Письма в ЖЭТФ, том 111, вып. 11, с. 767 – 771

Моделирование процесса образования пор на границах зерен в алюминии

А. В. Векман[1]*, Б. Ф. Демьянов*

Алтайский государственный технический университет им. И. И. Ползунова, 656038 Барнаул, Россия

Поступила в редакцию 23 апреля 2020 г.
После переработки 26 апрпеля 2020 г.
Принята к публикации 26 апрпеля 2020 г.

Методами компьютерного моделирования проведено исследование возможности образования пор на границах зерен наклона с осью разориентации [100]. Были исследованы три специальные границы и три границы зерен общего типа при температурах 400, 500 и 600 K. Показано, что наличия 3 % решеточных вакансий недостаточно для образования пор как на границе зерен, так и в зернах, при 6 % – поры образуются только в зернах. Поры на границы зерен образуются при температурах 500 и 600 K с плотностью решеточных вакансий 4 и 5 %. На специальной границе зерен $\Sigma5(013)$ поры на границе зерен не образовывались.

DOI: 10.31857/S1234567820110087

Введение. Хорошо известно, что границы зерен (ГЗ) и их тройные стыки являются местом сосредоточения различных дефектов, в частности, вакансий. Предельным случаем накопления избыточных вакансий на ГЗ являются поры. Наиболее интенсивное образование пор происходит при облучении металлов частицами с высокой энергией: электронами, нейтронами, γ-квантами или ионами. Основным процессом при облучении является образование вакансий и межузельных атомов [1]. При облучении материалов вакансии и межузельные атомы образуются с одинаковой скоростью по механизму Френкеля [2]. В облучаемом материале устанавливается состояние динамического равновесия, при котором скорость возникновения точечных дефектов уравновешивается скоростью их исчезновения на стоках [3, 4]. Число точечных дефектов при облучении значительно превышает равновесное, т.е. материал является пересыщенным. Вследствие высокой подвижности точечных дефектов и взаимодействия их друг с другом и с другими дефектами решетки, в облученном материале происходит образование новой дефектной структуры: возникают новые линейные, плоские и объемные дефекты.

Большое количество точечных дефектов исчезает при аннигиляции, однако многие из них избегают столкновений. Экспериментально установлено, что в облучаемом материале одна часть неаннигилированных точечных дефектов объединяются, образуя скопления: вакансионные диски, дислокационные петли, тетраэдры дефектов упаковки и поры [5–7]. Вторая часть точечных дефектов исчезает на стоках, которыми служат другие дефекты, а также свободная поверхность кристалла.

Способностью поглощать вакансии и межузельные атомы с различной эффективностью обладают практически все дефекты кристаллической решетки. Не все стоки одинаковы по отношению к вакансиям и внедренным атомам. Например, дислокации преимущественно являются стоками межузельных атомов, они их сильнее притягивают своим упругим полем [3, 4]. Дислокации являются эффективными стоками межузельных атомов еще и потому, что их количество велико в кристаллах. Поэтому поглощение межузельных атомов происходит быстрее и при облучении возникает вакансионное пересыщение. Это пересыщение при больших дозах облучения реализуется в виде пор.

ГЗ являются наиболее эффективными источниками и стоками вакансий в поликристаллах, именно они обеспечивают равновесную концентрацию вакансий в зерне. Сток вакансий на границу обнаруживается экспериментально по отсутствию вблизи ГЗ в закаленных металлах вакансионных выделений: дислокационных петель, тетраэдров дефектов упаковки [8]. Эффективность действия, как источников, так и стоков вакансий зависит от типа ГЗ – общие ГЗ являются высокоэффективными источниками и стоками, тогда как специальные ГЗ обладают слабой эмиссией и адсорбцией [9, 10].

