

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова»

На правах рукописи
УДК 538.913

Векман Анатолий Валериевич

**АТОМНЫЕ ПЕРЕСТРОЙКИ НА ГРАНИЦАХ ЗЕРЕН НАКЛОНА В
МЕТАЛЛАХ С ГЦК РЕШЕТКОЙ**

Специальность 01.04.07 – физика конденсированного состояния

Автореферат диссертации
на соискание ученой степени доктора физико-математических наук

Барнаул – 2018 г.

Работа выполнена в Алтайском государственном техническом университете
им. И.И.Ползунова

Научный консультант: доктор физико-математических наук, профессор
Демьянов Борис Федорович

Официальные оппоненты: ***

доктор физико-математических наук,

доктор физико-математических наук,

доктор физико-математических наук,

Ведущая организация: ***

Защита состоится "___" _____ 201* г. в ___ часов на заседании диссертационного совета Д***.***.** при *** университете по адресу: ***, e-mail: mail@mail.ru.

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке и на сайте ***.

<http://www.site.ru>

Автореферат разослан "___" _____ 201* г.

Ученый секретарь диссертационного совета Иванов И.И.

Примечание: отзывы на автореферат, заверенные гербовой печатью организаций, просим присылать **в 2-х экз.** на адрес университета и e-mail: mail@mail.ru

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

В последние годы наука о границах зерен (ГЗ) приобретает все большее значение. **Актуальность** исследований в этой области связана с тем, что ГЗ и другие внутренние поверхности раздела, не только влияют, но и часто определяют многие свойства материалов. Существует достаточно большое разнообразие видов поверхностей раздела: границы зерен, межфазные границы, двойниковые границы, антифазные и доменные границы, дефекты упаковки, свободная поверхность. В современном материаловедении широко применяются материалы с высоким значением удельной поверхности. Это материалы с микро- и нанокристаллическим размером зерен, элементы в электронной технике, тонкие пленки и многослойные материалы, ионно-имплантированные слои и специальные покрытия. В этих системах большая доля атомов находится в области принадлежащей границе раздела, что приводит к изменению свойств материала в целом.

Границы раздела оказывают влияние на такие важные свойства материалов как прочность и пластичность, высокотемпературная и низкотемпературная ползучесть, усталость, сверхпластичность, диффузия, коррозия, удельное электросопротивление, магнитные свойства и др. Границы зерен сильно влияют на свойства и поведение поликристаллических материалов в процессе их обработки и при использовании. Еще более важным является то, что процессы, происходящие на границах раздела можно использовать при разработке новых и совершенствовании существующих технологий. Прежде всего, это усовершенствование способов механической обработки (штамповка, прокатка), а также процессов спекания, образование адгезионных свойств поверхностных покрытий, регулирование фазовых превращений в зоне контакта в слоистых системах. Для керамических материалов ГЗ дают настолько важный вклад, что исследование структуры и выяснение роли ГЗ является одной из наиболее приоритетных задач.

В свою очередь, свойства самих ГЗ такие как энергия, подвижность, коэффициент диффузии, когезионная прочность, сопротивление скольжению и другие свойства – зависят от атомной структуры и химического состава ГЗ. Таким образом, для понимания многих фундаментальных свойств поликристаллических материалов необходимо учитывать, прежде всего, структуру и энергию ГЗ. Эти две важнейшие характеристики оказывают определяющее воздействие на рост зерен, сегрегацию примесей, диффузию, деформацию, разрушение.

Структура определяется координатами атомов в области ГЗ. Численно структура может быть охарактеризована такими величинами как свободный объем, координационное число, функция радиального распределения атомов и другими характеристиками. Также используются качественные характеристики структуры – наличие областей сжатия или растяжения, их взаимное расположение, однородность атомной структуры, степень аморфизации, ани-

зотропность, повторяемость структурных элементов, присутствие протяженных каналов.

Энергия на единицу площади является фундаментальной термодинамической величиной, характеризующей границы зерен и поверхности в целом. Энергия представляет собой сумму работ, необходимых для создания единицы площади границы зерен. Иными словами, энергия представляет дополнительную свободную энергию на единицу площади, которая существует в системе из-за наличия границы зерен. Величина энергии является функцией температуры, давления и химического потенциала. Поскольку ГЗ обладают сложной структурой, имеет смысл использовать понятие локальной энергии, представляющей потенциальную энергию отдельного атома или группы атомов. Также характеристикой ГЗ являются энергии метастабильных состояний и само число таких состояний.

Степень разработанности. Исследования дефектной структуры поликристаллов началось именно с ГЗ. Первые исследования представляли ГЗ как бесструктурную аморфную область. Развиваясь, эта модель в настоящее время описывает структуру ГЗ набором полиэдров Бернала. Развитие методов и инструментов исследования привели к тому, что в 1949 году вышла статья, авторы которой предложили модель решетки совпадающих узлов (PCY). Данная геометрическая модель до сих пор является отправной точкой многих исследований. В отличие от теории аморфного цемента она описывала ГЗ как область поликристаллов, имеющих собственную кристаллическую структуру. Модель PCY дала возможность ввести понятие границ специального типа и классификационный параметр Σ , который широко используется для исследования зернограничной структуры. Развитие этой модели привело к широко используемой многими исследователями модели структурных единиц (CE).

С развитием компьютерной техники и методов моделирования появилась возможность исследования ГЗ на атомном уровне. Использование этих методов позволило рассчитывать энергию границ и проводить отбор стабильных структур. Еще одним мощным методом исследования в настоящее время является высокоразрешающая электронная микроскопия. Электронно-микроскопические снимки высокого разрешения позволяют исследовать структуру ГЗ и являются неоценимым для проверки теоретических моделей. Хорошее совпадение предсказанной структуры ГЗ, полученной моделированием, с экспериментом явилось важным доказательством адекватности данных методов для исследования атомной структуры дефектов.

Существует огромное количество публикаций как теоретических, так и экспериментальных, посвященных границам зерен. Однако до настоящего времени еще не сложилось единой стройной теории ГЗ. Это связано с тем, что структура ГЗ на атомном уровне очень сложна. Наличие у границ кристаллического строения предполагает и наличие собственных зернограничных дефектов, таких как зернограничные дислокации, зернограничные вакансии, ступеньки, фасетки и др.

Целью настоящей работы является разработка новой модели ГЗ наклона в металлах, определение на основе разработанной модели атомной структуры стабильных состояний ГЗ и их свойств, исследование атомной структуры метастабильных состояний ГЗ, а также закономерностей перестройки при различных температурах. Для достижения указанной цели решались следующие **задачи**:

1. Разработка модели симметричных и ассиметричных ГЗ наклона.
2. Определение атомной структуры стабильных состояний ГЗ, механизмов перестройки границ, расчет избыточного объема и функции радиального распределения атомов в области границы.
3. Расчет энергетических характеристик границ, в частности, зависимости энергии ГЗ от угла разориентации, локальной энергии индивидуальных границ.
4. Исследование механизмов взаимодействия ГЗ с решеточными вакансиями.
5. Определение механизмов и параметров диффузионного движения атомов в области ГЗ.
6. Исследование влияние ГЗ на зарождение, аннигиляцию и устойчивость нанокластеров металлов.
7. Моделирование процессов плавления кристалла в области ГЗ.

Научная новизна. Разработана структурно-вакансионная модель, учитывающая множественность структурных состояний ГЗ. С использованием разработанной модели определены атомные структуры стабильных и метастабильных состояний ГЗ. Исследованы механизмы перестройки границ из одного состояния в другое – изменение структуры происходит при переходе вакансий из локализованного состояния в распределенное и при поглощении или испускании структурных вакансий. Проведен энергетический анализ специальных и общих ГЗ наклона с осями разориентации [100], [110] и [111] при относительном сдвиге зерен. Рассчитаны спектры энергии симметричных и ассиметричных ГЗ. Показано, что энергия малоугловых ГЗ растет с увеличением оси разориентации, энергия большеугловых ГЗ общего и специального типа (за исключением ограниченного числа высококогерентных ГЗ) не зависит от угла разориентации, отсутствует корреляция между энергией ГЗ и их избыточным объемом. Предложен механизм взаимодействия решеточных вакансий с ГЗ и определены радиусы захвата вакансий границами. Показано, что направления перескоков атомов в процессе самодиффузии определяются атомной структурой ГЗ. Исследованы механизмы, ответственные за изменение наклона арениусовских зависимостей. Исследованы закономерности поведения нанокластеров, окруженных матрицей такого же материала. Показано, что энергия границы кластер-матрица не зависит от взаимной ориентации решеток. В процессе диффузионного движения кластеры растворяются в матрице, причем этот процесс происходит по границе кластер-матрица. На основании выполненных расчетов показано, что большинство ГЗ плавятся

при температуре меньше температуры плавления монокристалла с равновесным количеством вакансий. Исключение составляют малоугловые ГЗ и высококогерентные границы специального типа.

Теоретическая и практическая значимость работы заключается в том, что результаты расчетов атомной структуры могут быть использованы для экспериментального и теоретического исследования зернограничных процессов, в частности для анализа электронно-микроскопических изображений высокого разрешения. Энергетические характеристики ГЗ могут использоваться при исследовании процессов зернограничного проскальзывания, ползучести и сверхпластичности. Предложенный в работе механизм захвата решеточных вакансий и самодиффузии могут быть использованы для уточнения теории диффузии как внутри зерен, так и на границах раздела. Полученные значения температуры плавления ГЗ могут использоваться при исследовании фазовых превращений. Данные об устойчивости кластеров могут быть использованы исследователями в области нанотехнологий.

На защиту выносятся следующие основные положения:

1. Структурно-вакансионная модель ГЗ наклона в металлах. В рамках модели структура равновесных ГЗ получается после разворота сопрягающихся кристаллов вокруг общей кристаллографической оси с последующим внесением дополнительных атомов и вакансий. Перестройка атомной структуры границ связана с изменением числа структурных зернограничных вакансий.

2. Зернограничные вакансии могут находиться в локализованном и распределенном состоянии. Энергия ГЗ с распределенными вакансиями ниже энергии границ с вакансиями в локализованном состоянии. Переход вакансий из локализованного состояния в распределенное проходит с преодолением потенциального барьера.

3. Стабильная структура большеугловых ГЗ может быть представлена чередованием ограниченного числа базовых структурных элементов, вследствие чего энергии большеугловых ГЗ имеют близкие значения. Для каждой оси разориентации существует от одной до трех ГЗ специального типа, имеющих пониженную энергию.

4. Существует три основных механизма зернограничной самодиффузии: трубочный, вакансионный и миграция атомов по зернограничным вакансиям. Атомная перестройка ГЗ при нагреве приводит к смене механизма зернограничной самодиффузии, что отражается в изменении преимущественного направления перескоков атомов и значения энергии активации диффузии.

5. Методика определения температуры плавления ГЗ по статистическому анализу атомной структуры зернограничного слоя. Границы зерен плавятся при температуре ниже температуры плавления монокристалла металла. Исключение составляют малоугловые и высококогерентные границы, сохраняющие кристалличность зернограничного слоя вплоть до температуры плавления.

Достоверность полученных результатов обеспечивается физической корректностью постановки и решения задач диссертации, использованием

апробированных методов, соответствием рассчитанных значений и характеристик ГЗ экспериментальным данным, сопоставлением с данными других авторов.

