

СТРУКТУРА,  
ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ И ДИФФУЗИЯ

УДК 539.422.23

ЗЕРНОГРАНИЧНОЕ ПРОСКАЛЬЗЫВАНИЕ  
ПО СПЕЦИАЛЬНЫМ АСИММЕТРИЧНЫМ ГРАНИЦАМ ЗЕРЕН  
В БИКРИСТАЛЛАХ Al. АТОМИСТИЧЕСКОЕ МОЛЕКУЛЯРНО-  
ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

© 2021 г. Л. Е. Карькина<sup>а</sup>, \*, И. Н. Карькин<sup>а</sup>, Ю. Н. Горностырев<sup>а</sup>

<sup>а</sup>Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, ул. С. Ковалевской, 18, Екатеринбург, 620108 Россия

\*e-mail: lidiakarkina@gmail.com

Поступила в редакцию 28.05.2021 г.

После доработки 10.07.2021 г.

Принята к публикации 15.07.2021 г.

Для выяснения механизмов, контролирующих процессы проскальзывания по границам зерен (ГЗ), энергетические характеристики зернограничных сдвигов для асимметричных ГЗ наклона  $\Sigma 5\{010\}/\{340\}\langle 001 \rangle$  и  $\Sigma 5\{110\}/\{710\}\langle 001 \rangle$  в бикристалле Al рассчитаны с использованием метода молекулярно-динамического моделирования. Определена энергия обобщенных зернограничных дефектов упаковки, установлены предпочтительные направления и энергетический барьер для зернограничного проскальзывания. Обнаружена характерная особенность асимметричных границ: число различающихся не эквивалентных сечений, параллельных плоскости ГЗ, для этих границ существенно выше, чем для симметричных. Показано, что тип ограничивающей ГЗ плоскости существенно влияет как на геометрию  $\gamma$ -поверхности, так и на энергетические характеристики зернограничного ДУ.

*Ключевые слова:* границы зерен, деформация, атомистическое моделирование, обобщенный дефект упаковки

DOI: 10.31857/S0015323021110073

## ВВЕДЕНИЕ

Процессы проскальзывания по границам зерен (ГЗ) играют важную роль в пластической деформации поликристаллических материалов (см. работы [1–7] и ссылки в них). В общем случае они являются достаточно сложными и зависят от особенностей структуры ГЗ [3], развития аккомодационных процессов в стыках зерен, которые, в свою очередь, могут протекать с участием диффузионного массопереноса [2].

В последнее время внимание привлекают “консервативные” механизмы проскальзывания и миграции ГЗ, способные обеспечивать зернограничную пластичность при комнатной и более низких температурах, когда внутризеренная диффузия заморожена. Явление миграции ГЗ под действием напряжений, впервые изученное на бикристаллах [8, 9], в последнее время рассматривается как альтернативный механизм пластичности нанозеренных материалов [1, 2, 10–15]. Известным примером консервативного движения ГЗ, не связанного с какой-либо диффузионной перетасовкой атомов, является движение двойниковых границ.

Отметим, что нанодвойники играют большую роль в процессах пластической деформации нанозерен в ГЦК-материалах с низким значением энергии дефекта упаковки [16–18].

Для понимания процессов, контролирующих проскальзывание и миграцию ГЗ, необходим переход на микроскопический уровень описания, учитывающий особенности структуры ГЗ и межатомных взаимодействий в конкретных материалах. В [19–21] с использованием атомистического моделирования методом молекулярной динамики (МД) и первопринципных расчетов были проанализированы механизмы миграции и проскальзывания ГЗ в Al. Установлено, что существуют предпочтительные направления, для которых энергетический барьер зернограничного проскальзывания (ЗГП) является достаточно низким. При этом легкие процессы проскальзывания включают частичный сдвиг зерен, реализация которого сопровождается консервативной миграцией ГЗ. Поэтому они могут играть существенную роль в деформации поликристалла при пониженных температурах, когда контролируемые диффузией процессы заморожены.

В работах [19–22] процессы ЗГП были исследованы для нескольких типичных специальных симметричных ГЗ наклона  $\Sigma 3$  (111),  $\Sigma 5$  (012),  $\Sigma 5$  (013) и  $\Sigma 11$  (113) в бикристалле Al. Однако, в поликристаллических материалах ансамбль границ зерен включает в себя кроме симметричных специальных ГЗ, асимметричные специальные границы, несимметричные ГЗ, а также ГЗ общего типа. В настоящее время вопрос о механизмах ЗГП для ГЗ, ориентации которых отличаются от специальных симметричных, остается открытым. Расширение класса границ зерен, исследуемых методами атомистического моделирования, позволит ответить на ряд вопросов, возникающих при экспериментальном исследовании поликристаллических материалов.

В настоящей работе методами атомистического моделирования, мы анализируем энергетические характеристики процесса проскальзывания для двух асимметричных границ зерен специального типа ( $\Sigma 5\{010\}/\{340\}\langle 001 \rangle$  и  $\Sigma 5\{110\}/\{710\}\langle 001 \rangle$ ) в бикристалле Al. Показано, что механизмы проскальзывания симметричных и асимметричных специальных ГЗ существенно различаются. Исчезают легкие связанные между собой механизмы проскальзывания и миграции, характерные для симметричных ГЗ. Для асимметричных границ имеется несколько плоскостей, параллельных ГЗ, в которых процесс ЗГП отличается величиной и направлением зернограницного сдвига.

## МЕТОД МОДЕЛИРОВАНИЯ

Энергетический барьер проскальзывания рассчитан для специальных асимметричных границ зерен  $\Sigma 5\{010\}/\{340\}\langle 001 \rangle$  и  $\Sigma 5\{110\}/\{710\}\langle 001 \rangle$  в ГЦК Al с осью наклона  $\langle 001 \rangle$ . Для ГЗ  $\Sigma 5$  в Al как энергия ГЗ [23], так и величина избыточного объема [24] слабо зависят от ориентации плоскости границы. Так энергия рассматриваемых асимметричных ГЗ отличается на величину менее 10% от энергии симметричных ГЗ  $\Sigma 5\{210\}$  и  $\Sigma 5\{310\}$  с той же осью наклона  $\langle 001 \rangle$ . Как и в [19], чтобы охарактеризовать присущее данному типу ГЗ сопротивление зернограницному сдвигу мы провели расчет энергии обобщенного дефекта упаковки (GB–SF) для плоскости границы, разделяющей два зерна [20–22]. Расчет энергетической поверхности GB–SF проводили методом молекулярной динамики с использованием пакета LAMMPS [25]. При МД моделировании для Al использовался *adp*-потенциал межатомного взаимодействия, предложенный в работе [26]. Этот потенциал наилучшим образом описывает свойства алюминия [27].

