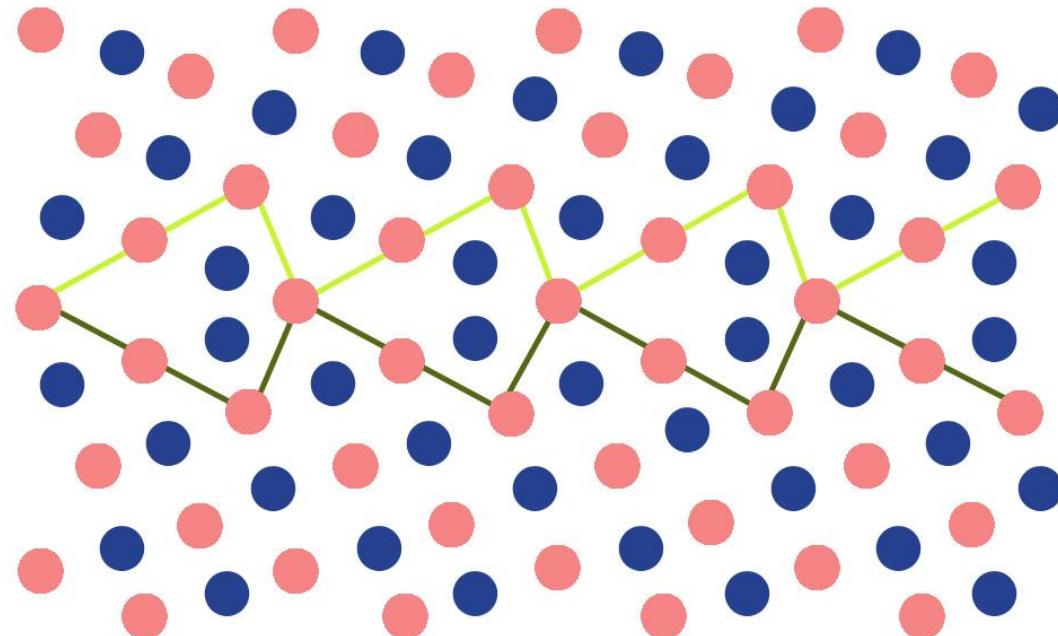
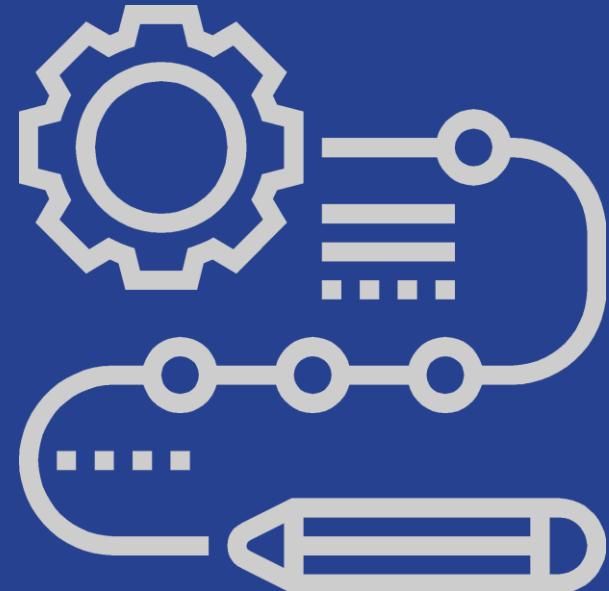


# Моделирование дефектов: границы зерен



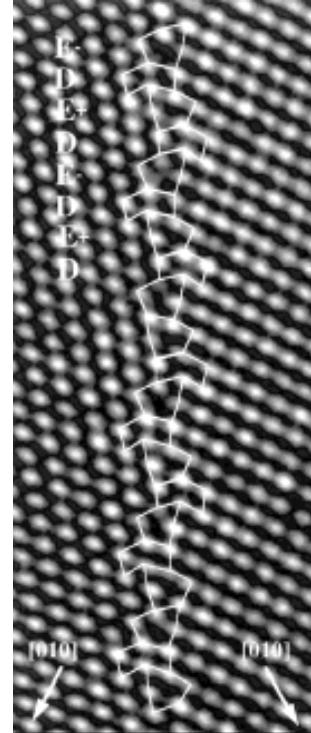
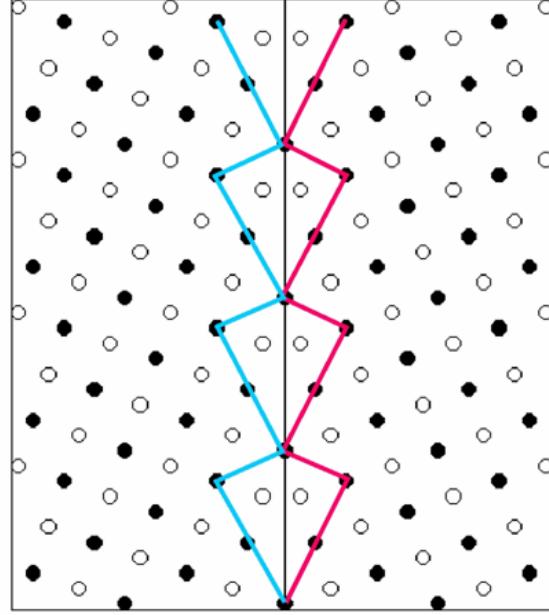
# План

- Что такое границы зерен?
- Модели ГЗ
- Специальные границы
- Диффузия по ГЗ
- Моделирование поликристаллов
- Зернограничное проскальзывание



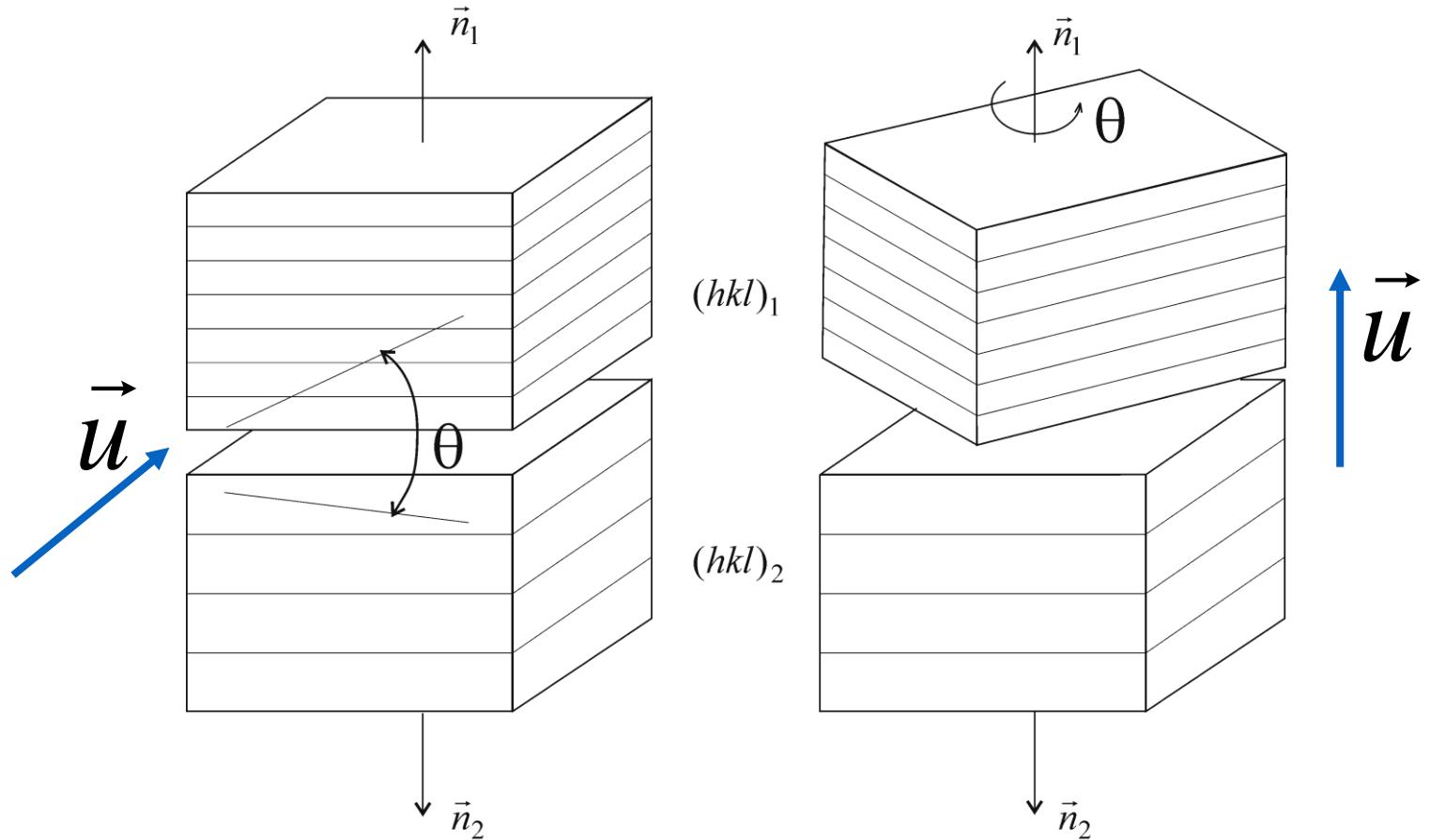
# Границы зерен

Граница зерен – двумерный (поверхностный) дефект, разделяющий два по-разному ориентированных зерна (кристаллита). Границы с разориентацией соседних зерен менее  $\sim 10^\circ$  относят к *малоугловым*, а с большей разориентацией — к *высокоугловым*.



Кристаллографическая ширина границ составляет  $(1\dots2) a_0 = 0,5\dots1 \text{ нм}$

# Границы наклона и кручения

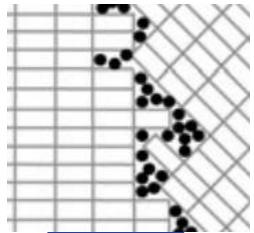


Если ось вращения лежит в плоскости границы зерен (субзерен), то такую границу называют *наклонной*, а если ось вращения перпендикулярна плоскости границы, то *границей кручения*. В более общем случае граница смешанного типа состоит из элементов и наклона, и кручения.

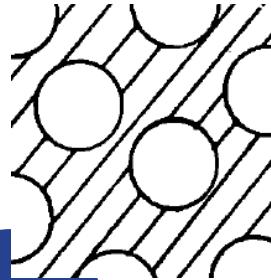
# Необходимость изучения ГЗ

- ГЗ являются важным элементом дефектной структуры поликристаллических материалов
- ГЗ оказывают важное влияние на прочность и пластичность, играют роль в процессах деформации и разрушения при повышенных температурах.
- Свойства материала зависят от общей протяженности ГЗ, от микроскопических свойств границ и их структурного состояния.
- ГЗ определяют характер процессов возврата, рекристаллизации, сегрегации примесей, коалесценции частиц.
- Локальная атомная структура ГЗ влияет на электронные свойства металла.

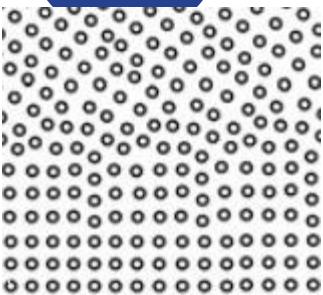
# Модели границ зерен



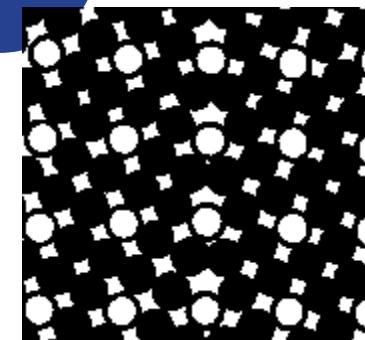
1913



1948



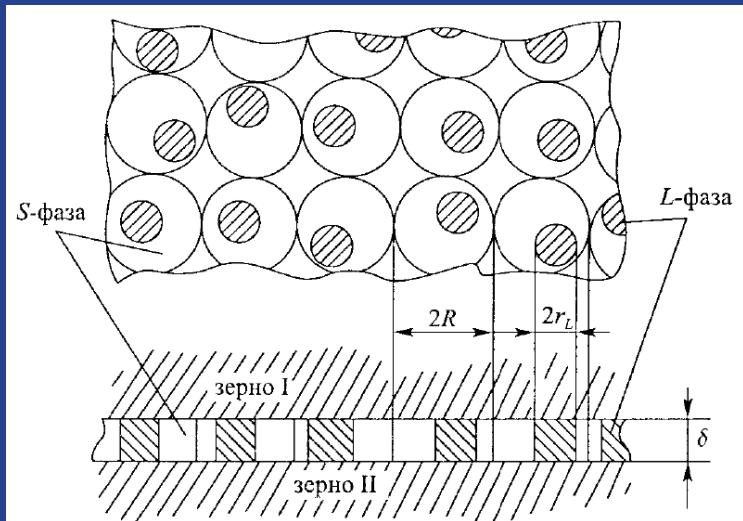
1929



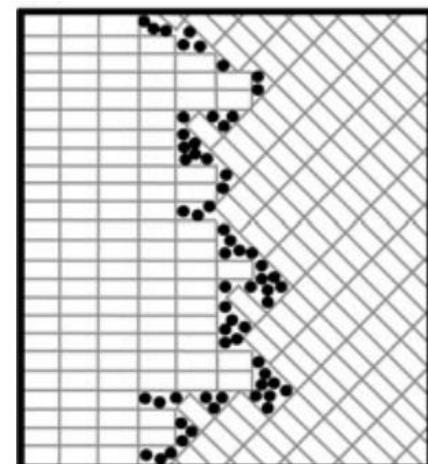
1949

# Модели границ зерен

## Модель аморфного цемента (Розенхайн, Хамфри, 1913)

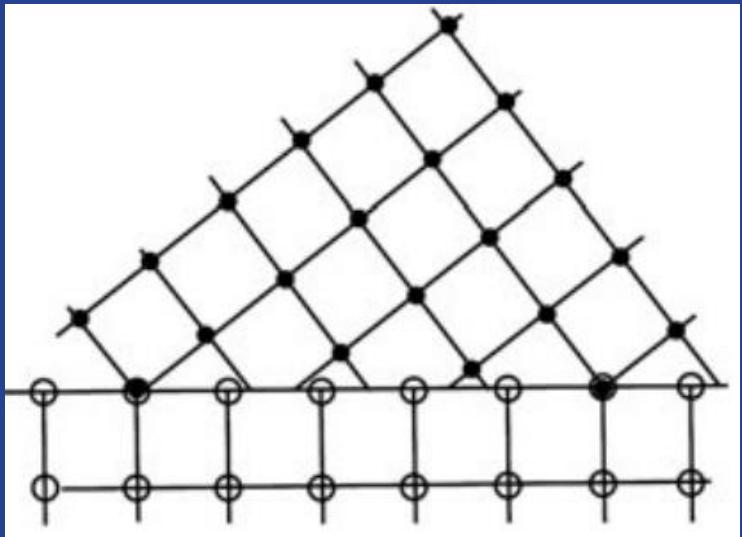


Модель аморфной прослойки по границам зерен (аморфного «цемента») обеспечивающего сцепление соседних кристаллов. Взаимное смещение зерен как единого целого во время высокотемпературной деформации объясняли тем, что с повышением температуры аморфные прослойки размягчаются быстрее, чем кристаллические зерна

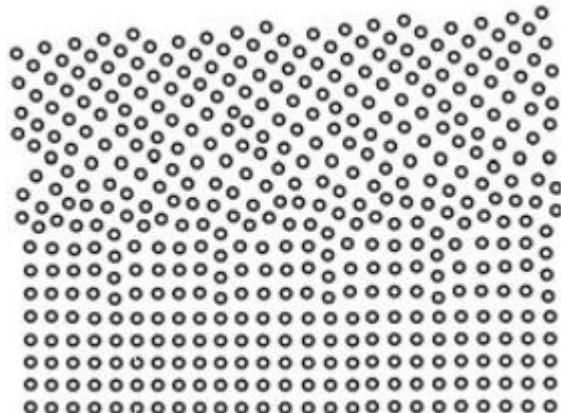


# Модели границ зерен

Модель переходной решетки  
(Харгривс, Хилл, 1928)

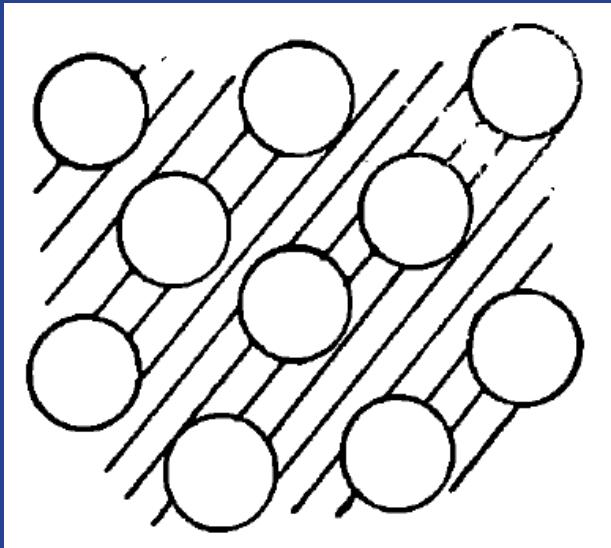


Атомы занимают свои узлы в решетке, за исключением, быть может, одного-двух слоев прямо у границы, в которых атомы занимают промежуточные положения, соответствующие минимально возможной при данных условиях потенциальной энергией. Из гипотезы переходной решетки по существу исходят все современные модели строения высокоугловых границ.



