

УДК 669.5 : 669—492.3

ЗАВИСИМОСТЬ СКОРОСТИ БЕЗАКТИВАЦИОННОГО ДВИЖЕНИЯ ГРАНИЦЫ ЗЕРЕН ОТ ЕЕ ОРИЕНТАЦИИ

Б. Б. Страумал, В. Г. Сурсаева, Л. С. Швиндлерман

Изучена зависимость скорости безактивационного движения границы наклона (ось $\langle 11\bar{2}0 \rangle$, угол разориентации 86°) в цинке от ее ориентации. Для объяснения величины скорости и ее ориентационной зависимости привлекаются аналогия с движением межфазной границы при мартенситных переходах и представления об ориентациях наилучшего совпадения.

В работе [1] был обнаружен эффект безактивационного движения большеугловых границ зерен (на особых границах наклона с осью $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ в цинке чистотой 99,995 ат.%). Поскольку эффект безакти-

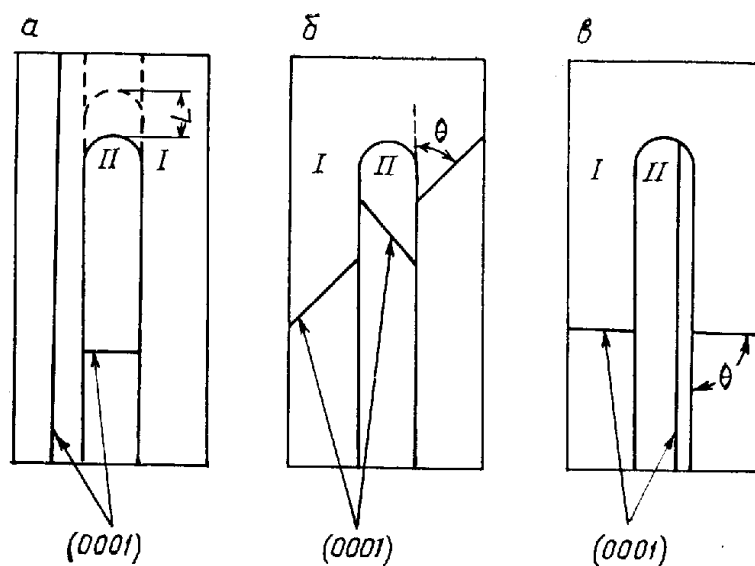


Рис. 1. Бикристаллы с разной ориентацией границы зерен; граница наклона $\langle 11\bar{2}0 \rangle$; $\varphi = 86^\circ$, Цп:
а — $\theta = 0$; б — 45 ; в — 86° .

вационного движения наблюдался на особых границах и связан с возможностью ориентированной перестройки атомов по обе стороны границы, представляет, вероятно, интерес исследовать влияние кристаллографических факторов на безактивационное движение границы. Одним из таких факторов может быть ориентация границы в бикристалле, разориентированном на определенный угол.

Цель настоящей работы — изучить зависимость подвижности границы при ее безактивационном движении от ориентации границы в бикристалле. Угол разориентации двух половин бикристалла остается при этом неизменным.

В экспериментах использовалась методика миграции одиночной границы с постоянной движущей силой процесса [2]. Постоянство движущей силы поддерживалось с точностью до 1%. Данная методика позволяла получать образцы с разной ориентацией границы, сохраняя при

этом разориентацию зерен неизменной. Угол ориентации θ границы определялся как угол между плоскостью (0001) в зерне I и плоскостью границы (рис. 1).

Измерения всех угловых характеристик образцов производились оптическим методом при помощи сколов по плоскостям (0001). Точность измерения углов лежала в пределах $20'$.

Отклонение угла разориентации половин бикристалла от заданного не превышало $\pm 30'$. С такой же точностью поддерживались и другие

