

## Моделирование процесса образования пор на границах зерен в алюминии

А. В. Векман<sup>1)</sup>, Б. Ф. Демьянов

Алтайский государственный технический университет им. И. И. Ползунова, 656038 Барнаул, Россия

Поступила в редакцию 23 апреля 2020 г.

После переработки 26 апреля 2020 г.

Принята к публикации 26 апреля 2020 г.

Методами компьютерного моделирования проведено исследование возможности образования пор на границах зерен наклона с осью разориентации [100]. Были исследованы три специальные границы и три границы зерен общего типа при температурах 400, 500 и 600 К. Показано, что наличия 3 % решеточных вакансий недостаточно для образования пор как на границе зерен, так и в зернах, при 6 % – поры образуются только в зернах. Поры на границы зерен образуются при температурах 500 и 600 К с плотностью решеточных вакансий 4 и 5 %. На специальной границе зерен  $\Sigma 5(013)$  поры на границе зерен не образовывались.

DOI: 10.31857/S1234567820110087

**Введение.** Хорошо известно, что границы зерен (ГЗ) и их тройные стыки являются местом сосредоточения различных дефектов, в частности, вакансий. Предельным случаем накопления избыточных вакансий на ГЗ являются поры. Наиболее интенсивное образование пор происходит при облучении металлов частицами с высокой энергией: электронами, нейтронами,  $\gamma$ -квантами или ионами. Основным процессом при облучении является образование вакансий и межузельных атомов [1]. При облучении материалов вакансии и межузельные атомы образуются с одинаковой скоростью по механизму Френкеля [2]. В облучаемом материале устанавливается состояние динамического равновесия, при котором скорость возникновения точечных дефектов уравнивается скоростью их исчезновения на стоках [3, 4]. Число точечных дефектов при облучении значительно превышает равновесное, т.е. материал является пересыщенным. Вследствие высокой подвижности точечных дефектов и взаимодействия их друг с другом и с другими дефектами решетки, в облученном материале происходит образование новой дефектной структуры: возникают новые линейные, плоские и объемные дефекты.

Большое количество точечных дефектов исчезает при аннигиляции, однако многие из них избегают столкновений. Экспериментально установлено, что в облучаемом материале одна часть неаннигилированных точечных дефектов объединяются, образуя скопления: вакансионные диски, дислокаци-

онные петли, тетраэдры дефектов упаковки и поры [5–7]. Вторая часть точечных дефектов исчезает на стоках, которыми служат другие дефекты, а также свободная поверхность кристалла.

Способностью поглощать вакансии и межузельные атомы с различной эффективностью обладают практически все дефекты кристаллической решетки. Не все стоки одинаковы по отношению к вакансиям и внедренным атомам. Например, дислокации преимущественно являются стоками межузельных атомов, они их сильнее притягивают своим упругим полем [3, 4]. Дислокации являются эффективными стоками межузельных атомов еще и потому, что их количество велико в кристаллах. Поэтому поглощение межузельных атомов происходит быстрее и при облучении возникает вакансионное пересыщение. Это пересыщение при больших дозах облучения реализуется в виде пор.

ГЗ являются наиболее эффективными источниками и стоками вакансий в поликристаллах, именно они обеспечивают равновесную концентрацию вакансий в зерне. Сток вакансий на границу обнаруживается экспериментально по отсутствию вблизи ГЗ в закаленных металлах вакансионных выделений: дислокационных петель, тетраэдров дефектов упаковки [8]. Эффективность действия, как источников, так и стоков вакансий зависит от типа ГЗ – общие ГЗ являются высокоэффективными источниками и стоками, тогда как специальные ГЗ обладают слабой эмиссией и адсорбцией [9, 10].

Существует много экспериментальных исследований, свидетельствующих о том, что поры на ГЗ мо-

<sup>1)</sup>e-mail: weckman@list.ru

гут образовываться не только в результате облучения, но и в результате интенсивной пластической деформации [11–16]. В результате такого воздействия ГЗ приходят в сильно неравновесное состояние и содержат высокую плотность дефектов деформационного происхождения, а при их коалесценции происходит зарождение пор. В работе [13] показано, что увеличение нанопористости в алюминиевом сплаве Al + 0.2 вес. % Sc связано с увеличением доли большеугольных границ. В работе [15] показано, что при низкотемпературном отжиге субмикроструктурного алюминиевого сплава 1570 происходит растворение нанопор, а в [17] авторы пришли к выводу, что увеличение исходной степени неравновесности ГЗ приводит к появлению непродолжительной стадии роста пор на начальном этапе низкотемпературного отжига и увеличению времени полного растворения пор. Очевидно, что возникновение пор на ГЗ происходит в результате диффузии неравновесных вакансий. Так, в работе [18] показано, что сток деформационных вакансий на ГЗ приводит к увеличению коэффициента зернограницной диффузии на один-два порядка. Повышение концентрации дефектов решетки при интенсивной пластической деформации эквивалентно повышению температуры и может оказывать влияние на фазовые превращения в сплавах [19].