# Модели границ зерен

## Островковая модель Мотта (1948)



Граница состоит из островков с хорошим сопряжением решеток, разделенных областями с плохим сопряжением. В островках с хорошим сопряжением сопротивление скольжению пренебрежимо мало. Элементарный акт, делающий возможным сдвиг, заключается в разупорядочении или плавлении за счет теплового возбуждения атомов вокруг островка, так что местное сопротивление сдвигу здесь исчезает.

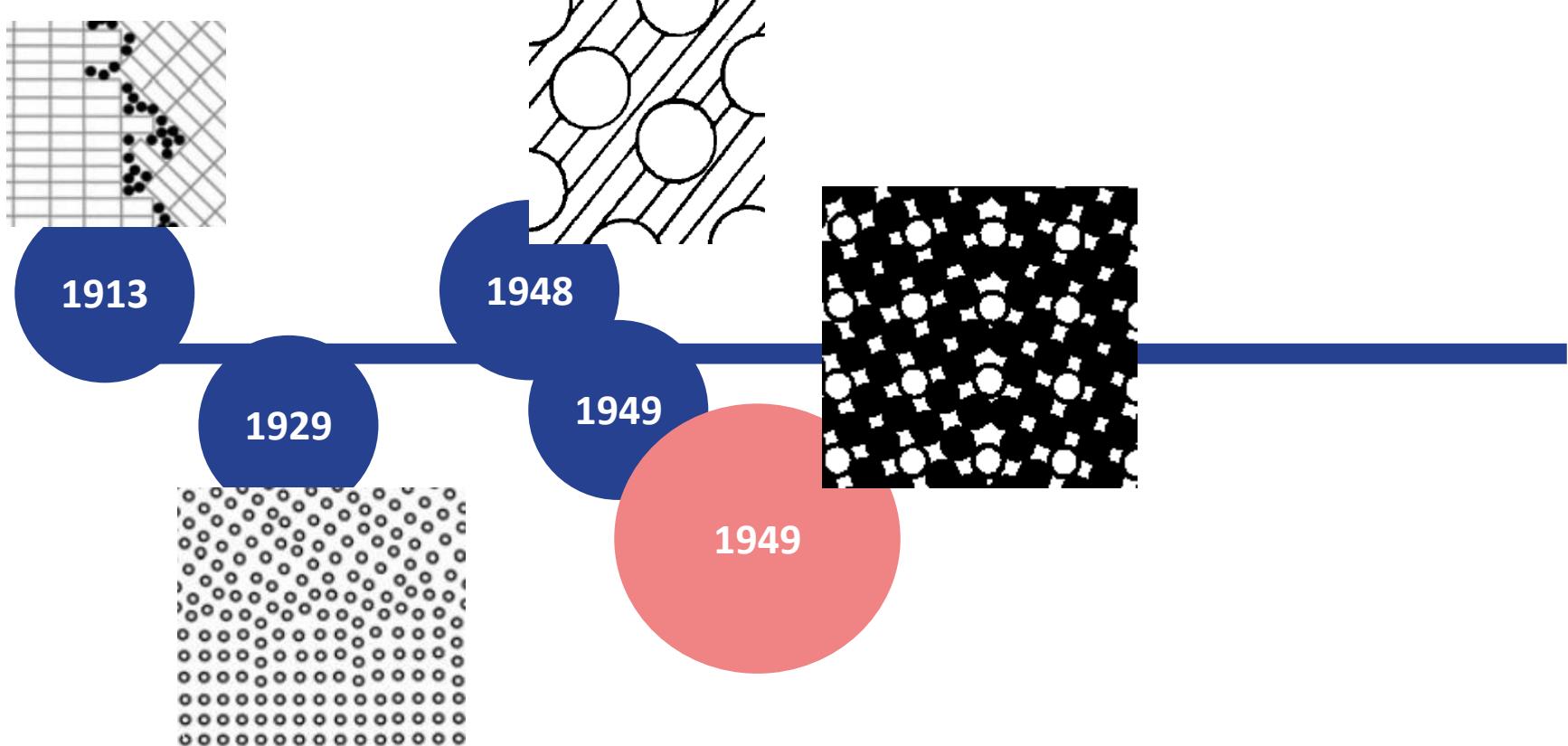
# Модели границ зерен

## Модель Ke (1949)

Граница зерен есть скопление дефектов решетки, ответственных за диффузию, а именно – вакансий или разупорядоченных групп. Скорость скольжения границы определялась аналогично модели Мотта.

Предположение было сделано исходя из наблюдения, что энергия активации скольжения по границам зерна совпадает с известными значениями для самодиффузии тех же металлов.

# Модели границ зерен

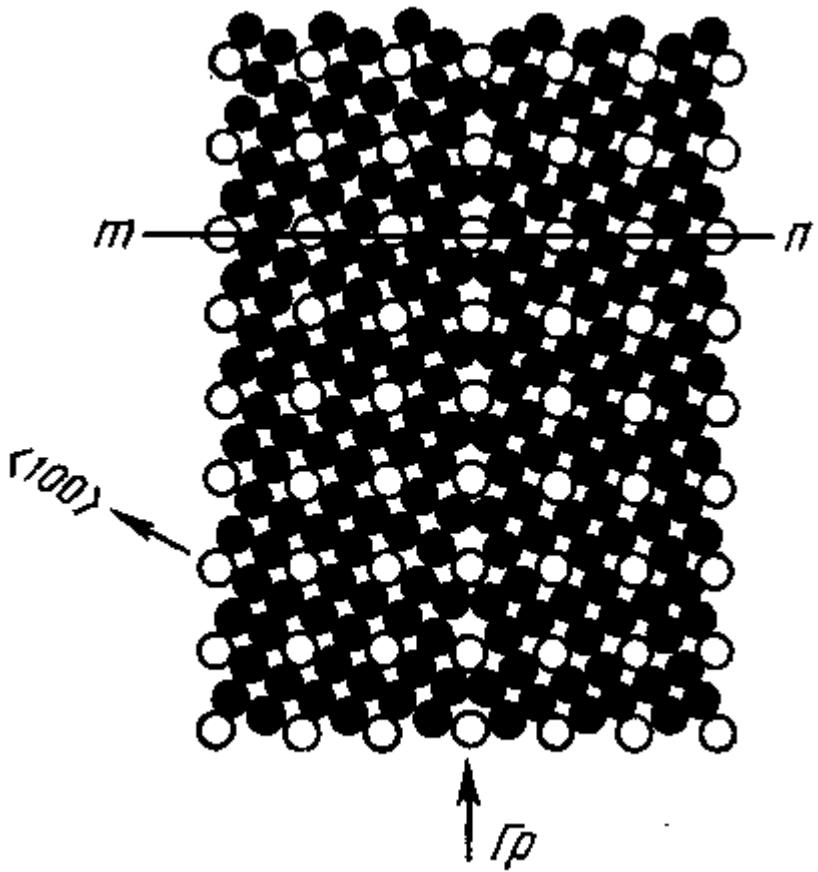


# Специальные границы

В развитии представлений о строении высокоугловых границ большую роль играют так называемые **особые (специальные) границы**, отличающиеся пониженной энергией и отвечающие особым кристаллографическим разориентировкам соседних зерен.

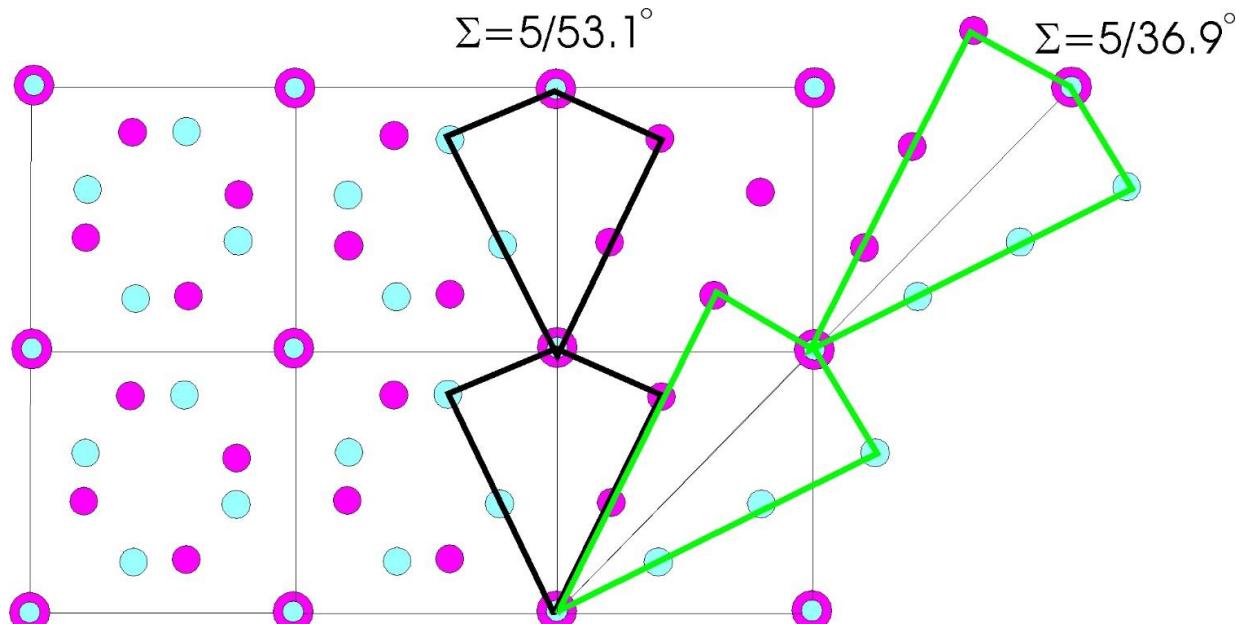
Как показали Кронберг и Вильсон, при развороте двух одинаковых решеток вокруг общей кристаллографической оси на определенный угол, часть узлов одной решетки совпадает с узлами другой решетки.

Граница Кронберга - Вильсона между зернами с примитивной кубической решеткой, развернутыми на  $36,9^\circ$  вокруг оси  $001$ . Светлые кружки — узлы совпадения ( $\Sigma = 5$ )



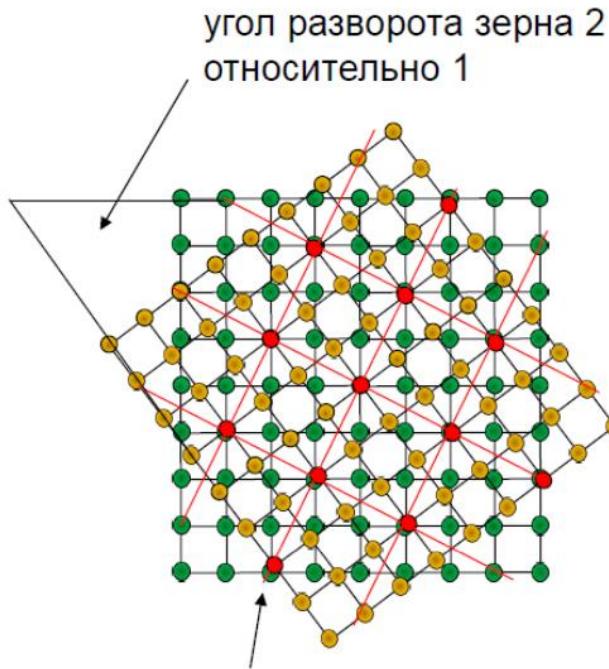
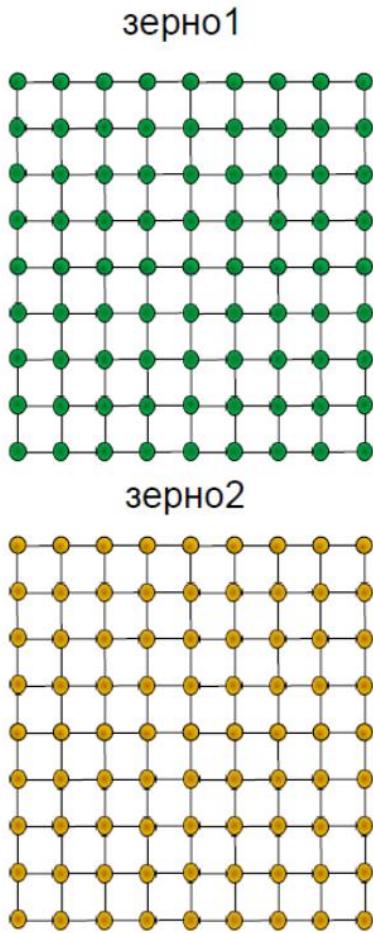
# Решетка совпадающих узлов (РСУ)

## Специальные границы зерен



$\Sigma$ - обратная плотность совпадающих узлов

При развороте двух одинаковых решеток вокруг общей кристаллографической оси на определенный угол, часть узлов одной решетки совпадает с узлами другой решетки. Такие узлы *совпадения* образуют свою трехмерную «сверхрешетку» — *решетку узлов совпадения*, общую для обоих зерен.

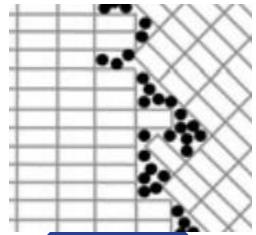


Красными шариками обозначена решётка совпадающих узлов в двух зёрнах. Число атомов в одной ячейке равно 5.

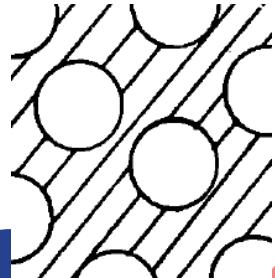
$$\Sigma=5$$

Чем большую плотностью совпадающих узлов содержит граница зерна, тем меньше её энергия и ниже диффузационная подвижность.

