

УДК 538.911

DOI: 10.17223/00213411/62/10/83

*Г.М. ПОЛЕТАЕВ¹, И.В. ЗОРЯ², Р.Ю. РАКИТИН³, А.С. СЕМЕНОВ⁴, М.Д. СТАРОСТЕНКОВ¹***ВЛИЯНИЕ ПРИМЕСНЫХ АТОМОВ УГЛЕРОДА И КИСЛОРОДА НА СКОРОСТЬ МИГРАЦИИ ТРОЙНЫХ СТЫКОВ ГРАНИЦ НАКЛОНА В ГЦК-МЕТАЛЛАХ**

Методом молекулярной динамики проведено исследование влияния примесных атомов углерода и кислорода на скорость миграции тройных стыков границ наклона с осью разориентации $\langle 111 \rangle$ в ГЦК-металлах Ni, Ag, Al. Показано, что введение примесных атомов легких элементов приводит к существенному торможению миграции тройных стыков. Атомы углерода стремятся образовывать агрегаты, которые, закрепляясь на границах зерен, становятся эффективными стопорами, препятствующими перемещению границ. Атомы кислорода не образуют агрегаты, но из-за высоких значений энергии связи с границами также эффективно тормозят их миграцию. Для примесных атомов углерода и кислорода рассчитаны энергии связи с зернограницными краевыми дислокациями в рассматриваемых металлах. Полученные значения хорошо коррелируют с зависимостями скорости миграции тройных стыков от концентрации примесей.

Ключевые слова: молекулярная динамика, тройной стык, миграция, граница зерен, примесь.

Введение

Тройной стык границ зерен представляет собой линейный дефект, вдоль которого сопрягаются три межзеренные границы. Классические теории роста зерна в обычных крупнозернистых поликристаллах, как правило, предполагают, что тройные стыки обладают бесконечной подвижностью и рост зерна реализуется посредством миграции границ зерен [1]. Однако эксперименты [2, 3] и результаты компьютерного моделирования роста зерен [4, 5] показали, что подвижность тройных стыков границ зерен является конечной величиной. Конечная подвижность связана с тем, что перемещение тройного стыка сопровождается трансформациями дефектной структуры на границах зерен в области стыка. Работы [2–5] внесли существенный вклад в развитие представлений о подвижности тройных стыков границ зерен в металлах. Тем не менее в настоящее время остается ряд открытых вопросов. В первую очередь, это накопление численных данных, связанных со структурными и энергетическими характеристиками миграции тройных стыков для разных металлов в зависимости от различных внешних и внутренних факторов, определение влияния на подвижность стыков примесей, дефектов кристаллической решетки, свободного объема.

Ранее авторами [6, 7] было проведено исследование атомного механизма миграции границ наклона с осями разориентации $\langle 100 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$, а также их тройных стыков с помощью метода молекулярной динамики. Было показано, что миграция и удлинение малоугловой границы $\langle 100 \rangle$ осуществляется посредством расщепления парных зернограницных дислокаций с последующей сменой дислокаций-партнеров. Смена дислокаций-партнеров происходит за счет скольжения расщепленных дислокаций. Миграция границы наклона $\langle 111 \rangle$ осуществляется путем комбинированного действия двух механизмов: описанного выше механизма и механизма, заключающегося в совместном скольжении парных зернограницных дислокаций, которые, в отличие от зернограницных дислокаций в границах $\langle 100 \rangle$, имеют общие плоскости скольжения. Совместное скольжение парных дислокаций имеет сравнительно низкую энергию активации, вследствие чего границы наклона $\langle 111 \rangle$ гораздо подвижнее границ $\langle 100 \rangle$.

В работе [8] рассмотрено влияние примеси водорода на миграционную подвижность границ наклона в палладии. Было показано, что наличие примесных атомов водорода приводит к замедлению миграции границ зерен. Настоящая работа посвящена исследованию влияния примесных атомов углерода и кислорода на скорость миграции тройных стыков границ наклона $\langle 111 \rangle$ в ГЦК-металлах Ni, Ag, Al. Этот набор из трех металлов уникален тем, что два из них имеют почти одинаковые радиусы атомов, тогда как другие два – почти одинаковые значения электроотрицательности. Радиусы атомов следующие: Al – 1.43 Å, Ag – 1.44 Å, Ni – 1.24 Å [9]; электроотрицательности (шкала Полинга): Al – 1.61, Ag – 1.93, Ni – 1.91 [10].

Уважаемые читатели!

Доступ к полнотекстовой версии журнала
«Известия высших учебных заведений. Физика»
осуществляется на платформе
Научной электронной библиотеки eLIBRARY.RU
на платной основе:

<https://elibrary.ru/contents.asp?titleid=7725>