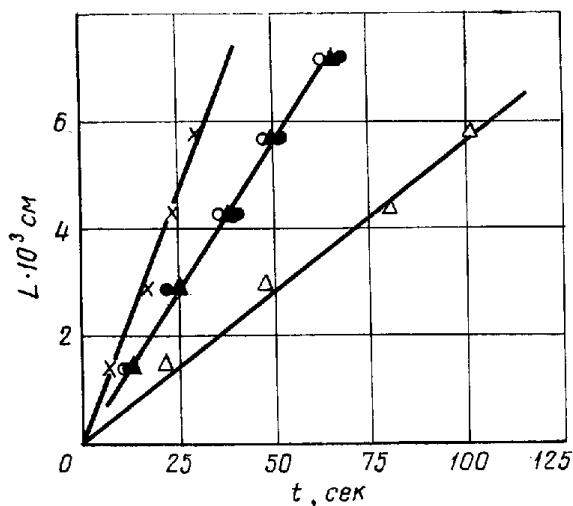


Рис. 2. Зависимость положения границы L от времени t ; граница наклона $\langle 11\bar{2}0 \rangle$; $\varphi = 86^\circ$, $\theta = 4^\circ$, Zn: Δ — $T = 608$; \bullet — 650; \blacktriangle — 661; \circ — 672; \times — 689 К.

Естественно изучать зависимость подвижности от угла ориентации на границе, где эффект безактивационного движения проявляется наиболее резко. Было замечено, что в образцах с данной концентрацией примеси эффект наблюдается лишь на особых границах, поэтому надо было выбрать самую совершенную из них. Для этого был проделан расчет зависимости доли совпадающих узлов Σ^{-1} от угла разориентации φ вокруг оси $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ в Zn в рамках модели решетки близкого совпадения [3], поскольку идеальное совпадение узлов для ГПУ решеток возможно лишь при повороте вокруг оси (0001), так как отношение c/a не является в реальных решетках рациональным. Программа позволяла рассчитывать зависимость $\Sigma^{-1} = \Sigma^{-1}(\varphi)$ для разных степеней несовпадения узлов ε

$$\varepsilon = |\mathbf{R}_i^{(1)} - \mathbf{R}_k^{(2)}|, \quad (1)$$

где $\mathbf{R}_i^{(1)}$ и $\mathbf{R}_k^{(2)}$ — радиус-векторы i -го атома 1-го кристалла и k -го атома 2-го кристалла соответственно. Размер расчетной ячейки для каждого из зерен составлял 1764 атома. Расчет был проведен при $\varepsilon = 0,05$ а; 0,07 а; 0,10 а и 0,15 а. На рис. 3 приведены результаты для $\varepsilon = 0,15$ и 0,07 а. Очевидно, что при $\varepsilon_1 > \varepsilon_2$

$$\Sigma^{-1}(\varphi_0, \varepsilon_1) > \Sigma^{-1}(\varphi_0, \varepsilon_2), \quad (2)$$

так как с ростом ε число совпадающих узлов увеличивается. Растет и фон, состоящий из случайно совпавших узлов. По результатам расчетов нами была выбрана граница наклона $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ с углом разориентации 86° , поскольку ей отвечает максимальная величина Σ^{-1} .

угловые параметры: перпендикулярность границы и осей $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ частей бикристалла к поверхности образца. Изучение миграции производилось в высокотемпературной приставке к оптическому микроскопу в поляризованном свете. Положение границы фиксировалось с точностью $3 \cdot 10^{-4}$ см. Время измеряли с точностью 0,1 сек, а отклонения температуры не превышали $\pm 0,5^\circ$ C от заданной. Исследования выполнены на цинке чистотой 99,995 ат.%. Типичные зависимости положения границы L от времени t представлены на рис. 2. Ошибка в определении подвижности A не превышала таким образом, 10%, а энергии активации миграции — 1 ккал/г·атом.

На рис. 4а—б изображены типичные температурные зависимости подвижности границы. Подвижность границы в низкотемпературной области экспоненциально изменяется с величиной T^{-1} , что свидетельствует об активационном характере движения. Затем в достаточно узком температурном интервале происходит резкий (на 1—2 порядка) рост подвижности, после чего она остается постоянной вплоть до температуры плавления. Подобное изменение зависимости A от T наблюдалось нами ранее и интерпретировалось как эффект отрыва движущейся границы от облака адсорбированной примеси [4]. В пользу этого говорят следующие особенности эффекта: отрыв происходит на особых границах в кристаллах высокой чистоты, с ростом движущей силы он начинается при более низких температурах. После отрыва от адсорбированной примеси движение границы зерен становится безактивационным.

Можно предположить, что подобный ход температурной зависимости подвижности связан с механизмом движения границы, близким по содержанию механизму мартенситных бездиффузионных переходов.