В работах [20–22] были исследованы образцы меди высокой частоты, подверженные деформации кручения под высоким давлением. Показано, что в результате такой обработки образуются поры, встроенные в полосы ультратонких зерен. Авторы полагают, что наблюдаемая пористость была вызвана высокими градиентами деформации [20]. Ультратонкие зерна внутри полос сдвига с порами, заполненными азотом, обладают более высокой термостойкостью, чем окружающая матрица [21]. Большинство ультратонких зерен имеют высокую плотность дефектов и внутреннюю деформацию [22].

В настоящей работе методами компьютерного моделирования проведено исследование возможности образования пор на границах зерен наклона с осью разориентации [100].

**Описание методики компьютерного эксперимента.** Равновесная структура исследуемых ГЗ была построена с использованием структурно-вакансионной модели ГЗ [23]. В данной модели два сопрягающихся кристалла, разориентированные на определенный угол вокруг общей оси, подвергаются последовательно вакансионной и атомной релаксации для минимизации энергии системы. Методика вакансионной и атомной релаксации описана в

работах [24, 25]. Межатомное взаимодействие описывалось парным потенциалом Морзе [26]. Энергия ГЗ находилась как разность энергий идеального кристалла и кристалла с дефектом. Перед началом компьютерного моделирования часть атомов удалялась из узлов расчетной ячейки, создавая таким образом определенное количество неравновесных вакансий. Неравновесные вакансии вносились в области, отстоящие от плоскости границы на расстояние не менее трех параметров решетки. Процесс перемещения вакансий исследовался методом молекулярной динамики. Время компьютерного эксперимента составляло 100 пс. В качестве объектов исследования выбраны границы общего типа с углами разориентации  $15^\circ$ ,  $30^\circ$  и  $60^\circ$  и три специальные ГЗ  $\Sigma 13(015)$ ,  $\Sigma 5(013)$  и  $\Sigma 5(012)$  с углами разориентации  $22.62^\circ$ ,  $36.87^\circ$  и  $52.13^\circ$ . Данные специальные ГЗ являются наиболее изученными из всех спецграниц с осью разориентации [100]. Как показано в работах [27, 28], граница  $\Sigma 5(013)$  имеет пониженную, по сравнению с другими ГЗ, энергию, тогда как энергия границ  $\Sigma 13(015)$  и  $\Sigma 5(012)$  сравнима с энергией границ общего типа.

**Результаты и их обсуждение.** На первом этапе исследования был изучен процесс захвата небольшого количества неравновесных вакансий. Общее количество атомов в расчетной ячейке составляло около сорока пяти тысяч атомов, а количество внесенных вакансий 90, 180 и 270. Таким образом, данное количество вакансий составляет менее половины процента от общего количества узлов решетки. Необходимо отметить, что внесенные вакансии являются избыточными по сравнению с равновесным количеством. Температура эксперимента составляла 600 К, что составляет  $0.65T_m$  ( $T_m$  – температура плавления алюминия). В процессе диффузии атомы совершают скачки из одного равновесного положения в другое. Направление и величина скачка могут быть представлены в виде отрезка, соединяющего начальное и конечное положения атома. Перескоки атомов из одного узла кристаллической решетки в другой происходят только в том случае, если рядом с атомом находится вакансия. Таким образом, совокупность всех перескоков атомов за определенный интервал времени при определенной температуре создавали трехмерную картину траекторий движения вакансий. На рисунке 1 представлена динамика движения решеточных вакансий вблизи ГЗ.