Основные результаты работы доложены на международных и российских конференциях: XIV уральской школе «Фундаментальные проблемы физического металловедения перспективных материалов», Ижевск (1998); MRS Spring Meeting'98, Сан-Франциско, США, (1998); международной школе-семинаре «Эволюция дефектных структур в конденсированных средах», Барнаул (1998, 2000, 2001, 2002, 2014); второй конференции «Материалы Сибири», Барнаул, (1998); the 5th IUMRS International Conference on Advanced Materials, Пекин, Китай, (1999); VI международной научно-технической конференции «Актуальные проблемы металловедения», Новокузнецк, (1999); второй международной научно-технической конференции «Экспериментальные методы в физике структурно-неоднородных конденсированных сред. Композиционные и порошковые металлические материалы», Барнаул (2001); VII международной конференции «Физико-химические процессы в неорганических материалах», Новокузнецк (2004); международной конференции «Актуальные проблемы физики твердого тела», Минск, Беларусь (2005); IV всероссийской конференции «Физические свойства металлов и сплавов ФСМиС-4», Екатеринбург (2007); международной конференции «Новые перспективные материалы и технологии их получения НПИМ-2007», Волгоград (2007); всероссийской научно-практической конференции «Энергетические, экологические и технологические проблемы экономики» ЭЭТПЭ-2007, Барнаул (2007); 4-й всероссийской научно-технической конференция студентов, аспирантов и молодых ученых «Наука и молодежь – 2007», Барнаул, (2007); IV международной школы-семинара «СВС-2008», Барнаул (2008); II всероссийской конференции ММПСН-2009, Москва (2009); VI международной конференции ММ-2009, Тирасполь, Молдова (2009); IV международной конференции «Актуальные проблемы физики твердого тела», Минск, Беларусь (2009); XXII International Materials Research Congress, Канкун, Мексика (2013); International Conference of Computational Methods In Sciences and Engineering, Афины, Греция (2014); International Conference on Computer Information Systems And Industrial Applications, Бангкок, Таиланд (2015); международной конференции «Влияние внешних воздействий на прочность и пластичность металлов и сплавов», Барнаул-Белокуриха (2015); XV international conference on intergranular and interphase boundaries in materials must «MIS&S», Москва (2016).

Публикации. По теме диссертации опубликовано 72 работы включая 35 статей в зарубежных журналах, в сборниках статей и изданиях, включенных в перечень ВАК. Кроме того, в процессе работы над диссертацией было получено государственное свидетельство о регистрации программы для ЭВМ.

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, шести глав, заключения и списка литературы из 353 наименований. Работа изложе-

на на 262 страницах машинописного текста, содержит 16 таблиц и 104 рисунка.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ.

Введение. Во введении изложена актуальность исследуемой проблемы, сформулированы цель диссертационной работы и основные защищаемые положения. Дается краткое содержание работы по главам.

В **первой главе** приводится обзор основных литературных данных о влиянии границ зерен на различные свойства поликристаллов, основные теоретические модели и методы исследования.

Вторая глава посвящена выбору методики моделирования атомной структуры ГЗ. Проводится обоснование выбора потенциала межатомного взаимодействия при исследовании энергетических и структурных характеристик дефекта. Описана методика построения физической модели ГЗ и процедура расчета зернограницной энергии.

Исследование ГЗ в данной работе проводилось методом компьютерного моделирования. Межатомное взаимодействие в работе аппроксимировалось парным эмпирическим потенциалом Морза.

$$\varphi(r_{ij}) = D\beta \exp^{-\alpha r_{ij}} \left[\beta \exp^{-\alpha r_{ij}} - 2 \right], \quad (1)$$

где D , α , β – параметры потенциальной функции взаимодействия двух атомов, находящиеся на расстоянии r_{ij} друг от друга.

Объектом исследования являются границы зерен наклона общего и специального типа, причем исследовались как симметричные, так и несимметричные границы. Оси разориентации лежат в пределах от 10° до 60° , а оси разориентации – $[100]$, $[110]$ и $[111]$. Специальные ГЗ имели обратную плотность совпадающих узлов $\Sigma \leq 53$. Для более детального изучения из всего спектра разориентировок были выбраны границы общего типа с углами разориентации 10° , 30° и 50° по всем трем типам осей и специальные ГЗ: $\Sigma 13(015)$, $\Sigma 5(013)$ и $\Sigma 5(012)$ для оси разориентации $[100]$; $\Sigma 33(118)$, $\Sigma 27(115)$ и $\Sigma 11(113)$ для оси разориентации $[110]$; $\Sigma 21(145)$, $\Sigma 39(257)$ и $\Sigma 3(112)$ для оси разориентации $[111]$.

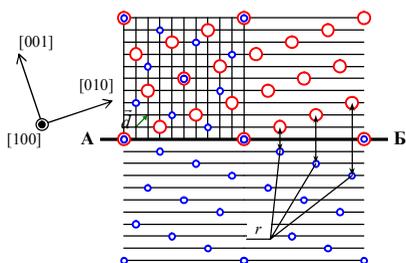


Рис. 1 Структура ГЗ в модели РСУ

Исходная конфигурация атомов была выбрана в модели РСУ (рис. 1). Часть атомов вблизи ГЗ находятся на расстоянии r , отличающемся от равновесного, что ведет к увеличению потенциальной энергии атомов. Величина r/r_1 (r_1 – радиус первой координационной сферы) показывает степень сближения или отдаления атомов. Области ГЗ, где величина $r/r_1 < 1$, оказываются в

напряженном состоянии сжатия, а $r/r_1 > 1$ – напряженном состоянии растяжения. С энергетической точки зрения атомы как находящиеся в стесненном состоянии, так и в разреженном дают увеличение потенциальной энергии. В результате большинство границ в модели РСУ имеют высокие значения энергии. Однако стабильная структура границы может быть получена из модели РСУ путем введения дополнительных атомов и вакансий в область ГЗ.

Этапы процедуры введения вакансий и атомов показаны на рис. 2. На первом этапе в исходной структуре в модели РСУ определялись области, где атомы находятся на расстоянии больше равновесного. Как видно из рис. 2а каждый структурный элемент содержит такую область. Для заполнения этих областей атомные плоскости одного из сопрягающихся кристаллов необходимо продлить вглубь второго (рис.2б). Таким образом, часть атомов заполняет «рыхлые» области. Варьируя значения глубины проникновения атомов в соседний кристалл можно определить количество атомов, которое необходимо внести в область ГЗ. На втором этапе определяются пары атомов, расстояние между которыми меньше некоторого минимального r_{min} . Величину r_{min} так же можно варьировать, что эквивалентно варьированию числа внесенных вакансий. На третьем этапе один из сближившихся атомов удаляется из ядра ГЗ (рис. 2в), после чего второй атом смещается в симметричное положение на плоскость границы (рис. 2г), образуя распределенную вакансию. Атомы, заполняющие «рыхлые» области так же смещаются в плоскость ГЗ. Данная процедура получила название *вакансионной релаксации* границы. Изменение энергии в процессе внедрения атомов и вакансий имеет вид кривых с минимумом. Минимумы приходятся на значение параметра $r/r_1 \sim 1,4$ при внедрении атомов и $0,7$ при введении вакансий. После проведения вакансионной релаксации энергия остается несколько завышенной. Это связано с тем, что атомы, за исключением тех, которые были помещены в плоскость ГЗ, остаются в узлах кристаллической решетки. Смещение атомов под действием межатомных сил дополнительно понижает энергию ГЗ. Данная процедура получила название *атомной релаксации*, и проводилась методом молекулярной статики.

Стабилизация атомной структуры границ хорошо иллюстрируется с помощью метода построения энергетических γ -поверхностей. Данный метод заключается в том, что сопрягающиеся кристаллы сдвигают друг относи-

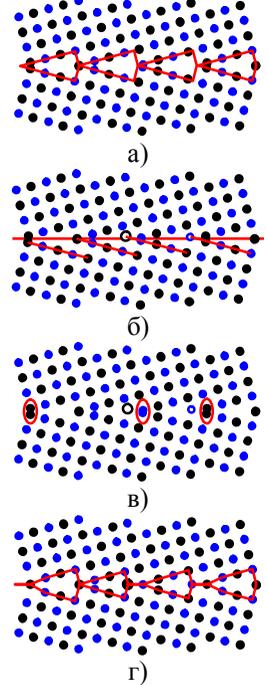


Рис. 2 Этапы проведения процедуры внедрения атомов и вакансий

тельно друга на различные векторы \vec{R} , лежащие в плоскости ГЗ. Для каждого положения сдвига рассчитывается потенциальная энергия границы. Высокие значения энергии показывают неустойчивые, а минимумы энергии стабильные и метастабильные состояния. На рис. 3 приведены примеры таких поверхностей, построенных в модели РСУ (рис. 3а), после проведения вакансионной релаксации (рис. 3б) и после атомной релаксации (рис.3в) для двух границ общего и специального типа.

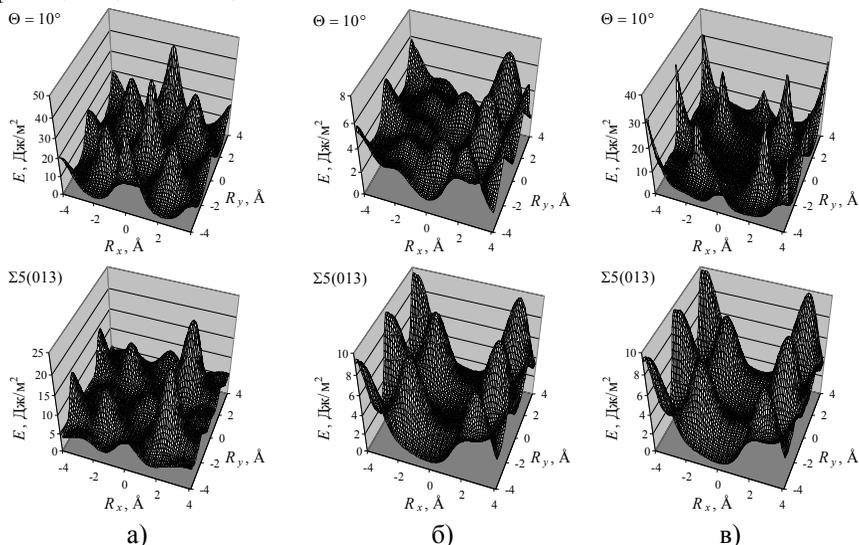


Рис. 3 Энергетические поверхности: а) в модели РСУ; б) после вакансионной релаксации; в) после атомной релаксации

Энергия всех ГЗ, соответствующая сдвигу $\vec{R}=0$ в модели РСУ, обладает высокой энергией, достигающей десятков Дж/м². Исключение составляет ГЗ специального типа $\Sigma 11(113)$. После проведения вакансионной релаксации относительному сдвигу $R_x = 0$ и $R_y = 0$ соответствуют минимумы потенциальной энергии с абсолютными значениями в пределах $0,8 \div 1,7$ Дж/м² для ГЗ общего типа и $0,4 \div 1,6$ Дж/м² для спецграниц. Проведение атомной релаксации для большинства ГЗ уменьшает эту энергию и увеличивает значение максимумов, причем положение минимумов и максимумов энергии остается неизменным.

Третья глава посвящена исследованию атомной структуры и энергии стабильных состояний ГЗ. Расчет свойств ГЗ методом компьютерного моделирования не может быть проведен с достаточной точностью, если не известна их атомная структура. Поэтому любые расчеты характеристик ГЗ требуют знания как можно более точных координат положений атомов в области дефекта. Используемая в настоящей работе модель позволяет построить границу в модели СЕ, отталкиваясь от структуры в модели РСУ при использова

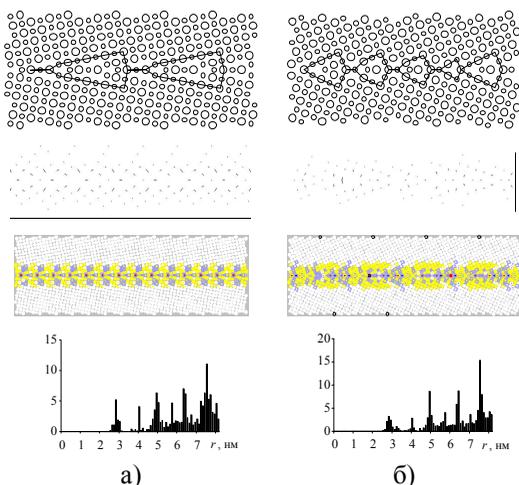


Рис. 4 Структура равновесных ГЗ:
а) специального типа; б) общего типа

ской ширине границ (h). На рис. 5 приведена зависимость ширины границы от величины максимального смещения атомов из узлов кристаллической решетки. Эта зависимость явно показывает отличие строения специальных и общих ГЗ. Смещение атомов связано с упорядоченностью атомной структуры границы – чем меньше смещение атомов, тем более упорядочена ее структура. Видно, что ширина спецграниц не зависит от величины максимального смещения атомов, тогда как для ГЗ общего типа прослеживается линейная зависимость.

