

Тонкая структура когерентных двойниковых границ в металлах

Т. И. Мазилова, И. М. Михайловский, Е. И. Луговская

*Национальный научный центр «Харьковский физико-технический институт»
Украина, 61108, г. Харьков, ул. Академическая, 1
E-mail: mikhailovskij@kipt.kharkov.ua*

Статья поступила в редакцию 25 мая 2000 г.

Методами молекулярной динамики исследованы осцилляционные особенности атомной релаксации на когерентной двойниковой границе в вольфраме. Установлен немонотонный характер изменения атомной плотности в приграничной области. Показано, что релаксация вблизи границ двойников может быть удовлетворительно описана в рамках континуальной модели линейно распределенных поверхностных сил.

Методами молекулярної динаміки досліджувані осциляційні особливості атомної релаксації на когерентній двійниковій межі у вольфрамі. Виявлено немонотонний характер зміни атомної щільності в примежовій області. Показано, що релаксація поблизу межі двійників може бути задовільнено описана в рамках континуальної моделі лінійно розподілених поверхневих сил.

PACS: 61.43.Bn, 61.72.Mm

Механическое двойникование является важным видом низкотемпературной пластической деформации металлов с ОЦК решеткой. Разработка высокоразрешающих методов полевой ионной и просвечивающей электронной микроскопии и компьютерного моделирования позволили достичь существенного прогресса в понимании особенностей атомного строения когерентных двойниковых границ [1,2]. Особое внимание к исследованию строения двойниковых границ объясняется, в частности, тем, что такие границы могут рассматриваться также как простейший пример специальных большеугловых границ зерен [2]. Введение Владимирским [3] понятия двойнивающей дислокации послужило отправной точкой для разработки дислокационной модели двойников. Двойнивающие дислокации компенсируют отклонение границы двойника от симметричной ориентации, локализуя нарушения когерентности на моноатомных ступеньках. Такие ступеньки в длинноволновом рассмотрении являются полными зернограничными дислокациями с векторами Бюргерса, равными вектору трансляции полной решетки наложенной [2] разориентированных решеток матрицы и двойника. Объекта-

ми континуальной теории двойников являлись макроскопические скопления двойнивающих дислокаций, находящихся в равновесии с внешним полем напряжений и силами сопротивления кристаллической решетки. Рельеф решеточных сил Пайерлса, контролирующей подвижность двойнивающих дислокаций, определялся в результате микроскопического рассмотрения методами молекулярной динамики. Теоретический анализ строения границ двойников, выполненный на основе континуальной теории дислокаций, позволил количественно описать основные закономерности процессов механического двойникования [1].

Вместе с тем теоретическое рассмотрение явления сверхпроводимости, локализованной вблизи симметричных (бездислокационных) границ двойников, в значительной мере основано на предположении о существовании достаточно протяженной приграничной области, характеризующейся повышенными значениями констант электрон-фонного взаимодействия [4,5]. О наличии упругих напряжений недислокационного происхождения свидетельствуют также результаты анализа поля приграничной деформации двойников. При микроскопическом определении упругих полей

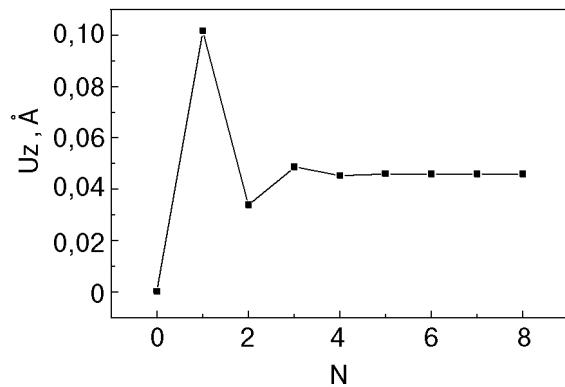


Рис. 1. Релаксация атомных плоскостей вблизи когерентной двойниковой границы в вольфраме.

напряжений в окрестности двойников и симметричных границ зерен [1,6] наблюдались особенности, которые не могут быть описаны в терминах непрерывной теории дислокаций. В связи с этим в настоящей работе методом молекулярной динамики исследовались атомная структура и поле смещений атомов в ядре когерентной двойниковой границы в металлах с ОЦК решеткой. Обнаружена приграничная атомная релаксация осцилляционного типа и показано, что такой тип релаксации может быть описан в рамках непрерывной теории упругости.

Модельный кристаллит с ОЦК решеткой содержал 1385 атомов, взаимодействующих между собой и 5540 атомами-изображениями. В качестве межатомного потенциала использовался центральный парный потенциал Джонсона, определенный для вольфрама [7]. Граничные условия на внешних поверхностях моделировали влияние среды. Для этого задавались пропорциональные смещению упругие силы и пропорциональные скорости движения поверхностных атомов вязкие силы. На гранях, нормальных к плоскости границы, задавались циклические граничные условия. В качестве исходной принималась нерелаксированная зеркально-симметричная структура двойника.

