

## Модели образования структурных дефектов на границах зерен в металлах

*Ю.В. Гусева*

*Национальный исследовательский университет "МЭИ", Волжский*

**Аннотация:** Представлены результаты анализа различных моделей структурных дефектов, образующихся на границах зерен в металлах. Показано, что возникающие граничные дефекты должны быть учтены при определении растягивающих напряжений на линиях их стыка. Развитие представлений о структуре дефектов способствует лучшему пониманию механизма их возникновения в кристаллах и более качественному определению изменяющихся химических и физических свойств на атомном уровне.

**Ключевые слова:** дефекты, зернограничные дислокации, фасетки, микронесплошность, пластическая деформация, геометрия границы.

Процесс механического разрушения тела под действием внешних нагрузок, происходящий во времени, состоит из двух последовательных - критической и закритической стадий. Проблема изучения механизмов образования различных дефектов в кристалле, которые могут развиваться до трещины при воздействии внешних нагрузок, в этой связи представляет собой актуальную задачу исследования, поскольку этот процесс может быть остановлен на ранней стадии. При этом трещина возникает на теле или границах зерен кристалла [1].

При влиянии определенной внешней нагрузки на тело кристалла наблюдается разрушение хрупкого и вязкого типа. Условность разделения приведенных видов разрушения применительно к металлам может быть объяснена несколькими причинами. Основная причина заключается в том, что пластическое течение в металлах может осуществляться при сколь угодно низких температурах путем консервативного движения дислокаций, не требующего термической активации. Аморфный материал всегда можно переохладить до такого состояния, когда пластическая деформация в нем станет невозможной [1 – 3].

Переохладить металлы до такого же состояния невозможно, так как в кристаллических телах скольжение дислокаций может происходить только под действием приложенного напряжения без участия температурных факторов. С понижением температуры сопротивление пластической деформации многих металлов и сплавов возрастает, но даже вблизи абсолютного нуля оно всего в несколько раз выше, чем при комнатной температуре. В результате в металлах пластическая деформация всегда сопровождает процесс разрушения на всех его стадиях. Большинство металлов от структурного состояния и внешнего воздействия могут быть подвержены разрушению одного из вышеуказанных типов. Необходимо отметить, что при определении растягивающих напряжений на практике необходимо учитывать действительную форму границы, которая может быть извилистой, фасетированной или ступенчатой [4, 5].

На рисунке 1 представлено кристаллическое строение формы границы – ступенчатое и фасетированное.

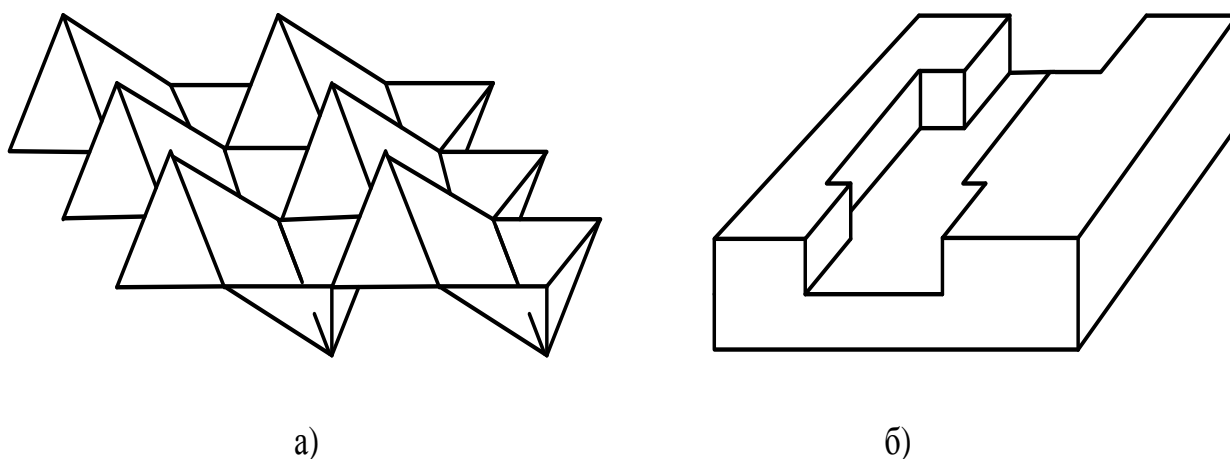


Рис. 1. Кристаллическое строение формы границы:  
а) фасетированное; б) ступенчатое