Нарушение кристаллической структуры в области ГЗ приводит к тому, что атомы вблизи границы находятся в стесненном или «разреженном» состоянии. Характер локальных искажений (сжатия или растяжения) ведет к увеличению потенциальной энергии. Чтобы определить вид деформации, для каждого атома были рассчитаны расстояния до ближайших соседей в двух координационных сферах, что позволило определить характер искажений в локальной области, окружающей атом. Распределение деформаций в зернограничном слое приведено на рис. 4 в виде цветных картин. Оттенки синего цвета указывают на атомы в области растяжения: сине-фиолетовый цвет соответствует меньшему растяжению, темно-синий – большему. Красный и желтый цвета указывают на атомы в области сжатия. Наибольшему сжатию соответствует красный цвет.

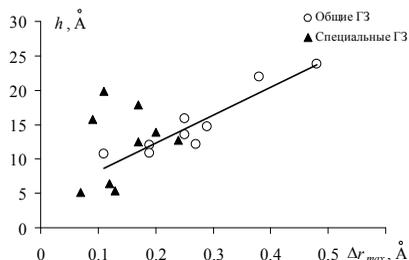


Рис. 5 Зависимость ширины ГЗ от величины максимального смещения атомов

Белым цветом обозначены ненапряженные атомы. Каждый атом представлен в виде круга, внутренняя часть которого окрашена в соответствии с напряжением ближайшего окружения, а наружная – рассчитанная по второй координатной сфере. Для всех специальных ГЗ наблюдается чередование областей сжатия и растяжения. Области растяжения по объемной доле преобладают по сравнению с областями сжатия, исключение составляет ГЗ $\Sigma 11(113)$, для которой в состоянии сжатия приходится по одному атому на структурную единицу. В малоугловых ГЗ общего типа области растяжения и сжатия четко чередуются. Размеры областей примерно одинаковы. Линии краевых дислокаций этих ГЗ проходят по границе областей сжатия и растяжения, и направлены вдоль оси разориентации ГЗ. Области сжатия и растяжения обширны и захватывают большие группы атомов. С увеличением угла разориентации поля напряжений границ рассеиваются, т.е. лишь небольшое окружение соседних с выбранным атомом находится в таком же состоянии (сжатия или растяжения).

Функция радиального распределения (ФРП) является важной характеристикой при анализе кристаллической структуры ГЗ. Расчет ФРП показал, что распределение атомов в области ГЗ для большинства границ отличается от распределения в области зерна. Исключение составляют две спецграницы $\Sigma 5(013)$ и $\Sigma 11(113)$. ФРП данных границ близко к распределению атомов в идеальном кристалле, что говорит об их правильном кристаллическом строении. Очевидно, что размытие ФРП вызвано в основном удалением части сильно сблизившихся атомов из области дефекта в процессе вакансионной релаксации, а также последующим сдвигом атомов из узлов кристаллической решетки на этапе атомной релаксации.

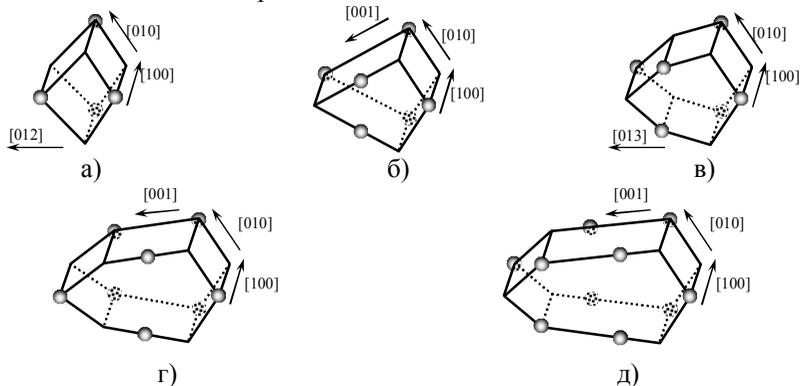


Рис. 6 Базовые структурные элементы ГЗ с осью разориентации $[100]$: а), б) и в) – большеугловые (тип A , A^* и B); г) и д) – малоугловые (тип C и D)

При более внимательном рассмотрении структуры индивидуальных ГЗ можно увидеть общие структурные особенности: каждый структурный элемент границ может быть представлен в виде набора групп атомов, причем набор таких групп для каждой оси разориентации строго ограничен. Напри-

мер, для границ с осью разориентации [100] таких групп обнаружено только пять. Большеугловые ГЗ состоят из базовых элементов типа A , A^* и B , малоугловые – C и D (рис. 6). Базовые элементы A и A^* являются соответственно релаксированной и РСУ структурой специальной границы $\Sigma 5(012)$, в элемент типа B – релаксированной структурой $\Sigma 5(013)$. Базовый элемент типа C является основой специальных ГЗ $\Sigma 25$ и $\Sigma 41$ с углами разориентации равны $16,26^\circ$ и $12,68^\circ$, а элемент типа D был обнаружен только в малоугловых границах с углом разориентации меньше 12° .

Анализ всего спектра границ, как специального, так и общего типа показал, что все границы с $\Theta \geq 54^\circ$ состоят из элементов типа A и A^* . По мере увеличения угла разориентации Θ , расстояние между структурными элементами растёт, и область бикристалла между ними представляет собой почти идеальный кристалл. Структурные элементы типа B встречаются в границах с $15 \leq \Theta \leq 50^\circ$. По мере уменьшения угла разориентации, расстояние между структурными элементами растёт, а область между ними представляет собой почти идеальный кристалл. Постепенная смена структурных элементов с типа B на тип C происходит, когда угол разориентации становится меньше 23° . По мере уменьшения углов малоугловых ГЗ в их структуре начинают преобладать базовые элементы типа D . На рис. 7 представлена «шкала» базовых структурных элементов, на которой обозначены границы углов разориентации в которых встречаются те или иные базовые элементы.

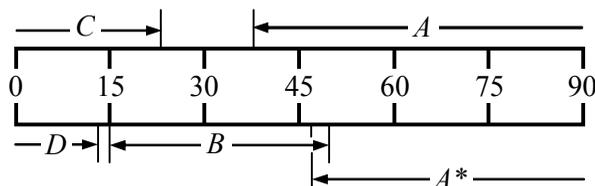


Рис. 6. «Шкала» базовых структурных элементов ГЗ с осью разориентации [100]

Одной из важнейших характеристик зернограницного ансамбля является зависимость энергии ГЗ от угла разориентации. Наиболее эффективным методом исследования энергии ГЗ является компьютерное моделирование. Таких расчетов накоплено достаточно много, но они проводятся, как правило, отдельно для ГЗ общего и специального типов, используя в каждом случае свои специфические методы. Такое раздельное исследование не позволяет провести сопоставление энергии различных ГЗ. Работы по исследованию энергии несимметричных границ практически отсутствуют.

После проведения вакансионной и атомной релаксации, межатомные расстояния в области ГЗ могут существенно отличаться от значений для идеальных кристаллов. При этом встречаются не только области сжатия, но и области растяжения, т.е. структура границы зерен не является однородной. Поэтому для таких протяженных дефектов, как ГЗ, имеет смысл говорить не только о средней зернограничной энергии E , но также и о локальной энергии E_b , зависящей от координаты внутри структурной единицы. Расчет локальной энергии проводился следующим образом. Плоскость ГЗ была разбита на ячейки размером $0,1 \times 0,1 \text{ \AA}$. Для всех атомов, проекция координат которых соответствовала выбранной ячейке, рассчитывалась потенциальная энергия. После чего была получена энергетическая поверхность в виде острых пиков, соответствующих положению каждого атома. На рис. 8 приведены поверхности, показывающие распределение локальной энергии, для границ специального (а) и общего (б) типа, а так же усреднение в поперечном сечении этой энергии вдоль ГЗ (рис. 8в и 8г).

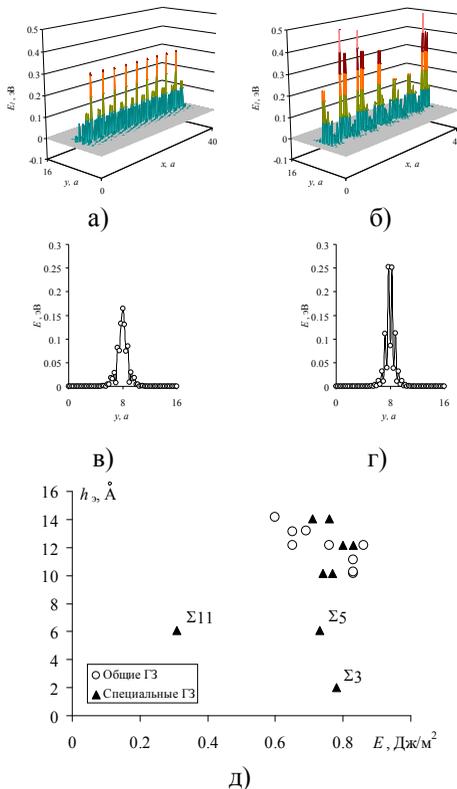


Рис. 8 Распределение энергии вдоль ГЗ специального (а) и общего (б) типа, в поперечном сечении для ГЗ специального (в) и общего (г) типа и зависимость энергетической ширины ГЗ от величины зернограничной энергии (д)

сти, показывающие распределение локальной энергии, для границ специального (а) и общего (б) типа, а так же усреднение в поперечном сечении этой энергии вдоль ГЗ (рис. 8в и 8г).

Из рисунков видно, что энергия локализована в тонком слое вблизи геометрической плоскости ГЗ. Распределение энергии имеет существенно неоднородный характер – наряду с участками с низкой энергией выделяются резкие пики высокой энергии. Участки с низкой энергией характеризуют те области ГЗ, в которых атомная плотность близка к плотности идеального кристалла. Энергетические пики соответствуют областям сжатия или растяжения. Общие ГЗ имеют высокие значения локальной энергии. Структура энергетического рельефа является квазипериодической и хорошо согласуется с квазипериодическим расположением совпадающих узлов в плоскости общих границ зерен. Локальная энергия специальных границ

зерен имеет строго периодический характер. Период энергетической зависимости соответствует одной структурной единице специальной ГЗ.

Используя полученное распределение энергии, можно определить толщину зернограничного слоя h как область, атомы которой имеют повышенную энергию по сравнению с энергией в области зерна. Для этого необходимо определить величину минимальной энергии, ниже которой кристалл можно считать идеальным. Тогда слой, содержащий атомы, с более высокой энергией, является зернограничным слоем. На рис. 8д представлены значения энергетической ширины ГЗ с пороговым значением 0.01 эВ от величины зернограничной энергии данных границ. Какой-либо зависимости ширины ГЗ от ее энергии не наблюдается. Это можно объяснить тем, что большинство границ не отличается друг от друга по физическим свойствам в силу своей структуры. Границы $\Sigma 3(112)$, $\Sigma 5(013)$ и $\Sigma 11(113)$ отделены от общей массы границ, причем какой-либо зависимости здесь тоже не наблюдается.

