

Фазовые переходы на границах наклона в поликристаллическом материале

Ю.В. Гусева

Национальный исследовательский университет "МЭИ", Волжский

Аннотация: Предлагается аналитическая модель развития и роста зародышей в поликристаллическом материале в процессе фазового перехода на межзеренной границе наклона. Модель предполагает наличие граней, которые ориентированы кристаллографически параллельно образующей границе и характеризуются пониженной поверхностной энергией. В данном случае грани относятся к плотноупакованной плоскости решетки совпадающих узлов. Полученные в работе результаты по оценке параметров образующихся фасеток и общего времени фасетирования подтверждаются обобщенными экспериментальными данными.

Ключевые слова: фазовые переходы, дефекты, микроструктура, фасетки, геометрия границы, удельная поверхностная энергия.

Физические свойства поликристаллических материалов обусловлены не только химическим составом, но и их микроструктурой. Одним из важнейших элементов структуры являются границы зерен. Необходимо отметить, что при разработке значительной части моделей фасетирования границ зерен руководствуются только геометрическими параметрами, не принимая во внимание температурные факторы, превышающие нулевой уровень. Поведение же границ в реальных условиях неизбежно должно учитывать изменение строения и свойств при конечных температурах [1, 2].

Границам, как и объемному материалу, присущи фазовые переходы, такие, как фасетирование, смачивание и обволакивание [3]. Структура даже специальных границ становится аморфноподобной при условиях, максимально приближенных к плавлению этого материала. Это инициирует начало процесса плавления образца. Фазовые переходные процессы происходят в местах наличия граничных дефектов решетки металла вследствие того, что атомы в кристаллической решетке практически всегда обладают повышенной энергией по сравнению с рассматриваемым объемом.

Наличие свободной энергии в этих термодинамических условиях провоцирует изменение на границах зерен поликристаллической структуры.

В таких условиях процесс фасетирования может выступать аналогом изменения формы границы. Следует отметить, что на межзеренных границах, близких к специальным, наблюдается процесс фасетирования. Появление фасетчатой структуры с разрозными дефектами происходит в результате фазового перехода на поверхности границы, что, в свою очередь, способствует понижению на границе свободной энергии [4, 5]. При наличии свободной энергии на межзеренных границах в таких термодинамических условиях может происходить изменение плоской границы на зигзагообразную. Следует отметить, что повышение уровня свободной энергии, характеризующееся увеличением фасетирования на границе, в приведенных обстоятельствах способствует образованию фасеток [6 – 8], а в других условиях влияет на высокотемпературный фон внутреннего трения и характеристики кристаллической решетки [9, 10].

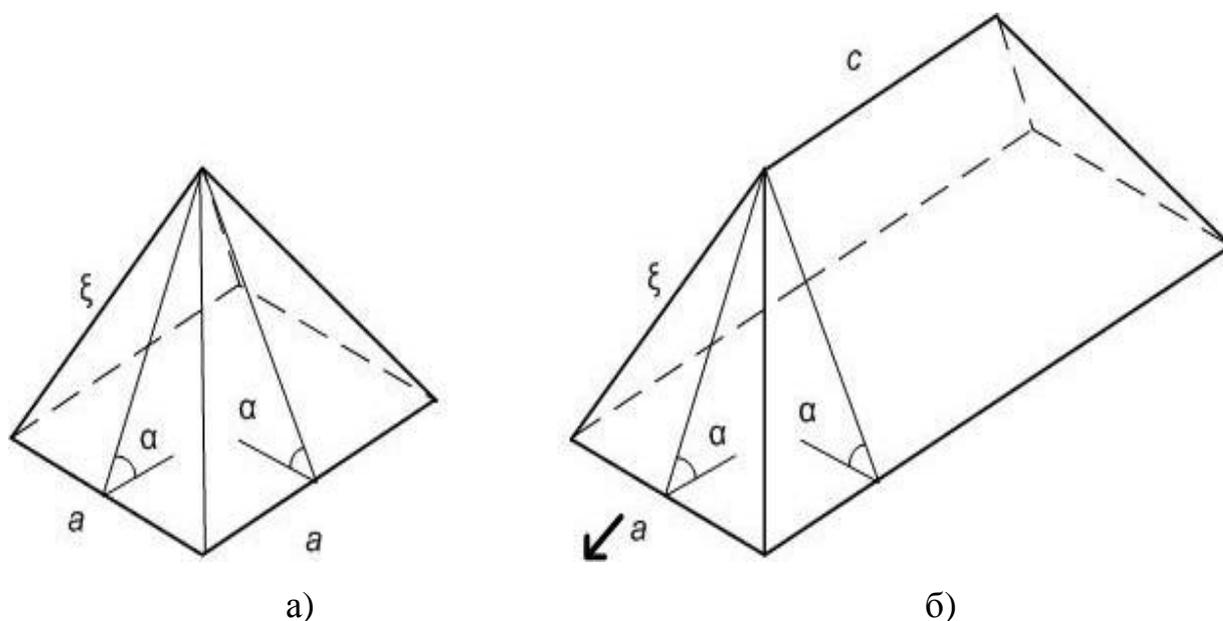


Рис.1. Зародыши фасетирования:

а) критический зародыш; б) зародыш на стадии роста

Рассмотрим процесс фасетирования границы наклона, который на стадии завершения роста структура наклона характеризуется поверхностью с направляющей зигзагообразной линией. Две противоположные грани четырехгранной пирамиды геометрически представляют форму зародыша, а грани пирамиды при этом являются будущими фасетками, в этой модели они ориентированы кристаллографически параллельно образующей границе и характеризуются пониженной поверхностной энергией σ_2 , как это показано на рис.1.а. В данном случае представленные грани относятся к плотноупакованной плоскости решетки совпадающих узлов (PCY). В рассматриваемых термодинамических условиях в соответствии с диаграммой Вульфа наличие двух других граней не является кристаллографически важным, таким образом эти грани обладают поверхностной энергией σ_1 .

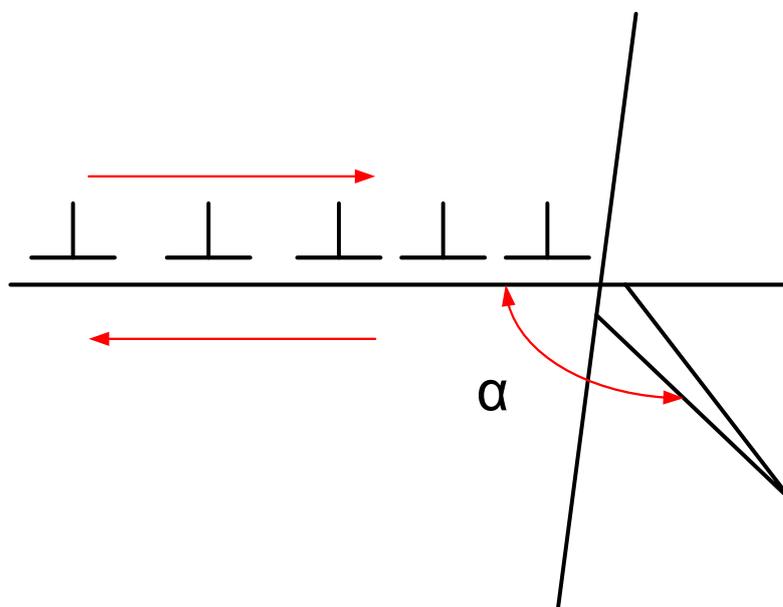


Рис.2. Плоскость скольжения по модели Зинера-Стро ($\alpha=110^\circ$ – угол между плоскостью границы и плоскостью скольжения)

Критический размер зародыша (1) и энергию образования зародыша фасетирования (2) можно представить в виде аналитических выражений:

$$a = \frac{2\lambda_0 \left(2 + \sqrt{1 + \cos^{-2} \alpha} \right)}{2\sigma_0 - (\sigma_1 + \sigma_2) \cos^{-1} \alpha}, \quad (1)$$

$$U_c = a^2 \left(\sigma_0 - \frac{\sigma_1 + \sigma_2}{2 \cos \alpha} \right), \quad (2)$$

где σ_0 – поверхностная энергия нефасетированной границы, λ_0 – удельная энергия линий сопряжения фасеток.

Развитие и рост образовавшегося зародыша происходит в направлении, указанном на рис. 1. б., что способствует общему понижению энергии в процессе фасетирования. В рассмотренных условиях удельная энергия λ_0 является одинаковой для всех типов возникающих фасеток. Необходимо отметить, что энергия развивающегося зародыша уменьшается по мере роста грани c , как показано на рис.1.б. и условия взаимодействия плоскости границы и плоскости скольжения (рис. 2.).

Время образования критического зародыша порядка $\tau_1 = \tau_0 \exp\left(\frac{U_c}{kT}\right)$, где τ_0 – период атомных колебаний, k – константа Больцмана, T – термодинамическая температура. Время роста критического зародыша до формирования одномерного зародыша соответствует $\tau_2 = \frac{d}{v}$, где d – размер зерна, $v = \frac{FM}{S}$ – скорость роста зародыша, M – миграционная подвижность движущейся грани, F – сила, действующая на движущиеся торцевые грани, $S = \frac{a^2}{4 \cos \alpha}$ – площадь движущейся грани.