Далее рассмотрим варианты краевых дислокаций, возникающих вследствие отсутствия плоскости. В данном представленном случае это два

---

самых простых вида дислокаций – краевая и винтовая. Необходимо заметить, что дислокации могут возникать в кристалле вследствие сдвига при деформации или других видах деформации, как показано на рисунке 2. В случае, если некоторый фрагмент кристалла находится вблизи непрерывной винтовой поверхности, такая дислокация называется винтовой.

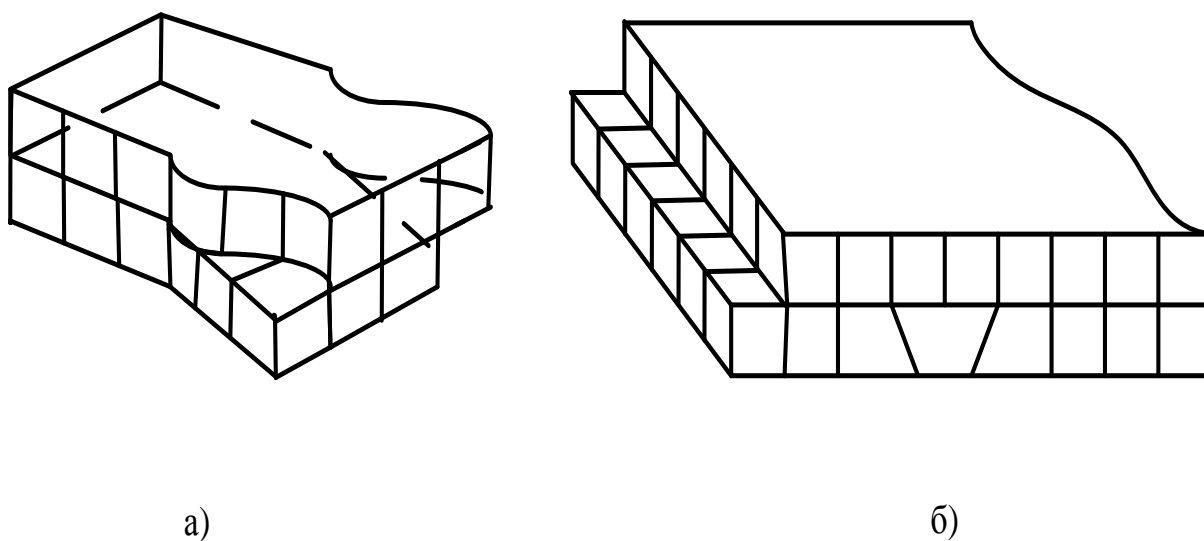


Рис. 2. Виды зернограничных дислокаций:

а) винтовая; б) краевая

Дислокации обладают некоторыми диффузионными свойствами, такими, как диффузионная проницаемость и способностью испускания и поглощения атомов в кристалле. При этом в кристаллах возникают и двумерные дефекты, образующиеся из множества дислокаций. Данные дефекты поясняют пространственное строение и взаимное расположение соседних блоков дислокаций, которые в свою очередь могут иметь общую границу, имеющую неупорядоченное расположение аморфизованного слоя атомов [6, 7].

Модель слияния дислокаций или модель Зинера - Стро показана на рисунке 3. Идея этой модели основывается на представлении Зинера о

гипотезе слияния всех дислокаций в достаточно мощном скоплении, заторможенном у какого-либо прочного барьера, например, у границы зерна [2].