Движение границы в этом случае будет определяться согласованным перемещением групп из n атомов, каждый из которых смещается на расстояния, меньшие межатомного. Совершенная граница, низкая концентрация примесных атомов, тот факт, что по обе стороны границы лежит одна и та же фаза — вот условия, способствующие проявлению данного механизма, названного групповым кооперативным, что и наблюдается в нашем случае: на границе зерен с высокой плотностью совпадающих узлов, в чистом (99,995% Zn) материале.

Анализ такого вида движения был проведен авторами в рамках упругой модели и теории абсолютных скоростей реакций. Учет кооперативности в таком приближении приводит в нашем случае к следующему выражению для скорости движения границ

$$v = bv \frac{\Delta F_1}{kT} \exp \left[\frac{\gamma E_1^*}{nk} \right] \exp \left(- \frac{E_1^*}{nkT} \right). \quad (3)$$

Здесь b — межатомное расстояние; v — частота колебаний атомов; ΔF_1 — движущая сила для перехода одного атома; E_1^* — энергия активации единичного процесса; $\gamma = \frac{d(\mu/\mu_0)}{dT}$, где μ и μ_0 — упругие модули при температуре эксперимента и 0 К соответственно.

По этой модели при $n \approx 10$ (что совпадает по порядку величины с числом атомов в структурной единице границы) энергия активации по порядку величины сравнима с kT (при температуре эксперимента). Это макроскопически проявляется в безактивационном характере движения.

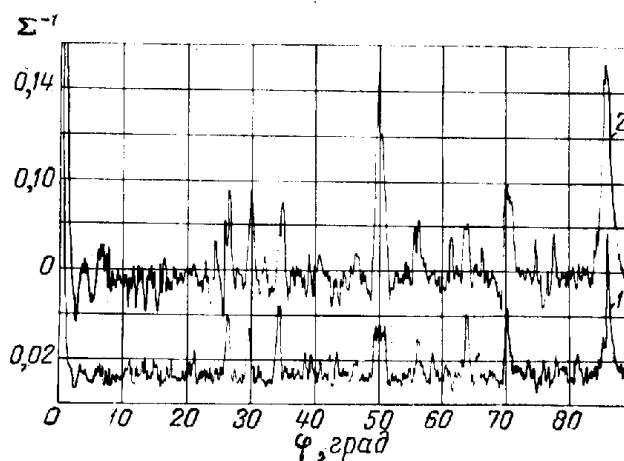


Рис. 3. Зависимость числа совпадающих узлов от разориентации для наложения с осью $\langle 11\bar{2}0 \rangle$, Zn:

1 — $\epsilon = 0,07$ а; 2 — $0,15$ а.

На рис. 5 представлена определенная в наших экспериментах зависимость подвижности A границы наклона $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ с углом разворота 86° на безактивационном участке от ориентации θ . Было исследовано 9 образцов во всем интервале углов θ ($\theta = 0, 4, 14, 19, 22, 30, 45, 60$ и 90°). Угол ориентации θ задавался при выращивании образца. Как видно, с изменением θ подвижность границы меняется немонотонно, а размах изменения достаточно велик: $\frac{A(\theta = 20^\circ)}{A(\theta = 90^\circ)} \sim 10^3$. Максимум подвижности примерно отвечает плоскости $(10\bar{1}2)$ среднего зерна (рис. 6).

