для границ с осью разориентации  $[11\bar{2}]$  общего типа (рис.4а) и специального типа (рис. 4б). Данные изображения свидетельствуют о нерегулярности атомных смещений границ общего типа и регулярности атомных смещений границ специального типа.

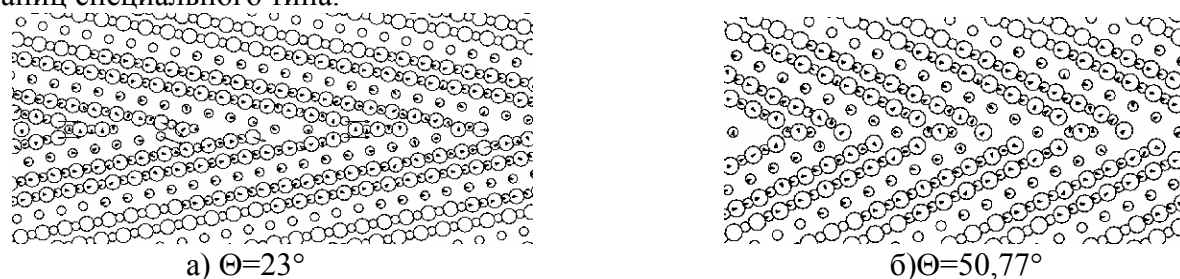


Рис. 4. Движение атомов при проведении атомной релаксации в ГЗ с осью разориентации  $[11\bar{2}]$

#### Литература

1. Э.В.Козлов, Л.Е. Попов, М.Д. Старостенков Изв. вузов. Физика №3, (1972)
2. М.Д. Старостенков, Б.Ф. Демьянов, А.В. Векман Поверхность №4, с.54-58 5 (2000)
3. Starostenkov M.D., Demyanov V.F., Weckman A.V. Acta Metallurgica Sinica.. – V.13, №2. – P.540-545. (2000)
4. Векман А.В. Атомная структура и энергия общих границ зерен наклона типа  $[100]$  в кубических кристаллах.// Автореферат к.ф.-м.н.: Барнаул, - (2000). – 23 с.