Локальная энергия индивидуальных ГЗ определяется их структурой, которая зависит от ориентации оси и угла разориентации. Поэтому зависимость энергии ГЗ от угла разориентации зерен $E = E(\Theta)$ является важной характеристикой, характеризующей зернограничный ансамбль в поликристалле в целом. В данной работе были проведены расчеты энергии как симметричных, так и несимметричных ГЗ. Массив симметричных границ составил 276 ГЗ общего типа для каждой оси разориентации. Углы разориентации варьировались от 5° до 60° с шагом $0,2^\circ$. Зависимости были построены для ГЗ в модели РСУ после вакансионной и атомной релаксации. В модели РСУ ГЗ имеют высокую энергию: для ГЗ типа [100] и [110] она составляет порядка 50 Дж/м^2 , а для ГЗ типа [111] – 30 Дж/м^2 . На зависимостях наблюдаются характерные провалы, соответствующие специальным ГЗ. Однако их энергия в большинстве случаев составляет порядка 10 Дж/м^2 .

После внедрения дополнительных атомов и вакансий в область ГЗ энергия понижается и не превышает $1,5 \text{ Дж/м}^2$. Среднее значение понизилось до $1,2 \text{ Дж/м}^2$. Большинство специальных границ имеют энергию, сравнимую с энергией ГЗ общего типа. Проведение атомной релаксации дополнительно понижает энергию ГЗ. На рис. 9 приведены эти зависимости. Видно, что после проведения всех видов релаксации большинство специальных ГЗ имеют энергию, сравнимую с энергией ГЗ общего типа. Выделенными на графиках остаются лишь границы $\Sigma 3(112)$, $\Sigma 5(013)$ и $\Sigma 11(113)$.

В работе так же проведены расчеты энергии симметричных ГЗ в никеле, золоте и меди. В целом, данные зависимости повторяют вид графиков для алюминия, однако есть и свои особенности. В частности это касается специальных ГЗ, которые являются выделенными на эти графиках. Набор таких границ варьируется в зависимости от материала, в частности, на рис. 9а для Al выделенной является только граница $\Sigma 5(013)$, тогда как для Cu и Ni пониженную энергию имеет так же ГЗ $\Sigma 29(025)$, а для Au – $\Sigma 29(025)$ и $\Sigma 53(027)$.

Для ГЗ с осью разориентации [110] выделенной является ГЗ $\Sigma 33(225)$ для всех металлов, кроме Al.

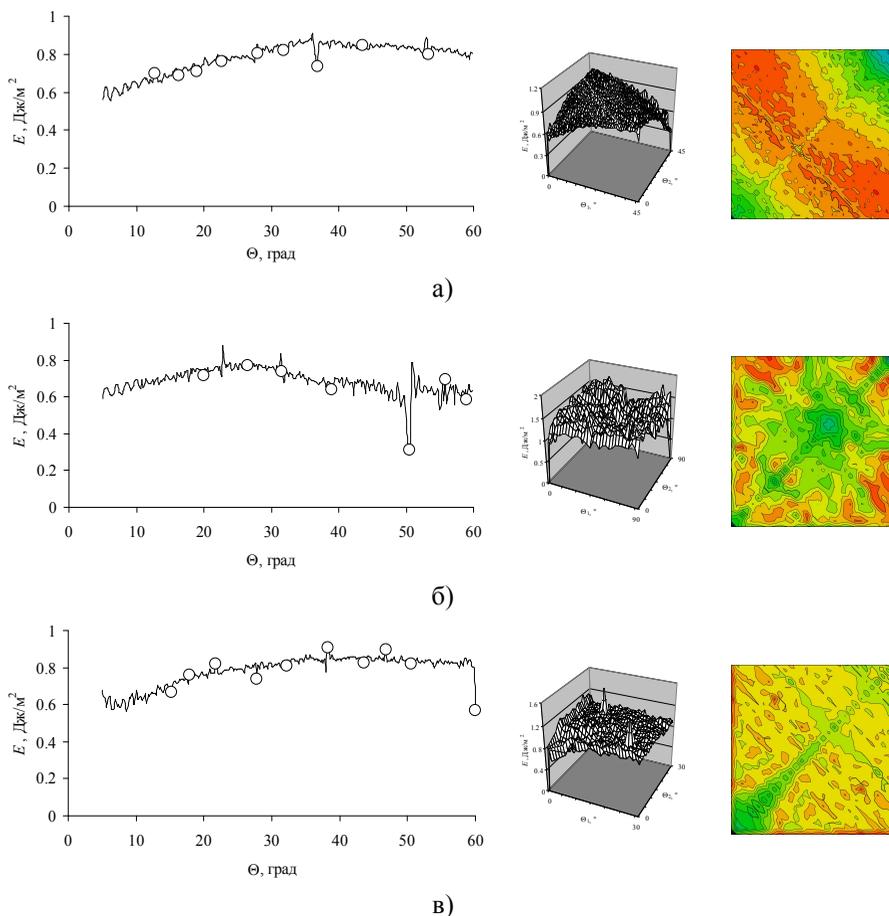


Рис. 9 Зависимость энергии границ зерен в алюминии после проведения атомной релаксации: а) ось разориентации [100]; б) ось разориентации [110]; в) ось разориентации [111]

В данной работе проведен расчет энергии несимметричных границ в зависимости от угла разориентации. Зависимости представлены в виде энергетических поверхностей и их «контурная карта», цвета на которой соответствуют видимому спектру электромагнитных волн, т.е. в порядке возрастания энергии следуют оттенки цвета: синий, зеленый, желтый и красный (рис. 9). Для границ с осью разориентации [100] углы поворота варьировались от 0° до 45° , а энергетическая поверхность имеет форму холма с вершиной, соответствующей углам разориентации, в сумме дающим значение 45° (рис. 9а). Энергия симметричных границ слабо отличается от несимметричных, сред-

ная энергия границ по всем углам разориентации составила $0,843 \text{ Дж/м}^2$. Для границ с осью разориентации $[110]$ углы поворота варьировались от 0° до 90° . Энергия симметричных границ ниже энергии несимметричных (рис. 10б). На поверхности наблюдается минимум, соответствующий симметричным границам с углом разориентации, близким к специальной границе $\Sigma 3(111)$ с углом разориентации $\Theta = 109,47^\circ$. Энергия этой границы была рассчитана отдельно и составила $0,109 \text{ Дж/м}^2$. Средняя энергия границ по всем углам разориентации составила $1,291 \text{ Дж/м}^2$. Для границ с осью разориентации $[111]$ углы поворота варьировались от 0° до 60° (рис. 9в). Энергия этих границ практически не зависит ни от угла разориентации, ни от плоскости их залегания. Энергия симметричных ГЗ несколько ниже энергии несимметричных границ. Средняя энергия границ по всем углам разориентации составила $0,939 \text{ Дж/м}^2$.

Одной из важнейших характеристик поликристаллов является избыточный объем. При компьютерном моделировании расчет избыточного объема может быть осуществлен посредством подсчета количества атомов в расчетной ячейке. Однако такой способ подсчета имеет свои недостатки. Это связано с тем, что степень сближения атомов различна и при удалении атома появляется свободный объем, величина которого, во-первых, не равна объему самого атома, во-вторых, различна и зависит от степени сжатия сближенных атомов в модели РСУ. Численные значения избыточного объема ГЗ так же зависят от того, какую область бикристалла учитывать при его расчете. Поскольку для большинства ГЗ энергетическая ширина составляла $3,5 \div 4,5$ параметра решетки, то для расчета свободного объема было выбрано значение $4a$. Значения относительного свободного объема для исследованных ГЗ приведены на рис. 10.

Избыточный объем границ общего типа с осями разориентации $[100]$ и $[111]$ колеблется в пределах $0,02 \div 0,04$, а для границ $[110]$ – порядка $0,1$.

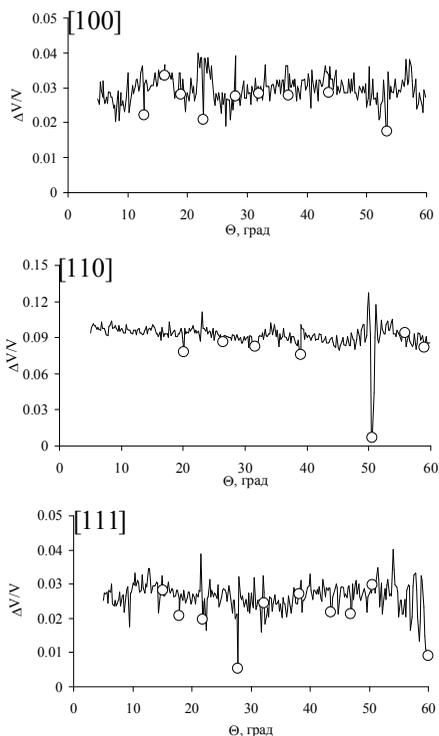


Рис. 10 Зависимость относительного избыточного объема ГЗ

Круглыми маркерами на зависимостях выделены специальные границы. Видно, что у одних спецграниц избыточный объем меньше, чем у границ общего типа, тогда как другие имеют сравнимый с ними избыточный объем. Сравнение графиков на рис. 11 и энергетических зависимостей $E = E(\Theta)$ приводит к выводу, что однозначной корреляции здесь не наблюдается.

В четвертой главе рассмотрены варианты атомной перестройки границ при малых температурах, процессы поглощения и испускания вакансий, варианты зернограницного скольжения.

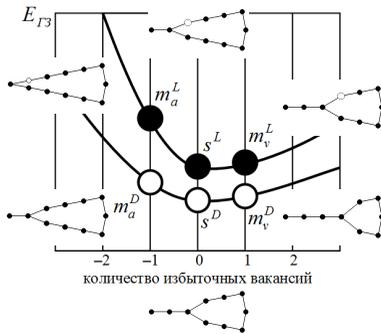


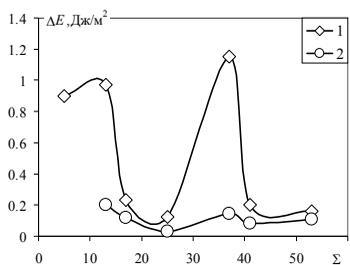
Рис. 11 Зависимость энергии ГЗ при введении избыточных вакансий

структурных вакансий. Атомная структура ядра стабильной ГЗ схематически изображена в нижней части рисунка. Чтобы испустить вакансию, необходима перестройка участка границы из состояния с распределенной в состояние с локализованной вакансией. Локализованная вакансия может мигрировать вглубь кристалла, обеспечивая, таким образом, их равновесную концентрацию. После испускания вакансии граница переходит в метастабильное состояние с избытком атомов m_a^D . Реакция перестройки границы в процессе испускания вакансий может быть записана следующим образом:

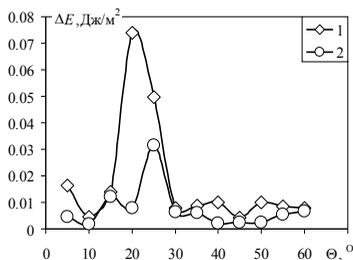


Этот процесс определяется энергией перехода ГЗ из распределенного состояния в локализованное и образованием метастабильной структуры с избытком атомов. Механизм поглощения вакансий сходен с механизмом их испускания. При поглощении вакансий необходимо, чтобы из зерна в ядро стабильной границы, попала вакансия (состояние m_v^L). Переход вакансии из локализованного состояния в распределенное приводит к образованию новой структуры (состояние m_v^D). Реакция поглощения вакансии может быть записана как:





а)



б)

Рис. 12 Изменение энергии ГЗ при переходе в метастабильные состояния: 1 – испускание вакансий; 2 – поглощение вакансий

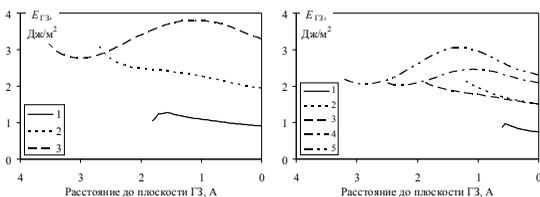
рают ее в данном положении. Для прояснения этого вопроса нами был поставлен компьютерный эксперимент по перемещению атомов в плоскость ГЗ. На рис. 13а представлены структурные элементы ГЗ $\Sigma 5(012)$ и $\Sigma 5(013)$, на примере которых рассмотрен данный переход. На рисунках цифрами «1», «2», ... обозначены атомы структурных элементов по мере их удаления от плоскости ГЗ. Из рисунков видно, что для обеих границ переход атома «1» из локализованного состояния в распределенное проходит через потенциальный барьер, величина которого составляет порядка 10% от величины зернограничной энергии. Смещение атома «2», соответствующее переходу типа

Эмиссия и адсорбция вакансий вызывает переход ГЗ из стабильного состояния в метастабильное состояние. На рис. 14 показаны графики изменения энергии специальных (а) и общих (б) границ при переходе в метастабильное состояние с избытком структурных вакансий m_v^D и с их недостатком m_a^D . Из рисунка видно, что имеется существенная асимметрия процесса – для испускания вакансий требуется энергия в два-три раза больше, чем для их поглощения. Приведенные графики соответствуют изменению структурной единицы на один атом, то есть удалению или добавлению в структуру протяженной ГЗ атомных рядов.