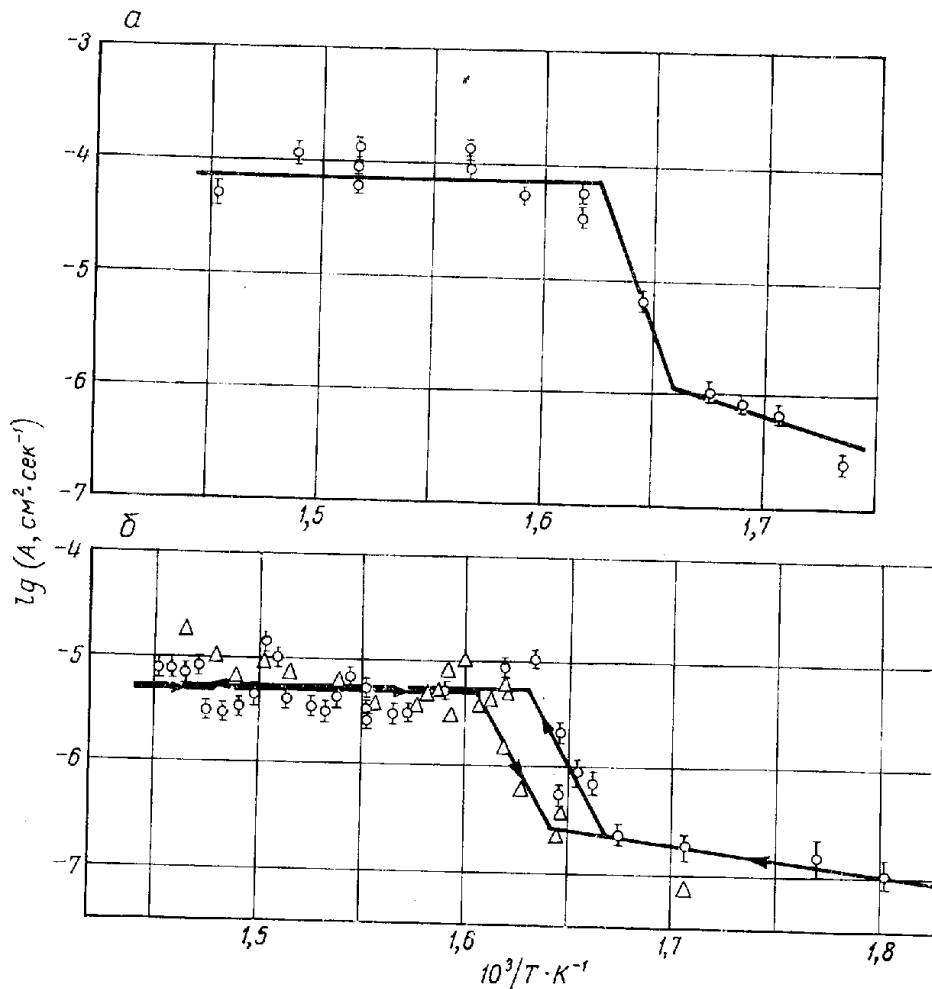


Рис. 4. Температурная зависимость подвижности границы зерен; граница наклона $\langle 11\bar{2}0 \rangle$; $\varphi = 86^\circ$; $\theta = 22^\circ$ (а); $\varphi = 4^\circ$ (б), Zn.

Этот факт заслуживает внимания, поскольку наиболее плотно узлы близкого совпадения располагаются, как показывают, в частности, наши расчеты, по плоскости $(10\bar{1}1)$. В модели же структурных единиц граница в плоскости $(10\bar{1}2)$ обладает наименьшими структурными единицами [3].

Плоскость $(10\bar{1}2)$ является в Zn плоскостью двойникования [5]. С этой точки зрения максимум на зависимости A от θ (см. рис. 5) может быть объяснен следующим образом: в нашей методике искривленный участок границы движется как целое, то есть составляющая скорости границы, параллельная ее плоским участкам, одна и та же для всех точек полупетли. В то же время составляющая скорости, нор-

мальная границе, изменяется от нуля в точке сопряжения изогнутой полупетли с неподвижным участком до максимального значения в вершине полупетли (рис. 6). А эта составляющая как раз и считается ответственной за все наблюдаемые эффекты. Вершина полупетли лежит в плоскости $(10\bar{1}2)$ среднего зерна при $\theta = 20^\circ$. Этот факт может свидетельствовать о связи процессов двойникования и безактивационного движения.

Из изложенных представлений следует, что чем совершеннее граница в своей вершине, тем меньше ее адсорбционная способность и выше подвижность цилиндрической части на безактивационном участке. Проанализируем обнаруженный эффект безактивационного движения границ зерен с точки зрения теории движения фазовых границ при мартенситных переходах [6]. При хорошем сопряжении решеток потенциальные барьеры для движения границы уменьшаются и барьер для

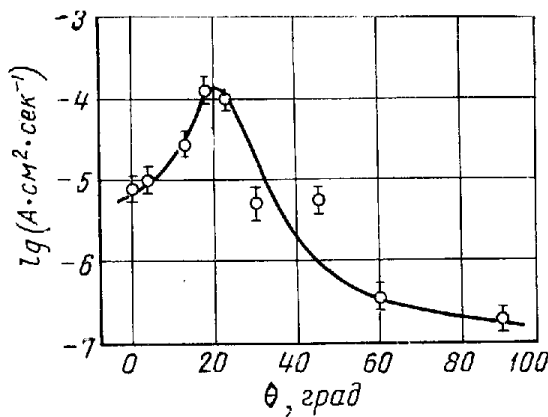


Рис. 5. Зависимость подвижности границы зерен на безактивационном участке от угла разориентации; границы наклона $\langle 11\bar{2}0 \rangle$; $\phi = 86^\circ$, Zn.