Оказалось, что «энергетическая» ширина двойниковой границы существенно больше структурной. Атомы, лежащие на расстоянии r от центральной атомной плоскости $\{211\}$, меньшем параметра решетки a , имеют энергию на 5 порядков выше фона (10^{-6} эВ/атом), возникающего вследствие приближенного характера потенциала и наличия малых смещений атомов, связанных с недостаточно полной релаксацией системы. При $a < r < 2a$ энергия атомов превышает фон на 2–3 порядка, а при $r > 3,5a$ атомы практически имеют

энергию фона. Характер убывания энергии удовлетворительно описывается зависимостью $W = W_0 \exp(-r/r_0)$, где r_0 — параметр убывания энергии, равный 0,85 Å. В соответствии с результатами, приведенными в [6], при уменьшении r усредненные значения нормальных напряжений $1/3(\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz})$ возрастали, достигая значения 0,1μ, где μ — модуль сдвига. Причем максимальные значения напряжений соответствовали положениям взаимно отталкивающихся атомов в плоскостях, ближайших к плоскости границы.

В результате релаксации происходило нормальное к границе смещение атомных плоскостей (211). Отсутствовал жесткий сдвиг в направлении, нормальном оси разориентации, и, таким образом, сохранялась зеркально-симметричная конфигурация. Из рис. 1 следует, что приграничная релаксация атомных плоскостей имеет осциллирующий характер. Осцилляционные смещения атомных плоскостей экспоненциально затухают в глубь металла. Аналогичный характер смещений атомных плоскостей наблюдался в окрестности некоторых специальных симметричных границ в металлах с ОЦК и ГЦК решетками [2,8].

Происхождение осцилляций межплоскостных расстояний в окрестности специальных границ зерен в некоторых случаях связано с особенностями локальных изгибов атомных плоскостей в окрестности ядер зернограничных дислокаций [2]. В рамках дислокационной модели релаксации удается качественно описать осцилляции плотности и зернограничную коалесценцию атомных плоскостей. Однако на рассматриваемой в настоящей работе двойниковой границе $\Sigma 3 \{112\} 70,32^\circ [110]$ и других симметричных соизмеримых границах зерен с высокой плотностью совпадающих узлов структурные зернограничные дислокации отсутствуют. Анализ особенностей поля напряжений в окрестности двойниковой границы позволяет при описании поля деформации заменить сложную картину взаимодействия смежных кристаллитов периодическими рядами параллельных линейных сил. Линейно распределенные силы локализованы вдоль направлений с максимальной плотностью упаковки $\langle 111 \rangle$ на границе двойника, характеризующихся повышенным уровнем напряжений (до 0,1μ). При этом смежные кристаллиты рассматриваются как упругие континуумы, ограниченные плоской поверхностью. Расстояние L между линиями приложения сил вдоль оси x равно для данного типа границы периоду решетки в направлении, нормальном оси разориентации. Силы P_z , равномерно распределенные вдоль оси

разориентации y , направлены вдоль оси z , нормальной к границе.

Линейно распределенная сила P_z , действующая на плоскую поверхность, ограничивающую упругое полупространство, генерирует поле деформаций [9]:

$$\begin{aligned} e_{xx} &= \frac{2P_z(1+\sigma)}{\pi E} \frac{z}{x^2+z^2} \left(\sigma - \frac{x^2}{x^2+z^2} \right); \\ e_{zz} &= \frac{2P_z(1+\sigma)}{\pi E} \frac{z}{x^2+z^2} \left(\sigma - \frac{z^2}{x^2+z^2} \right); \\ e_{yy} &= 0, \end{aligned} \quad (1)$$

где P_z — величина силы, отнесенной к единице длины; σ — коэффициент Пуассона; E — модуль Юнга.

Ряды линейно распределенных сил при $z \gg L$ вызывают однородное сжатие кристаллита. В то же время, как следует из результатов компьютерного моделирования, на этих расстояниях от двойниковой границы обращаются в нуль все компоненты тензора напряжений. В связи с этим для обеспечения равенства нулю напряжений при больших z из поля смещений, создаваемого системой параллельных линейных сил, следует вычесть смещения, вызываемые далекодействующим полем напряжений [10]:

$$\begin{aligned} U_z &= \frac{P_z(1+\sigma)}{2\pi E} \left\{ Z \left[\frac{\text{sh}(Z)}{\text{ch}(Z) - \cos(X)} - 2\sigma + 1 \right] - \right. \\ &\quad \left. - 2(1-\sigma) \ln [\text{ch}(Z) - \cos(X)] \right\}, \end{aligned} \quad (2)$$

где $X = 2\pi x/L$ и $Z = 2\pi z/L$.