В рассмотренных случаях использовали кристаллит, плоскость *YZ* которого совпадала с плоскостью ГЗ, ось *OZ* – параллельна оси наклона,

направление *OX* перпендикулярно плоскости границы. Кристаллит содержал 2 зерна, разделенные рассматриваемой ГЗ, расположенной в его центре. При МД моделировании кристаллит содержал в зависимости от типа ГЗ  $\sim(15000–20000)$  атомов. Размер зерен вдоль направления *OX*, перпендикулярно плоскости ГЗ составлял  $\sim 20$  нм. В этом направлении использовали свободные граничные условия. В двух других взаимно перпендикулярных направлениях, лежащих в плоскости ГЗ, использовали периодические граничные условия. Длина периода вдоль этих направлений была кратна трансляции вдоль заданного кристаллографического направления (*ba*, *5a* и  $5\sqrt{2}a$  вдоль направлений  $\langle 001 \rangle$ ,  $\langle 430 \rangle$  и  $\langle 170 \rangle$ , соответственно, где *a* – параметр решетки).

На рис. 1 представлены фрагменты кристаллитов, содержащие асимметричную границу зерна специального типа  $\Sigma 5\{010\}/\{340\}\langle 001 \rangle$  (рис. 1а) и ГЗ  $\Sigma 5\{110\}/\{710\}\langle 001 \rangle$  (рис. 1б). В обоих случаях геометрия границ может быть описана на языке искаженных структурных единиц *B* и *C* [23], характерных для симметричных ГЗ  $\Sigma 5\{210\}$  и  $\Sigma 5\{310\}$  (выделены линиями на рис. 1). Для ГЗ  $\Sigma 5\{010\}/\{340\}\langle 001 \rangle$  структурные единицы *B*, *C* чередуются; каждая пара со смещением  $1/2\langle 001 \rangle$  вдоль оси наклона. Для ГЗ  $\Sigma 5\{110\}/\{710\}\langle 001 \rangle$  структурные единицы *B*, *C* чередуются в последовательности *C*, *B*, *B*. Обе границы сконструированы из двух типов плоскостей: низко индексные плотно упакованные в ГЦК-решетке плоскости  $\{110\}$  и  $\{100\}$  с одной стороны ГЗ; и высоко индексные плоскости  $\{710\}$  и  $\{340\}$  с другой стороны. На рис. 1 цифрами помечены узлы решетки, входящие в структурные единицы, размер которых характеризует ширину рассматриваемой ГЗ. Можно отметить, что, по данной оценке, ширина асимметричных границ в  $\sim 1.5$  раза выше симметричных, и составляет 4.4–4.6 Å.

Величину GB–SF вычисляли как изменение энергии кристаллита (отнесенное к площади границы)  $\Delta E_{GB-SF}(\mathbf{f})$  при сдвиге на заданный вектор  $\mathbf{f}$ , лежащий в пределах элементарной ячейки решетки совпадающих узлов (PCY) в плоскости, параллельной ГЗ. После осуществления сдвига в точках локальных минимумов GB–SF проводили полную релаксацию кристаллита, а в других точках, отвечающих общему положению, проводили релаксацию в направлении *OX*, перпендикулярном плоскости ГЗ. Полученные таким образом значения  $\Delta E_{GB-SF}(\mathbf{f})$  образуют так называемую  $\gamma$ -поверхность, анализ которой позволяет сделать выводы о существовании стабильных дефектов упаковки и определить сопротивление сдвигу вдоль того или иного направления в одной из выбранных плоскостей сдвига.

РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

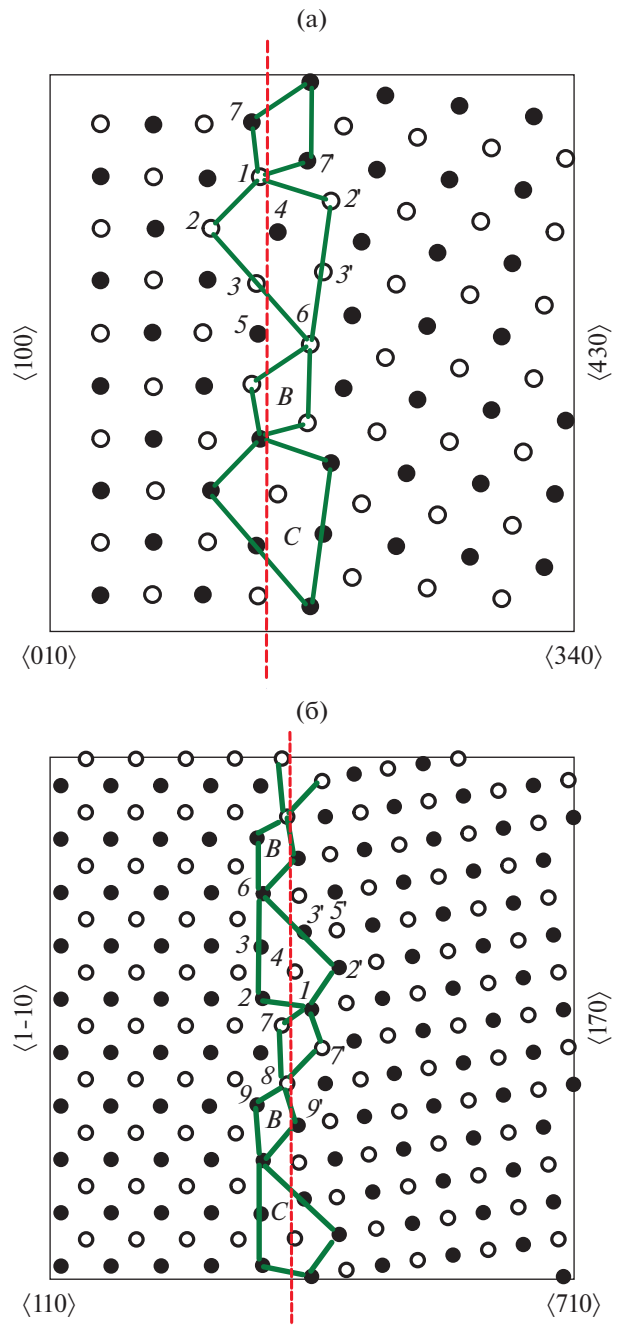
Внутри полосы, соответствующей ширине ГЗ, можно выделить 7 плоскостей, параллельных границе, отличающихся межплоскостными расстояниями (см. табл. 1). Несколько сечений состоят из близко расположенных плоскостей, образовавшихся в результате процедуры релаксации. Межплоскостные расстояния распределены очень неравномерно, также неравномерно происходит заполнение атомами ближайших атомных плоскостей. Оба эти обстоятельства оказывают влияние как на значения энергии GB–SF, так и на геометрию  $\gamma$ -поверхностей.