Из рисунка видно, что в начале эксперимента (рис. 1а) перемещение атомов происходит в плоскости ГЗ и сопрягающихся зернах, где существует значительное количество неравновесных вакансий. На рисунках 1б и 1с отчетливо видно, что решеточные

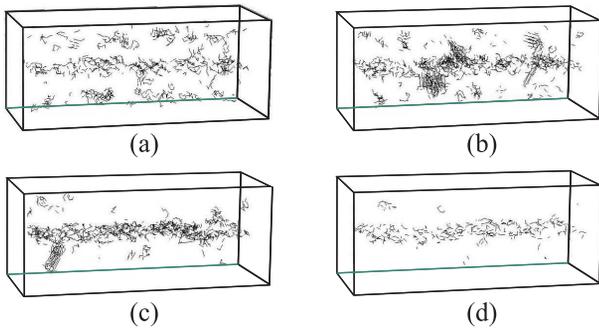


Рис. 1. Динамика движения решеточных вакансий вблизи ГЗ

вакансии постепенно перемещаются в плоскость границы. На рисунке 1d движение атомов происходит в основном в плоскости ГЗ, что свидетельствует о том, что неравновесные вакансии были захвачены границей. Это согласуется с результатом, полученным в работе [29], где показано, что в результате диффузионного движения вакансии могут попадать в область ГЗ, после чего оказываются захваченными ею. По картинам диффузионного движения можно увидеть, какое время требуется для того, чтобы большая доля решеточных вакансий пришла в границу. В таблице 1 представлены обобщенные данные этого времени.

Таблица 1. Время захвата вакансий границами зерен, пс

Тип ГЗ	90 вакансий	180 вакансий	270 вакансий
15°	55	60	60
30°	60	65	60
60°	60	65	65
$\Sigma 13(015)$	60	65	55
$\Sigma 5(013)$	85	80	80
$\Sigma 5(012)$	65	60	65

Из таблицы 1 видно, что наибольшее время требуется для границы  $\Sigma 5(013)$ , а для остальных – примерно одинаковое время. Это означает, что граница  $\Sigma 5(013)$  обладает наименьшей способностью к захвату вакансий.

На втором этапе исследования в область вблизи ГЗ вводилось большое количество неравновесных вакансий – от 3 до 6%. Расчеты проводились для трех значений температуры: 400, 500 и 600 К. В результате наблюдалось три ситуации:

- пора не возникает;
- пора образуется на ГЗ;
- пора образуется в зерне.

В качестве примера на рис. 2 представлены кадры видеоряда, на которых видно, что, вакансии приходят в границу, распределяются вдоль ее плоскости, образуя аморфизированный слой, но их количества недостаточно для образования пор. Данная картина наблюдалась для всех границ и при всех температурах, когда количество избыточных вакансий составляло 3%.

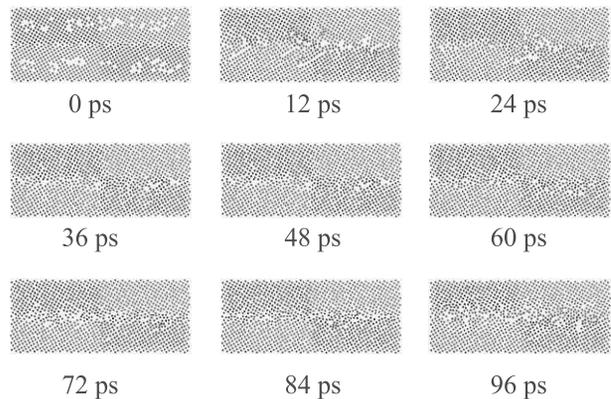


Рис. 2. (Цветной онлайн) Кадры видеоряда без образования пор

На рисунке 3 представлен пример образования поры на ГЗ. Видно, что вакансии, расположенные в зернах, постепенно начинают стекаться к ГЗ. После того, как большинство вакансий пришло в границу, на границе образуется зародыш поры. Момент времени, в который начинает образовываться пора, составляет 50 пс после начала эксперимента. После образования зародыша поры она начинает расти очень быстро и в течении 10 пс достигает максимального размера.

