

**О СТРУКТУРЕ СЕГРЕГАЦИЙ НА СПЕЦИАЛЬНЫХ ГРАНИЦАХ
ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СПЛАВОВ ЗАМЕЩЕНИЯ***Л.С. Васильев¹, И.Л. Ломаев², С.Л. Ломаев^{1,3}¹ Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН, г. Ижевск, Россия² Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия³ Удмуртский государственный университет, г. Ижевск, Россия

Рассмотрены особенности микроскопической теории сегрегаций примеси на межкристаллитных границах поликристаллических сплавов замещения с учетом деформационных взаимодействий в подсистемах планарных и точечных дефектов кристаллической структуры. В приближении среднего поля получено интегральное уравнение, описывающее пространственную структуру сегрегаций. Результаты теории применены к анализу структуры сегрегаций на плоских специальных границах наклона двойных сплавов. Показано, что структура сегрегаций полностью определяется особенностями распределения избыточного объема в плоскости границы и экспериментально измеряемыми параметрами, характеризующими макроскопические свойства сплавов.

Ключевые слова: межкристаллитные границы, избыточный объем, сегрегации примесей, сплавы замещения.

Введение

Сегрегации атомов примеси и легирующих элементов на межкристаллитных границах поликристаллов существенно влияют на многие физико-химические и механические свойства сплавов [1–4]. Столь широкий спектр проявления свойств сегрегаций давно вызывает значительный интерес у многих исследователей [1–8]. Существует два основных метода исследования свойств сегрегаций. Условно их можно обозначить как термодинамический [1–4] и микроскопический [5–8].

Основы термодинамического метода были заложены Дж. Гиббсом [3]. Сейчас существует большое количество его разветвлений, приспособленных к конкретным условиям, реализуемым в различных сплавах (см. обзоры [1, 2, 4]). Метод позволяет получить достаточно простые аналитические выражения для расчета плотности сегрегаций во всем объеме поликристалла через некоторые экспериментально измеряемые параметры, характеризующие макроскопические свойства сплавов. Однако пренебрежение реальной атомной структурой границ существенно снижает точность и научную значимость этих расчетов.

В основе микроскопического подхода лежат численные расчеты структуры сегрегаций, опирающиеся на модельные представления о потенциалах межатомных взаимодействий и точный учет атомной структуры межкристаллитных границ. Этот метод привел к значительно большим успехам в исследовании пространственной структуры сегрегаций и ее зависимости от особенностей атомной структуры границ [5–7] и избыточного объема, вносимого границами [8].

К недостаткам численных методов следует отнести их ограниченность в выборе предмета исследований. К примеру, в 1 см^3 поликристалла со средним линейным размером кристаллита 10^{-6} м находится около 10^{18} различного рода межкристаллитных границ. Отсюда ясно, что численно проанализировать структуру сегрегаций на всех этих границах практически невозможно. Очевидно также, что расчет структуры сегрегаций на небольшом числе границ, выполненный на разных сплавах [5–8], не может дать реальное представление о состоянии сегрегаций примеси во всем объеме одного сплава.

Другой недостаток метода состоит в том, что результаты расчетов в большинстве случаев представляются в зависимости от значений микроскопических параметров, не связанных непосредственно с измеряемыми макроскопическими параметрами сплавов. Например, через характеристики электронной плотности [5], параметры модельных псевдопотенциалов [6, 7] и т.п.

Между тем существует ряд основных экспериментально измеряемых параметров, которые практически полностью определяют структуру сегрегаций на межкристаллитных границах. В первую очередь, это избыточный объем, создаваемый межкристаллитными границами сплава: при отсутствии избыточного объема в сплаве отсутствуют границы и сегрегации на них. Не менее важ-

* Работа выполнена в рамках темы государственного задания Минобрнауки РФ (проект № ББ_2021_121030100003-7 и № АААА-А18-118020190104-3).

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>