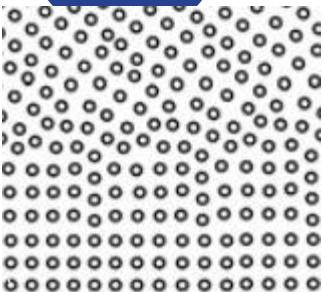
# Модели границ зерен



1913

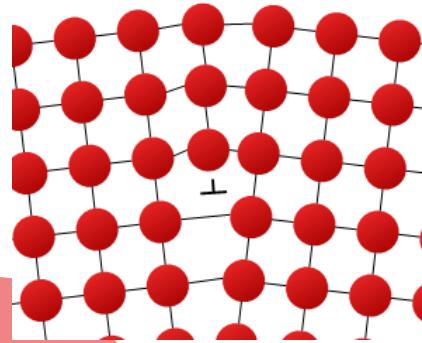


1948



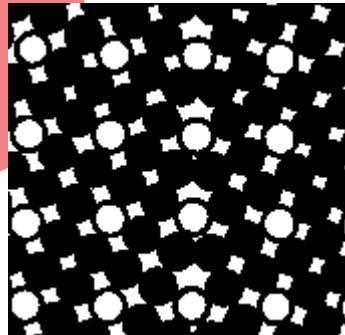
1929

1949



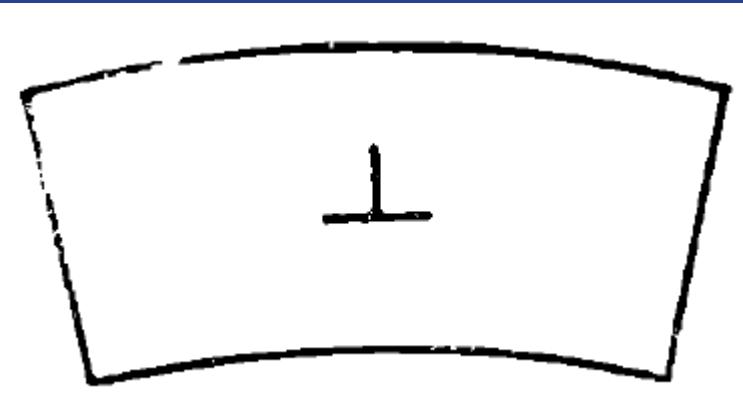
1950

1949



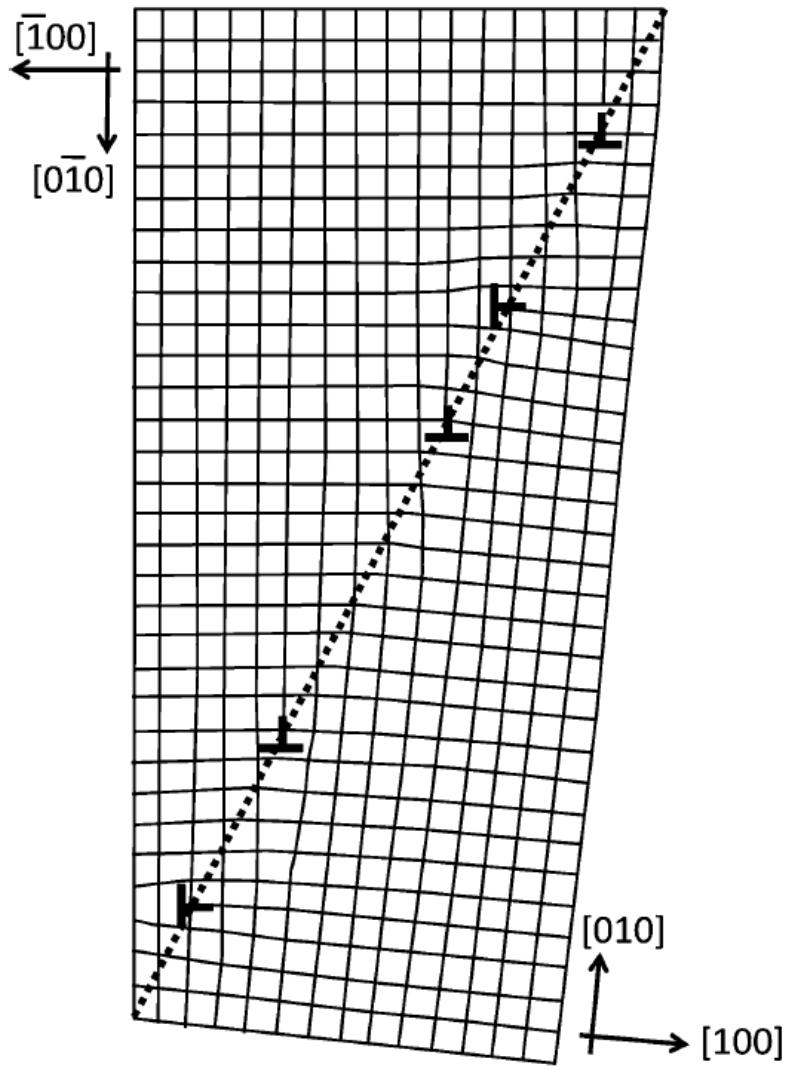
# Модели границ зерен

## Дислокационная модель



Полиэдры отражают характерные структуры ГЗ и могут рассматриваться как структурные единицы. Самые низкоэнергетические границы состоят из полиэдров только одного типа. Полиэдры других типов идентичны областям дислокаций. Концепция структурных единиц и зависимость их структуры от угла разориентации отражает современные представления о ГЗ. Изначально была разработана для жидкости.

# Дислокационная модель. МУГ



Граница кручения

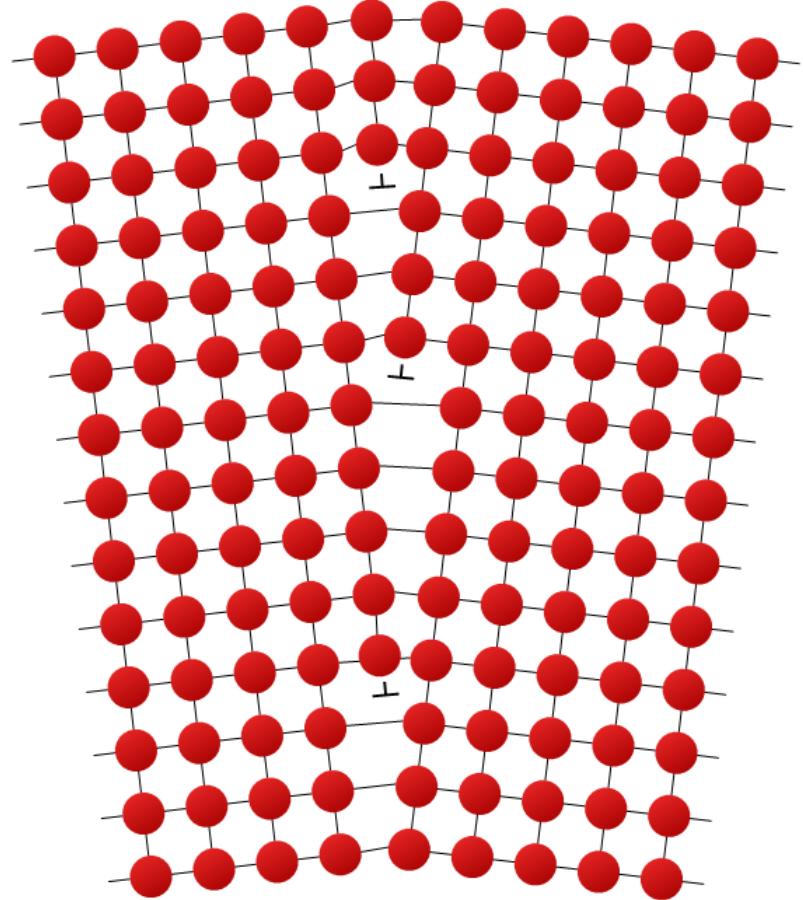


Figure: Low angle grain boundary

Граница наклона

# Дислокационная модель. БУГ

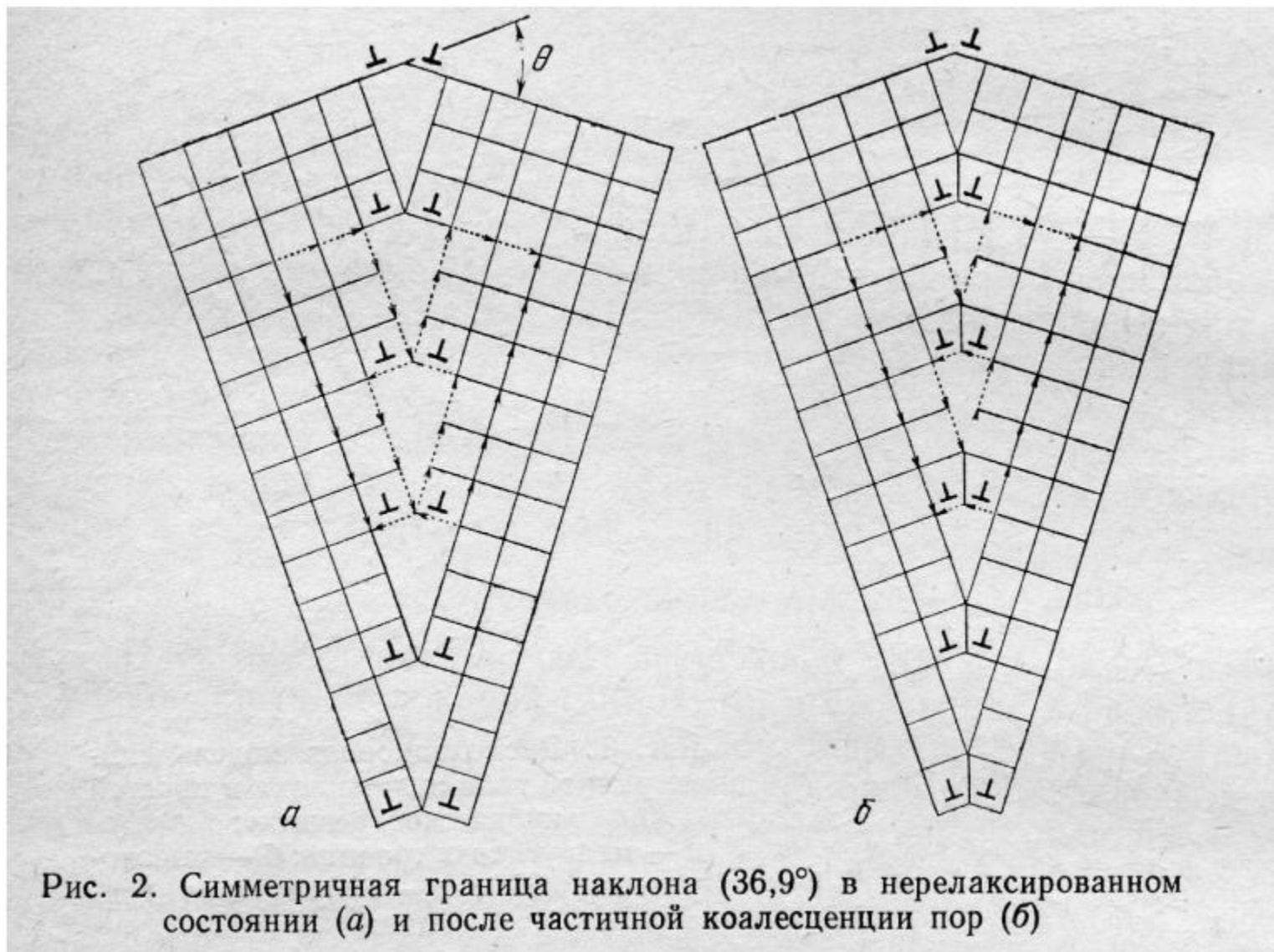
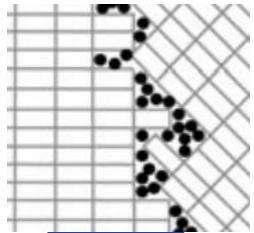
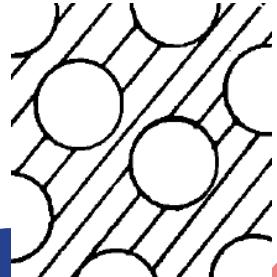


Рис. 2. Симметричная граница наклона ( $36,9^\circ$ ) в нерелаксированном состоянии (a) и после частичной коалесценции пор (б)

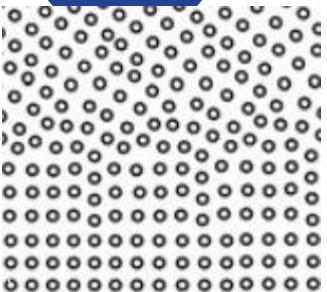
# Модели границ зерен



1913

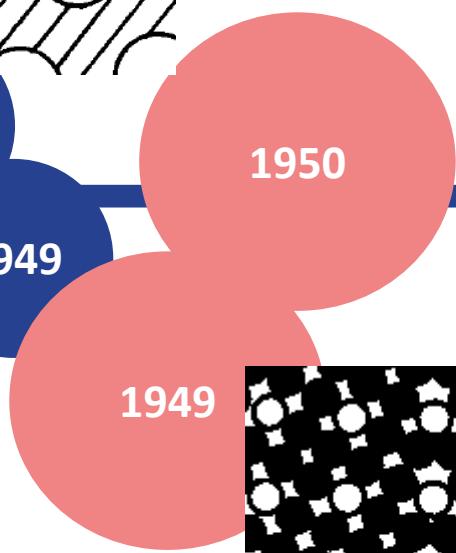


1929

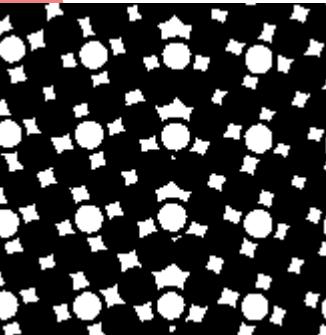


1948

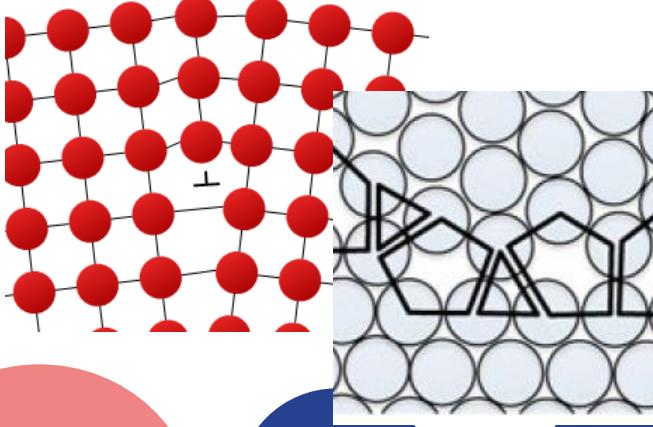
1949



1949

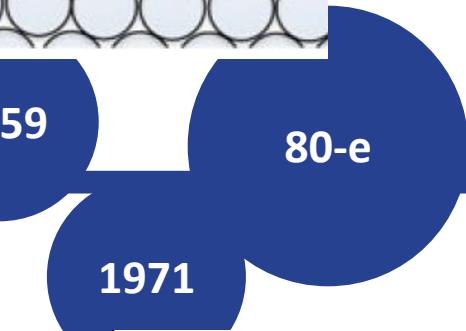


1950

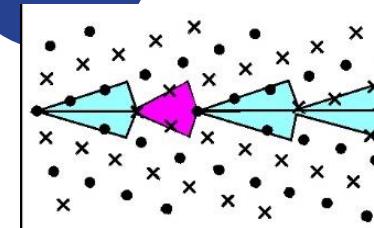


1959

1971

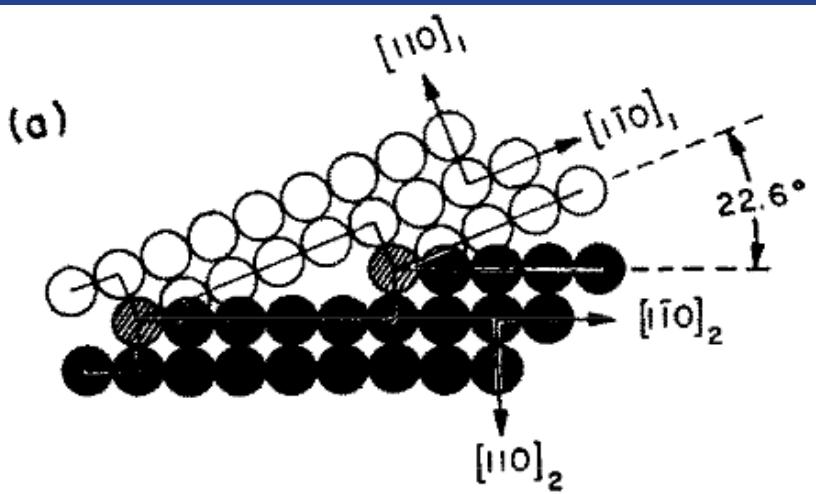


80-е



# Модели границ зерен

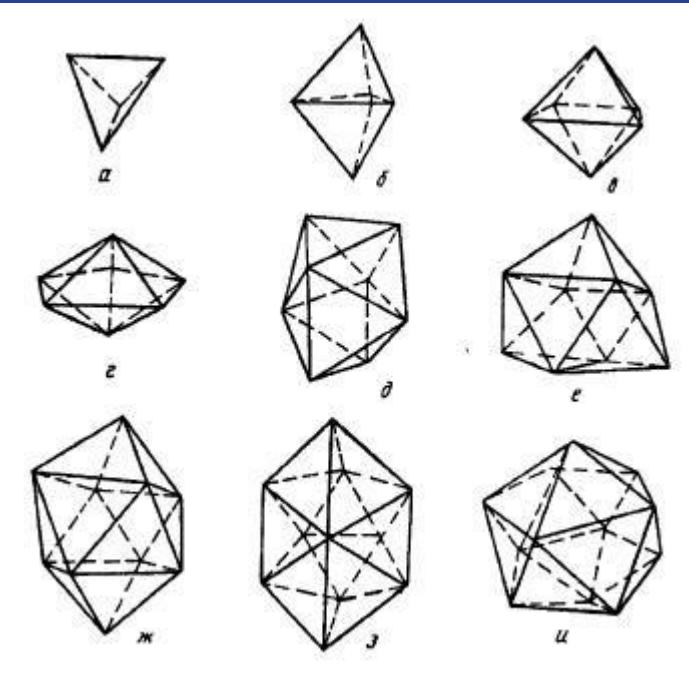
Модель свободного объема(1959)



Из геометрических соображений ясно, что область границы зерна, в силу ее меньшей атомной упорядоченности, обладает некоторым избыточным объемом по сравнению с идеальной кристаллической решеткой. Этот избыточный, «лишний» объем называют свободным объемом границы. Обычно понятие «свободный объем» определяется как разность объемов материала, ограниченного некоторой поверхностью, охватывающей отрезок границы и некоторое число атомов в объеме, и совершенного кристалла, содержащего то же количество атомов

# Модели границ зерен

## Полиэдры Бернала (80-е)



Полиэдры отражают характерные структуры ГЗ и могут рассматриваться как структурные единицы. Самые низкоэнергетические границы состоят из полиэдров только одного типа. Полиэдры других типов идентичны областям дислокаций. Концепция структурных единиц и зависимость их структуры от угла разориентации отражает современные представления о ГЗ. Изначально была разработана для жидкости.