При расчете GB–SF, сдвиг одного зерна относительно другого проводили по одной из 7 плоскостей (сечений), параллельных границе. В обоих случаях наименьшим вектором трансляции является сдвиг в общем для обеих зерен направлении  $\langle 001 \rangle$  вдоль оси наклона границ. Как и в случае симметричных ГЗ с той же осью наклона для зависимости энергии GB–SF от величины сдвига в направлении  $\langle 001 \rangle$  характерны симметричные кривые с максимумом в точке  $Z = 0.5a$ .

На рис. 2 показаны энергии нестабильного GB–SF при сдвиге вдоль направления  $\langle 001 \rangle$  в зависимости от номера сечения. Отметим, что во всех рассматриваемых случаях энергии поверхностных дефектов значительно изменяются после релаксации. Для ГЗ  $\Sigma 5\{010\}/\{340\}\langle 001 \rangle$  для сечения 4 энергия нестабильного ДУ существенно ниже, чем в других сечениях для такого же сдвига; для ГЗ  $\Sigma 5\{110\}/\{710\}\langle 001 \rangle$  наименьшее значение энергии GB–SF получено для сечения 3. На рис. 2а приведены также значения  $\gamma_{us}$  для плоскостей  $\{010\}$  и  $\{340\}$  в идеальной решетке, а на рис. 2б – значения  $\gamma_{us}$  для плоскостей  $\{110\}$  и  $\{710\}$  в идеальной решетке. Видно, что по сравнению с идеальной решеткой сопротивление проскальзыванию облегчено для большинства сечений. Так для ГЗ  $\Sigma 5\{010\}/\{340\}\langle 001 \rangle$  для сечения 4 величина  $\gamma_{us}$  в 2–3 раза ниже, чем в идеальной решетке для плоскости  $\{340\}$ . Следует отметить, что для сечения 4 (ГЗ  $\Sigma 5\{010\}/\{340\}\langle 001 \rangle$ ) релаксированное значение  $\gamma_{us} = 0.26$  Дж/м<sup>2</sup>, близко к значению для соответствующих сдвигов вдоль направления  $\langle 001 \rangle$  для симметричных ГЗ  $\Sigma 5\{012\}$  и  $\Sigma 5\{013\}$  (0.25 и 0.38 Дж/м<sup>2</sup>, соответственно) [19].

**Таблица 1.** Межплоскостные расстояния  $d$  (Å) в ГЗ1  $\Sigma 5\{010\}/\{340\}\langle 001 \rangle$  и ГЗ2  $\Sigma 5\{110\}/\{710\}\langle 001 \rangle$ . Нумерация начинается от левого края ГЗ (точка 2 на рис. 1)

	$d_1$	$d_2$	$d_3$	$d_4$	$d_5$	$d_6$	$d_7$
ГЗ1	1.56	0.33	0.67	1.13	0.11	0.50	0.29
ГЗ2	1.17	0.30	0.43	0.53	0.42	0.60	0.98



**Рис. 1.** Фрагменты кристаллита Al после МД релаксации, содержащие специальные асимметричные ГЗ  $\Sigma 5\{010\}/\{340\}\langle 001 \rangle$  (а) и  $\Sigma 5\{110\}/\{710\}\langle 001 \rangle$  (б) в проекции на плоскость  $\{001\}$ , перпендикулярную оси наклона. Открытые и заштрихованные кружки соответствуют атомам в соседних  $\{001\}$  плоскостях. Сплошными линиями выделены структурные единицы  $B$  и  $C$  [22]. Штриховой линией обозначены сечения с минимальными значениями GB–SF энергии.

Значение  $\gamma_{us} = 0.31$  Дж/м<sup>2</sup> для сечения 3 (ГЗ  $\Sigma 5\{110\}/\{710\}\langle 001 \rangle$ ) несколько превышает полученное ранее для симметричной ГЗ  $\Sigma 5\{012\}$  и близко к значению для  $\Sigma 5\{013\}$ . Наиболее энерге-

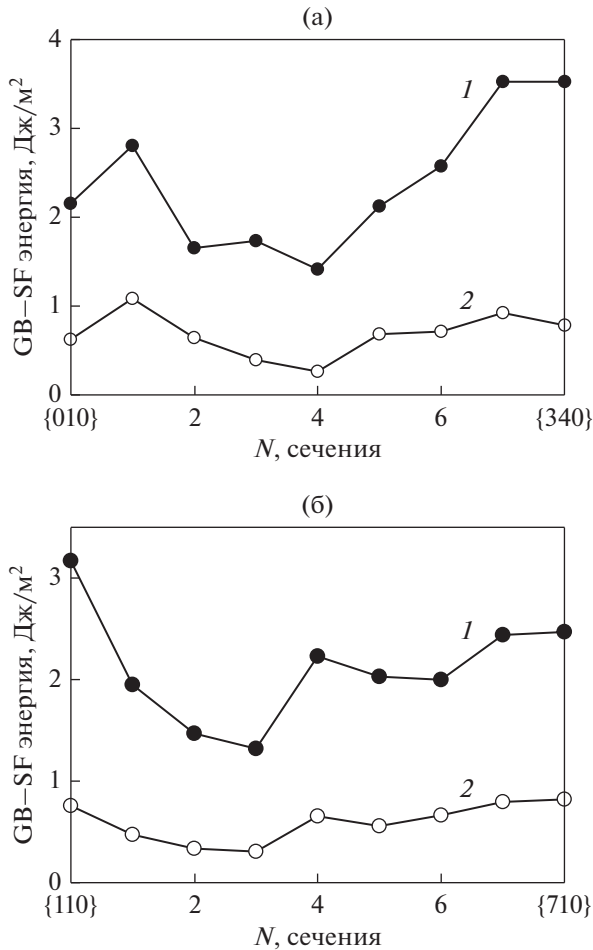


Рис. 2. Зависимость энергии нестабильного GB-SF от номера сечения при сдвиге вдоль оси наклона  $\langle 001 \rangle$  для ГЗ  $\Sigma 5\{010\}/\{340\}\langle 001 \rangle$  (а) и для ГЗ  $\Sigma 5\{110\}/\{710\}\langle 001 \rangle$  (б). Кривые 1 – без релаксации, кривые 2 – с учетом релаксации.