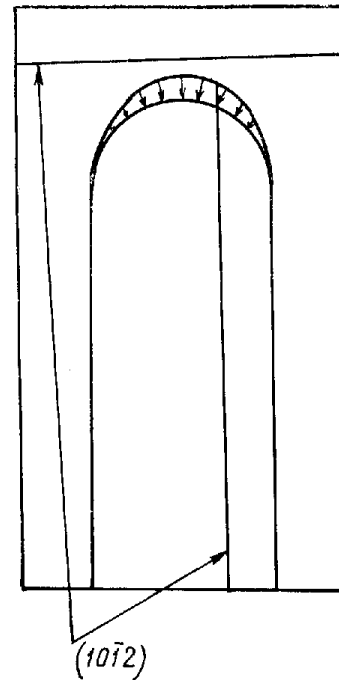


Рис. 6. Эшора нормальной составляющей скорости границы.

перемещения точечного дефекта¹ на границе меньше барьера для движения линейного дефекта², который, в свою очередь, меньше барьера для границы как целого. По мере увеличения движущей силы становится возможным безактивационное движение вначале точечного, затем линейного дефектов и, наконец, всей границы со скоростью звука в кристалле.

При мартенситных переходах наблюдается обычно последний случай, так как движущие силы там огромны. Для границ зерен достичь таких движущих сил нельзя. Скорость их безактивационного движения сравнительно мала. Это говорит о том, что без термической активации двигаются, например, линейные дефекты на границе. Оценим подвижность границы при таком механизме. Двигаясь безактивационно, линейный дефект³ границы (высотой $h \approx 10^{-8}$ см), перпендикулярный плоскости образца, будет со скоростью звука ($c = 3 \cdot 10^5$ см/сек)

¹ Излома на ступени.

² Ступени на границе.

³ Им может быть, например, зернограницная дислокация, а упомянутый точечный дефект — перегибом на ней.

заметать цилиндрическую часть границы (подобно «дворнику» на стекле автомобиля). Подвижность границы

$$A \approx \frac{ch}{\pi} \approx 10^{-3} \text{ см}^2/\text{сек.} \quad (4)$$

Это по порядку величины близко к максимальной подвижности, полученной в наших экспериментах. При безактивационном движении границы как целого величина A была бы на 8 порядков больше. Если безактивационно двигаются точечные дефекты, то подвижность составила бы $10^{-11} \text{ см}^2/\text{сек}$, что существенно ниже подвижностей, зарегистрированных экспериментально.

Институт физики твердого тела
АН СССР

Поступила в редакцию
23 января 1979 г.;
в окончательном варианте —
9 апреля 1979 г.

ЛИТЕРАТУРА

1. Копецкий Ч. В., Сурсаева В. Г., Швиндлерман Л. С. Эффект бездиффузионного движения границ зерен в цинке. — ДАН СССР, 1978, 238, с. 842—843.
2. Аристов В. Ю., Фридман Е. М., Швиндлерман Л. С. Миграция границ в бикристаллах алюминия. — ФММ, 1973, 35, с. 859—862.
3. Briggeman G. A., Bishop G. H., Hart W. H. Coincidence and nearcoincidence grain boundaries in HCP metals. — In: Nature and Behaviour of Grain Boundaries, N. Y. - - Ld., 1972, p. 83—122.
4. Аристов В. Ю., Копецкий Ч. В., Сурсаева В. Г., Швиндлерман Л. С. Эффект отрыва движущейся границы от адсорбированной примеси. — ДАН СССР, 1975, 205, с. 804—806.
5. Классен-Неклюдова М. В. Механическое двойникование кристаллов. М., «Наука», 1960, 225 с.
6. Ройтбурд А. Л. Особенности развития фазовых превращений в кристаллах. — В кн. Проблемы современной кристаллографии, М., «Наука», 1975, с. 345—376.