# Полиэдры Берналла

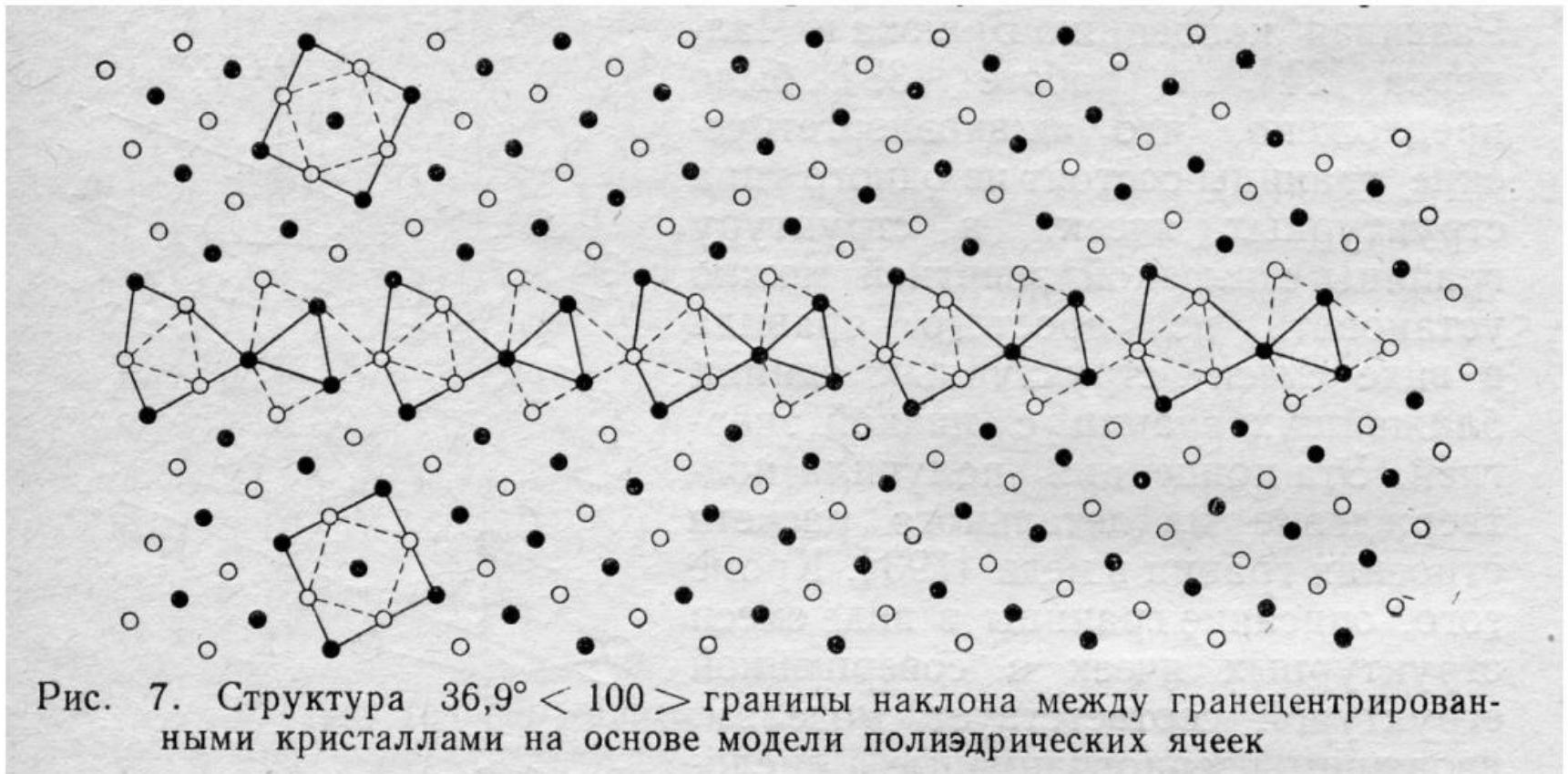


Рис. 7. Структура  $36,9^\circ <100>$  границы наклона между гранецентрированными кристаллами на основе модели полиэдрических ячеек

# Модель структурных единиц

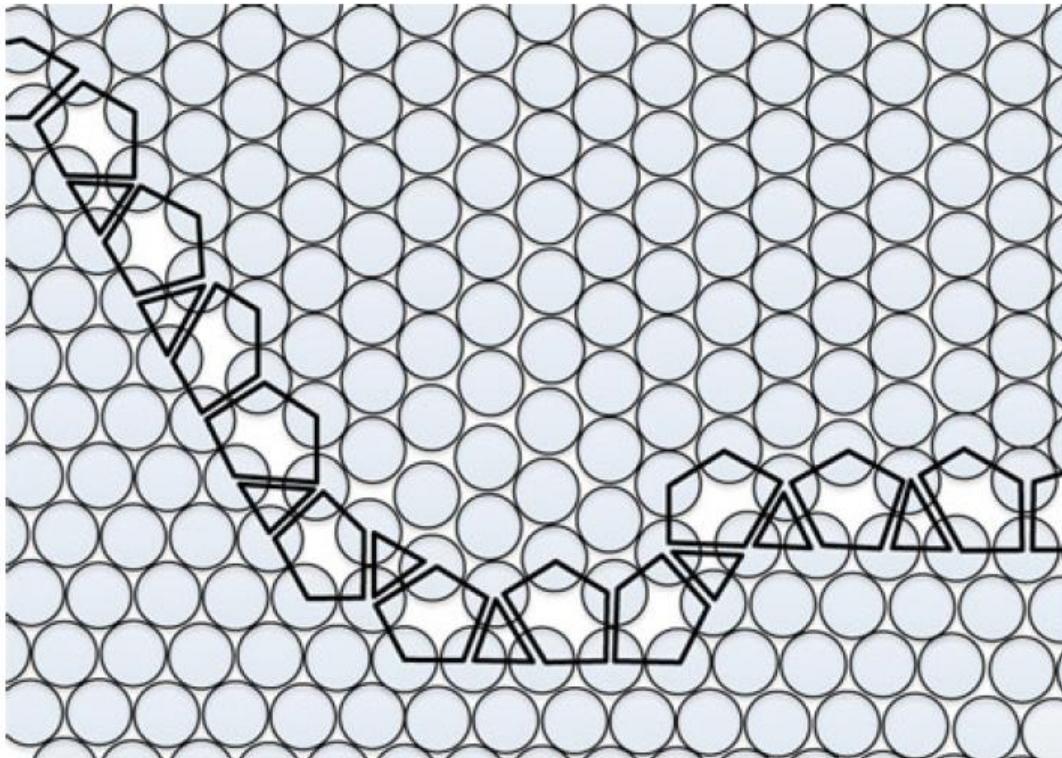


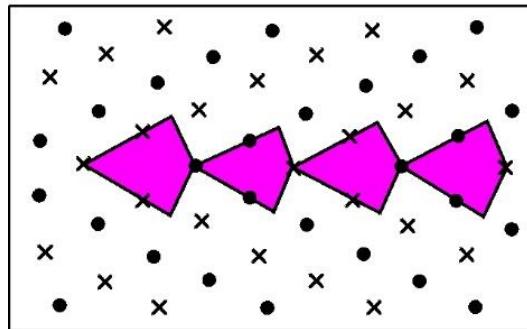
Иллюстрация модели многогранного повторяющегося элемента для зерна граница между двумя ближайшими упакованными кристаллами твердой сферы. Граница состоит из пятиугольников и треугольников.

[Rohrer et al. 2011]

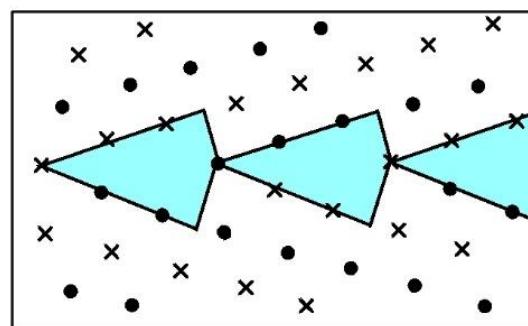
# Модель структурных единиц

Предпочтительные границы наклона [110]

$$\Sigma=11 \text{ (113) } 129,52^\circ$$

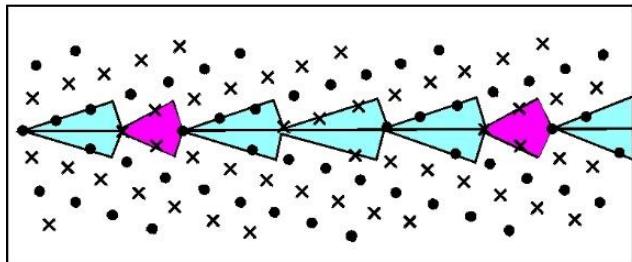


$$\Sigma=27 \text{ (115) } 148,41^\circ$$

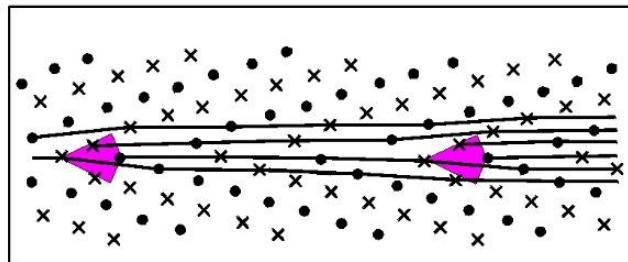


Произвольные границы наклона [110]

$$\Sigma=89 \text{ (229) } 145,10^\circ$$



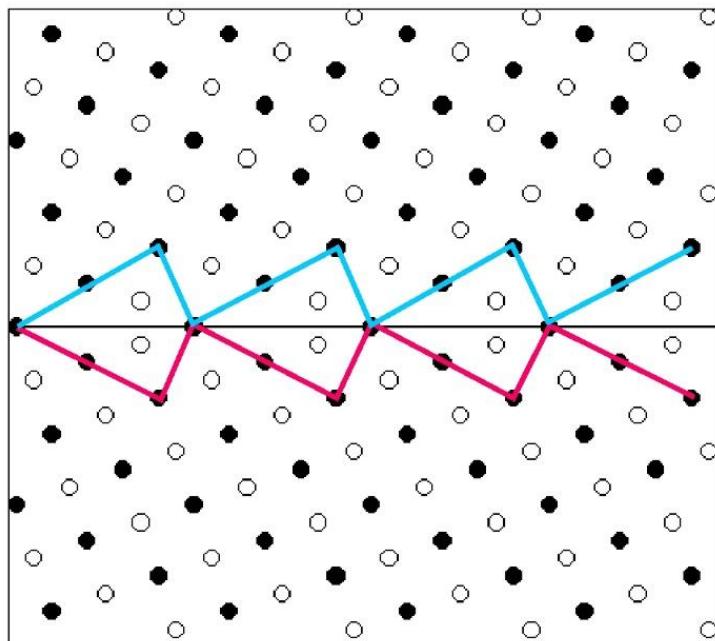
Структурные ЗГД в границе  $\Sigma=89$



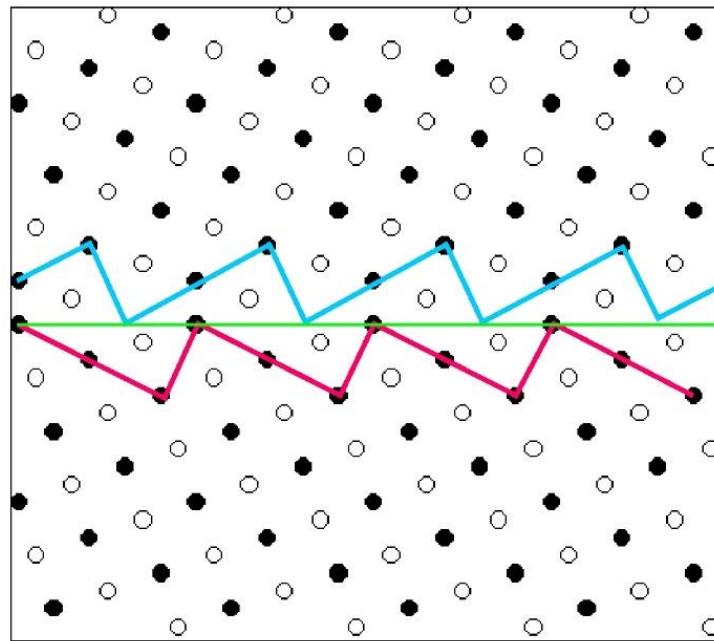
(A.P. Sutton, V. Vitek, 1980-1983)

# Границы зерен с неоптимизированным жестким смещением

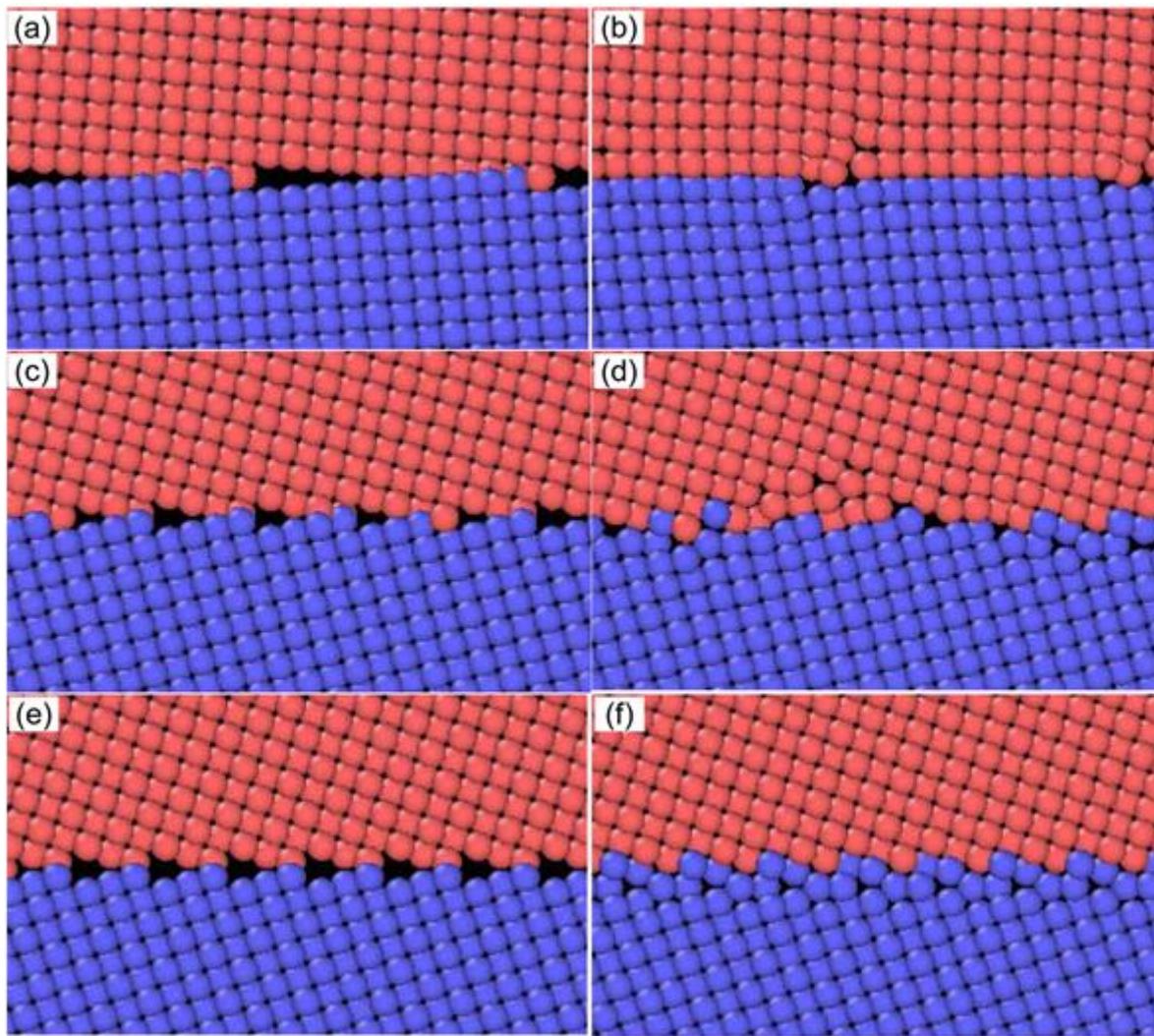
$\tau=0$



$\tau$

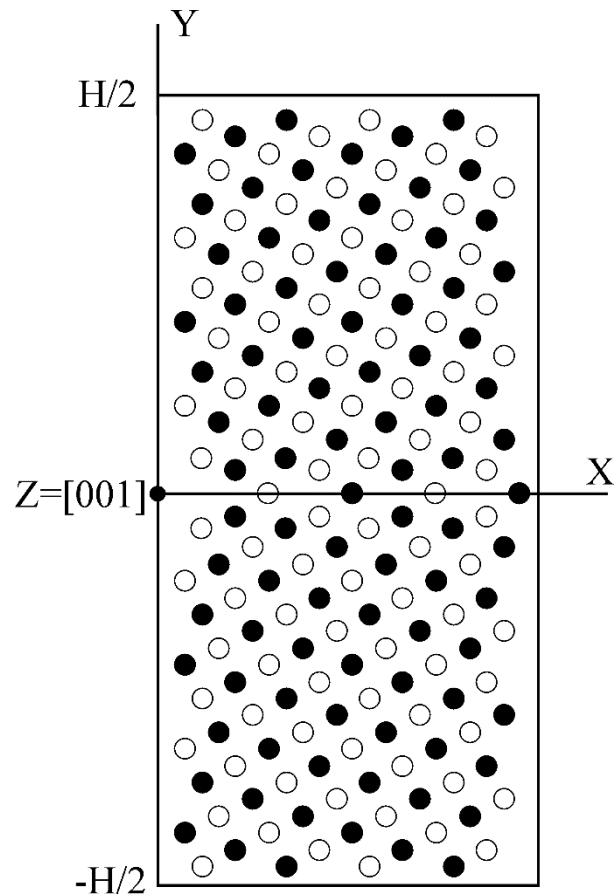


# Релаксация расчетной ячейки

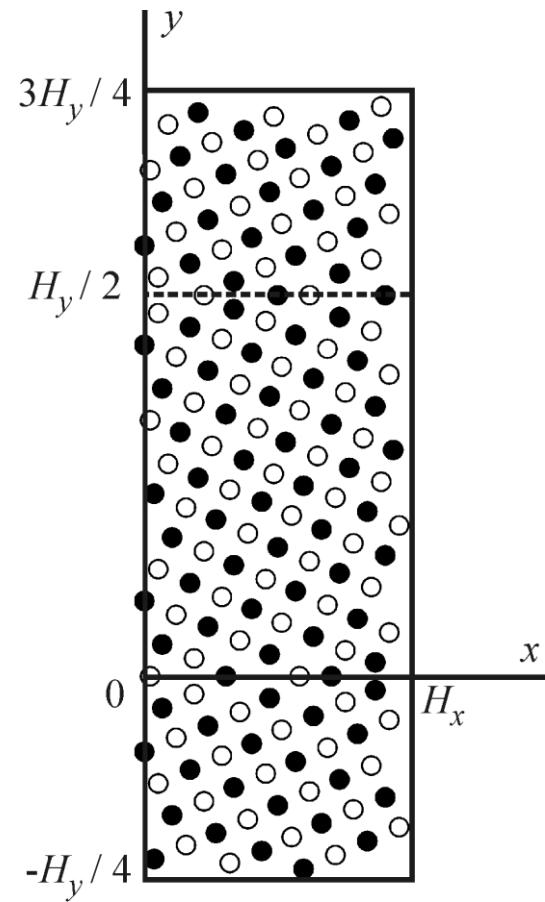


Угол разориентации  $10^\circ$  ((a) и (b)),  $30^\circ$  (c) и (d),  $36.9^\circ$  (e) и (f)