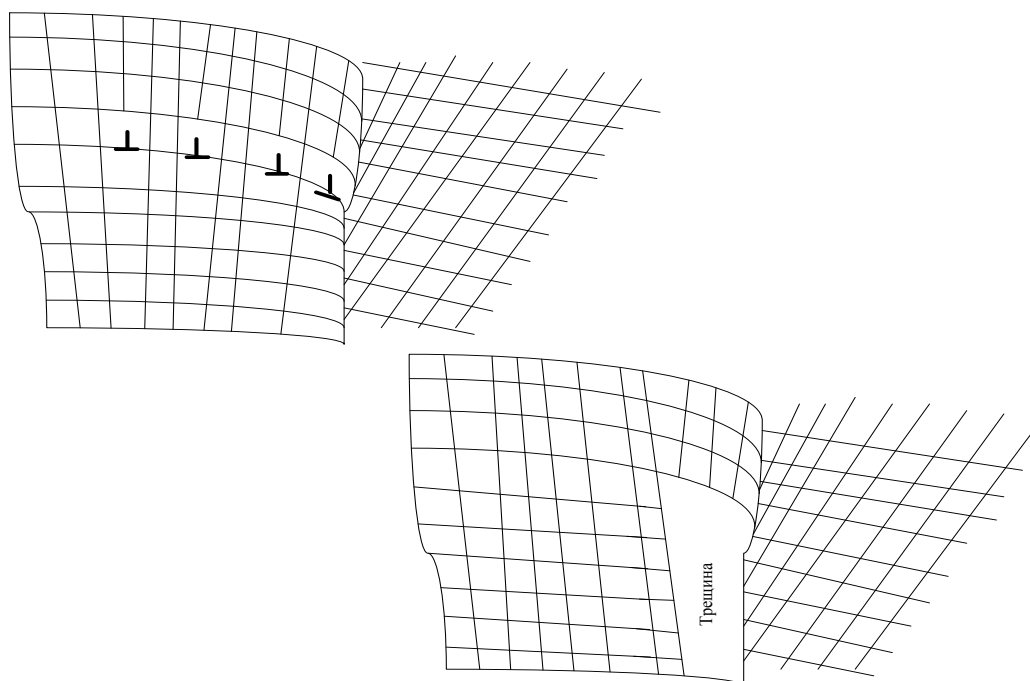


Рис. 3. Модель Зинера - Стро

Расчетные исследования Стро позволили ответить на предположение о том, что в результате воздействия внешних факторов на дислокации может быть образована микронесплошность, данная атомарная структура предполагает дальнейший рост с последующим слиянием всех дислокаций.

Модель заторможенного сдвига, в которой наличие барьера блокирует плоскость скольжения, принимает во внимание растягивающее напряжение в пространстве под плоскостью, таким образом, более детально уточняет модель слияния дислокаций Зинера-Стро. Стро рассчитал компоненты поля упругих напряжений у вершины скопления и определил, что напряжения принимают максимальные значения на плоскости, образующей угол  $\alpha$  порядка 110 град. с плоскостью скольжения.

В модели Коттрелла, представленной на рисунке 4, образование скопления дислокаций происходит в результате скольжения по пересекающимся плоскостям (что характерно для объемноцентрированной кубической решетки). Дислокация встречи, согласно модели Коттрелла, препятствует обеим скользящим плоскостям, что способствует скоплению свободных дислокаций и приводит к зарождению трещины в плоскости скола [4, 8].

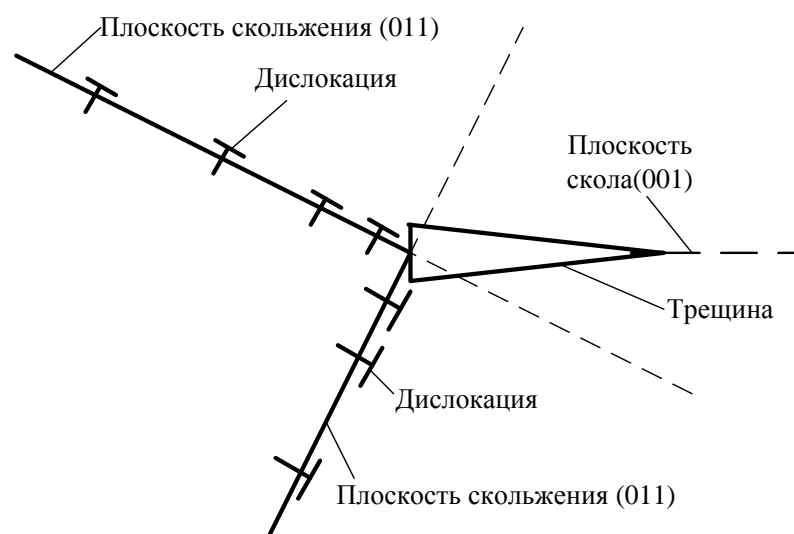


Рис. 4. Модель образования скопления дислокаций в результате скольжения по пересекающимся плоскостям (модель Коттрелла)