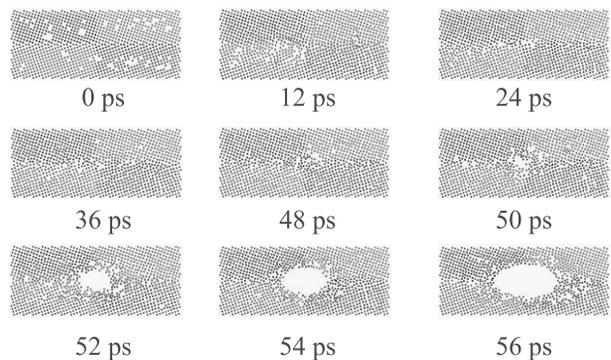


Рис. 3. (Цветной онлайн) Кадры видеоряда с образованием поры на границе зерен

На рисунке 4 представлены кадры видеоряда образования пор в зернах. В отличие от предыдущей ситуации зародыши пор в зернах возникают уже

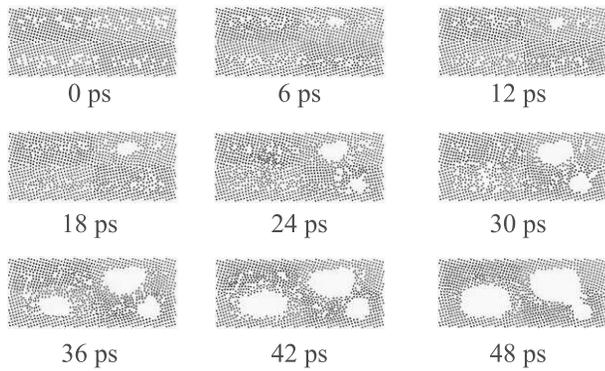


Рис. 4. (Цветной онлайн) Кадры видеоряда с образованием пор в зернах

на начальной стадии эксперимента порядка 15–20 пс, причем за это время только незначительное количество вакансий успевает дойти до ГЗ. Кроме того, как видно из рис. 4, в зернах может образовываться не одна, а сразу несколько пор. Однако, необходимо отметить, что образование одной поры в толще зерна наблюдалось гораздо чаще, чем нескольких пор.

В таблице 2 приведены обобщенные данные по образованию пор на ГЗ. Символом “–” отмечены эксперименты, в которых поры не образовывались, “GB” – поры образовывались на ГЗ, а “В” – поры возникали в зерне. Видно, что во всех экспериментах с количеством вакансий 6 % поры образовывались в зернах. Очевидно, что при такой плотности вакансий они начинают объединяться до того, как были захвачены ГЗ.

При самой низкой температуре (400 К) пор на ГЗ также не образуется. Видимо, это связано с невысокой подвижностью решеточных вакансий, тогда как при самой высокой температуре (600 К) поры на ГЗ возникали во всех ГЗ, за исключением высококогерентной границы  $\Sigma 5(013)$ . Отсутствие пор на ГЗ  $\Sigma 5(013)$  при всех температурах и плотностях решеточных вакансий, видимо, связано со способностью данной границы захватывать решеточные вакансии. Так, в работе [30] показано, что поглощение вакансий данной ГЗ энергетически не выгодно в силу ее атомной структуры.

**Закключение.** В работе методами компьютерного моделирования проведено исследование возможности образования пор на границах зерен наклона с осью разориентации [100] в алюминии. Исследованы ГЗ общего и специального типа при температурах 400, 500 и 600 К. Было показано, что наличия 3 % избыточных вакансий вблизи ГЗ недостаточно для образования пор как на ГЗ, так и в толще сопрягающихся зерен. Образование пор происходит при тем-

Таблица 2. Обобщенные данные по порообразованию в зависимости от температуры и количества вакансий: “–” – пор нет, “GB” – поры на ГЗ, а “В” – поры в зерне

Тип ГЗ	T, К	3 %	4 %	5 %	6 %
15°	400	–	–	–	В
	500	–	–	GB	В
	600	–	GB	GB	В
30°	400	–	–	–	В
	500	–	–	–	В
	600	–	GB	GB	В
60°	400	–	–	–	В
	500	–	–	GB	В
	600	–	–	GB	В
$\Sigma 13(015)$	400	–	–	В	В
	500	–	–	GB	В
	600	–	GB	GB	В
$\Sigma 5(013)$	400	–	–	–	В
	500	–	–	–	В
	600	–	–	–	В
$\Sigma 5(012)$	400	–	–	В	В
	500	–	GB	В	В
	600	–	GB	В	В

пературах 500 и 600 К с плотностью избыточных решеточных вакансий 4 и 5 %. Когда количество избыточных вакансий достигает 6 %, то поры образуются только в зернах при всех значениях исследованных температур. На специальной ГЗ  $\Sigma 5(013)$  поры на ГЗ не образовывались.