# Расчетные ячейки с границами наклона [001]

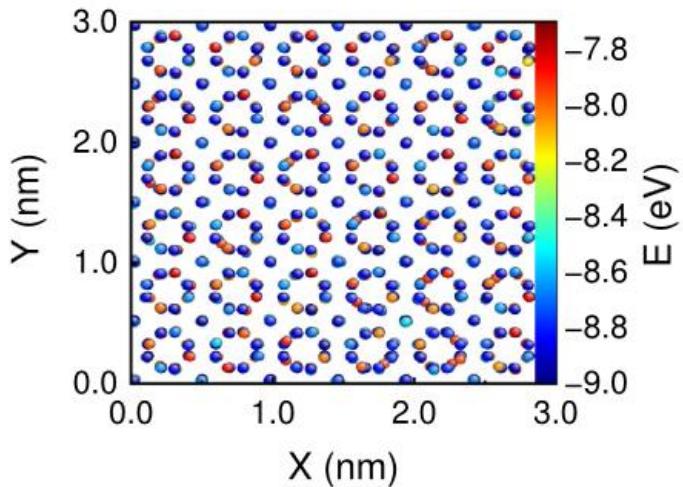


Со свободной  
поверхностью

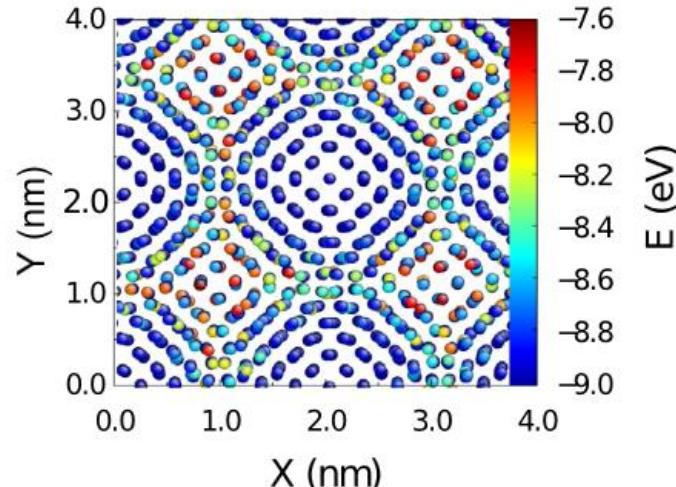


Периодические  
границы условия

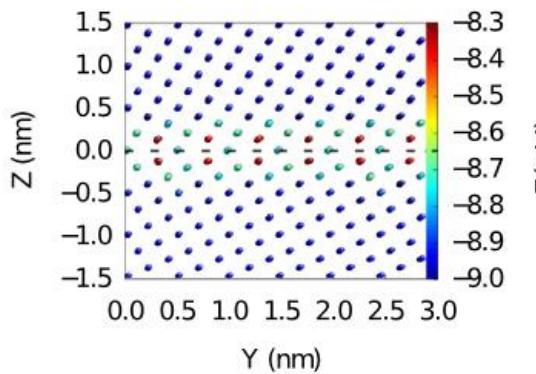
# Границы наклона и кручения



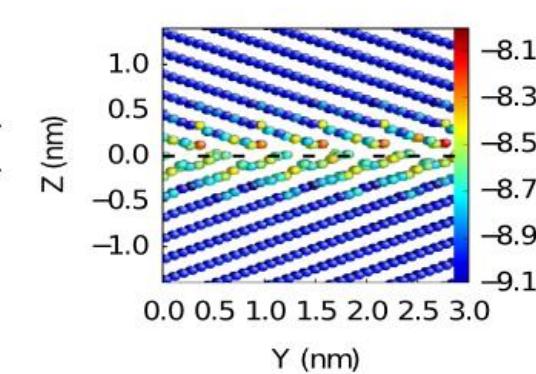
(a)  $\Sigma 5Twist$



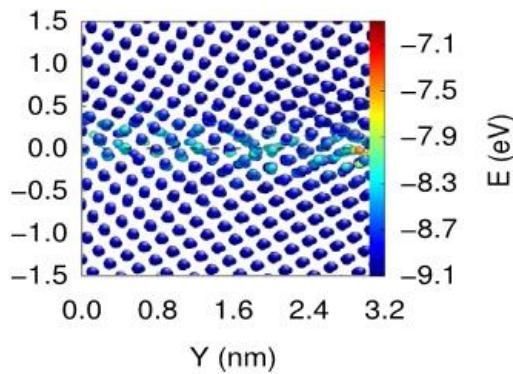
(b)  $\Sigma 85Twist$



(c)  $\Sigma 5Tilt$

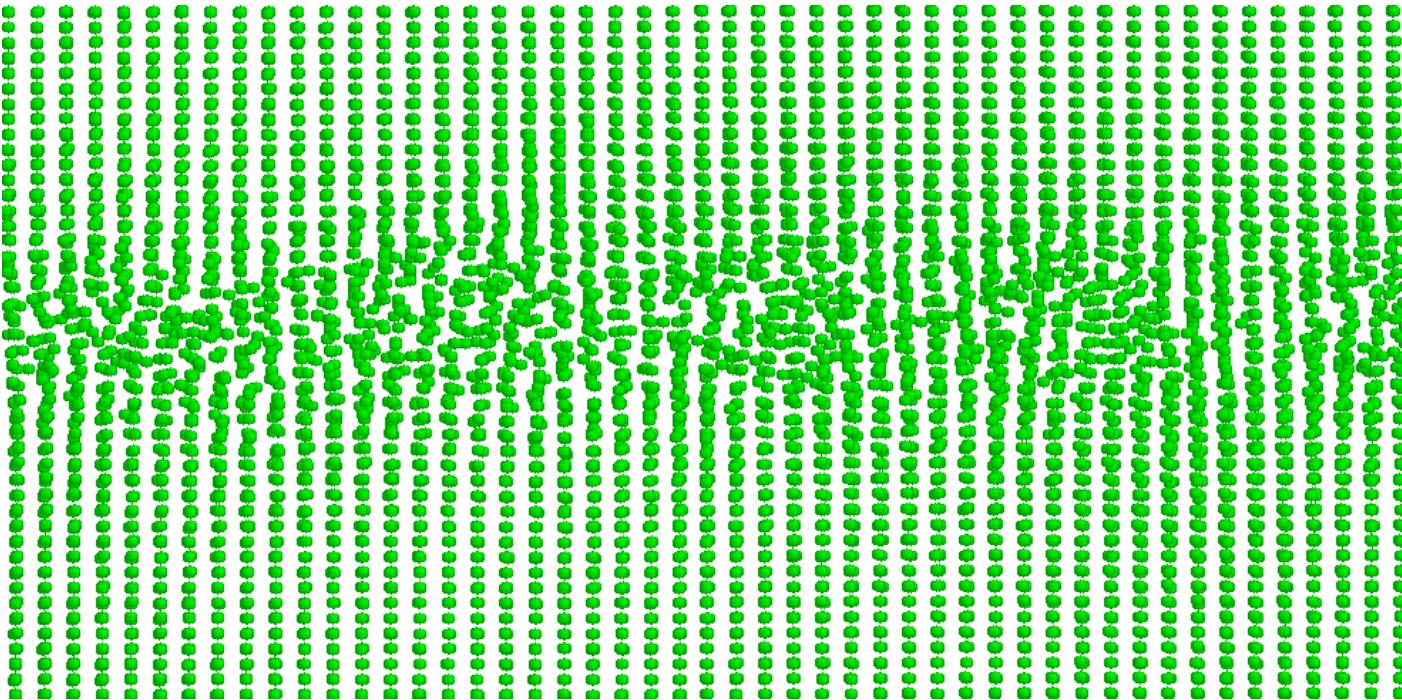


(d)  $\Sigma 21Tilt$

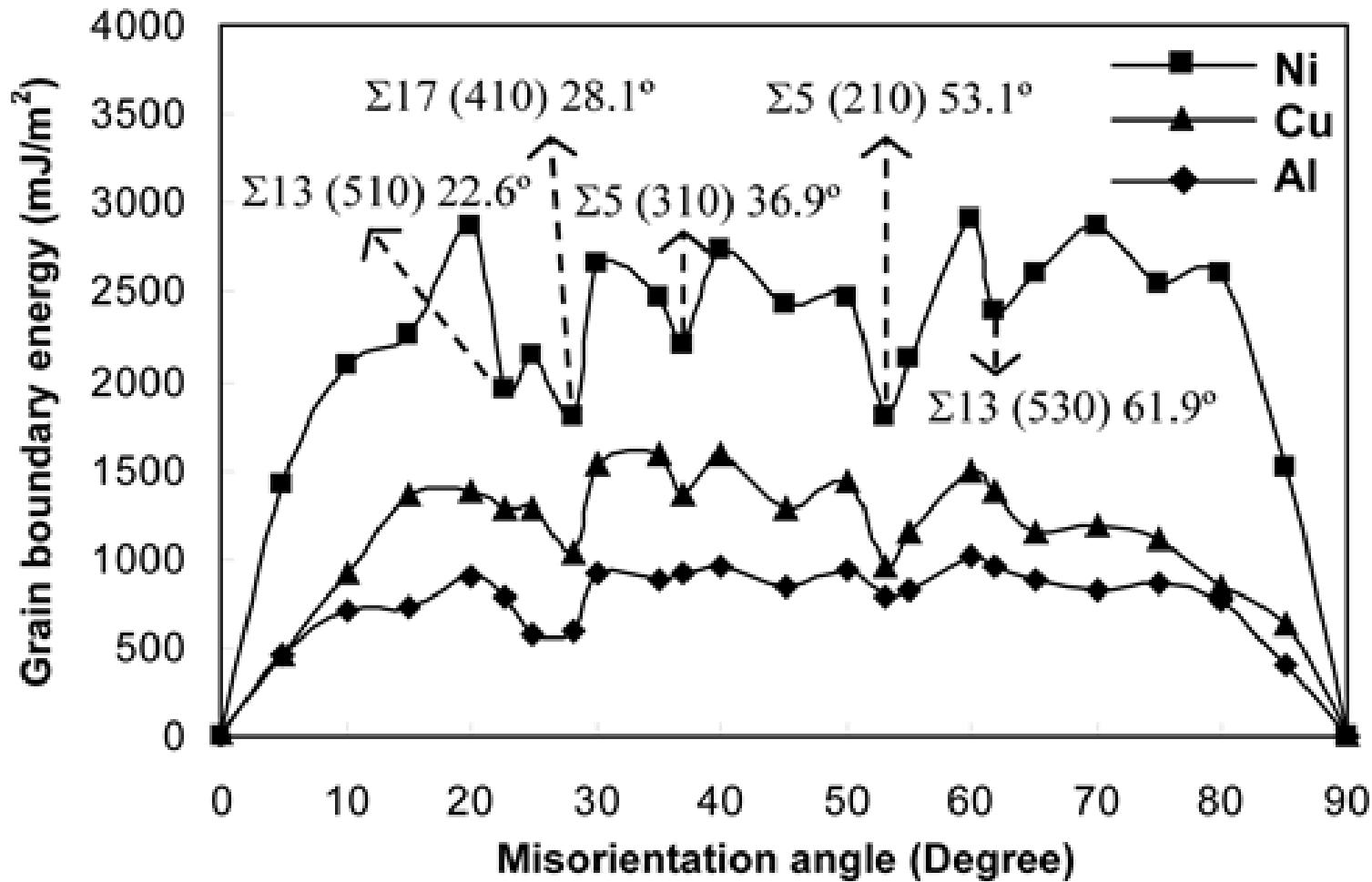


(e)  $\Sigma 85Tilt$

# Границы зерен общего типа



# Энергия границы зерна



# Неравновесные ГЗ

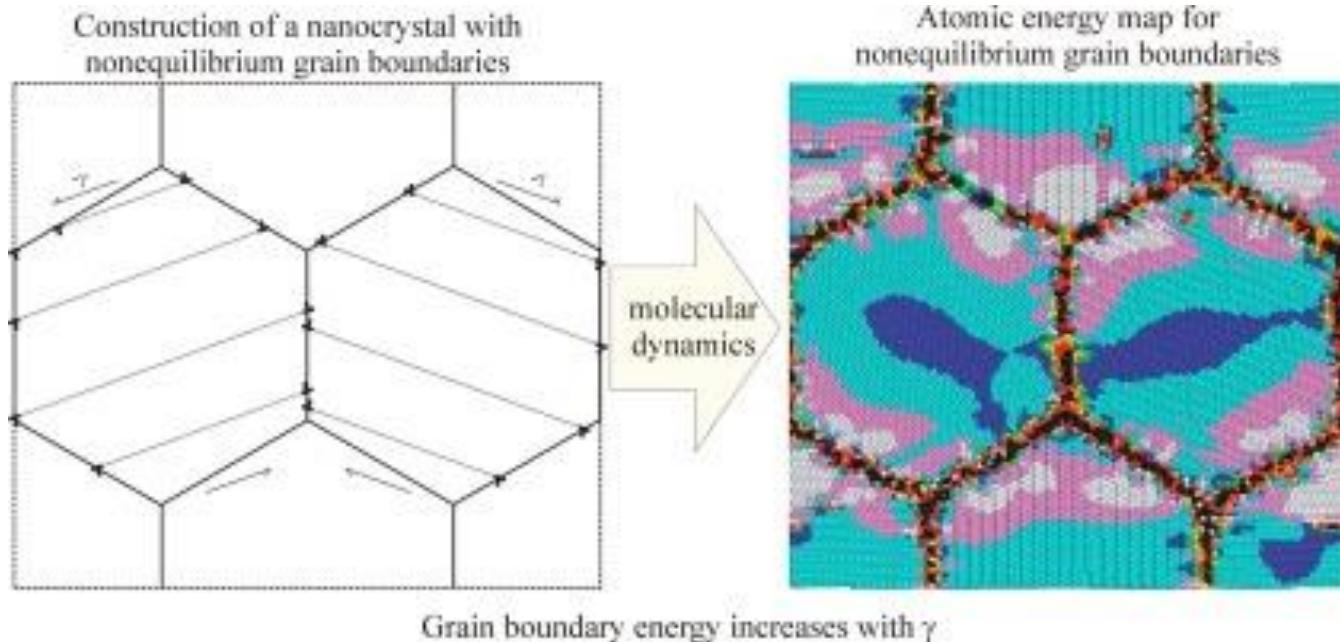
Рассматривая структуру границ в неравновесных условиях, встречающихся при некоторых процессах в твердом теле, таких, например, как рекристаллизация и зернограничное проскальзывание, а также адсорбция границами вакансий и решёточных дислокаций, выдвинуты следующие утверждения:

- i) Подвижность атомов в неравновесных границах зёрен выше, чем в границах с низкоэнергетической структурой. Это означает, что их структуры различны.
- ii) Отличие в структуре зависит от сил, действующих на неравновесную границу.
- iii) Структура неравновесных границ зёрен не является аморфной.