При наличии в кристалле малоугловых границ с достаточно сильной разориентировкой (не менее 5 град.) возможно образование трещин в результате сдвига, разделяющего границу на две части, такой механизм наблюдается в гексогональных кристаллах при низкой температуре, что может характеризовать структуру развития трещины у субграницы, как показано на рисунке 5. Кроме рассмотренных, существуют и другие модели. Общее для всех этих моделей, то, что образование трещин должно происходить в том случае, если отсутствует возможность снижения

концентрации растягивающих напряжений в результате деформации в окрестности вершины скопления [8 – 10].

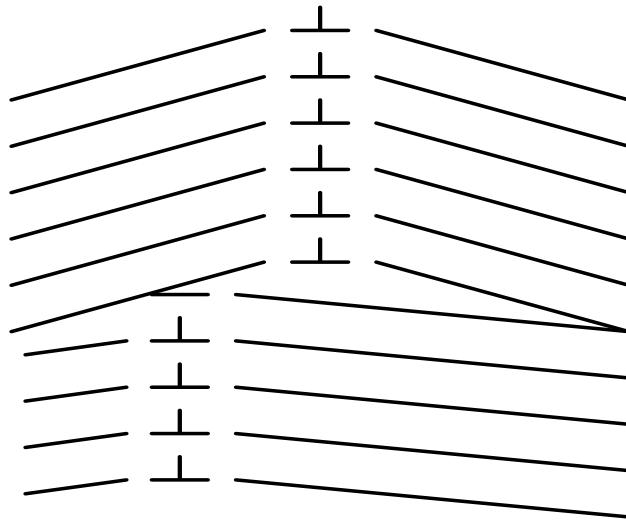


Рис. 5. Структура развития трещины у субграницы

С учетом вышеуказанных особенностей геометрического строения дефектов на границах зерен и возникающих на них химических изменений, автором предложена модельная структура межзеренного проскальзывания, представленная на рисунке 6.



Рис. 6. Модель межзеренного проскальзывания под действием сдвигового напряжения

Такое строение границы приводит к появлению нормальных напряжений  $\sigma$  в области ступенек, что в свою очередь приводит к изменению

химических параметров в их окрестностях. Таким образом, ступеньки следует рассматривать как источник и сток свободных вакансий [10].

При рассмотрении приведенной структуры формирования дефектов на границе зерен, можно заметить, что несимметричность граничных условий приводит к тому, что средняя по сегменту концентрация свободных вакансий в произвольный момент времени в общем случае отлична от равновесной [11]. В этой связи, для потока граница является источником вакансий в объем зерна.

### Литература

1. Ежов А.А., Герасимова Л.П. Разрушение металлов. – М.: Наука.2004. - 400 с.
  2. Чувильдеев В.Н. Неравновесные границы зерен в металлах. Теория и приложения. - М.: Физматлит, 2004. - 304 с.
  3. Ларииков Л.Н., Исаичев В.И. Диффузия в металлах и сплавах. - Киев: Наукова думка, 1987. - 510 с.
  4. Кульков В.Г., Васильева Ю.В. Образование микронесплошностей в процессе проскальзывания по ступенчатой межкристаллитной границе // XI Международная конференция "Взаимодействие дефектов и неупругие явления в твердых телах" (IAPS XI). Сборник трудов. – Тула, изд. ТулГУ, 2008 г. – С. 71-76.
  5. Pankov S.Yu., Kalinin Yu.E., Makagonov V.A., Zhilova O.V., Chetverikova A.P., Kashirin M.A., Foshin V.A. The structure and electrical properties of  $(\text{In}_2\text{O}_3/\text{SiO}_2)_{25}$  thin films // Advanced Materials and Technologies. – 2020. – № 1 (17). – pp. 43-48.
  6. Zhilova O.V., Pankov S.Yu., Sitnikov A.V., Kalinin Yu.E., Volochaev M.N., Makagonov V.A. Structure and electrophysical properties of thin-film  $\text{SNO}_2\text{-In}_2\text{O}_3$  heterostructures // Journal of Materials Science: Materials in Electronics. – 2019. – Т. 30. – № 13. – pp. 11859-11867.
-