Существует много экспериментальных исследований, свидетельствующих о том, что поры на ГЗ мо-

[1]e-mail: weckman@list.ru

гут образовываться не только в результате облучения, но и в результате интенсивной пластической деформации [11–16]. В результате такого воздействия ГЗ приходят в сильно неравновесное состояние и содержат высокую плотность дефектов деформационного происхождения, а при их коалесценции происходит зарождение пор. В работе [13] показано, что увеличение нанопористости в алюминиевом сплаве Al + 0.2 вес. % Sc связано с увеличением доли большеугловых границ. В работе [15] показано, что при низкотемпературном отжиге субмикрокристаллического алюминиевого сплава 1570 происходит растворение нанопор, а в [17] авторы пришли к выводу, что увеличение исходной степени неравновесности ГЗ приводит к появлению непродолжительной стадии роста пор на начальном этапе низкотемпературного отжига и увеличению времени полного растворения пор. Очевидно, что возникновение пор на ГЗ происходит в результате диффузии неравновесных вакансий. Так, в работе [18] показано, что сток деформационных вакансий на ГЗ приводит к увеличению коэффициента зернограничной диффузии на один-два порядка. Повышение концентрации дефектов решетки при интенсивной пластической деформации эквивалентно повышению температуры и может оказывать влияние на фазовые превращения в сплавах [19].

В работах [20–22] были исследованы образцы меди высокой частоты, подверженные деформации кручения под высоким давлением. Показано, что в результате такой обработки образуются поры, встроенные в полосы ультратонких зерен. Авторы полагают, что наблюдаемая пористость была вызвана высокими градиентами деформации [20]. Ультратонкие зерна внутри полос сдвига с порами, заполненными азотом, обладают более высокой термостойкостью, чем окружающая матрица [21]. Большинство ультратонких зерен имеют высокую плотность дефектов и внутреннюю деформацию [22].

В настоящей работе методами компьютерного моделирования проведено исследование возможности образования пор на границах зерен наклона с осью разориентации [100].

Описание методики компьютерного эксперимента. Равновесная структура исследуемых ГЗ была построена с использованием структурно-вакансионной модели ГЗ [23]. В данной модели два сопрягающихся кристалла, разориентированные на определенный угол вокруг общей оси, подвергаются последовательно вакансионной и атомной релаксации для минимизации энергии системы. Методика вакансионной и атомной релаксации описана в работах [24, 25]. Межатомное взаимодействие описывалось парным потенциалом Морзе [26]. Энергия ГЗ находилась как разность энергий идеального кристалла и кристалла с дефектом. Перед началом компьютерного моделирования часть атомов удалялась из узлов расчетной ячейки, создавая таким образом определенное количество неравновесных вакансий. Неравновесные вакансии вносились в области, отстоящие от плоскости границы на расстояние не менее трех параметров решетки. Процесс перемещения вакансий исследовался методом молекулярной динамики. Время компьютерного эксперимента составляло 100 пс. В качестве объектов исследования выбраны границы общего типа с углами разориентации 15°, 30° и 60° и три специальные ГЗ $\Sigma13(015)$, $\Sigma5(013)$ и $\Sigma5(012)$ с углами разориентации 22.62°, 36.87° и 52.13°. Данные специальные ГЗ являются наиболее изученными из всех спецграниц с осью разориентации [100]. Как показано в работах [27, 28], граница $\Sigma5(013)$ имеет пониженную, по сравнению с другими ГЗ, энергию, тогда как энергия границ $\Sigma13(015)$ и $\Sigma5(012)$ сравнима с энергией границ общего типа.

Результаты и их обсуждение. На первом этапе исследования был изучен процесс захвата небольшого количества неравновесных вакансий. Общее количество атомов в расчетной ячейке составляло около сорока пяти тысяч атомов, а количество внесенных вакансий 90, 180 и 270. Таким образом, данное количество вакансий составляет менее половины процента от общего количества узлов решетки. Необходимо отметить, что внесенные вакансии являются избыточными по сравнению с равновесным количеством. Температура эксперимента составляла 600 K, что составляет $0.65T_m$ (T_m – температура плавления алюминия). В процессе диффузии атомы совершают скачки из одного равновесного положения в другое. Направление и величина скачка могут быть представлены в виде отрезка, соединяющего начальное и конечное положения атома. Перескоки атомов из одного узла кристаллической решетки в другой происходят только в том случае, если рядом с атомом находится вакансия. Таким образом, совокупность всех перескоков атомов за определенный интервал времени при определенной температуре создавали трехмерную картину траекторий движения вакансий. На рисунке 1 представлена динамика движения решеточных вакансий вблизи ГЗ.