Понятие неравновесных границ зёрен используют для описания границ зёрен, обладающих повышенной энергией и/или обнаруживающих аномалии в кинетических (диффузионных) свойствах.

# Неравновесные ГЗ

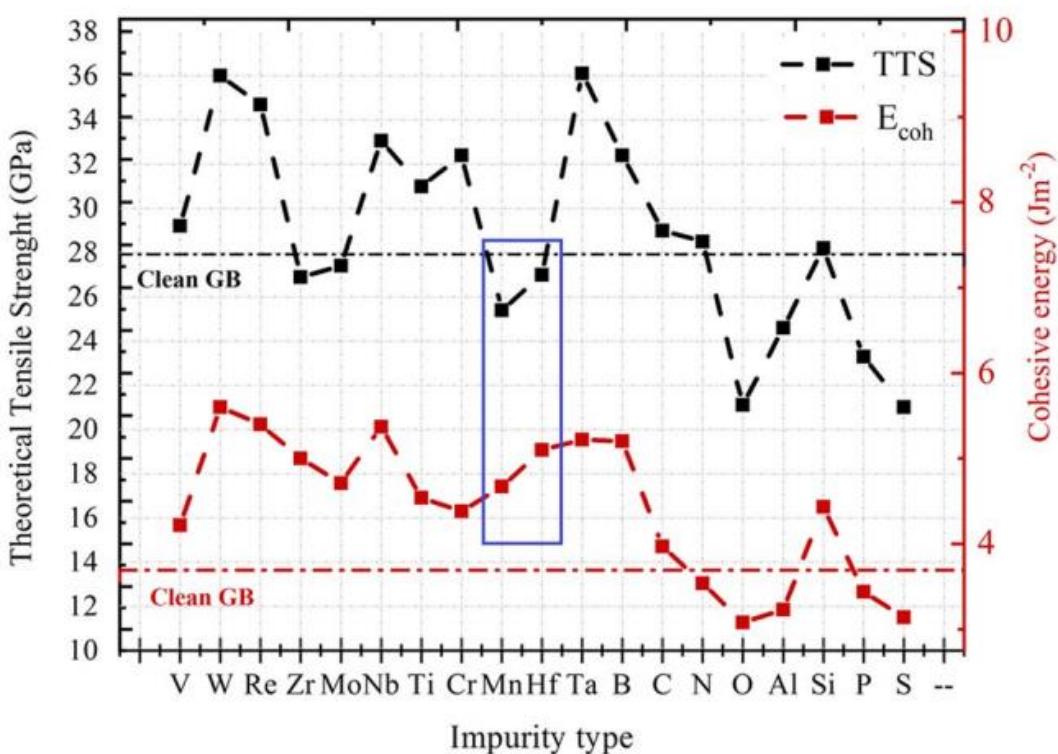
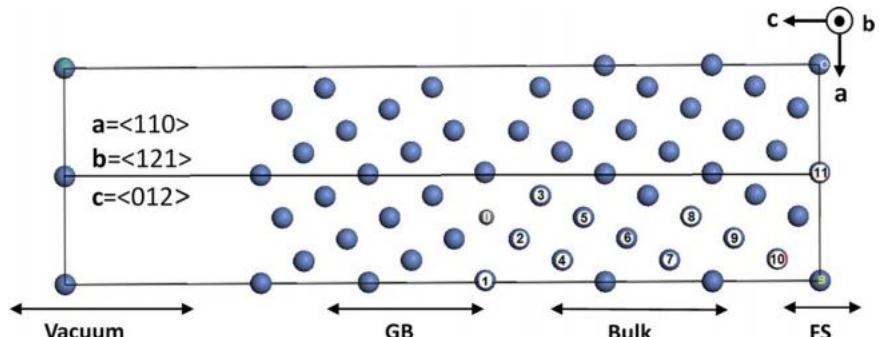
[Nazarov et al. 2018]



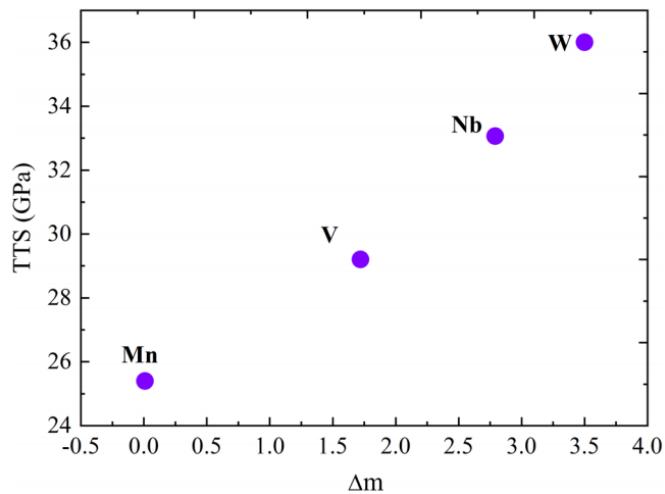
Атомистическая модель хорошо описывает структуру, дальнодействующие поля напряжений и энергию неравновесных ГЗ. Совместное действие внутренних напряжений, вызванных наличием ЗГД и приложенным напряжением-сжатием, приводит к асимметричному процессу генерации решеточных дислокаций неравновесными ГЗ и их скольжению по зернам. Этот процесс приводит к эффективному устранению зернограничных дислокаций из ГЗ и ослаблению их структуры, энергии и дальних полей напряжений.

# Специальная граница $\text{Ni}\Sigma=5$

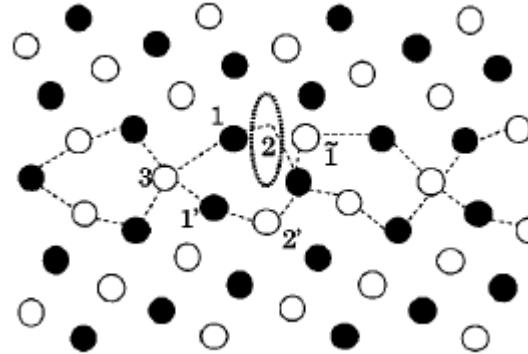
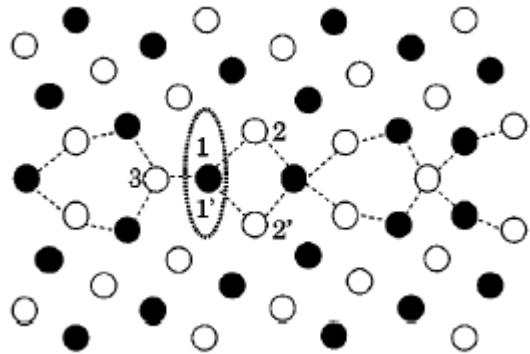
Влияние примесей в границе зерна  $\text{Ni}\Sigma=5$  на прочность материала и его окрупчивание.



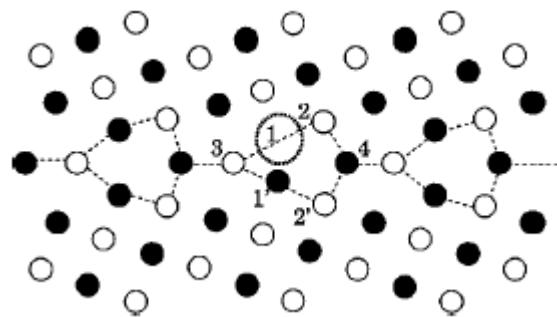
[Bentra et al., 2019]



# Ваканции в специальных ГЗ

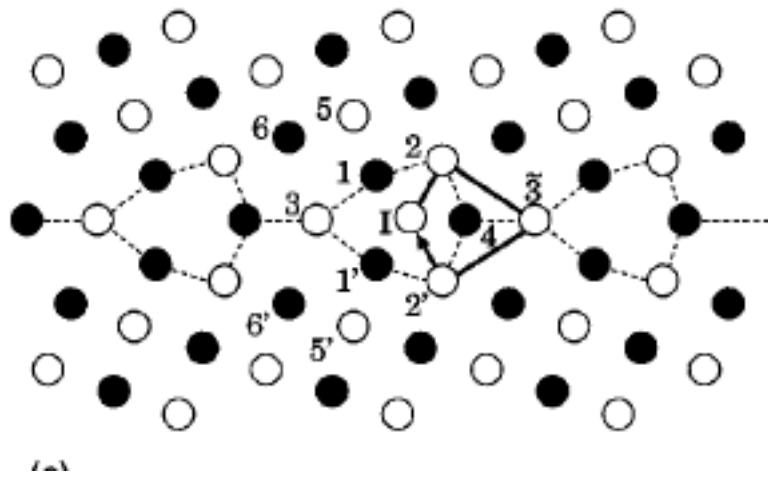
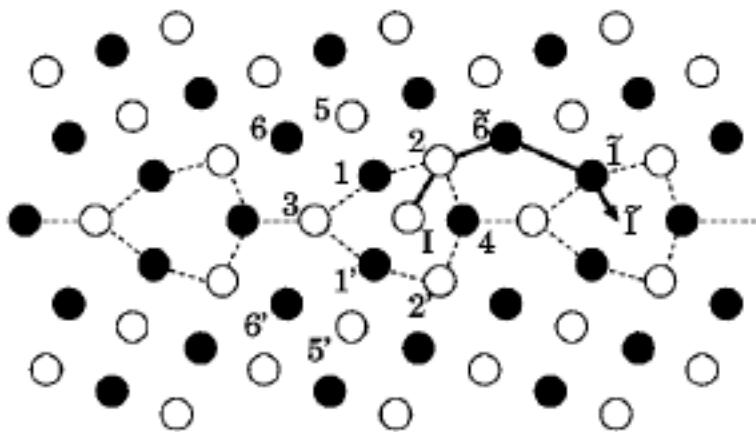
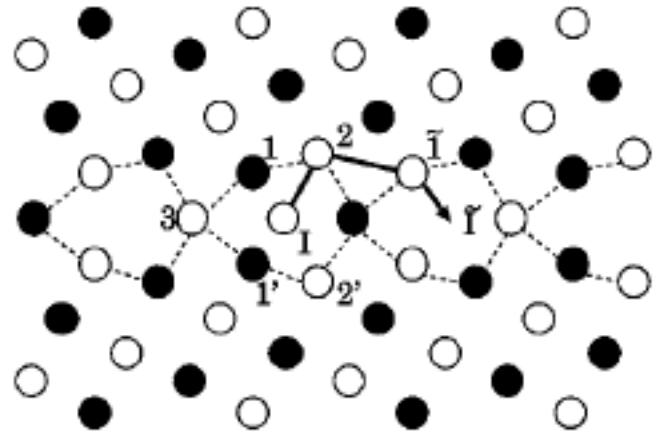


:  $\Sigma = 5$  (210)[001] !

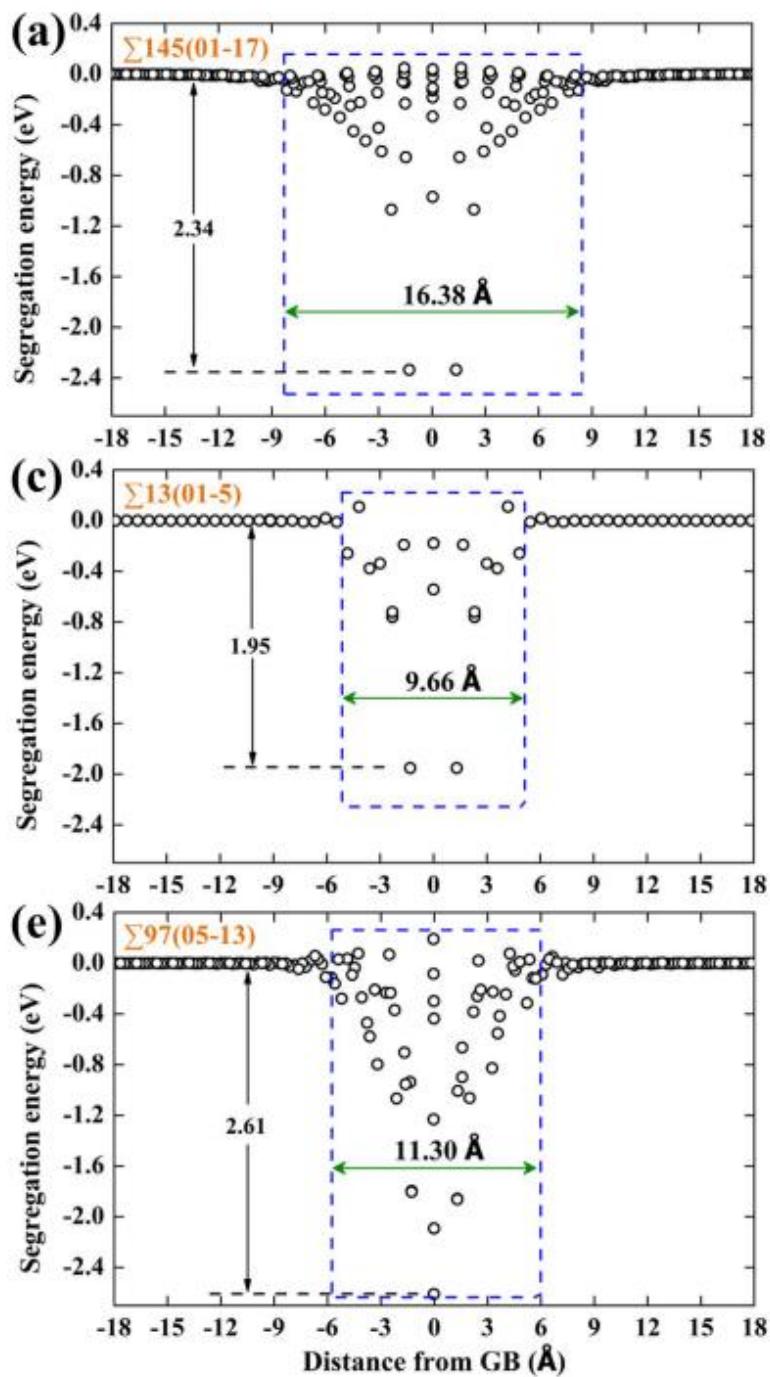
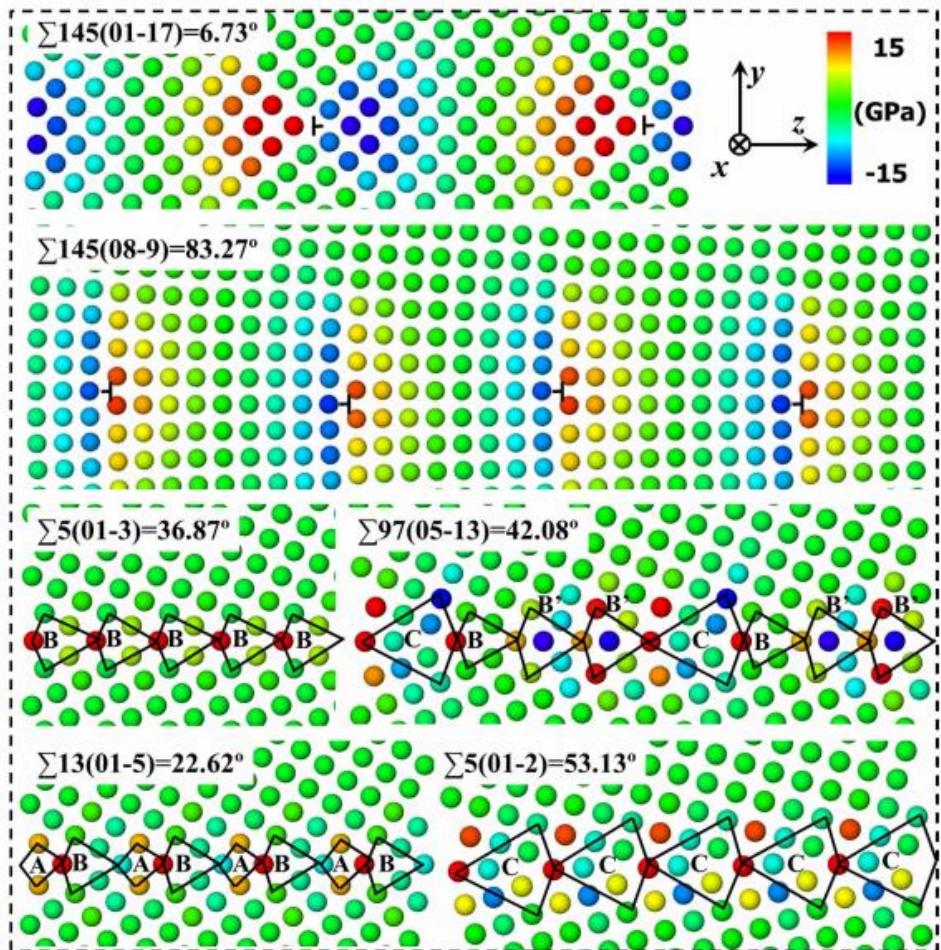


$\Sigma = 5$  (310)[001]

