

ТОНКАЯ СТРУКТУРА СИММЕТРИЧНЫХ ГРАНИЦ ЗЕРЕН В ВОЛЬФРАМЕ

П.А.Березняк, О.А.Великодная, Т.И.Мазилова, И.М.Михайловский

ННЦ "Харьковский физико-технический институт"

310108 Харьков, Украина

Поступила в редакцию 28 февраля 1994 г.

С помощью методов полевой ионной микроскопии и математического моделирования обнаружены осцилляционные особенности изменения атомной плотности в окрестности симметричных границ зерен.

Благодаря развитию высокоразрешающей электронной микроскопии и методов машинного моделирования в последние годы достигнут существенный прогресс в описании структуры границ зерен в металлах [1-3]. Установлено, что структурная ширина границ зерен – область, в которой реализуется переориентация решеток и сосредоточены ядра зернограничных дефектов решетки – составляет $1-2a$, где a – параметр решетки. Ряд физических свойств, в частности абсорбционная способность границ, определяется особенностями строения ядра границ зерен [4]. Вместе с тем анализ данных по диффузионной проницаемости границ зерен показывает, что область за пределами ядра также обладает свойствами, отличными от объемных [5], которые нельзя описать в терминах дальнедействующих упругих полей напряжений зернограничных дислокаций.

Существует количественная корреляция энергии границ и ряда других свойств с величиной зернограничной дилатации [3]. При теоретическом рассмотрении структуры и свойств границ зерен обычно принимается, что границы зерен представляют собой области с избыточным объемом, локализованном на участке, соответствующем ширине ядра границы [3,6]. В настоящей работе с помощью методов высокоразрешающей низкотемпературной полевой ионной микроскопии и математического моделирования проанализированы зернограничные особенности атомной плотности и обнаружены осцилляции локальной плотности в области, существенно превышающей ширину ядра границы.

Изучались большеугловые границы зерен в игольчатых бикристаллах, изготовленных электрохимическим травлением текстурированной вольфрамовой проволоки чистотой 99,98%. Исследования проводились в полевом ионном микроскопе с охлаждением образцов жидким водородом. В качестве изображающего газа использовался гелий при давлении 10^{-3} Па. Информация об атомном строении приграничной области получалась на основании анализа конфигурации атомных ступенек. Атомные ступеньки формировались в процессе контролируемого послойного низкотемпературного полевого испарения. Наименьшая толщина испаренного слоя соответствовала межплоскостному расстоянию для плоскостей с высокими индексами Миллера ($\sim 0,01$ нм). Достижение атомного разрешения по всему полю изображения за счет глубокого охлаждения образцов и применение методики поатомного контролируемого испарения позволили детально исследовать строение приграничных областей.

Ядра большинства высокоугловых границ характеризовались пониженной плотностью и склонностью к предпочтительному полевому испарению [7]. Этот

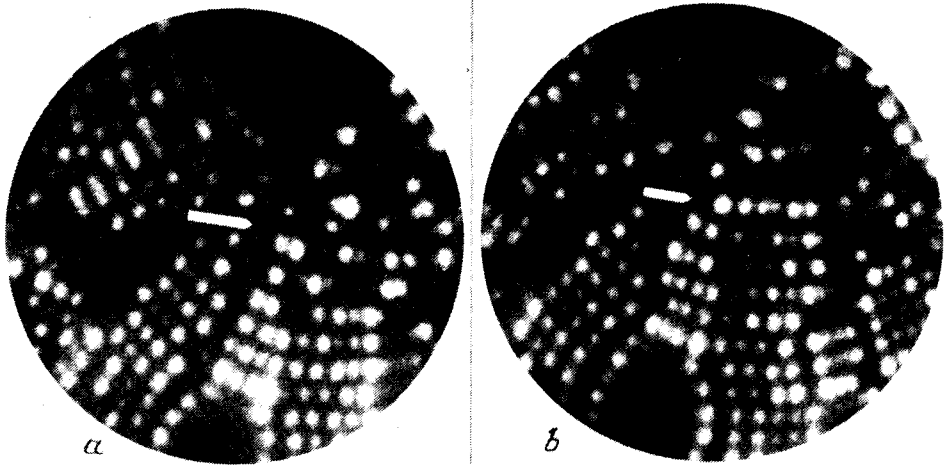


Рис.1. Изменение в процессе испарения зернограницного контраста ионно-микроскопического изображения большеугловой границы зерен (отмечена стрелками). Фазы испарения, соответствующие формированию следа границы в виде: *a* – полосы с пониженной атомной плотностью, *b* – плотноупакованной цепочки атомов