Хотя состояние границы с распределенными вакансиями энергетически более выгодно, нами был обнаружен потенциальный барьер при переходе типа $s^L \rightarrow s^D$. Это может быть связано с тем, что атомы, релаксируя вокруг локализованной вакансии, как бы запирают ее в данном положении.



а)



б)

Рис. 13 Изменение энергии в процессе перехода вакансии из локализованного состояния в распределенное

$m_v^L \rightarrow m_v^D$, происходит безбарьерно. Та же самая картина наблюдается для перехода $m_{2v}^L \rightarrow m_{2v}^D$ границы $\Sigma 5(013)$. Более удаленные от границы атомы при движении к границе преодолевают значительный потенциальный барьер. Причем энергия, соответствующая локализованному состоянию вакансий, для них ниже, чем распределенному. Данный факт объясняется атомной структурой приграничной области, а именно, вакансии, соответствующие позициям «3» для $\Sigma 5(012)$, «4» и «5» для $\Sigma 5(013)$, полностью окружены ближайшими соседями в позициях близких к идеальному кристаллу. Надо отметить, что хотя атомы «2» и движутся к границе безбарьерно, энергия такой ГЗ почти в два раза выше энергии стабильной ГЗ.

Пятая глава посвящена исследованию зернограничных процессов при высоких температурах. Структурные перестройки границ зерен под действием температуры связаны в основном с диффузионным движением атомов и вакансий.

На первом этапе исследования перестроек структуры при высоких температурах нами были проведены исследования процессов взаимодействия решеточных вакансий с границей зерен. Для этого мы отслеживали поведение вакансий, строго говоря, не принадлежащих границе. После построения бикристалла в него были введены восемь вакансий находящихся на разном расстоянии от плоскости ГЗ. Расстояния от вакансии до границы варьировались в пределах от $2a$ до $5,5a$, где a – параметр решетки. Для удобства представления вакансии были пронумерованы по мере удаления от ГЗ. Далее в ходе динамической релаксации отслеживались все скачки атомов, и при помощи программы-визуализатора строилась трехмерная картина, на которой скачки атомов изображались отрезками.

Исследование границ проводилось при температурах 600 К, 700 К, 800 К и 900 К. Расчеты показали, что перемещение решеточных вакансий носит в целом случайный характер. В связи с этим выводы о взаимодействии границы с вакансиями можно делать только на основе статистических данных. На рис. 14а представлены статистические данные по количеству вакансий ΔN , дошедших до плоскости ГЗ. Общее количество вакансий N составляло 18 (по количеству исследованных ГЗ). По горизонтальной шкале отложены номера вакансий, а по вертикальной доля ($\Delta N/N$) вакансий, дошедших до границы.

Учитывая, что расстояние от плоскости ГЗ до вакансии линейно зависит от ее номера, можно сделать вывод, что вероятность захвата вакансии границей линейно уменьшается с увеличением расстояния от ГЗ до вакансии. Рис. 14а так же показывает, что температура практически не влияет на эту зависимость. Разброс статистических значений связан с небольшим количеством исследованных ГЗ. Что касается статистики по отдельным осям ориентации, то их вид отличается от графиков, приведенных на рис. 14а только тем, что разброс в силу малого количества ГЗ более существенный.

В статистической выборке участвовали как специальные, так и общие ГЗ. В связи с этим представляет интерес рассмотреть взаимодействие вакансий с

границами по отдельности. На рис. 14б представлена статистика вакансий, пришедших в границу, для общих и специальных ГЗ, а также всего спектра ГЗ без учета температуры. В этом случае так же наблюдается линейная зависимость $\Delta N/N$ от номера вакансии, а, следовательно, и расстояния между вакансией и плоскостью ГЗ.

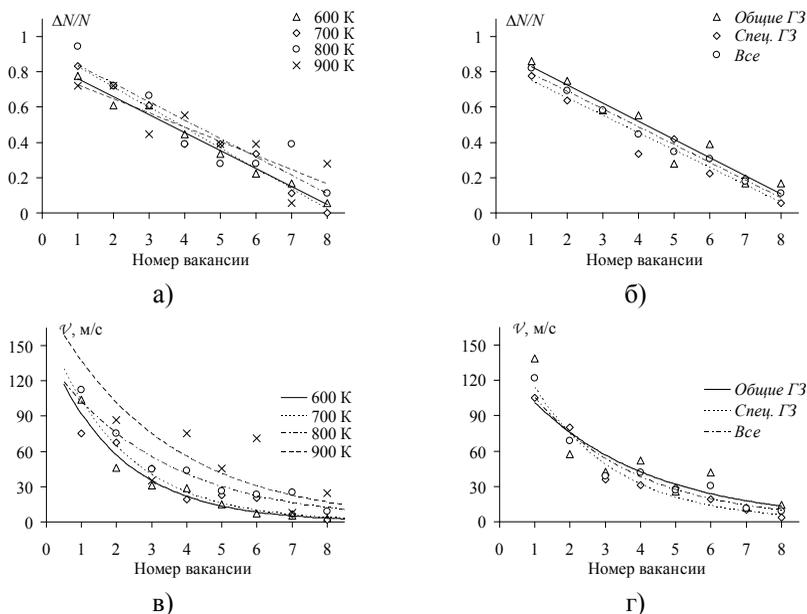


Рис. 14. Доля вакансий, дошедших до ГЗ (а и б) и средняя скорость миграции вакансий (в и г)

Усредненная скорость миграции вакансий может характеризовать силу взаимодействия вакансий с ГЗ. На рис. 14в приведены значения средних скоростей миграции вакансий при различных температурах по всему ансамблю границ. Здесь учитывались только те вакансии, которые в процессе миграции достигали области ГЗ. На всех четырех графиках наблюдается уменьшение скорости миграции вакансий \bar{v} при отдалении их от плоскости ГЗ по степенному закону. На рис. 14г приведены зависимости средних скоростей миграции вакансий к ГЗ без учета температуры. Зависимости также имеют такой же вид как для ГЗ общего и специального типов, так и для всего ансамбля границ.

Можно предположить, что уменьшение скорости миграции вакансии при отдалении от границы связано со способностью ГЗ притягивать вакансии. Однако, для того чтобы оценить это, мало ограничиться усредненными характеристиками. Для выяснения данного вопроса было проведено исследование треков атомов, пришедших в ГЗ. На рис. 15 приведены характерные за-

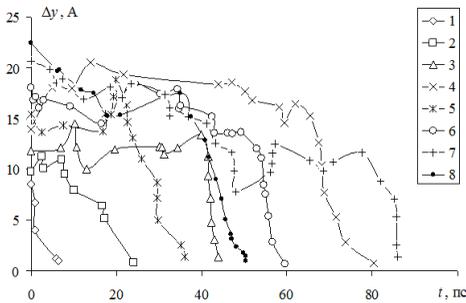


Рис. 15 Зависимость положения вакансий относительно плоскости ГЗ от времени

Вакансии, которые находятся далеко от границы, попадают в ГЗ только тогда, когда в результате случайных блужданий не попадут в некоторую область в непосредственной близости от границы, соответствующую двум-трем параметрам решетки. Таким образом, можно говорить о величине, которую обычно называют радиус захвата. Однако нахождение вакансии на расстоянии меньше радиуса захвата не означает ее безусловного прихода в ГЗ. Более того, как видно из рис. 14а лишь около 80% вакансий «1» оказываются захваченными.

Обобщение результатов моделирования по радиусам захвата $\Delta y_{кр}$ ГЗ и скоростям движения захваченных вакансий $v_{кр}$ приведена на рис. 16. Из рис. 16а видно, что с ростом температуры радиус захвата ГЗ увеличивается почти линейно, однако это увеличение составляет не более 20%. Отличие от линейной зависимости связано, видимо, с малым количеством исследованных ГЗ. Скорости движения захваченных вакансий значительно отличаются от средних скоростей миграции, что, очевидно, связано с воздействием границы на вакансию. Скорость движения растет линейно с увеличением температуры.

Еще одна особенность взаимодействия ГЗ с вакансиями состоит в том, в какую область границы они приходят. Из рис. 15 видно, что, например, вакансии под номерами «3» и «7» сначала приближаются к границе на расстояние меньше, чем радиус захвата, потом вновь удаляются от нее и затем, вновь, приближаясь, входят в область ГЗ. Это связано со сложной структурой границ. На рис. 17 изображены характерные примеры треков вакансий. Нами

висимости положения вакансий (Δy – расстояние от вакансии до плоскости ГЗ) относительно границы зерна от времени. Цифрами «1», «2», ... обозначены вакансии по мере их удаления от плоскости границы, причем из всего ансамбля выбрано только по одному характерному треку вакансий при температуре 600 К.

Из рисунка видно, что ближайшие к ГЗ вакансии приходят в границу практически сразу.

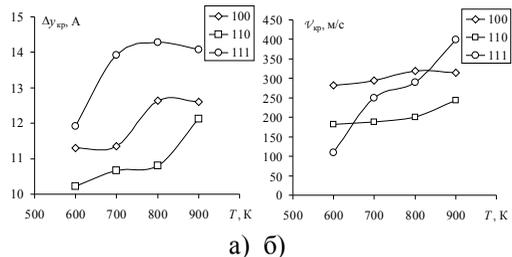


Рис. 16 Средний радиус захвата (а) и средняя скорость захваченных вакансий (б)

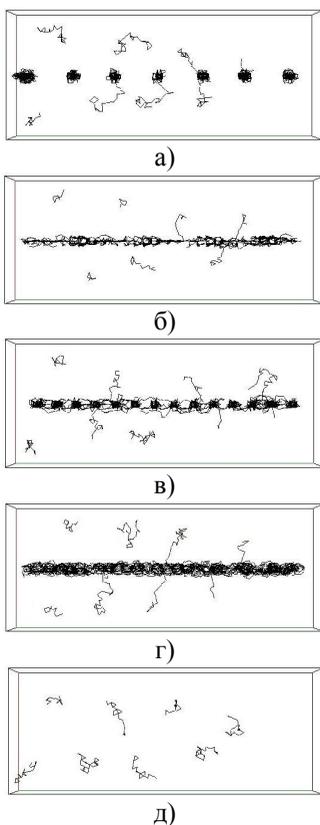


Рис. 17 Места входа вакансий в границу зерен

область, ширина которой сопоставима с моноатомным слоем. Треки, изображенные на рис. 17в и 17г, характерны для ГЗ общего типа с углами разориентации 30° и для границ специального типа. Сближение ядер дислокаций таких границ приводит к образованию сплошного диффузионного слоя (рис. 17г), либо почти сплошного слоя (рис. 17в). Как видно из этих рисунков, вакансии входят в плоскость таких границ практически в любом месте. И, наконец, для некоторых границ характерно полное отсутствие диффузионного движения вдоль плоскости ГЗ, либо это движение очень незначительное (рис. 17д). К таким границам относятся, например, специальные ГЗ $\Sigma 3$ и $\Sigma 11$. В этом случае характер миграции решеточных вакансий никак не связан с наличием ГЗ, т.е. вакансии если и попадают в границу, то совершенно случайно.