Из рисунка видно, что в начале эксперимента (рис. 1a) перемещение атомов происходит в плоскости ГЗ и сопрягающихся зернах, где существует значительное количество неравновесных вакансий. На рисунках 1b и 1c отчетливо видно, что решеточные

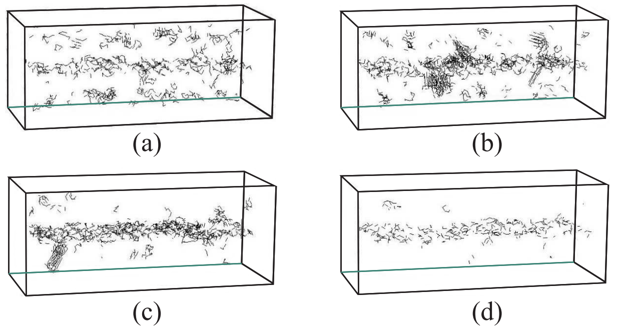

Рис. 1. Динамика движения решеточных вакансий вблизи ГЗ

вакансии постепенно перемещаются в плоскость границы. На рисунке 1d движение атомов происходит в основном в плоскости ГЗ, что свидетельствует о том, что неравновесные вакансии были захвачены границей. Это согласуется с результатом, полученным в работе [29], где показано, что в результате диффузионного движения вакансии могут попадать в область ГЗ, после чего оказываются захваченными ею. По картинам диффузионного движения можно увидеть, какое время требуется для того, чтобы большая доля решеточных вакансий пришла в границу. В таблице 1 представлены обобщенные данные этого времени.

Таблица 1. Время захвата вакансий границами зерен, пс

Тип ГЗ	90 вакансий	180 вакансий	270 вакансий
15°	55	60	60
30°	60	65	60
60°	60	65	65
$\Sigma13(015)$	60	65	55
$\Sigma5(013)$	85	80	80
$\Sigma5(012)$	65	60	65

Из таблицы 1 видно, что набольшее время требуется для границы $\Sigma5(013)$, а для остальных – примерно одинаковое время. Это означает, что граница $\Sigma5(013)$ обладает наименьшей способностью к захвату вакансий.

На втором этапе исследования в область вблизи ГЗ вводилось большое количество неравновесных вакансий – от 3 до 6 %. Расчеты проводились для трех значений температуры: 400, 500 и 600 К. В результате наблюдалось три ситуации:

- ∘ пора не возникает;
- ∘ пора образуется на ГЗ;
- ∘ пора образуется в зерне.

В качестве примера на рис. 2 представлены кадры видеоряда, на которых видно, что, вакансии приходят в границу, распределяются вдоль ее плоскости, образуя аморфизированный слой, но их количества недостаточно для образования пор. Данная картина наблюдалась для всех границ и при всех температурах, когда количество избыточных вакансий составляло 3 %.

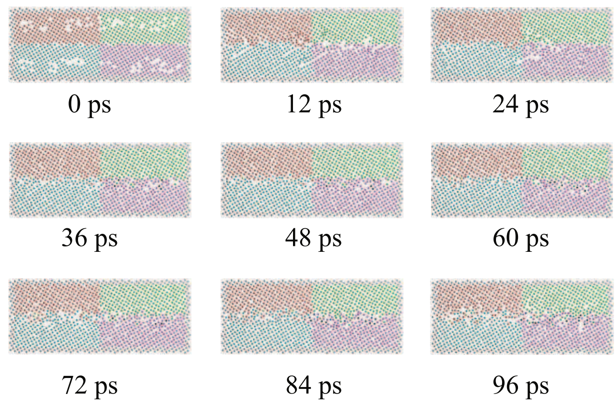

Рис. 2. (Цветной онлайн) Кадры видеоряда без образования пор

На рисунке 3 представлен пример образования поры на ГЗ. Видно, что вакансии, расположенные в зернах, постепенно начинают стекаться к ГЗ. После того, как большинство вакансий пришло в границу, на границе образуется зародыш поры. Момент времени, в который начинает образовываться пора, составляет 50 пс после начала эксперимента. После образования зародыша поры она начинает расти очень быстро и в течении 10 пс достигает максимального размера.