тически выгодные сечения выделены штриховой прямой на рис. 1а, 1б. Отметим, что эти сечения имеют одни из самых высоких значений межплоскостных расстояний для рассматриваемых ГЗ (табл. 1), а ограничивающие их плоскости менее других “размыты” вследствие процессов релаксации, т.е. являются наиболее плотноупакованными.

Мы рассчитали энергии GB-SF для всех обсуждаемых выше семи плоскостей, параллельных рассматриваемой ГЗ. Полученные результаты характеризуют GB-SF геометрию и указывают предпочтительные направления для зернограничного проскальзывания. Ниже обсуждаются результаты расчетов для отдельных плоскостей, ограниченных направлениями, перпендикулярными оси наклона. Для ГЗ  $\Sigma 5\{010\}/\{340\}\langle 001 \rangle$  это вектора  $\langle 001 \rangle$  и  $\langle 100 \rangle/\langle 430 \rangle$ ; для ГЗ  $\Sigma 5\{110\}/\{710\}\langle 001 \rangle$  – вектора  $\langle 001 \rangle$  и  $\langle 1-10 \rangle/\langle 170 \rangle$ . Мы сохранили здесь двойное обозначение векторов (обычно используемое для плоскостей), имея в виду, что рассматриваемые

направления параллельны в первом и втором зерне. Расчет показал, что для ГЗ1 и ГЗ2 геометрия GB-SF-поверхностей для плоскости 1 близка к геометрии идеальных плоскостей  $\{010\}$  и  $\{110\}$ ; геометрия GB-SF поверхностей для плоскости 7 близка к геометрии идеальных плоскостей  $\{340\}$  и  $\{710\}$ . Для сечений с промежуточными номерами вид GB-SF-поверхностей последовательно изменяется от одного типа поверхности к другому. Изучены также некоторые другие направления в плоскостях ГЗ с низкими значениями GB-SF энергии.

**ГЗ  $\Sigma 5\{010\}/\{340\}\langle 001 \rangle$ .** На рис. 3 представлены GB-SF поверхность и изменение энергии GB-SF вдоль направления  $\langle 100 \rangle/\langle 430 \rangle$  для сечения 4 ГЗ  $\Sigma 5\{010\}/\{340\}\langle 001 \rangle$ . Здесь и далее расстояния даны в единицах параметра решетки. На рис. 3 отмечены точки  $A_1, A_2$  локальных минимумов, которые получены для нерелаксированного случая. Видно, что сдвиг в положительном и отрицательном направлениях  $\langle 100 \rangle/\langle 430 \rangle$  не является симметричным. Без учета релаксации возможной траекторией скольжения была бы ломаная линия вдоль  $O_1A_2A_1O_2$ . После релаксации (кривая 2 на рис. 3б) существенным образом изменяется не только высота пиков, но и положение локальных минимумов. При этом формируются локальные минимумы с нулевой GB-SF-энергией в точках, соответствующих целому числу параметров решетки; их положение соответствует векторам трансляции в плоскости  $\{100\}$  идеальной решетки. Действительно, левая часть рис. 1а, отвечающая системе плоскостей куба, доходит вплоть до позиции 4. При этом наиболее существенные смещения  $\sim 0.8 \text{ \AA}$  при формировании ГЗ испытывают атомы в позициях, подобных 4 и 7. При образовании сдвига в сечениях 1–4 релаксация затрагивает эти атомы, восстанавливая структуру ГЗ до сдвига. Можно, однако, заметить, что форма кривых зависимости GB-SF энергии между точками минимума различается, повторяя лишь рисунок на длине периода  $\langle 100 \rangle/\langle 430 \rangle$ . Значения  $\gamma_{us} \sim (0.24-0.27) \text{ Дж/м}^2$  близки к значениям энергии нестабильного ДУ при сдвиге вдоль оси наклона  $\langle 001 \rangle$  (рис. 2а).

С учетом релаксации легким оказалось также направление сдвига вдоль  $\langle 101 \rangle$  (линия  $OA'_2$  на рис. 3а). На рис. 4 приведены GB-SF энергии в зависимости от сдвига вдоль направления  $\langle 101 \rangle$  для сечений 1, 4, а также для идеальной решетки. После релаксации равное нулю значение GB-SF энергии достигается для сдвига  $1/2\langle 101 \rangle$  (вектор  $OA'_2$  на рис. 3а, 4). Минимальное значение энергии нестабильного GB-SF получено для сечения 4 ( $\gamma_{us} \sim 0.26 \text{ Дж/м}^2$ ), что в 1.7 раза ниже, чем для идеальной решетки, и близко к значению  $\gamma_{us}$  при сдвиге вдоль направления  $\langle 100 \rangle$  и  $\langle 001 \rangle$  (сечение 4).

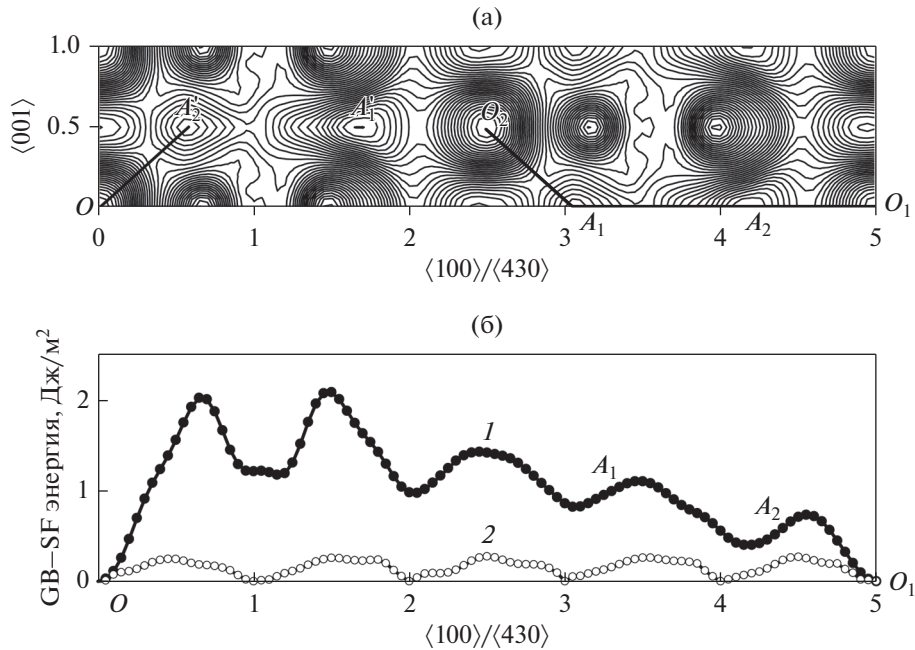


Рис. 3. GB–SF поверхность (а); зависимость GB–SF энергии (б) без релаксации (кривая 1) и с учетом релаксации (кривая 2) вдоль направления  $\langle 100 \rangle / \langle 430 \rangle$  для сечения 4 ГЗ  $\Sigma 5\{010\} / \{340\} \langle 001 \rangle$ .