Изучение самодиффузии атомов по ГЗ преследовало следующие цели: анализ анизотропии атомных перескоков, изменение механизмов самодиффу-

было выделено пять различных типов границ, по-разному взаимодействующих с решеточными вакансиями.

На рис. 17а представлена малоугловая граница. Как видно из рисунка диффузионное движение вакансий в области границы сосредоточено в вершинах дислокаций. Именно эти области и являются стоками решеточных вакансий. Данный рисунок поясняет, почему некоторые вакансии, сблизившись с границей, не сразу и не обязательно являются захваченными ей: если вакансия приблизилась к плоскости ГЗ на расстояние меньше радиуса захвата, но при этом находится далеко от ядра дислокации, то в результате теплового движения она может удалиться от границы. При этом края зоны захвата имеют волнообразный вид, что и согласуется с характером распределения напряжений сжатия и растяжения в области ГЗ.

На рис. 17б изображены треки, характерные для большеугловой ГЗ общего типа при температурах (600 К и 700 К). Движение вдоль границы является неоднородным. Толщина диффузионного слоя меняется вдоль ГЗ. Решеточные вакансии могут приходить в любую область границы. Например, вакансии «1» и «2» приходят в область с широким диффузионным слоем, а вакансия «3» в об-

зии, связанное с перестройкой ГЗ, и получение параметров построением арениусовых зависимостей.

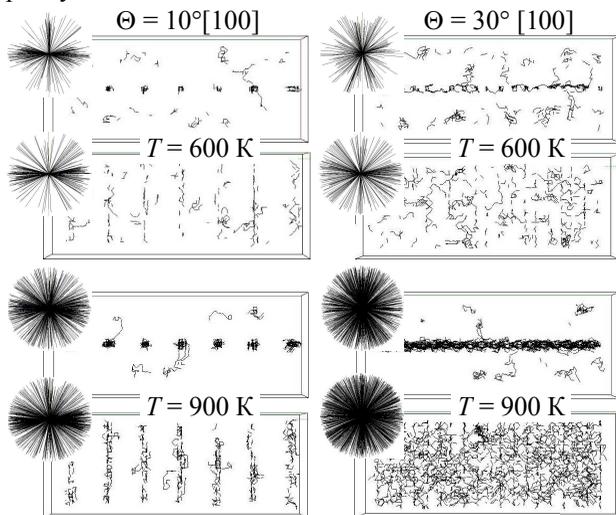


Рис. 18 Диаграммы перескоков и диффузионные треки ГЗ общего типа

Анализ анизотропии перескоков атомов проводился по нижеприведенной методике. В течение некоторого интервала времени отслеживались все скачки атомов в области дефекта. Далее определялись координаты начального и конечного положения атомов. Затем все отрезки совмещались точками своих начальных положений. В результате получалась трехмерная фигура, дающая наглядное пред-

ставление о направлениях и анизотропии элементарных перескоков атомов в процессе диффузии. Построение треков атомов позволяет выявить преимущественные механизмы диффузии ГЗ.

На рис. 18 представлены диаграммы перескоков и треков атомов при температурах 600 К и 900 К границ общего типа. Для всех таких типов характерно неравномерное распределение направлений перескоков атомов при низких температурах. Особенно это проявляется для ГЗ с осью разориентации [111]. Другой характерной особенностью является явно

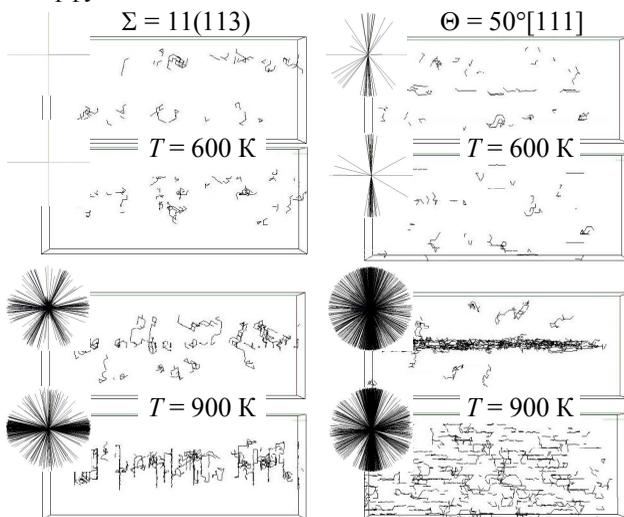


Рис. 19 Характерные диаграммы перескоков и диффузионные треки ГЗ с осями разориентации [110] и [111]

выраженная анизотропия перескоков для малоугловых границ, как при любых температурах. Диффузия атомов всех малоугловых границ ($\Theta = 10^\circ$) проходит по трубочному механизму при всех температурах. Для большеугловой границы $\Theta = 30^\circ$ так же наблюдается трубочная диффузия, но ее каналы располагаются близко друг к другу, поэтому с увеличением температуры все больше атомов перескакивают из одного канала в другой. Кроме того, ширина зернограничного слоя, в котором происходит диффузионное движение, увеличивается.

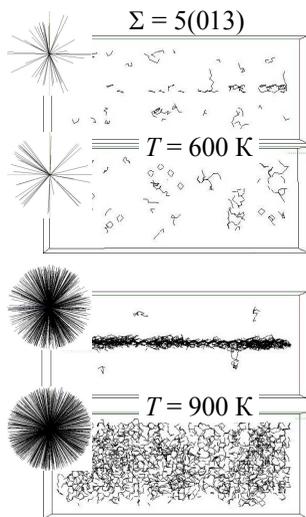


Рис. 20 Диаграммы перескоков и диффузионные треки ГЗ $\Sigma 5(013)$

Параметры самодиффузии находились из наблюдений за перемещением атомов в процессе нагрева кристалла, содержащего границу. Определялось среднее число перескоков атомов в единицу времени в единице объема – частота перескоков Γ . Объем области ГЗ, в котором учитывался перескок атомов, представляет собой слой толщиной $2a$, в центре которого находится плоскость границы. Коэффициент самодиффузии D_{GB} находится по формуле

$$D_{GB} = \frac{1}{6} \alpha^2 \Gamma = \frac{1}{12} a^2 \Gamma \quad (4)$$

где α – расстояние, на которое атом совершает скачок в процессе диффузии. Для вакансионного механизма $\alpha = r_1 = a\sqrt{2}/2$ длина перескока равна кратчайшему межатомному расстоянию r_1 – радиусу первой координационной сферы. Длина скачка для других механизмов диффузии считалась такой же.

На рис. 21 приведены температурные зависимости $\ln D_{GB}$, рассчитанные для зернограничной самодиффузии в границах общего типа. Видно, что для

Анализ траекторий движения атомов в границах типа $[110]$ показал (рис. 19), что низкотемпературная диффузия в них протекает по вакансионному механизму, а при повышении температуры – связана с коллективным смещением атомов вдоль линии краевых дислокаций, из которых состоит граница. Перескоки атомов границ типа $[111]$ происходят преимущественно вдоль плоскости ГЗ в направлении, перпендикулярном оси разориентации, т.е. по зернограничным вакансиям.

Особое место в ряду специальных ГЗ занимает граница $\Sigma 5(013)$ с осью разориентации $[100]$. Для данной границы с увеличением температуры хаотическая составляющая проявляется гораздо более явно, чем у других специальных ГЗ. Уже при температуре 700 К практически отсутствуют выделенные направления перескоков. А при температурах 800 К и 900 К перескоки носят явный анизотропный характер (рис. 20).

границ с осью разориентации [100] графики имеют излом при некоторой температуре: для малоугловой границы $\Theta = 10^\circ$ приблизительно 700 К, а для большеугловых границ $\Theta = 30^\circ$ и $\Theta = 50^\circ$ соответственно 750-800 К. Границы с осью разориентации [110] имеют по три линейных участка. Изломы соответствуют температурам 700 К и 900 К для границ $\Theta = 10^\circ$ и $\Theta = 50^\circ$. Граница $\Theta = 30^\circ$ имеет изломы при температурах 700 К и 800 К. Зависимости для границ с осью разориентации [111] вовсе не имеют изломов.

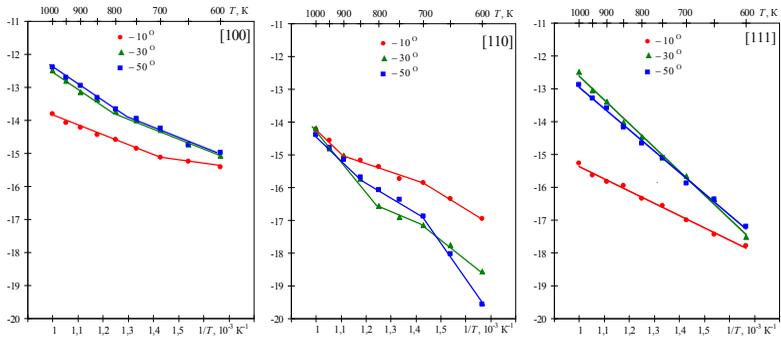


Рис. 21 Температурные зависимости $\ln D_{GB}$, рассчитанные для зернограничной самодиффузии по ГЗ общего типа

На рис. 22 представлены температурные зависимости $\ln D_{GB}$, рассчитанные для зернограничной самодиффузии границ специального типа. Зависимости коэффициента диффузии для спецграниц с осями разориентации [100] и [110] имеют по одному излому, а ГЗ типа [111], как и границы общего типа с этой осью разориентации, имеют всего лишь один линейный участок.

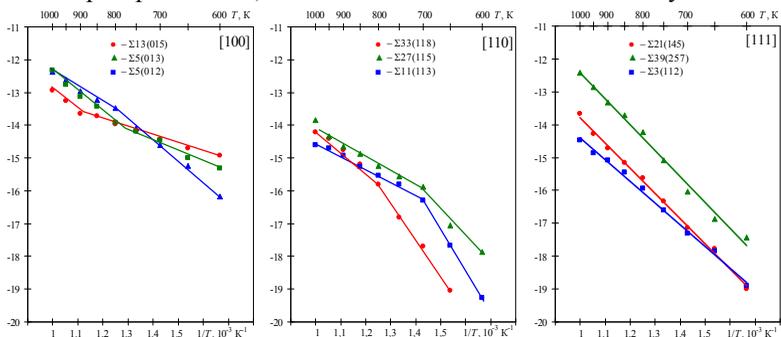


Рис. 22 Температурные зависимости $\ln D_{GB}$, рассчитанные для зернограничной самодиффузии по ГЗ специального типа

Изменение наклона графиков происходит при различных температурах. Самое высокое значение, близкое к температуре плавления, имеет граница $\Sigma 13(015)$. Для границы $\Sigma 33(118)$ это значение составляет 800-850 К; $\Sigma 5(012)$

и $\Sigma 5$ (013) – 750-800 К; $\Sigma 27$ (112) и $\Sigma 11$ (113) – 700-750 К. Кроме этого наклон некоторых графиков специальных ГЗ, в отличие от границ общего типа, уменьшается при высоких температурах. Это наблюдается для $\Sigma 5$ (013) и всех спецграниц с осью разориентации [110]. Энергия активации зернограничной диффузии, рассчитанная по аррениусовским зависимостям в 4-5 раз ниже энергии активации объемной самодиффузии в алюминии (~200 кДж/моль). Минимальное значение энергии активации имеет малоугловая граница с осью разориентации [100] (10,15 кДж/моль), максимальное (104.12 кДж/моль) – специальная граница $\Sigma 11(113)$.