эффект проявляется, в частности, в уменьшении поверхностной плотности изображаемых атомов вдоль следа границ зерен (рис.1*a*). На некоторых этапах испарения атомов в области специальных границ обнаруживалась инверсия контраста. Наблюдались плотноупакованные атомные цепочки повышенной яркости, ориентированные вдоль следа границы (рис.1*b*). Анализ серий ионно-микроскопических изображений, полученных последовательно при поатомном полевом испарении, показал, что ответственными за появление цепочки атомов с повышенной яркостью могут быть локальные планарные приграничные участки с повышенной плотностью. Для сравнения на рис.2 приведено модельное изображение бикристалла, содержащего границу типа $\Sigma 9$, $(1\bar{1}4)$, $\theta = 38,9^\circ$ $[110]$, где Σ – обратная плотность совпадающих узлов, θ – угол разориентации. Машинное моделирование выполнено в приближении геометрической модели тонких оболочек [7]. Одна из атомных плоскостей, параллельных плоскости границы, характеризуется удвоенной атомной плотностью. Плотноупакованные цепочки атомов на модельных изображениях наблюдались на фазах полевого испарения, соответствующих совпадению положения поверхностных атомных ступенек со следом плоскости границы с удвоенной атомной плоскостью. Изменение локальной плотности упаковки атомов, обнаруживаемое при полевом испарении (рис.1), связано со смещением атомной ступеньки в приграничной области.

Несмотря на то, что в ряде случаев удается добиться соответствия реальных и модельных ионно-микроскопических изображений, вывод о том, что на границах помимо участков с повышенной локальной дилатацией [5] существуют области с повышенной планарной атомной плотностью, нуждается в дополнительном подтверждении. В связи с этим, методом молекулярной

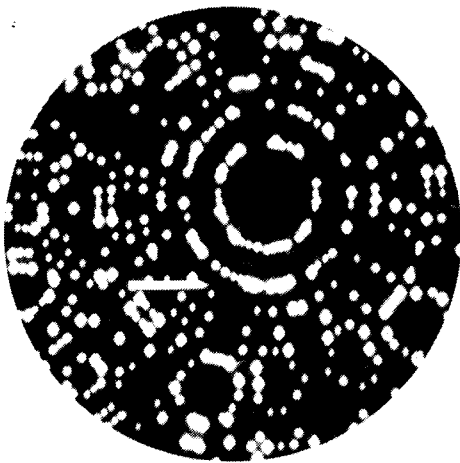


Рис.2

Рис.2. Модельное изображение бикристалла, содержащего симметричную границу зерен $\Sigma 9$. Стрелкой отмечена плотноупакованная группа атомов на границе

динамики было проведено математическое моделирование атомного строения границы $\Sigma 9$, $(1\bar{1}4)$, $\theta = 38,9^\circ$ $[110]$. В качестве потенциала межатомного взаимодействия использовался парный центральный потенциал, развитый в работе [8] для вольфрама. Модельный кристаллит содержал $\sim 10^3$ атомов. Учтены три периода идентичности вдоль направления $[110]$ (6 атомных плоскостей). Как и в работе [2], на плоскостях, ограничивающих кристаллит и параллельных направлению $[110]$, задавались гибкие граничные условия; на поверхностных плоскостях (110) – циклические граничные условия. Конфигурация с минимумом энергии была обнаружена после взаимной жесткой трансляции решеток на $2,6 \text{ \AA}$ вдоль плоскости границы, перпендикулярной оси разориентации и $0,5 \text{ \AA}$ в направлении, перпендикулярном плоскости границы. В качестве структурных элементов на границе зерен могут быть выбраны пятиугольные бипирамиды.

На рис.3 представлена структура границ зерен $\Sigma 9$, $(1\bar{1}4)$, $\theta = 38,9^\circ$ $[110]$ в проекции на плоскости (110) (a) и $(1\bar{1}4)$ (b). Локальная зернограничная дилатация приграничной области носит осциллирующий характер: расстояние d между соседними параллельными границе атомными плоскостями $(1\bar{1}4)$ изменяется немонотонно (рис.4). В центре ядра границы происходит полное слияние атомных плоскостей смежных кристаллов ($d \cong 0$) и формирование плоскости с удвоенной планарной плотностью $2(1\bar{1}4)$ (рис.3b).

Расстояние до ближайших к ядру атомных плоскостей, напротив, существенно превышает межплоскостное расстояние $(1\bar{1}4)$ в объеме кристалла. Этот участок и вносит основной вклад в зернограничную дилатацию. Планарные осцилляции атомной плотности наблюдаются вплоть до 12–15 межплоскостных расстояний, то есть в области, на порядок превышающей полуширину ядра границы.

Для выделения вклада приграничных атомных плоскостей в формирование атомной конфигурации границ было проведено математическое моделирование двумерной решетки. Использовались те же потенциал взаимодействия и граничные условия, что и при решении трехмерной задачи. Исходная конфигурация соответствовала зернограничной плотноупакованной плоскости $2(1\bar{1}4)$.