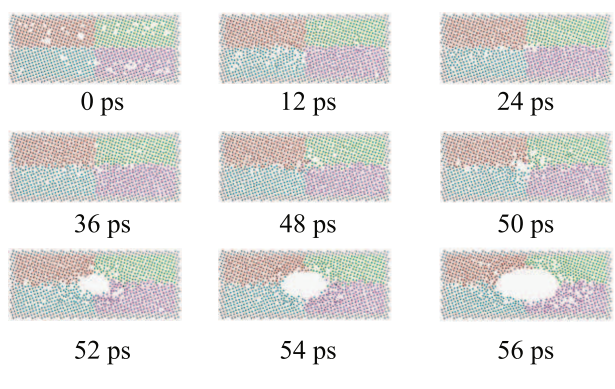

Рис. 3. (Цветной онлайн) Кадры видеоряда с образованием поры на границе зерен

На рисунке 4 представлены кадры видеоряда образования пор в зернах. В отличие от предыдущей ситуации зародыши пор в зернах возникают уже

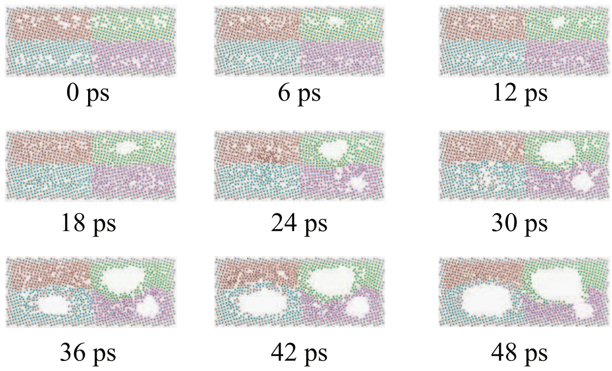

Рис. 4. (Цветной онлайн) Кадры видеоряда с образованием пор в зернах

на начальной стадии эксперимента порядка 15–20 пс, причем за это время только незначительное количество вакансий успевает дойти до ГЗ. Кроме того, как видно из рис. 4, в зернах может образовываться не одна, а сразу несколько пор. Однако, необходимо отметить, что образование одной поры в толще зерна наблюдалось гораздо чаще, чем нескольких пор.

В таблице 2 приведены обобщенные данные по образованию пор на ГЗ. Символом "–" отмечены эксперименты, в которых поры не образовывались, "GB" – поры образовывались на ГЗ, а "B" – поры возникали в зерне. Видно, что во всех экспериментах с количеством вакансий 6 % поры образовывались в зернах. Очевидно, что при такой плотности вакансий они начинают объединяться до того, как были захвачены ГЗ.

При самой низкой температуре (400 K) пор на ГЗ также не образуется. Видимо, это связано с невысокой подвижностью решеточных вакансий, тогда как при самой высокой температуре (600 K) поры на ГЗ возникали во всех ГЗ, за исключением высококогерентной границы Σ5(013). Отсутствие пор на ГЗ Σ5(013) при всех температурах и плотностях решеточных вакансий, видимо, связано со способностью данной границы захватывать решеточные вакансии. Так, в работе [30] показано, что поглощение вакансий данной ГЗ энергетически не выгодно в силу ее атомной структуры.

Заключение. В работе методами компьютерного моделирования проведено исследование возможности образования пор на границах зерен наклона с осью разориентации [100] в алюминии. Исследованы ГЗ общего и специального типа при температурах 400, 500 и 600 K. Было показано, что наличия 3 % избыточных вакансий вблизи ГЗ недостаточно для образования пор как на ГЗ, так и в толще сопрягающихся зерен. Образование пор происходит при температурах 500 и 600 K с плотностью избыточных решеточных вакансий 4 и 5 %. Когда количество избыточных вакансий достигает 6 %, то поры образуются только в зернах при всех значениях исследованных температур. На специальной ГЗ Σ5(013) поры на ГЗ не образовывались.

Таблица 2. Обобщенные данные по порообразованию в зависимости от температуры и количества вакансий: "–" – пор нет, "GB" – поры на ГЗ, а "B" – поры в зерне

Тип ГЗ	T, K	3 %	4 %	5 %	6 %
15°	400	–	–	–	B
	500	–	–	GB	B
	600	–	GB	GB	B
30°	400	–	–	–	B
	500	–	–	–	B
	600	–	GB	GB	B
60°	400	–	–	–	B
	500	–	–	GB	B
	600	–	–	GB	B
Σ13(015)	400	–	–	B	B
	500	–	–	GB	B
	600	–	GB	GB	B
Σ5(013)	400	–	–	–	B
	500	–	–	–	B
	600	–	–	–	B
Σ5(012)	400	–	–	B	B
	500	–	GB	B	B
	600	–	GB	B	B