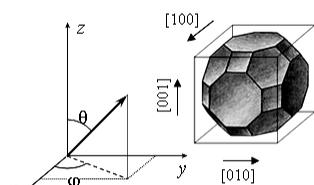


Рис. 23 Внешний вид моделируемого кристалла

Хорошо известно, что вещества с нанометровым размером зерен проявляют уникальные физико-механические свойства. Эта уникальность обусловлена большой долей границ раздела. В нашей работе сделана попытка изучения влияния ГЗ на эволюцию наночастицы при определенной температуре. Исследовались нанокластеры, окруженные металлической матрицей – идеальным кристаллом, из того же материала, что и кластер.

Кластер представлял собой усеченный куб-октаэдр, полученный путем отсечения у куба ребер плоскостями типа $\{110\}$ и углов плоскостями типа $\{111\}$. В результате кластер имел форму многогранника, ограниченного наиболее плотноупакованными кристаллографическими плоскостями типа $\{100\}$, $\{110\}$ и $\{111\}$ (рис. 23). Ближайшее расстояние до каждой грани (параметр R) задавалось при моделировании кластера и характеризует его линейные размеры. Сформировав кластер, его поворачивали относительно геометрического центра на азимутальный (ϕ) и радиальный (θ) углы, после чего окружали матрицей. При этом кристаллографические направления решетки матрицы соответствуют кристаллографическим направлениям неповернутого кластера. Следовательно, внутренние границы раздела «кластер-матрица» являются плоскими ГЗ смешанного типа. Как и в случае индивидуальных ГЗ систему подвергали вакансионной и атомной релаксации. Расчеты показали, что после проведения стабилизационных процедур энергия нанокластеров не зависит от их ориентации в матрице.

Для исследования поведения нанокластера, окруженного металлической матрицей, были выбраны кластеры с параметром R равным 1, 1,5, 2, 2,5, 3, 3,5 и 4 нм. Для каждого размера R было выбрано по 8 комбинаций азимутального и радиального углов поворота (ϕ и θ): 10–0; 20–0; 30–0; 40–0; 10–10; 20–20; 30–30; 40–40. Нанокластеры выдерживались при температуре 600 К, в течении 10000 шагов, что соответствовало времени 100 пс. Граничные условия были жесткими. Удаленность закрепленных атомов от границы «кластер-матрица» составляла более пяти параметров решетки. Это позволяет утверждать, что закрепленные атомы не оказывают силового воздействия на атомы, находящиеся вблизи границы. В процессе работы программы отслежива-

лось диффузионное движение атомов, создавался видеофайл перемещения атомов в сечении, соответствовавшем середине кластера, и производилась запись потенциальной и кинетической энергии, приходившейся в среднем на один атом расчетной ячейки.

Проведение тестовых расчетов показало, что все кластеры «растворяются» в матрице. Динамика диффузионного движения атомов кластера и кадры видеоряда его растворения кластера представлены на рис. 24.

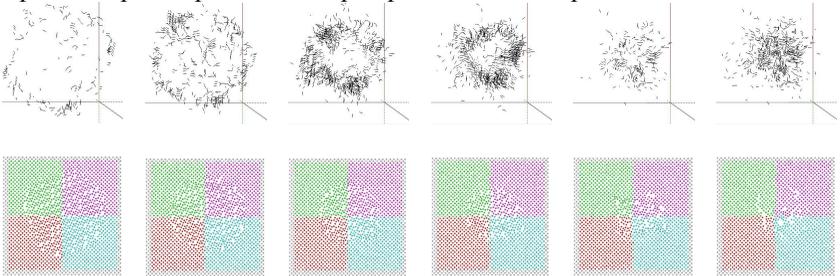


Рис. 24 Динамика диффузионного движения атомов в интервалах (слева направо): 0÷10 пс; 10÷20 пс; 20÷30 пс; 30÷40 пс; 40÷50 пс; 50÷60 пс

Видно, что диффузионное движение атомов происходит только на границе «кластер-матрица». Данное обстоятельство обусловлено наличием большого количества структурных вакансий на границе. Эти вакансии создают избыточный объем, который в значительной степени оказывает влияние на поведение системы. Так же видно, что процесс растворения не сопровождается изменением внутренней структуры кластера, а идет только по границе «кластер-матрица». На основе полученных экспериментальных данных по диффузионному движению атомов, видеоряду и динамике потенциальной энергии нами были установлены закономерности времени растворения кластера в матрице. Эти результаты отражены на рис. 25

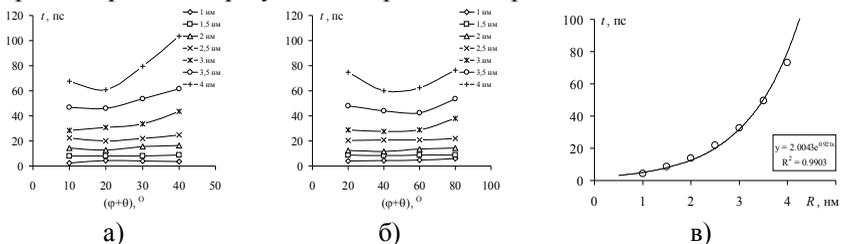


Рис. 25 Зависимость времени растворения кластера от ориентации относительно матрицы (а) и (б) и от размеров (в)

На рис. 25а представлена зависимость времени растворения кластера с нулевым углом θ , а на рис. 25б изображены зависимости времени растворения кластера с ненулевым углом θ . Из рисунка видно, что для кластеров размером $R = 2,5$ нм и менее отсутствует зависимость времени растворения от их ориентации относительно матрицы. Кластеры больших размеров раство-

ряются за разное время, и какой-либо тенденции от ориентации в матрице не наблюдается. Зависимость среднего времени аннигиляции от размеров кластера (рис. 25в) носит явный экспоненциальный характер.

В шестой главе предпринята попытка исследовать фазовый переход кристалл-жидкость в области границы зерен. При этом мы постарались использовать несколько различных подходов. Первым из них является расчет функции радиального распределения атомов. Хорошо известно, что в жидкостях реализуется такая конфигурация атомов, когда сохраняется ближний порядок их расположения при отсутствии дальнего порядка, что влияет на вид кривой ФРР. Для таких сложных дефектов как ГЗ ФРР является размытой. Это хо-

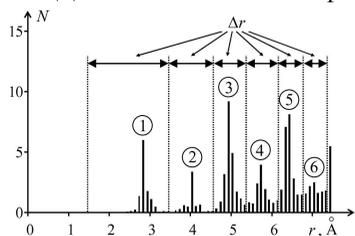


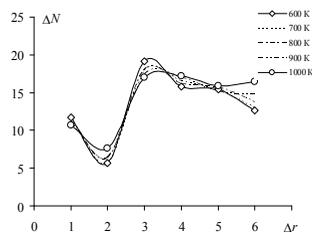
Рис. 26 Функция радиального распределения ГЗ

сохраняется.

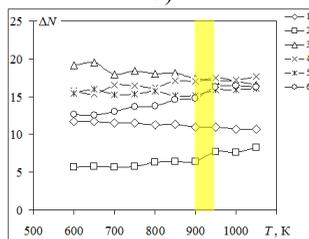
При переходе в жидкое состояние кривая ФРР претерпевает изменения – аморфизация структуры приводит к тому, что, начиная с третьей координационной сферы, значения ФРР практически не меняются. Для отслеживания изменения нами была введена интегральная ФРР, отражающая количество атомов ΔN , находящихся в шаровом слое, границы которого обозначены на рис. 26 как Δr . Использование такого приема позволило значительно сократить расчетное время проведения эксперимента, и упростило анализ динамики процесса плавления.

Известно, что в аморфном материале присутствует ближний порядок, т.е. при переходе кристалла с ГЦК решеткой в аморфное состояние число ближайших соседей не изменяется. В жидкости также реализуется принцип плотной упаковки, однако, за счет снижения плотности жидкой фазы среднее число ближайших соседей уменьшится. Если в ГЦК решетке координационное число равно 12, то в жидкости оно близко к 11. Это может служить

рошо видно из рис. 26, на котором приведена ФРР для ГЗ общего типа, рассчитанная при температуре $T = 0$ К. Цифрами, заключенными в кружок, обозначены пики, соответствующие значению r равному радиусу 1-й, 2-й и т.д. координационных сфер. Рисунок показывает, что даже при абсолютном нуле температур далеко не все атомы точно находятся на координационных сферах, однако кристалличность



а)



б)

Рис. 27 Динамика изменения интегральной ФРР в процессе нагрева в толще зерна

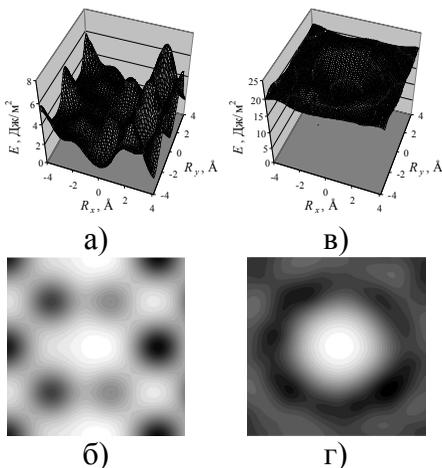


Рис. 28 Энергетические поверхности и контурные графики для ГЗ общего типа: а) и б) $T = 0$ К; в) и г) $T = 950$ К.

интегральной ФРП от температуры. Из рисунка видно, что вплоть до температуры 900 К кривая, соответствующая второй координационной сфере, практически горизонтальна. Резкое изменение ΔN_2 заметно между температурами 900 К и 950 К. При этом для первой координационной сферы значение при температуре 900 К оказалось равным 11,25, а при 950 К – 10,81. Для остальных четырех сфер значения становятся практически одинаковыми, что свидетельствует об аморфизации атомной структуры. Таким образом, можно утверждать, что расплав кристалла произошел при температурах между 900 К и 950 К, что согласуется с экспериментальными данными (температура плавления алюминия 933 К).

Другим критерием расплава кристалла можно считать отсутствие потенциального барьера напряжению сдвига. Для этого на разных этапах нагрева кристалла нами проводилось построение энергетических поверхностей. На рис. 28 приведены поверхности и их «контурные карты» при температурах 600 К и 950 К монокристалла с равновесным количеством вакансий. При низкой температуре энергетическая поверхность отражает атомную структуру плоскости (100). При плавлении происходит нарушение регулярного расположения атомов. Отсутствие на ней пиков и выделенных направлений наилегчайшего скольжения означает аморфизацию атомной структуры (рис. 28в и 28г). Кроме того, в отличие от кристалла, не существует выделенных направлений наилегчайшего скольжения, а на расстоянии равном радиусу первой координационной сферы от точки $R_x = 0$ $R_y = 0$ наблюдается максимум энергии практически во всех направлениях сдвига. Это говорит о том, что нарушается дальний порядок расположения атомов, но сохраняется ближний.

Еще один способ определения интервала плавления, который был нами использован – по видеоряду атомной структуры кристалла, которая записы-

критерием образования жидкой фазы.

На рис. 31 приведены графики изменения величины ΔN в процессе нагрева монокристалла с равновесным количеством вакансий. Видно (рис. 31а), что в процессе нагрева амплитуда осцилляций ΔN уменьшается, однако характер кривых остается похожим. Это свидетельствует о кристаллическом характере структуры кристалла. При температуре 1000 К кривая соответствует расплавленному кристаллу, поскольку значение интегральной ФРП четвертой, пятой и шестой сферы выравниваются. На рис. 31б представлена динамика изменения

валась в avi-файл. Одному кадру видеоряда соответствовал шаг по температуре 10 К. Суть метода заключалась в том, что разбив кадр на ячейки, программа отслеживала положение атомов. Размер ячеек был выбран таким, что в одну ячейку мог попасть только один атом. Перебирая атомы, программа определяла сходство в «заселении» ячеек. Если программа фиксировала такое сходство, то расплавления не произошло. Напротив, если такого порядка нет, то кристалл считался расплавленным. Критерием разупорядочения системы может служить значение статистической суммы «заселения» ячеек.