1. В. Ф. Зеленский, И. М. Неклюдов, Т. И. Черняева, *Радиационные дефекты и набухание металлов*, Наук. Думка, Киев (1988), гл. 2, с. 21.
2. Я. И. Френкель, *Введение в теорию металлов*, Гостехиздат, М. (1958), гл. 12, п. 1, с. 194.
3. A. D. Brailsford and R. Bollough, *J. Nucl. Mater.* **56**, 121 (1975).
4. Yu. V. Konobeev, A. V. Subbotin, and S. I. Golubov, *Radiation Effects* **20**, 265 (1973).
5. М. В. Томпсон, *Дефекты и радиационные повреждения в металлах*, Мир, М. (1971) [M. W. Thompson, *Defects and Radiation Damage in Metals*, University Press, Cambridge (1969), 394 p.].
6. К. Лейман, *Взаимодействие излучения с твердым телом и образование элементарных дефектов*, Атомиздат, М. (1979) [Chr. Lehmann, *Interaction of radiation with solids and elementary defect production*, North-Holland Publishing Company, Amsterdam, N.Y., Oxford (1977), 341 p.].
7. В. В. Кирсанов, А. Л. Суворов, Ю. В. Грушин, *Процессы радиационного дефектообразования в металлах*, Энергоатомиздат, М. (1985).

8. R. W. Siegel, S. M. Chang, and R. W. Balluffi, *Acta Metall.* **28**, 249 (1980)
9. О. А. Кайбышев, Р. З. Валиев, *Границы зерен и свойства металлов*, Металлургия, М. (1987), гл. 3, п. 1, с. 54.
10. H. Gleiter, *Acta Metall.* **27**, 187 (1979).
11. В. И. Бетехтин, А. Г. Кадомцев, V. Sklenicka, and I. Saxl, *ФТТ* **49**, 1787 (2007).
12. R. Lapovok, D. Tomus, J. Mang, Y. Estrin, and T. C. Lowe, *Acta Mater.* **57**, 2909 (2009).
13. В. И. Бетехтин, V. Sklenicka, I. Saxl, Б. К. Кардашев, А. Г. Кадомцев, М. В. Нарыкова, *ФТТ* **52**, 1517 (2010).
14. I. A. Ovid'ko, A. G. Sheinerman, and N. V. Skiba, *Acta Mater.* **59**, 678 (2011).
15. В. Н. Перевезенцев, М. Ю. Щербань, Т. А. Грачева, Т. А. Кузьмичева, *ЖТФ* **85**, 63 (2015).
16. J. Dvorak, V. Sklenicka, V. I. Betekhtin, A. G. Kadomtsev, P. Kral, M. Kvapilova, and M. Svoboda, *Mater. Sci. Eng. A* **584**, 103 (2015).
17. В. Н. Перевезенцев, А. С. Пупынин, А. Е. Огородников, *ЖТФ* **88**, 1539 (2018).
18. В. Н. Перевезенцев, А. С. Пупынин, *Письма в ЖТФ* **37**, 88 (2011).
19. Б. Б. Страумал, А. Р. Кильмаматов, И. А. Мазилкин, А. Корнева, П. Земба, Б. Барецки, *Письма в ЖЭТФ* **110**, 622 (2019).
20. Y. Qi, A. Kosinova, A. R. Kilmametov, V. B. Straumal, and E. Rabkin, *Mater. Charact.* **145**, 1 (2018).
21. Y. Qi, A. Kosinova, A. R. Kilmametov, V. B. Straumal, and E. Rabkin, *Scr. Mater.* **178**, 29 (2020).
22. Y. Qi, A. Kosinova, A. R. Kilmametov, V. B. Straumal, and E. Rabkina, *Mater. Charact.* **145**, 389 (2018).
23. А. В. Векман, Б. Ф. Демьянов, *ФММ* **120**, 53 (2019).
24. А. С. Драгунов, Б. Ф. Демьянов, А. В. Векман, *Известия ВУЗов. Физика* **53**, 82 (2010).
25. А. С. Драгунов, А. В. Векман, Б. Ф. Демьянов, *Ползуновский альманах* **4**, 29 (2011).
26. P. M. Morse, *Phys. Rev.* **34**, 57 (1929).
27. А. В. Векман, *Известия ТПУ* **313**, 96 (2008).
28. А. С. Драгунов, Б. Ф. Демьянов, А. В. Векман, *Ползуновский альманах* **2**, 133 (2009).
29. А. В. Векман, Б. Ф. Демьянов, А. С. Драгунов, *ФММ* **116**, 621 (2015).
30. А. В. Векман, *Дисс. канд. физ.-мат. наук: 01.04.07. Барнаул* (2000).