1. В. Ф. Зеленский, И. М. Неклюдов, Т. И. Черняева, *Радиационные дефекты и распухание металлов*, Наук. Думка, Киев (1988), гл. 2, с. 21.
2. Я. И. Френкель, *Введение в теорию металлов*, Гостехиздат, М. (1958), гл. 12, п. 1, с. 194.
3. A. D. Brailsford and R. Bollough, J. Nucl. Mater. **56**, 121 (1975).
4. Yu. V. Konobeev, A. V. Subbotin, and S. I. Golubov, Radiation Effects **20**, 265 (1973).
5. М. В. Томпсон, *Дефекты и радиационные повреждения в металлах*, Мир, М. (1971) [M. W. Thompson, *Defects and Radiation Damage in Metals*, University Press, Cambridge (1969), 394 p.].
6. К. Лейман, *Взаимодействие излучения с твердым телом и образование элементарных дефектов*, Атомиздат, М. (1979) [Chr. Lehmann, *Interaction of radiation with solids and elementary defect production*, North-Holland Publishing Company, Amsterdam, N.Y., Oxford (1977), 341 p.].
7. В. В. Кирсанов, А. Л. Суворов, Ю. В. Трушин, *Процессы радиационного дефектообразования в металлах*, Энергоатомиздат, М. (1985).

8. R. W. Siegel, S. M. Chang, and R. W. Balluffi, Acta Metall. **28**, 249 (1980)
9. О. А. Кайбышев, Р. З. Валиев, *Границы зерен и свойства металлов*, Металлургия, М. (1987), гл. 3, п. 1, с. 54.
10. H. Gleiter, Acta Metall. **27**, 187 (1979).
11. В. И. Бетехтин, А. Г. Кадомцев, V. Sklenicka, and I. Saxl, ФТТ **49**, 1787 (2007).
12. R. Lapovok, D. Tomus, J. Mang, Y. Estrin, and T. C. Lowe, Acta Mater. **57**, 2909 (2009).
13. В. И. Бетехтин, V. Sklenicka, I. Saxl, Б. К. Кардашев, А. Г. Кадомцев, М. В. Нарыкова, ФТТ **52**, 1517 (2010).
14. I. A. Ovid'ko, A. G. Sheinerman, and N. V. Skiba, Acta Mater. **59**, 678 (2011).
15. В. Н. Перевезенцев, М. Ю. Щербань, Т. А. Грачева, Т. А. Кузьмичева, ЖТФ **85**, 63 (2015).
16. J. Dvorak, V. Sklenicka, V. I. Betekhtin, A. G. Kadomtsev, P. Kral, M. Kvapilova, and M. Svoboda, Mater. Sci. Eng. A **584**, 103 (2015).
17. В. Н. Перевезенцев, А. С. Пупынин, А. Е. Огородников, ЖТФ **88**, 1539 (2018).
18. В. Н. Перевезенцев, А. С. Пупынин, Письма в ЖТФ **37**, 88 (2011).
19. Б. Б. Страумал, А. Р. Кильмаметов, И. А. Мазилкин, А. Корнева, П. Земба, Б. Барецки, Письма в ЖЭТФ **110**, 622 (2019).
20. Y. Qi, A. Kosinova, A. R. Kilmametov, B. B. Straumal, and E. Rabkin, Mater. Charact. **145**, 1 (2018).
21. Y. Qi, A. Kosinova, A. R. Kilmametov, B. B. Straumal, and E. Rabkin, Scr. Mater. **178**, 29 (2020).
22. Y. Qi, A. Kosinova, A. R. Kilmametov, B. B. Straumal, and E. Rabkina, Mater. Charact. **145**, 389 (2018).
23. А. В. Векман, Б. Ф. Демьянов, ФММ **120**, 53 (2019).
24. А. С. Драгунов, Б. Ф. Демьянов, А. В. Векман, Известия ВУЗов. Физика **53**, 82 (2010).
25. А. С. Драгунов, А. В. Векман, Б. Ф. Демьянов, Ползуновский альманах **4**, 29 (2011).
26. P. M. Morse, Phys. Rev. **34**, 57 (1929).
27. А. В. Векман, Известия ТПУ **313**, 96 (2008).
28. А. С. Драгунов, Б. Ф. Демьянов, А. В. Векман, Ползуновский альманах **2**, 133 (2009).
29. А. В. Векман, Б. Ф. Демьянов, А. С. Драгунов, ФММ **116**, 621 (2015).
30. А. В. Векман, Дисс. канд. физ.-мат. наук: 01.04.07. Барнаул (2000).