Для сечения 7 геометрия GB–SF поверхности качественно подобна (рис. 5а). Как и в предыдущем случае, сдвиги  $OO_1$  и  $OO_2$  соответствуют векторам трансляции. При этом зависимости для нерелаксированных и релаксированных значений GB–SF-энергии в целом повторяют друг друга (рис. 5б).

Сдвиг вдоль направления  $OO_1$  вряд ли возможен, так как при подобном смещении кристаллитов встречаются три пика с высокими значениями GB–SF-энергии, а релаксация сохраняет значительный барьер для проскальзывания. Сдвиг скорее будет происходить по траектории  $O_1A_1O_2$  из точки  $O_1$  в  $O_2$ , показанной на рис. 5а. Высота барьеров после релаксации составляет  $0.5\text{--}0.8 \text{ Дж/м}^2$ , что существенно выше, чем для сечения 4. Таким образом, наиболее легким вариантом для ГЗ  $\Sigma 5\{010\} / \{340\} \langle 001 \rangle$  является скольжение по сечению 4 вдоль оси наклона  $\langle 001 \rangle$ , а также вдоль направлений  $\langle 100 \rangle$  и  $\langle 101 \rangle$  в плоскости ГЗ.

**ГЗ  $\Sigma 5\{110\} / \{710\} \langle 001 \rangle$ .** Геометрия GB–SF-поверхности для ГЗ  $\Sigma 5\{110\} / \{710\} \langle 001 \rangle$  близка к той, которая реализуется в идеальной решетке только для сечения 1. Из рис. 1б видно, что для остальных сечений при GB–SF-сдвигах на вектор  $1/2\langle 1-10 \rangle$  не все атомы вблизи поверхности данного сечения переходят в идентичные позиции, отличающиеся от исходной только релаксационной деформацией.

Только для сечения 1 на длине трансляции вдоль направления  $\langle 1-10 \rangle / \langle 170 \rangle$  существуют локальные

минимумы в точках  $B_1\text{--}B_4$ , в которых энергия после релаксации обращается в ноль (рис. 6). Это означает возможность трансляции на вектор  $1/2\langle 1-10 \rangle$  в этом сечении ГЗ  $\Sigma 5\{110\} / \{710\} \langle 001 \rangle$ , и эквивалентность сдвигов с векторами  $OB_1$ ,  $B_1B_2$  и т.д. на рис. 6. Значение энергии нестабильного GB–SF при этих сдвигах изменяется в пределах  $\gamma_{us} = 0.22\text{--}0.24 \text{ Дж/м}^2$ , что является минимальным значением при сдвиге в данной ГЗ. Для сравнения, для идеальной решетки энергия нестабильного GB–SF при сдвиге вдоль направле-

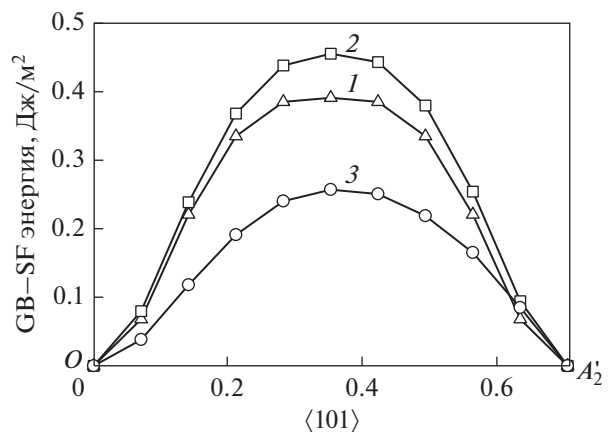


Рис. 4. Зависимость GB–SF энергии с учетом релаксации вдоль направления  $\langle 101 \rangle$  для идеальной решетки (кривая 1), для сечения 1 (кривая 2) и сечения 4 (кривая 3) для ГЗ  $\Sigma 5\{010\} / \{340\} \langle 001 \rangle$ .



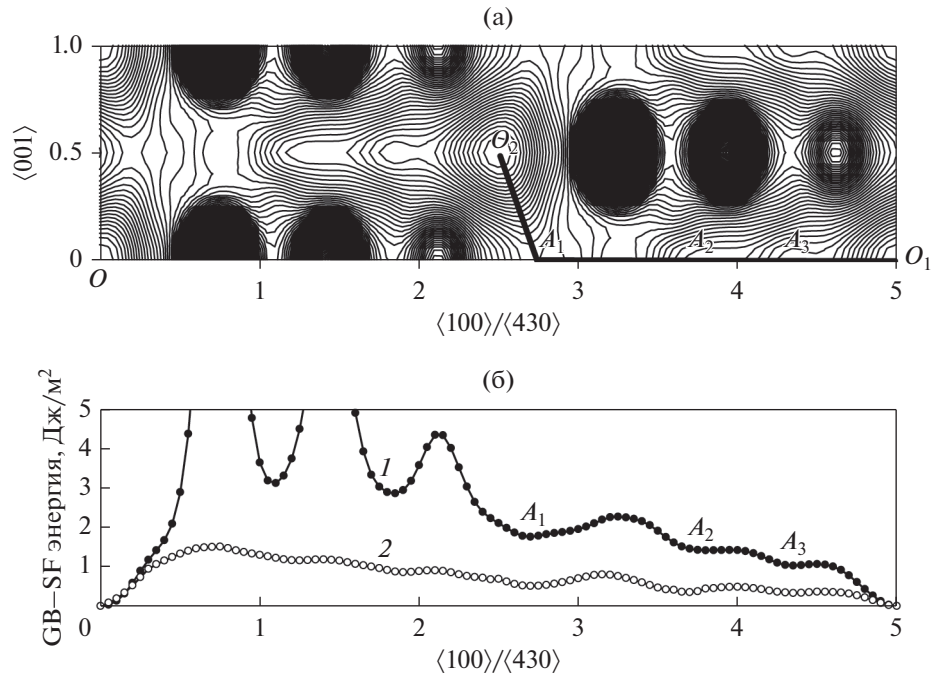


Рис. 5. GB–SF поверхность (а); зависимость GB–SF энергии (б) без релаксации (кривая 1) и с учетом релаксации (кривая 2) вдоль направления  $\langle 430 \rangle$  для сечения 7 ГЗ  $\Sigma 5\{010\}/\{340\}\langle 001 \rangle$ .