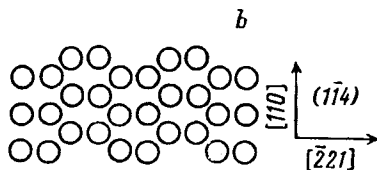
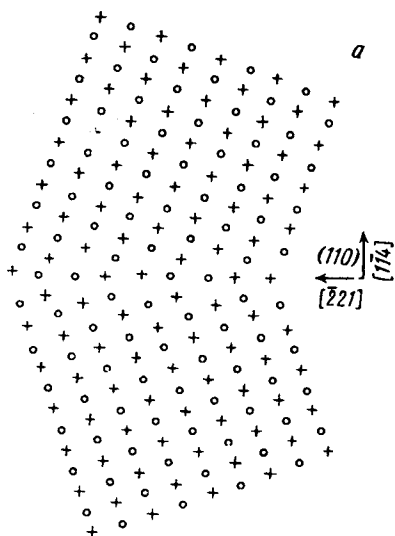


Рис.3. Структура симметричной границы зерен $\Sigma 9$ в проекции на плоскость (110) (a) и (114) (b)

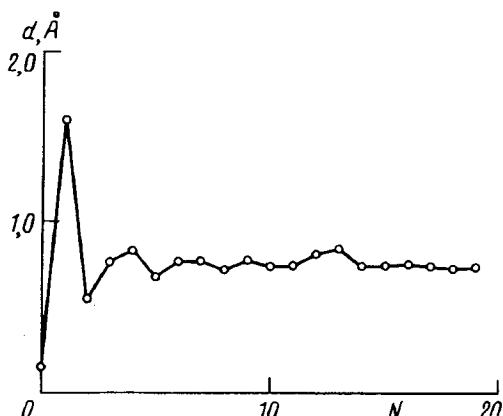


Рис.4. Зависимость расстояния между плоскостями (114) от удаления от границы $\Sigma 9$

После релаксации конфигурация двумерной решетки $2(1\bar{1}4)$ практически не изменилась. Наблюдались лишь небольшие отклонения атомов из положений, соответствовавших узлам плотноупакованной зернограничной плоскости $2(1\bar{1}4)$. Компоненты смещения в направлении $[2\bar{2}1]$ лежали в интервале $(1-8) \cdot 10^{-3}$ нм, в направлении $[110]$ - $(0-3) \cdot 10^{-3}$ нм. Средние значения смещений на два порядка меньше межатомных расстояний, что указывает на отсутствие заметного влияния взаимодействия с атомами, лежащими в приграничных плоскостях $(1\bar{1}4)$ на формирование атомной конфигурации плотноупакованной зернограничной плоскости $2(1\bar{1}4)$. Этот результат подтверждает сделанный в работе [9] вывод о возможности трактовки большеугловых границ зерен в металлах как двумерных упорядоченных структур, двумерных кристаллов с характерными для них дефектами строения.

Планарное повышение атомной плотности в окрестности границ наблюдалось как в отожженной, так и в деформированной (холоднотянутой) вольфрамовой проволоке. Как показали дополнительные компьютерные эксперименты,

плотнупакованный характер центральной плоскости сохраняется и при значениях взаимных жестких смещений решетки, соответствующих неравновесным состояниям границы. В связи с этим следует ожидать, что обнаруженное в данной работе формирование плотнупакованных атомных плоскостей играет существенную роль в структурных превращениях границ, контролирующих процессы пластической деформации поликристаллов. Выявленные в настоящей работе осцилляционные особенности тонкого строения приграничных областей должны оказывать существенное воздействие на поведение точечных дефектов и могут быть ответственными за несовпадение значений диффузионной и структурной ширины границ [4] и осциллирующий характер взаимодействия решеточных дислокаций с границами зерен [10].

Работа поддерживается Госкомитетом по вопросам науки и технологий Украины и Международным научным фондом.

-
1. S.E.Babcock and R.W.Baluffi, *Acta Metall.* **37**, 2367 (1989).
 2. В.С.Бойко, Т.И.Мазилова, А.Н.Орлов, Вопросы атомной науки и техники. Серия: Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение, вып.2(44), 3 (1988).
 3. D.Wolf, *Acta Metall.* **38**, 791 (1990).
 4. I.M.Mikhailovskij, V.B.Rabukhin, and O.A.Velikodnaya, *Phys. Stat. Sol. (a)*, **125**, K65 (1991).
 5. Б.С.Бокштейн, Ч.В.Копецкий, Л.С.Швиндлерман и др., Структура и свойства внутренних поверхностей раздела в металлах. М: Наука, 1988.
 6. J.R.Smith and J.Ferrante, *Phys. Rev.* **B34**, 2238 (1986).
 7. Э.Мюллер, Г.Цонь, Автоионная микроскопия. М.: Металлургия, 1972.
 8. R.A.Johnson and P.J.White, *Phys. Rev.* **B18**, 2939 (1978).
 9. П.А.Березняк, В.С.Бойко, И.М.Михайловский, Вопросы атомной науки и техники. Серия: Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение, вып. 1(43), 19 (1988).
 10. В.С.Бойко, И.Н.Сидоренко, *ФММ* **67**, 444 (1989).