# Межузельные механизмы



# Взаимодействие с вакансиями



# Миграция ГЗ

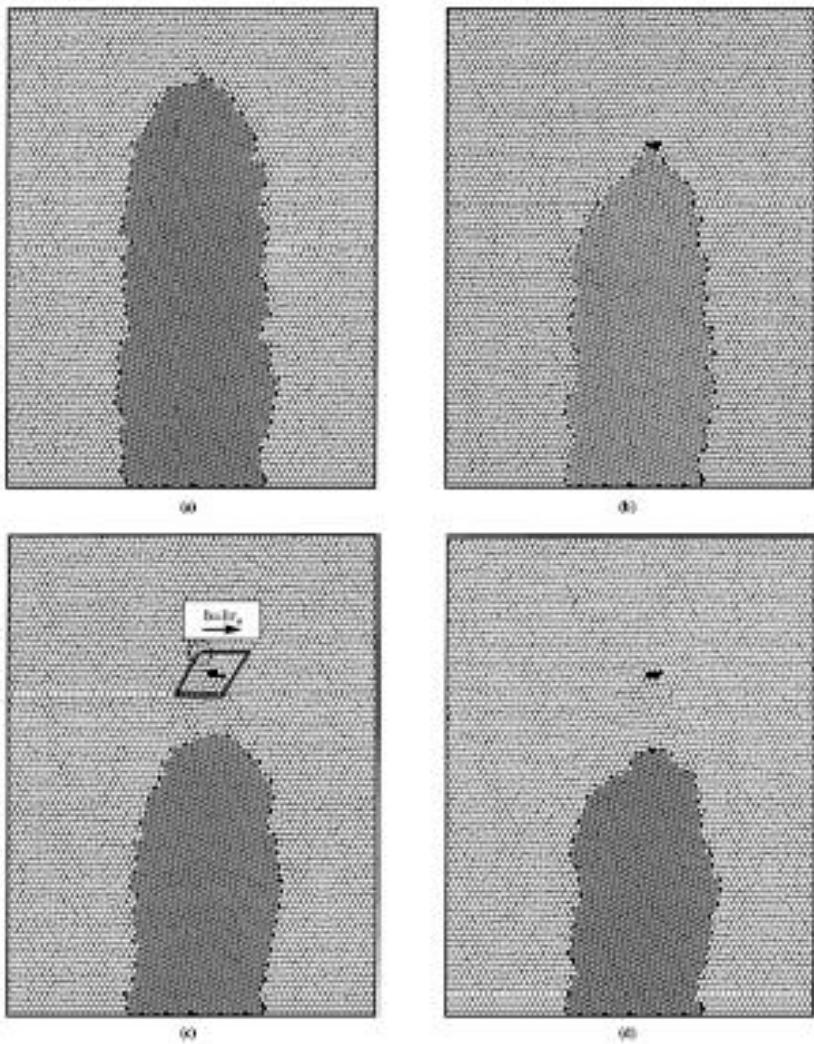
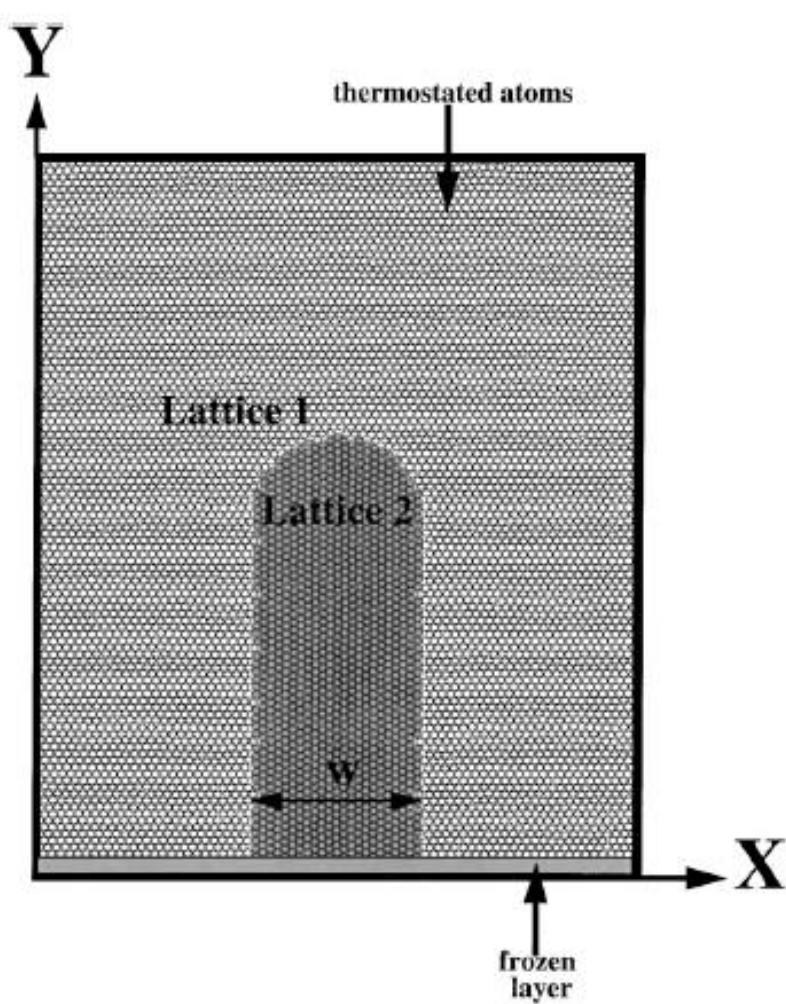
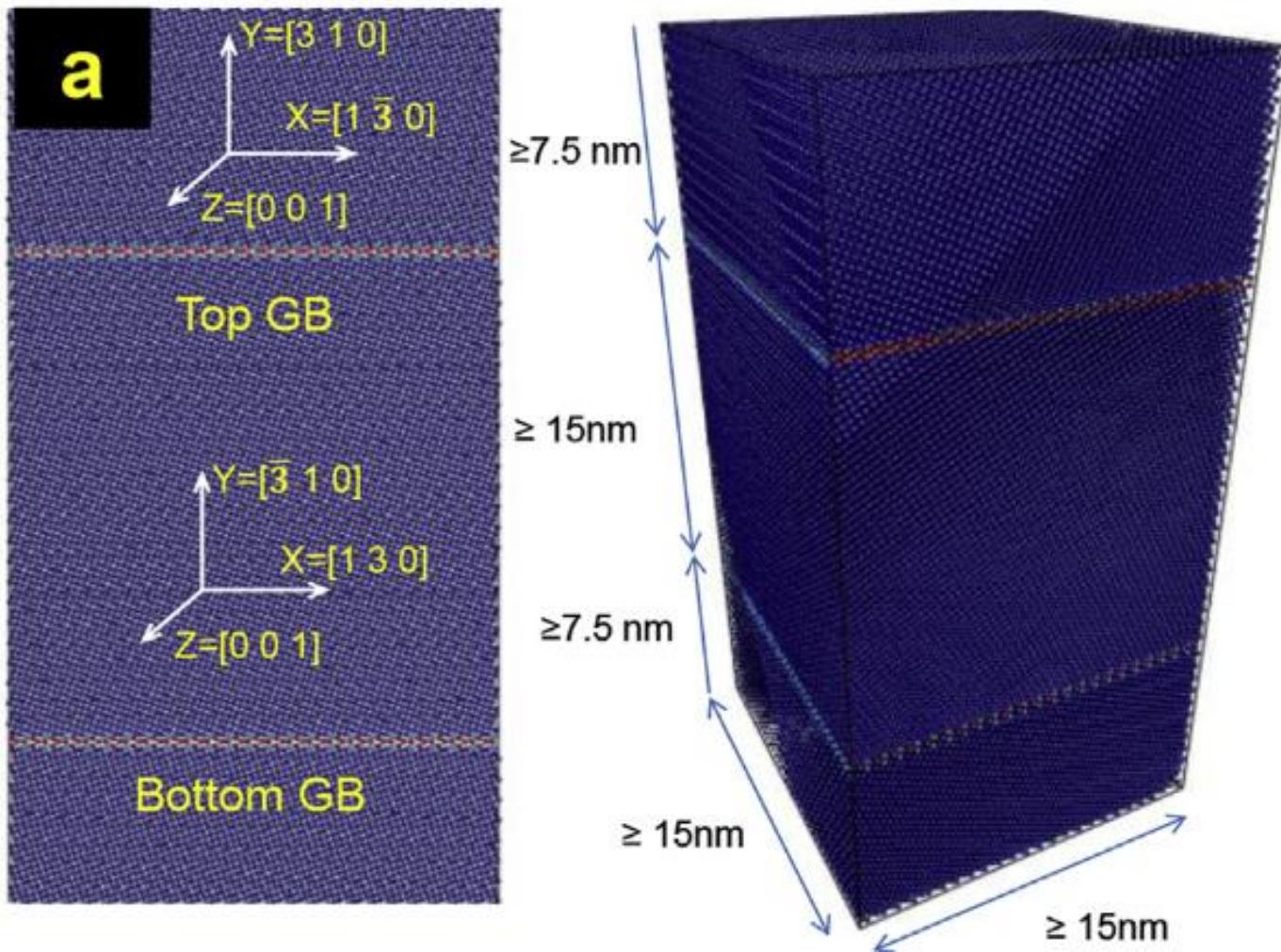


Figure 4. The temporal evolution of the atomic configuration of the rotating half-loop ( $T = 0.175\kappa/2$  and  $\nu = 21\nu_0$  and  $\Sigma = 7(10.12^\circ)3$ , for which the half-loop annihilation plot was shown in Fig. 3. Figures (a)-(d) correspond to  $t = 50, 200, 350, 440, 510, 615, 760, 890$  and  $967t$ , respectively. Figure 4(c) shows a Burgers loop down around a void.

(Continued on next page)

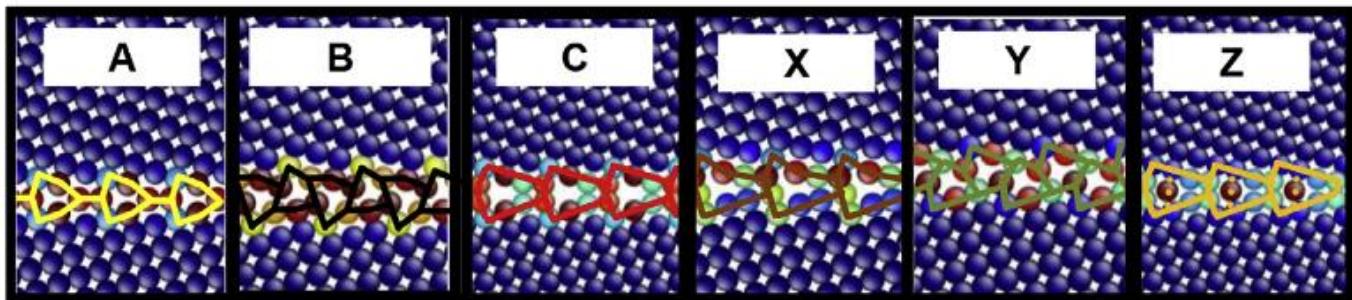
# Модель бикристалла



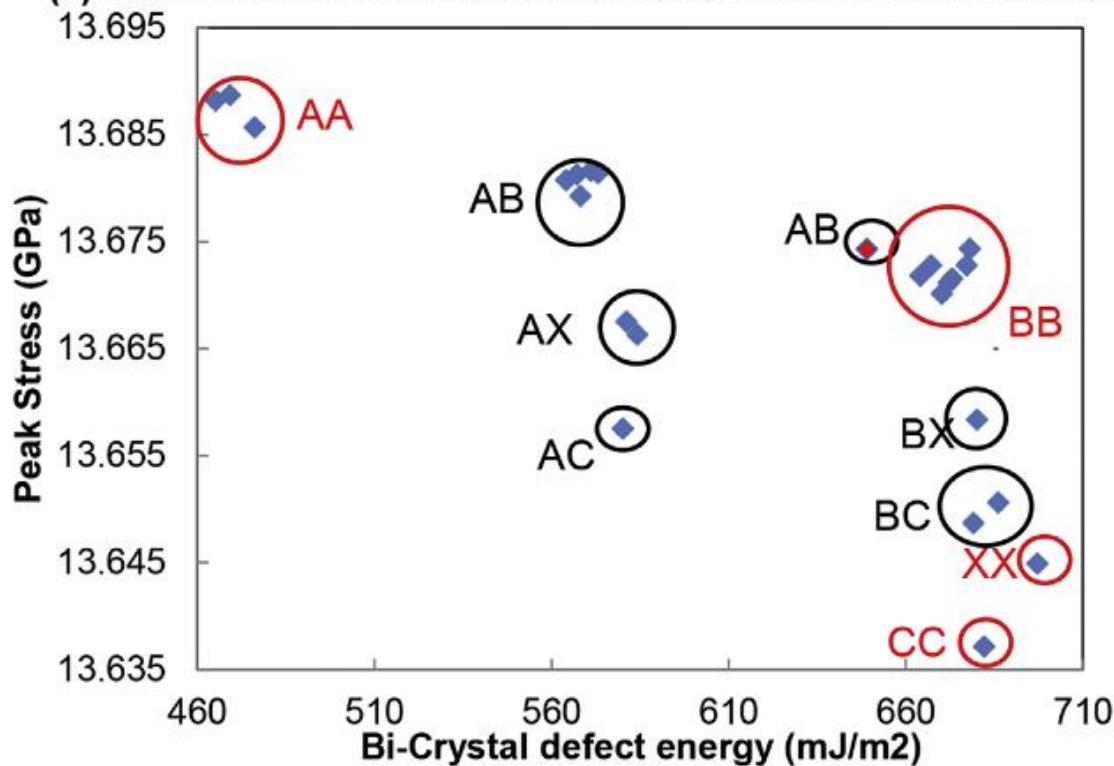
[Burberry et al, 2016]

# Дислокационная модель. БУГ

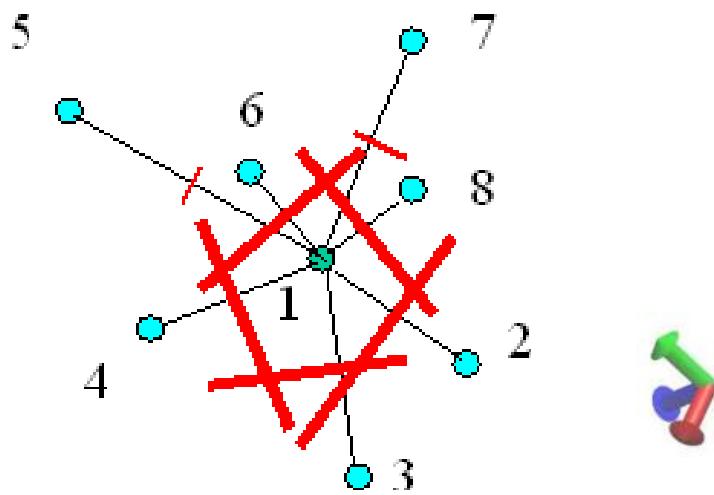
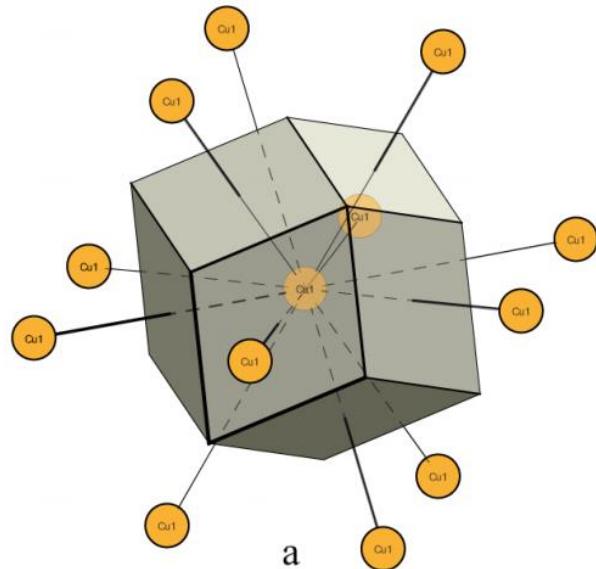
[Burberry et al, 2016]