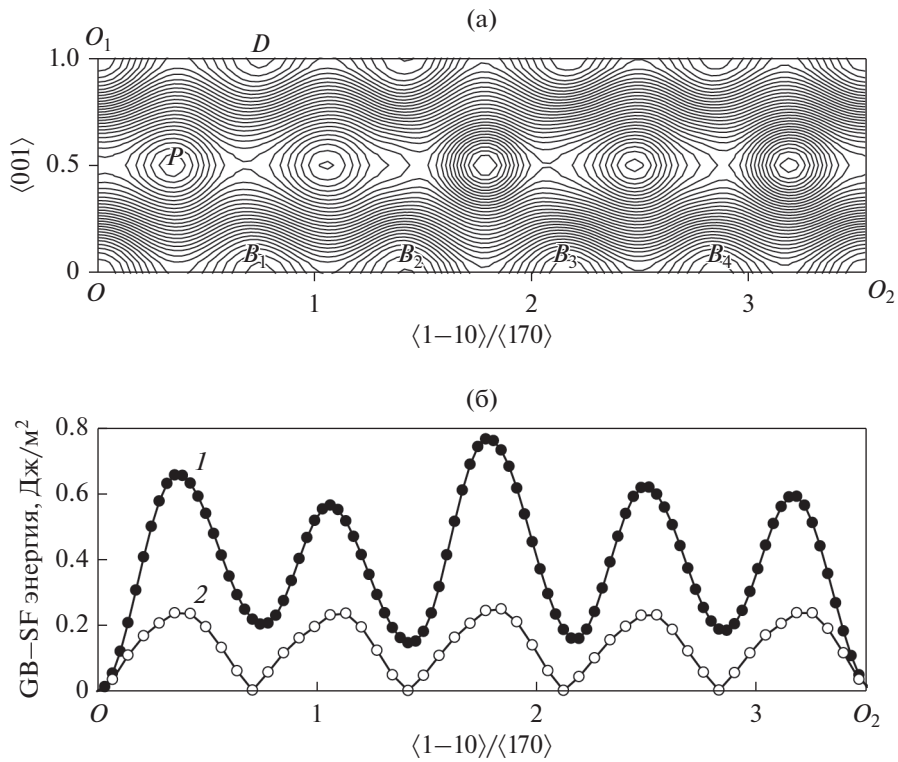


Рис. 6. GB–SF поверхность (а); зависимость GB–SF энергии (б) без релаксации (кривая 1) и с учетом релаксации (кривая 2) вдоль направления  $\langle 1-10 \rangle / \langle 170 \rangle$  для сечения 1 ГЗ  $\Sigma 5\{110\}/\{710\}\langle 001 \rangle$ .

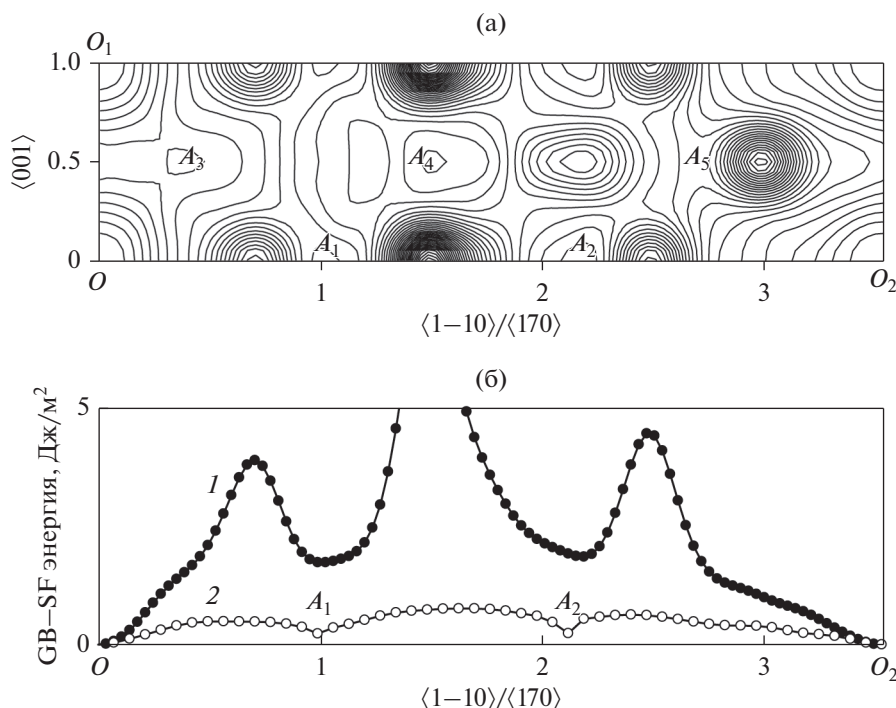


Рис. 7. GB–SF поверхность (а); зависимость GB–SF энергии (б) без релаксации (кривая 1) и с учетом релаксации (кривая 2) вдоль направления  $\langle 1-10 \rangle / \langle 170 \rangle$  для сечения 3 ГЗ  $\Sigma 5\{110\} / \{710\} \langle 001 \rangle$ .

ния  $1/2\langle 110 \rangle \langle 110 \rangle$  равна  $\gamma_{us} = 0.24$  Дж/м<sup>2</sup>, что несколько выше, чем для аналогичного GB–SF-сдвига в сечении 1. Сдвиг  $OD = 1/2\langle 112 \rangle$  (рис. 6а) должен преодолеть максимум в точке Р, который соответствует  $\gamma_{us} = 0.65$  Дж/м<sup>2</sup>, что существенно выше значений энергии нестабильного ДУ для других сдвигов в сечении 1 ГЗ  $\Sigma 5\{110\} / \{710\} \langle 001 \rangle$ . Другие локальные минимумы вдоль направления  $\langle 112 \rangle$  отсутствуют.