7. Kosinova A., Rabkin E., Straumal B., Kilmametov A., Straumal P., Bulatov M. Faceting of twin grain boundaries in high-purity copper subjected to high pressure torsion // *Advanced Engineering Materials*. 2020. Т. 22. № 1. pp. 1900589.

8. Кульков В.Г. Межзеренное скольжение по границе с уступами // *Поверхность*. – 2005. – № 8. – С. 84-87.

9. Золотухин И.В., Калинин Ю.Е. О высокотемпературном фоне внутреннего трения в кристаллических и аморфных твёрдых телах // *ФТТ*. 1995. Т. 37. № 2. С. 536-545.

10. Гусева Ю.В. Фон внутреннего трения на межкристаллитных границах общего типа // *Инженерный вестник Дона*, 2021, №10. URL: [ivdon.ru/ru/magazine/archive/n10y2021/7226](http://ivdon.ru/ru/magazine/archive/n10y2021/7226).

11. Батырев А. С., Бисенгалиев Р. А., Лиджиев Б.С., Сумьянова Е. В. Влияние ионно-аргонной бомбардировки на спектральные и вольтамперные характеристики кристаллов CdS вблизи края фундаментального поглощения // *Инженерный вестник Дона*, 2019, №4. URL: [ivdon.ru/ru/magazine/archive/n4y2019/5860](http://ivdon.ru/ru/magazine/archive/n4y2019/5860).

### References

1. Ezhov A.A., Gerasimova L.P. *Razrushenie metallov [Destruction of metals]*. М.: Nauka.2004. 400 p.

2. Chuvil'deev V.N. *Neravnovesnye granicy zeren v metallah. Teoriya i prilozheniya [Nonequilibrium grain boundaries in metals. Theory and applications]*. М.: Fizmatlit, 2004. 304 p.

3. Larikov L.N., Isaichev V.I. *Diffuziya v metallah i splavah [Diffusion in metals and alloys]*. Kiev: Naukova dumka, 1987. 510 p.





4. Kul'kov V.G., Vasil'eva Yu.V. XI Mezhdunarodnaya konferenciya "Vzaimodejstvie defektov i neuprugie yavleniya v tverdyh telah" (IIAPS XI). Sbornik trudov. Tula, izd. TulGU, 2008 g. pp. 71- 76.

5. Pankov S.Yu., Kalinin Yu.E., Makagonov V.A., Zhilova O.V., Chetverikova A.P., Kashirin M.A., Foshin V.A. Advanced Materials and Technologies. 2020. № 1 (17). pp. 43-48.

6. Zhilova O.V., Pankov S.Yu., Sitnikov A.V., Kalinin Yu.E, Volochaev M.N., Makagonov V.A. Journal of Materials Science: Materials in Electronics. 2019. T. 30. № 13. pp. 11859-11867.

7. Kosinova A., Rabkin E., Straumal B., Kilmametov A., Straumal P., Bulatov M. Advanced Engineering Materials. 2020. T. 22. № 1. p. 1900589.

8. Kul'kov V.G. Poverhnost'. 2005. № 8. pp. 84-87.

9. Zolotuhin I.V., Kalinin Yu.E. FTT. 1995. T. 37. № 2. pp. 536-545.

10. Guseva Yu.V. Inzhenernyj vestnik Dona, 2021, №10. URL: [ivdon.ru/ru/magazine/archive/n10y2021/7226](http://ivdon.ru/ru/magazine/archive/n10y2021/7226).

11. Batyrev A. S., R. A. Bisengaliev, Lidzhiev B. S., Sumanova E. V. Inzhenernyj vestnik Dona, 2019, №4. URL: [ivdon.ru/ru/magazine/archive/n4y2019/5860](http://ivdon.ru/ru/magazine/archive/n4y2019/5860).