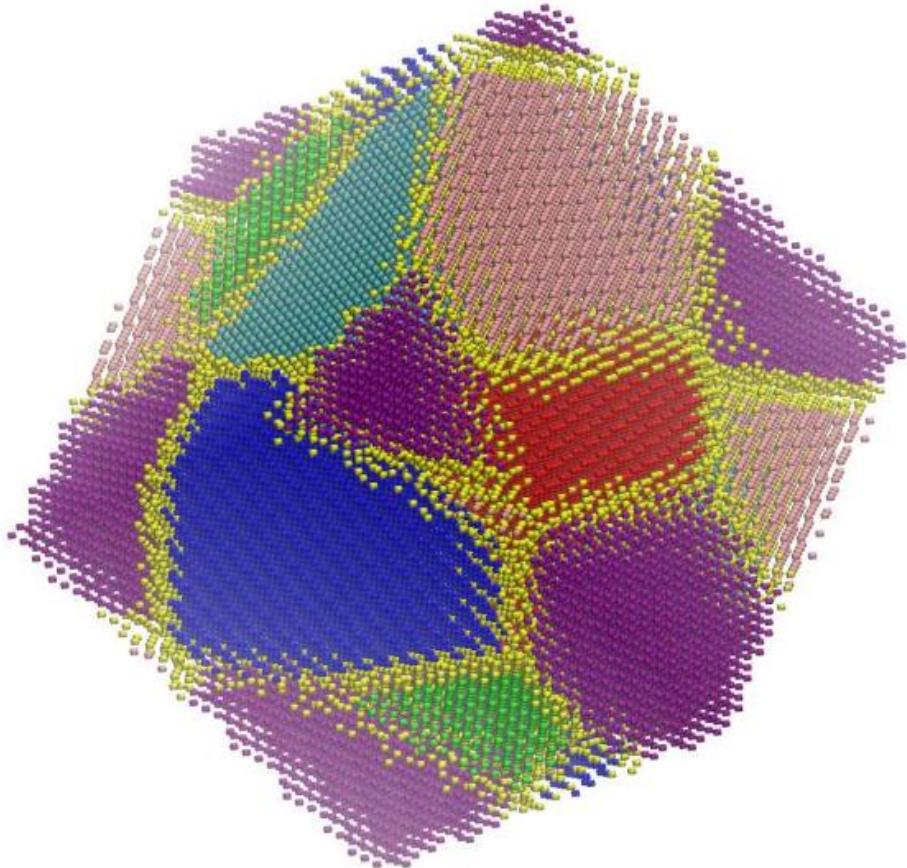
(a): Reference for characteristic metastable 0K GB structures



# Полиэдры Вороного

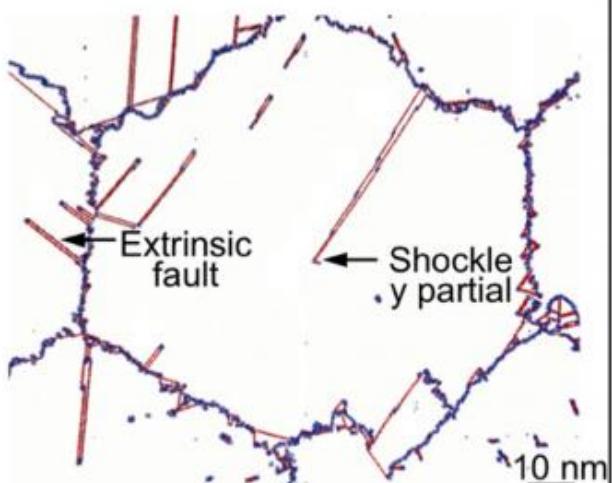


**Полиэдры Вороного** – геометрическое место точек, которые лежат ближе к данному атому, чем к любому другому атому рассматриваемой системы атомов



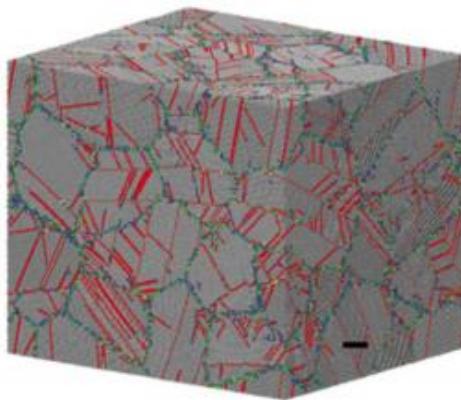
# Моделирование поликристаллов

Yamakov et al. (2002)



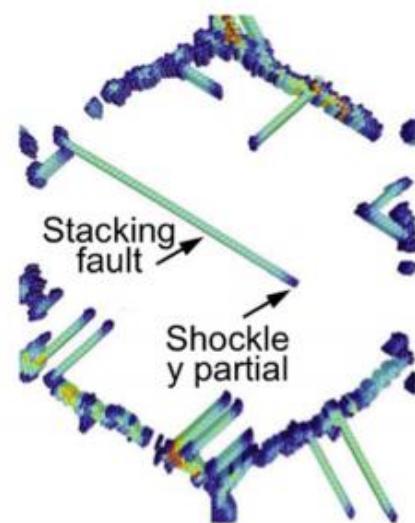
Twin nucleation from  
grain boundary

Li et al. (2010)



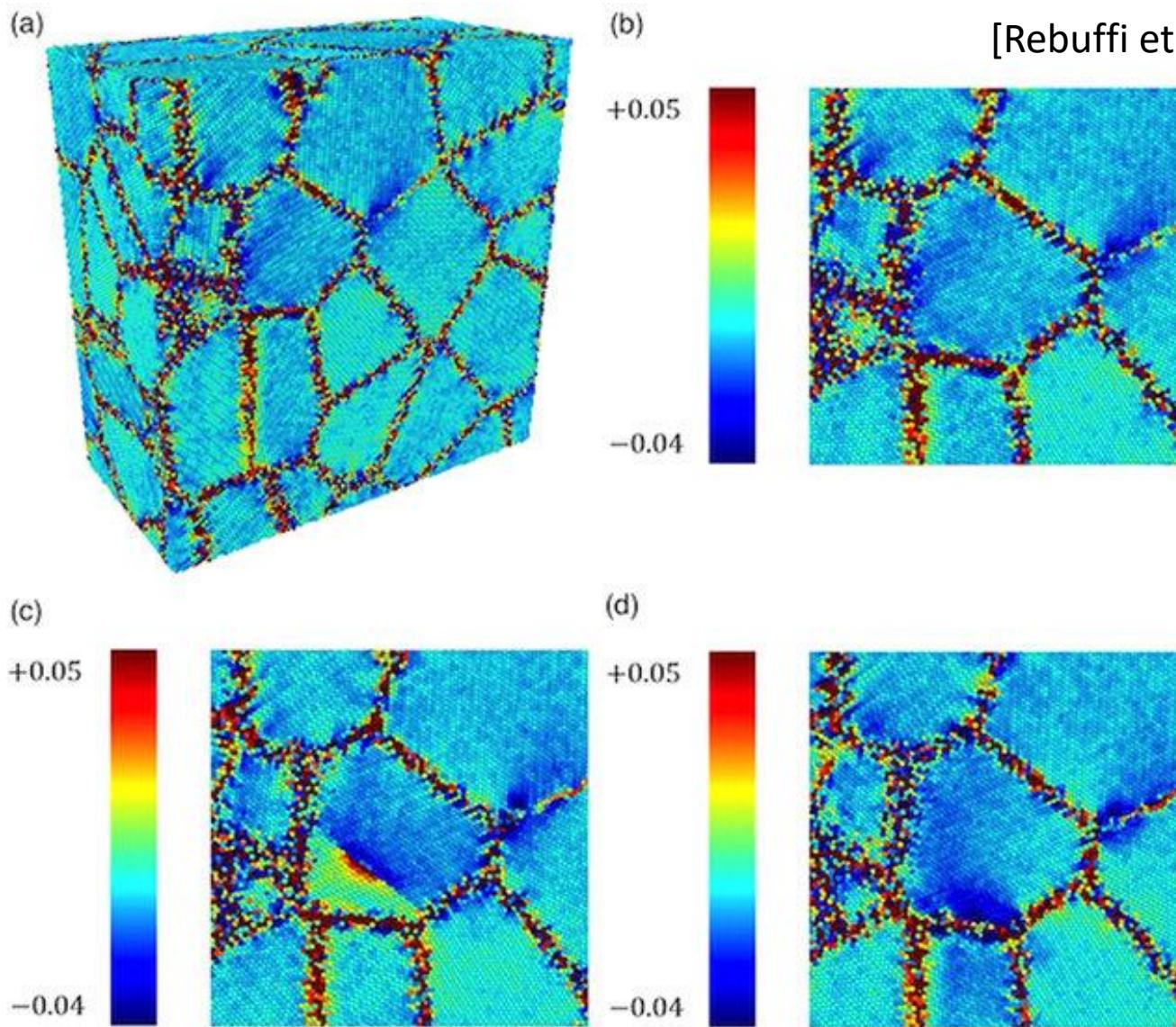
Slip intercepting twins  
in a polycrystal

Shabib and Miller (2009)



Slip nucleation from  
grain boundary

# Моделирование поликристаллов



# Зернограничное проскальзывание

Зернограничное проскальзывание – один из основных механизмов деформирования субмикро- и нанокристаллических материалов

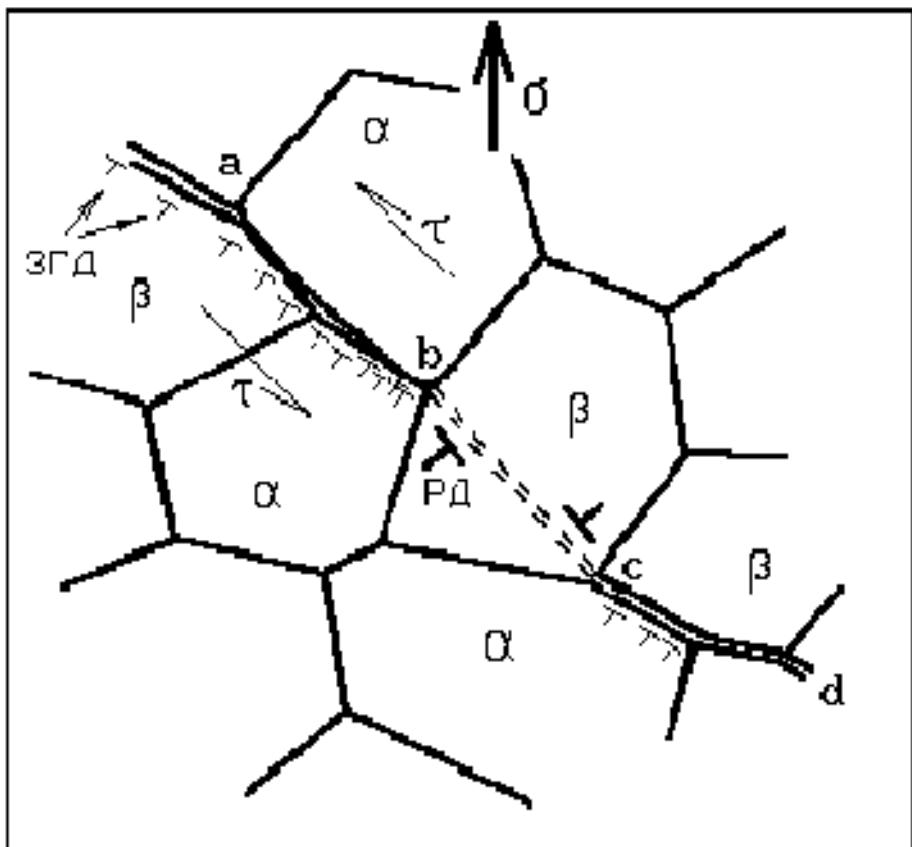


Рис. 1. Схема развития линии КЗГП.

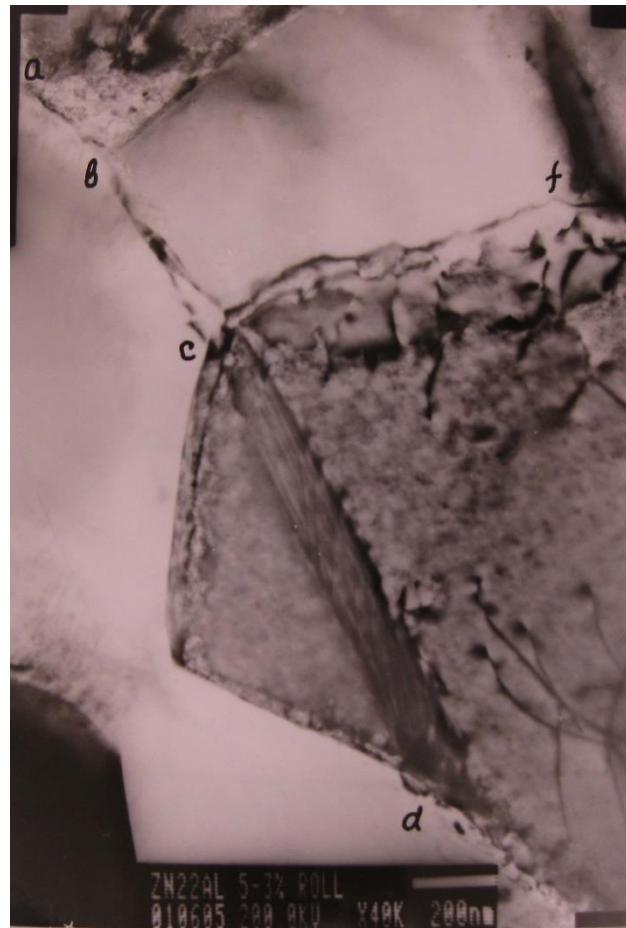
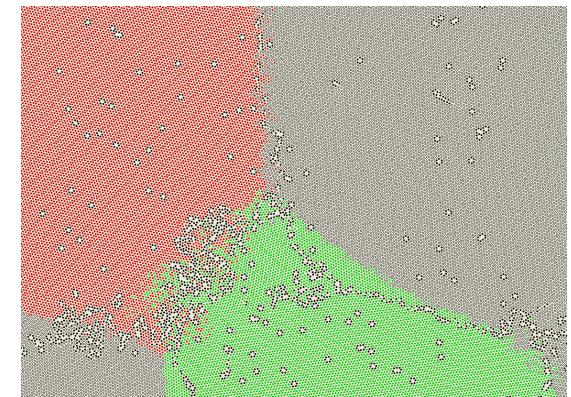
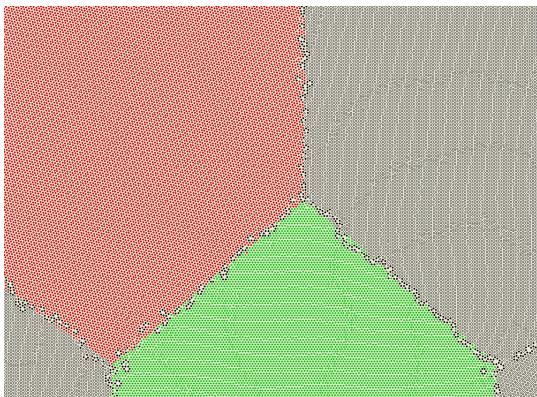
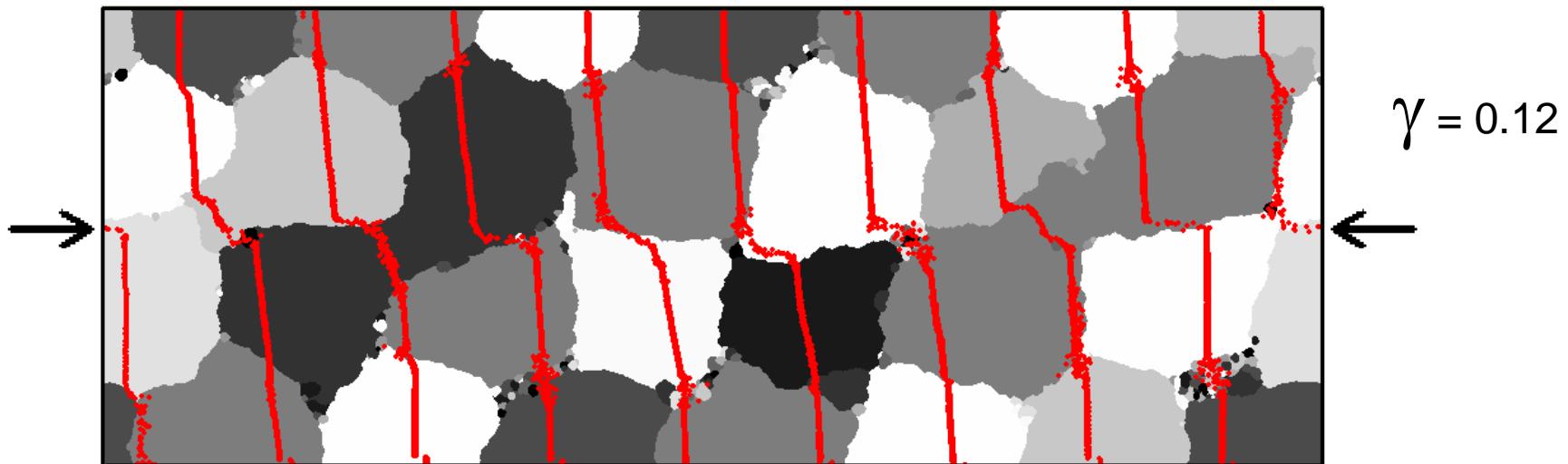


Рис. 2. Линия КЗГП, пересекающая зерно. Zn-22%Al

# Кооперация ЗГП



## Вопросы к зачету

1. Что такое ГЗ и их основные характеристики?
2. Границы зерен и их структурные модели
3. Что такое специальные границы зерен и РСА
4. Моделирование поликристаллов
5. Зернограничное проскальзывание
6. Какие задачи могут быть решены с помощью МД моделирования ГЗ?