На рис. 7 представлена  $\gamma$ -поверхность (рис. 7а) и зависимость GB–SF-энергии (рис. 7б) вдоль направления  $\langle 1-10 \rangle / \langle 170 \rangle$  для сечения 3. На длине трансляции  $OO_2$  существуют два минимума в точках  $A_1$  и  $A_2$ ,  $E_{min}(A_1) = 0.23$  Дж/м<sup>2</sup>,  $E_{min}(A_2) = 0.24$  Дж/м<sup>2</sup>. Сдвиг  $OO_2$  должен проходить через промежуточные точки этих минимумов. Значения энергии нестабильного ДУ изменяются в пределах  $\gamma_{us} = 0.5-0.8$  Дж/м<sup>2</sup>, что значительно выше, чем при сдвиге вдоль направления  $\langle 001 \rangle$ . Таким образом, наиболее легким вариантом скольжения для ГЗ  $\Sigma 5\{110\} / \{710\} \langle 001 \rangle$  является скольжение для сечения 1 вдоль направления  $1/2\langle 1-10 \rangle$  в плоскости ГЗ.

### ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

С целью выяснения механизмов, контролирующей подвижность асимметричных границ зерен в поликристалле Al, методами атомистического

моделирования исследована структура ГЗ и энергетические характеристики процесса проскальзывания для двух специальных ГЗ наклона  $\Sigma 5\{010\} / \{340\} \langle 001 \rangle$  и  $\Sigma 5\{110\} / \{710\} \langle 001 \rangle$ . “Ширина” ГЗ для асимметричных границ несколько превышает ширину симметричных границ  $\Sigma 5\{012\}$  и  $\Sigma 5\{013\}$ , из структурных единиц которых сконструированы рассматриваемые асимметричные ГЗ. Характерная особенность асимметричных границ состоит в том, что число различающихся сечений, параллельных плоскости ГЗ, для этих границ значительно выше (7), табл. 1, чем для симметричных границ. Расчет энергии зернограничного обобщенного дефекта упаковки позволил дать оценку величины барьера, определяющего сопротивление относительно смещению зерен. Установлено, что сдвиг на вектор трансляции  $\langle 001 \rangle$  вдоль оси наклона зависит как от типа плоскости, так и от типа сечения. Для ГЗ  $\Sigma 5\{010\} / \{340\} \langle 001 \rangle$  минимальное значение нестабильного ДУ при сдвиге вдоль оси наклона с учетом релаксации  $\gamma_{us} = 0.26$  Дж/м<sup>2</sup>, максимальное – в 3.5 раза выше (рис. 2а). Для  $\Sigma 5\{110\} / \{710\} \langle 001 \rangle$  минимальное значение  $\gamma_{us} = 0.31$  Дж/м<sup>2</sup>, максимальное – в 2.7 раза выше (рис. 2б).

Для ГЗ  $\Sigma 5\{010\} / \{340\} \langle 001 \rangle$  в шести последовательных сечениях со стороны плоскости  $\{010\}$  геометрия  $\gamma$ -поверхностей сохраняет наиболее существенные черты идеальной плоскости  $\{010\}$ : локальные минимумы с нулевой энергией в точ-

ках, кратных векторам сдвига  $\langle 100 \rangle$  и  $1/2\langle 101 \rangle$  (рис. 3, 4). Значения нестабильного ДУ изменяются в пределах  $\gamma_{us} = 0.24-0.27$  Дж/м<sup>2</sup> для сдвига вдоль направления  $\langle 100 \rangle$  и  $\gamma_{us} = 0.26-0.39$  Дж/м<sup>2</sup> для сдвига вдоль направления  $1/2\langle 101 \rangle$ . Для ГЗ  $\Sigma 5\{110\}/\{710\}\langle 001 \rangle$  значение нестабильного ДУ при сдвиге вдоль направления  $1/2\langle 1-10 \rangle$  в сечении 1 равно  $\gamma_{us} = 0.22-0.24$  Дж/м<sup>2</sup>. Таким образом, в ряде сечений возможно зернограничное скольжение, характеризуемое низким значением энергии нестабильных ДУ вдоль направлений  $\langle 110 \rangle$ .

Можно предположить, что и другие асимметричные ГЗ, например,  $\Sigma 7\{\bar{1}10\}/\{\bar{8}35\}\langle 111 \rangle$  или  $\Sigma 15\{001\}/\{1\bar{2}2\}\langle 210 \rangle$ , будут содержать легкие направления для проскальзывания в одном или нескольких сечениях, примыкающих к ГЗ со стороны плотно упакованных плоскостей  $\{\bar{1}10\}$  и  $\{001\}$ .

Таким образом, для границ зерен специального типа можно выделить группу ГЗ, содержащих плотно упакованные низко индексные плоскости. Для этой группы границ возможна реализация легкого проскальзывания в одном или нескольких плотно упакованных сечениях. Можно предположить, что границы этой группы будут обеспечивать как аккомодацию решеточного скольжения, так и увеличивать долю зернограничной деформации. Отметим, что аккомодация решеточного скольжения будет происходить тем легче, чем выше энергия ДУ при расщеплении дислокации с вектором Бюргерса  $1/2\langle 110 \rangle$  на две частичные дислокации Шокли в своей плоскости скольжения  $\{111\}$  в идеальной решетке. Это приводит к легкой рекомбинации частичных дислокаций Шокли при подходе к плоскости ГЗ и дальнейшем движении не расщепленной дислокации с вектором Бюргерса  $1/2\langle 110 \rangle$  в одном из возможных сечений плоскости ГЗ. Таким образом, подобную перестройку на ГЗ можно рассматривать как поперечное скольжение решеточной дислокации винтовой ориентации из исходной плоскости скольжения в одном из зерен в плоскость поперечного скольжения в одном из сечений ГЗ без образования на ГЗ каких-либо дополнительных дефектов. Так как величина  $\gamma_{us}$  достаточно низкая, то можно считать, что рассмотренные процессы будут происходить достаточно легко, без изменения структуры ГЗ, обеспечивая большой сдвиг при проскальзывании вдоль ГЗ. В частности, Al является одним из металлов, где рекомбинация частичных дислокаций происходит легко, что приводит к легкому поперечному скольжению в этом металле. Возможность реализации указанного выше механизма требует дополнительного изучения процессов, происходящих на микроуровне, например, с использованием процедуры многомасштабного моделирования [28]. Мы указываем здесь лишь принципиальную возможность реали-

зации процесса поперечного скольжения решеточных дислокаций в одном из сечений границ зерен специального типа.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Склонность к проскальзыванию по асимметричным границам зерен  $\Sigma 5\{010\}/\{340\}\langle 001 \rangle$  и  $\Sigma 5\{110\}/\{710\}\langle 001 \rangle$  в бикристаллах Al изучена методом молекулярно-динамического моделирования на основе анализа структуры и энергии зернограничных дефектов упаковки. Установлено, что число различающихся не эквивалентных сечений, параллельных плоскости ГЗ, для этих границ существенно выше, чем для симметричных границ. Дана оценка величины барьеров, определяющих сопротивление относительно смещению зерен в различных сечениях. Показано, что тип ограничивающей ГЗ плоскости существенно влияет как на геометрию  $\gamma$ -поверхности, так и на энергетические характеристики зернограничного ДУ.