На рассматриваемой границе $\Sigma 3 \{112\}$ смещения атомов i -й плоскости (112) можно представить в виде

$$x_i - x = ia/2[110]. \quad (3)$$

Локальные значения межплоскостных расстояний между i -м и $(i+1)$ -м атомными слоями определялись из уравнений (2) и (3) как $d_i = d + (U_{i+1} - U_i)$. На рис. 2 приведена рассчитанная по континуальной модели зависимость (кривая 1) межплоскостных расстояний (112) от расстояния до двойниковой границы, выраженного в атомных слоях. Для сравнения приведены результаты, полученные методом молекулярной динамики (кривая 2). Модель линейно распределенных сил носит полумикроскопический характер, поскольку она содержит феноменологический параметр P_z , значение которого не может быть определено

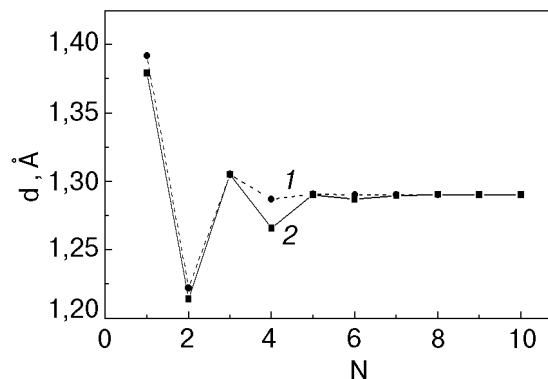


Рис. 2. Осцилляция межплоскостных расстояний (112) вблизи симметричной двойниковой границы. 1 — континуальная модель, 2 — расчет методом молекулярной динамики.

в рамках теории упругости. В связи с этим P_z , необходимое для расчета абсолютных значений расстояний между атомными слоями, определялось из условия максимального соответствия расчетной и экспериментальной кривых. Из рис. 2 следует, что периоды и фазы осцилляций, определенные в компьютерных экспериментах и рассчитанные в рамках континуальной модели, совпадают. Характер затухания в обоих случаях близок к экспоненциальному. При сравнительно больших расстояниях от границы U_z убывает как $z \exp(-z/z_0)$, где z_0 — параметр затухания. Однако скорость затухания осцилляций в компьютерных экспериментах приблизительно на 20% ниже скорости, рассчитанной с помощью континуальной модели. Параметр затухания z_0 , определяемый методом молекулярной динамики, равен 0,92 Å. В рамках континуальной модели линейно распределенных поверхностных сил $z_0 = a[110]/2\pi = 0,71$ Å. В целом же можно сделать вывод, что с помощью континуальной модели линейно распределенных сил может быть достигнуто удовлетворительное количественное описание осцилляционного характера атомной релаксации на двойниковой границе.

1. В. С. Бойко, Р. И. Гарбер, А. М. Косевич, *Обратимая пластичность кристаллов*, Наука, Москва (1991).
2. A. P. Sutton and R. W. Balluffi, *Interfaces in Crystalline Materials*, Clarendon Press, Oxford (1995).
3. К. В. Владимирский, *ЖЭТФ* **17**, 530 (1947).
4. И. Н. Хлюстикова, А. И. Буздин, *УФН* **155**, 47 (1988).
5. В. И. Соколенко, Я. Д. Стародубов, *ФНТ* **19**, 951 (1993).
6. В. С. Бойко, Т. И. Мазилова, А. Н. Орлов, *Вопросы атомной науки и техники, Сер.: Физ. радиацион. повреждений и радиационное материаловедение* **2(44)**, 3 (1988).
7. R. A. Johnson, *Phys. Rev.* **B27**, 2014 (1983).

-
8. П. А. Березняк, О. А. Великодная, Т. И. Мазилова, И. М. Михайловский, *Письма в ЖЭТФ* **59**, 515 (1994).
 9. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Теория упругости*, Наука, Москва (1965).
 10. D. J. Sroloviz and J. P. Hirth, *Surf. Sci.* **255**, 111 (1991).

Fine structure of coherent twin boundaries in metals

T. I. Mazilova, I. M. Mikhailovskij,
and E. I. Lygovskaja

The molecular dynamics methods are used to investigate the oscillation features of the atomic relaxation on coherent twin boundaries in tungsten. It is found that the changes in the atomic density within the boundary area are nonmonotonic. The relaxation nearby the twin boundaries is shown to be adequately described in terms of the continuum model of linearly distributed surface forces.-