Время общего фасетирования границы, включая период образования зародышей, а также их количественной характеристики N на участке границы, описывается зависимостью [2]:

$$\tau = \tau_1 + \tau_2 + \left(4,363N^2 \frac{M(\sigma_0 \cos \alpha - \sigma_2)}{\sin \alpha} \right)^{-1}. \quad (3)$$

Оценочное время фасетирования границы, определенное по вышеуказанной зависимости, согласуется с экспериментальными результатами, приведенными в работе [3], при этом сравнительные данные получены в экспериментах по фасетированию межзеренных границ в меди. Следует отметить, что по расчетным оценкам, критический размер зародыша сопоставим с параметрами РСУ, что в свою очередь, на порядок выше постоянной кристаллической решетки зерна. Фасетки, образующиеся в результате роста зародышей, характеризуются размерами в широком масштабе их изменения. Это обстоятельство предопределяет значительное количество фасеток на границе поликристаллического материала. В ходе расчетов было установлено, что линейные размеры фасеток имеют порядок $10^{-9} - 10^{-4}$ м. Таким образом, параметры фасеток, аналитически полученные автором, согласуются с экспериментальными результатами [4].

Литература

1. Страумал Б.Б. Фазовые переходы на границах зерен. – М.: Наука. 2003. - 327 с.
2. Кульков В.Г. Кинетика фасетирования несоразмерной межкристаллитной границы наклона // Неорганические материалы. 2005. Т. 41. № 7. С. 892-896.
3. Straumal B.B., Polyakov S.A., Bischoff E., Gust W., Mittemeijer E.J. Faceting of $\Sigma 3$ and $\Sigma 9$ grain boundaries in copper // Interface Science. 2001. № 9. pp. 287–292.
4. Копецкий Ч. В., Орлов А. Н., Фионова Л. К. Границы зёрен в чистых материалах. – М: Наука. 1987. - 158 с.
5. Золотухин И.В., Калинин Ю.Е. О высокотемпературном фоне внутреннего трения в кристаллических и аморфных твёрдых телах // ФТТ. 1995. Т. 37. № 2. С. 536-545.

6. Pankov S.Yu., Kalinin Yu.E., Makagonov V.A., Zhilova O.V., Chetverikova A.P., Kashirin M.A., Foshin V.A. The structure and electrical properties of $(\text{In}_2\text{O}_3/\text{SiO}_2)_{25}$ thin films // Advanced Material and Technologies. 2020. №1 (17). p. 43-48.

7. Zhilova O.V., Pankov S.Yu., Sitnikov A.V., Kalinin Yu.E., Volochaev M.N., Makagonov V.A. Structure and electrophysical properties of thin-film $\text{SNO}_2\text{-In}_2\text{O}_3$ heterostructures // Journal of Materials Science: Materials in Electronics. 2019. Т. 30. № 13. p. 11859-11867.

8. Kosinova A., Rabkin E., Straumal B., Kilmametov A., Straumal P., Bulatov M. Faceting of twin grain boundaries in high-purity copper subjected to high-pressure torsion // Advanced Engineering Materials. 2020. Т.22. №1. p. 1900589.

9. Батырев А. С., Бисенгалиев Р. А., Лиджиев Б.С., Сумьянова Е.В. Влияние ионно-аргонной бомбардировки на спектральные и вольт-амперные характеристики кристаллов CdS вблизи края фундаментального поглощения // Инженерный вестник Дона, 2019, №4. URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/n4y2019/5860.

10. Гусева Ю.В. Фон внутреннего трения на межкристаллитных границах общего типа // Инженерный вестник Дона, 2021, №10. URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/n10y2021/7226.

References

1. Straumal B.B. Fazovye perehody na granicah zeren [Phase transitions at grain boundaries]. М.: Nauka. 2003. 327 p.
2. Kul'kov V.G. Neorganicheskie materialy. 2005. Т. 41. № 7. pp. 892-896.
3. Straumal B.B., Polyakov S.A., Bischoff E., Gust W., Mittemeijer E.J. Interface Science. 2001. № 9. pp. 287-292.



4. Kopec'kij Ch. V., Orlov A. N., Fionova L. K. Granicy zjoren v chistyh materialah [Grain boundaries in pure materials]. M: Nauka. 1987. 158 p.
5. Zolotuhin I.V., Kalinin Yu.E. FTT. 1995. T. 37. № 2. pp. 536-545.
6. Pankov S.Yu., Kalinin Yu.E., Makagonov V.A., Zhilova O.V., Chetverikova A.P., Kashirin M.A., Foshin V.A. Advanced Material and Technologies. 2020. №1(17). pp. 43-48.
7. Zhilova O.V., Pankov S.Yu., Sitnikov A.V., Kalinin Yu.E., Volochaev M.N., Makagonov V.A. Journal of Materials Science: Materials in Electronics. 2019. T. 30. № 13. pp. 11859-11867.
8. Kosinova A., Rabkin E., Straumal B., Kilmametov A., Straumal P., Bulatov M. Advanced Engineering Materials. 2020. T.22. №1. p. 1900589.
9. Batyrev A. S., R. A. Bisengaliev, Lidzhiev B. S., Sumanova E. V. Inzhenernyj vestnik Dona, 2019, №4. URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/n4y2019/5860.
10. Guseva Yu.V. Inzhenernyj vestnik Dona, 2021, №10 URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/n10y2021/7226.