Работа выполнена в рамках государственного задания по темам “Давление” № АААА-А18-118020190104-3 и “Структура” № АААА-А18-118020190116-6.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Cahn J.W., Mishin Yu., Suzuki A.* Coupling grain boundary motion to shear deformation // *Acta Mater.* 2006. V. 54. P. 4953–4975.
2. *Bobylev S.V., Morozov N.F., Ovid'ko I.A.* Cooperative grain boundary sliding and nanograin nucleation process in nanocrystalline, ultrafine-grained, and polycrystalline solids // *Phys. Rev.* 2011. V. B 84. P. 094103.
3. *Hadian R., Grabowski B., Race C.P., Neugebauer J.* Atomistic migration mechanisms of atomically flat, stepped, and kinked grain boundaries // *Phys. Rev.* 2016. V. B 94. P. 165413.
4. *Langdon T.G.* Grain boundary sliding revisited: Developments in sliding over four decades // *J. Mater. Sci.* 2006. V. 41. P. 597–609.
5. *Li J., Soh A.K.* Synergy of grain boundary sliding and shear-coupled migration process in nanocrystalline materials // *Acta Mater.* 2013. V. 61. P. 5449–5457.
6. *Mompiou F., Caillard D., Legros M.* Grain boundary shear–migration coupling. II. Geometrical model for general boundaries // *Acta Mater.* 2009. V. 57. P. 2390–2402.
7. *Mompiou F., Legros M., Caillard D.* SMIG model: A new geometrical model to quantify grain boundary-based plasticity // *Acta Mater.* 2010. V. 58. P. 3676–3689.
8. *Guillope M., Poirier J.P.* A model for stress-induced migration of tilt grain boundaries in crystals of NaCl structure // *Acta Metall.* 1980. V. 28. P. 163–167.
9. *Babcock S.E., Balluffi R.W.* Grain boundary kinetics // *Acta Metall.* 1989. V. 37. P. 2357–2367.



10. Schiotz J., Jacobsen K.W. A Maximum in the Strength of Nanocrystalline Copper // *Science*. 2003. V. 301. P. 1357–1359.
11. Van Swygenhoven H., Weertman J.R. Deformation in nanocrystalline metals // *Mater. Today*. 2006. V. 9. P. 24–31.
12. Farkas D., Froseth A., Van Swygenhoven H. Grain boundary migration during room temperature deformation of nanocrystalline Ni // *Scripta Mater.* 2006. V. 55. P. 695–698.
13. Gianola D.S., Van Petegem S., Legros M., Brandstetter S., Van Swygenhoven H., Hemker K.J. Stress-assisted discontinuous grain growth and its effect on the deformation behavior of nanocrystalline aluminum thin films // *Acta Mater.* 2006. V. 54. P. 2253–2263.
14. Legros M., Gianola D.S., Hemker K.J. In situ TEM observations of fast grain-boundary motion in stressed nanocrystalline aluminum films // *Acta Mater.* 2008. V. 56. P. 3380–3393.
15. Gutkin M.Yu., Mikaelyan K.N., Ovid'ko I.A. Grain growth and collective migration of grain boundaries during plastic deformation of nanocrystalline materials // *Phys. Solid State*. 2008. V. 50. P. 1266–1279.
16. Lu L., Chen X., Huang X., Lu K. Revealing the Maximum Strength in Nanotwinned Copper // *Science*. 2009. V. 323. P. 607–610.
17. Purceka G., Saraya O., Nagimov M.I., Nazarov A.A., Safarov I.M., Danilenko V.N., Valiakhmetov O.R., Mulyukov R.R. Microstructure and mechanical behavior of UFG copper processed by ECAP following different processing regimes // *Phil. Mag.* 2012. V. 92. P. 690–704.
18. Shen Y.F., Lu L., Lu Q.H., Jin Z.H., Lu K. Tensile properties of copper with nano-scale twins // *Scripta Materialia*. 2005. V. 52. P. 989–994.
19. Карькина Л.Е., Карькин И.Н., Кузнецов А.Р., Горностырев Ю.Н. Зернограничное проскальзывание и миграция специальных границ зерен в бикристаллах Al. Атомистическое моделирование // *ФТТ*. 2018. Т. 60. С. 1874–1881.
20. Карькина Л.Е., Карькин И.Н., Горностырев Ю.Н. Влияние сегрегаций легирующих элементов на зернограничное проскальзывание в бикристаллах сплавов Al–Mg и Al–Ni. Атомистическое моделирование // *ФММ*. 2020. Т. 121. № 9. С. 901–906.
21. Kuznetsov A., Karkina L., Gornostyrev Yu., Korzhavyi P. Effects of Zn and Mg Segregations on the Grain Boundary Sliding and Cohesion in Al: Ab Initio Modeling // *Metals*. 2021. V. 11. P. 631.
22. Karkina L., Karkin I., Kuznetsov A., Gornostyrev Yu. Alloying Element Segregation and Grain Boundary Reconstruction, Atomistic Modeling // *Metals*. 2019. V. 9. P. 1319.
23. Tschopp M.A., Macdowell D.L. Asymmetric tilt grain boundary structure and energy in copper and aluminum // *Phil. Mag.* 2007. V. 87. P. 3871–3892.
24. Fuhua Cao, Yong Jiang, Tao Hu, Dengfeng Yin. Correlation of grain boundary extra free volume with vacancy and solute segregation at grain boundaries: a case study for Al // *Philosophical Magazine*. 2018. V. 98. P. 464–483.
25. <http://lammps.sandia.gov/index.html>.
26. Apostol F., Mishin Y. Interatomic potential for the Al–Cu system // *Phys. Rev.* 2011. V. B 83. P. 054116.
27. <http://www.ctcms.nist.gov/potentials/>.
28. Dewald M.P., Curtin W.A. Multiscale modelling of dislocation/grain boundary interactions. II. Screw dislocations impinging on tilt boundaries in Al // *Philosophical Magazine*. 2007. V. 87. P. 4615–4641.