Проведение расчетов по описанной методике показало, что большинство границ имеют температуру плавления ниже, чем монокристалл с равновесным количеством вакансий. Из ГЗ общего типа сохранили кристаллическую структуру вплоть до температуры плавления поликристалла, все малоугловые границы и ГЗ $\Theta = 50^\circ[110]$, атомная структура которой близка к структуре границы $\Sigma 11(113)$, которая в свою очередь также имеет высокую температуру плавления. Самую низкую температуру плавления имеет специальная граница $\Sigma 5(012)$. Полученные результаты показывают, что зернограничное плавление происходит для большинства границ в интервале $0,85T_{пл} \div 0,95T_{пл}$, где $T_{пл} = 933$ К – температура плавления алюминия.

ОСНОВНЫЕ ВЫВОДЫ И РЕЗУЛЬТАТЫ

1. Разработана новая структурно-вакансионная модель ГЗ наклона в металлах. Определены критерии построения стабильной атомной структуры ГЗ.
2. Структура ГЗ можно быть представлена как чередование от одного до трех базовых структурных элементов. Определены атомные конфигурации базовых структурных элементов.
3. Границы зерен могут существовать в двух состояниях – с распределенными и с локализованными зернограничными вакансиями. Переход границы из стабильного состояния с локализованными вакансиями к состоянию с распределенными вакансиями осуществляется с преодолением потенциального барьера. Обнаружены устойчивые метастабильные состояния ГЗ, возникающие вследствие поглощения и испускания вакансий.
4. Эффективность общих границ зерен как стоков и источников вакансий на порядок выше, чем специальных ГЗ. Обнаружена асимметрия процесса поглощения и испускания вакансий – генерация вакансий сопровождается большим повышением энергии ГЗ, чем при их поглощении.
5. Энергия ГЗ локализована в тонком слое вблизи геометрической плоскости границы. Распределение энергии имеет периодический характер, соответствующий структуре ГЗ. По энергетическим профилям локальной энергии определена энергетическая ширина ГЗ.
6. Энергия малоугловых ГЗ ($\Theta < 25^\circ$) монотонно возрастает с ростом угла разориентации. Энергия большеугловых ГЗ не зависит от угла разориентации. Большинство специальных ГЗ не являются выделенными на энергетической кривой. Количество энергетически выделенных границ составляет от

одной до трех специальных ГЗ на каждую ось разориентации в зависимости от материала.

7. Взаимодействие решеточных вакансий с ГЗ носит в целом статистический характер. С ростом расстояния до границы вероятность захвата вакансий уменьшается линейно, а средняя скорость миграции захваченных вакансий – экспоненциально. Радиус захвата вакансий границами зерен увеличивается с ростом температуры, а внешний вид области захвата зависит от типа границ и определяется видом области напряжений растяжения-сжатия ГЗ. Выявлено четыре типа границ различным образом взаимодействующих с решеточными вакансиями: ГЗ с дислокационной структурой, в которой вакансии взаимодействуют преимущественно с ядрами дислокаций; ГЗ с нерегулярной структурой – взаимодействие происходит с наиболее напряженными участками границы; ГЗ с регулярной структурой – взаимодействие осуществляется по всей поверхности ГЗ; высококогерентные границы, которые практически не являются стоками вакансий.

8. Определены преимущественные механизмы самодиффузии и доминирующие направления перемещения атомов. Диффузия атомов в малоугловых границах проходит по трубочному механизму. С увеличением угла разориентации в зависимости от структуры ГЗ преобладает вакансионный механизм, либо миграция атомов по зернограницным вакансиям. Показано, что перескоки атомов при температурах $0,65 \div 0,80 T_{пл}$ имеют выделенные направления, а с увеличением температуры меняются в сторону хаотической составляющей.

9. Зависимости Аррениуса имеют по одному, два или три линейных участка: для ГЗ с осью разориентации $[111]$ – один, общие ГЗ с осью разориентации $[110]$ – по три, остальные по два участка. Определены параметры зернограницной диффузии. Изменение наклона аррениусовских зависимостей связано со сменой механизма диффузии в результате перестройки ГЗ. Значение энергии активации зернограницной диффузии в 4-5 раз ниже энергии активации объемной самодиффузии (~ 200 кДж/моль) и лежит в пределах от 10,15 кДж/моль до 104,12 кДж/моль.

10. Разработана методика определения температуры плавления ГЗ. Методика опирается на динамику изменения ФРР, относительный сдвиг зерен и динамику перемещения атомов в области ГЗ. В соответствии с методикой рассчитаны температурные интервалы плавления девяти специальных ГЗ и девяти ГЗ общего типа. Малоугловые ГЗ и граница $\Sigma 11(113)[110]$ более устойчивы к воздействию температуры. Все остальные границы плавятся при температурах ниже температуры плавления монокристалла с равновесным количеством вакансий. Ширина расплавленной зоны колеблется от очень узкой (менее 2-х параметров решетки) до очень широкой (более 4 параметров решетки).

ОСНОВНЫЕ ПУБЛИКАЦИИ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

Статьи в журналах и сборниках статей

1. **Векман А.В.**, Демьянов Б.Ф., Драгунов А.С. Моделирование границ зерен: роль потенциала межатомного взаимодействия // Известия АлтГУ. 2018. №1(99). С.11-18.
2. **Векман А.В.**, Агейкова Л.Н., Демьянов Б.Ф. Базовые структурные элементы специальных границ зерен наклона с осью разориентации [110] // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2017. – Т.14, №4. – С.480-485
3. **Векман А.В.**, Демьянов Б.Ф. Базовые структурные элементы границ зерен наклона с осью разориентации [100] // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2017. – Т.14, №3. – С.393-397
4. Demyanov B.F., Markin V.B., **Vekman A.V.**, Ageykova L.N. Structure and Properties of Intercrystalline Boundary between Coating and Substrate // Central-Asian Material Science Journal. – 2015. – Iss.1. – P.24-29
5. **Векман А.В.**, Демьянов Б.Ф. Устойчивость нанокластеров алюминия в матрице идеального кристалла // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2015. – Т.12, №4. – С.393-397
6. **Векман А.В.**, Демьянов Б.Ф., Драгунов А.С. Молекулярно-динамическое исследование взаимодействия вакансий с симметричными границами зерен наклона в алюминии // ФММ. – 2015. – Т.116, №6. – С.621-626
7. **Weckman A.V.**, Demyanov B.F., Dragunov A.S. Molecular-dynamic investigation of the interaction of vacancies with symmetrical tilt grain boundaries in aluminum // The Physics of Metals and Metallography. – 2015. – V.116, N6. – P.586-591
8. **Векман А.В.**, Демьянов Б.Ф., Драгунов А.С. Моделирование процесса плавления границ зерен в алюминии // Известия ВУЗов. Физика. – 2015. – Т.58, № 12. – С.58-65
9. **Weckman A.V.**, Demyanov B.F., Dragunov A.S. Simulation of the process of grain-boundary melting in aluminum // Russian Physics Journal. – 2016. – V.58, N12. – P.1732-1740
10. **Weckman A.V.**, Demyanov B.F., Dragunov A.S., Ageikova L.N. Atomic structure influence on thermodynamic properties of special tilt grain boundaries $\Sigma 5$ and $\Sigma 11$ / In book: Effect of external influences on the strength and plasticity of metals and alloys Book of the International seminar articles. Edition in Chief: Professor Sc. D., Starostenkov M.D. – Барнаул: ООО НИЦ "Системы управления", 2015. – P.125-126
11. **Векман А.В.**, Демьянов Б.Ф., Драгунов А.С. Исследование процесса плавления границы зерен в алюминии // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2014. – Т.11, №2. – С.228-234
12. **Векман А.В.**, Демьянов Б.Ф., Шмаков И.А. Коэффициенты зернограницной самодиффузии в алюминии (компьютерный расчет) Известия Алтайского государственного университета. 2013. № 1-2 (77). С. 141-145

13. **Векман А.В.**, Драгунов А.С., Демьянов Б.Ф., Адарич Н.В. Энергетический спектр границ зерен наклона в меди // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2012. – Т.55, № 7. – С.65-71
14. **Weckman A.V.**, Dragunov A.S., Demyanov B.F., Adarich N.V. Energy spectrum of tilt grain boundaries in copper // Russian Physics Journal. – 2012. – V.55, N7. – P.799-806
15. **Векман А.В.**, Адарич Н.В., Драгунов А.С., Демьянов Б.Ф., Агейкова Л.Н. Моделирование зерен нанометрового размера в металлической матрице // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2011. – Т.8, №2. – С.24-27
16. Драгунов А.С., **Векман А.В.**, Демьянов Б.Ф. Теоретическая модель границ зерен наклона общего и специального типа для гцк кристаллов // Ползуновский альманах. – 2011. – № 4. – С.29-31
17. **Векман А.В.**, Адарич Н.В., Драгунов А.С., Демьянов Б.Ф., Агейкова Л.Н. Моделирование зерен нанометрового размера в металлической матрице // Вестник Югорского государственного университета. – 2011. – №2. – С.3-7
18. Демьянов Б.Ф., Драгунов А.С., **Векман А.В.** Механизмы самодиффузии по границам зерен в алюминии // Известия Алтайского государственного университета. – 2010. – №1-2 (65). – С.158-161
19. Драгунов А.С., Демьянов Б.Ф., **Векман А.В.** Компьютерное моделирование внутренних поверхностей раздела в металлах и сплавах // Известия ВУЗов. Физика. – 2010. – Т.53, №3-2. – С.82-87
20. Адарич Н.В., **Векман А.В.**, Демьянов Б.Ф., Драгунов А.С., Пономаренко И.В. Энергетический спектр несимметричных границ зерен наклона // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2010. – Т.7, №4. – С.93-97
21. Демьянов Б.Ф., **Векман А.В.**, Драгунов А.С. Атомная структура и свойства границ зерен в металлах / В кн. «Наука – Алтайскому краю» Сборник научных статей по результатам научно-исследовательских работ, выполненных за счет средств краевого бюджета. – Вып.4. – Барнаул: Алтайский дом печати, 2010. – 208-215
22. Драгунов А.С., Демьянов Б.Ф., **Векман А.В.** Температурная зависимость самодиффузии по границам зерен в алюминии // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2009. – Т.6, №1. – С.96-100
23. **Векман А.В.** Энергия границ зерен наклона в металлах и сплавах с гцк решеткой // Известия томского политехнического университета – 2008. – Т.313, №3. – С.96-100
24. **Векман А.В.**, Драгунов А.С., Адарич Н.В., Демьянов Б.Ф. Энергетический спектр границ зерен наклона в алюминии // Ползуновский альманах. – 2008. – №3. – С.49-52
25. Демьянов Б.Ф., **Векман А.В.**, Драгунов А.С. Структурные превращения при нагреве в металлах, содержащих границы зерен // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2007. – Т.4, №4. – С.108-113

26. Куклина Е.А., **Векман А.В.**, Демьянов Б.Ф. Энергия специальных границ зерен наклона в алюминии // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. – 2005. – Т.2, №1. – С.50-52
27. Демьянов Б.Ф., **Векман А.В.**, Кустов С.Л., Старостенков М.Д. Атомная структура равновесных границ зерен. // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. – 2004. – №1. – С.86-92
28. Куклина Е.А., **Векман А.В.**, Демьянов Б.Ф. Зернограничное проскальзывание на специальных границах зерен наклона в золоте // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. – 2004. – №1. – С.141-146
29. **Weckman A.V.**, Dem'yanov B.F., Starostenkov M.D. Influence of a misorientation angle on an energy of the grain boundary // *Металлофизика и новейшие технологии*. – 2002. – Т.24, №2. – С.189-195
30. Demyanov B.F., **Weckman A.V.**, Starostenkov M.D., Chernyh E.V. Diffusional reconstruction of low-angle tilt grain boundary in ordered alloy CuAu // *Ползуновский вестник*. – 2002. – №2. – С.82-85
31. Демьянов Б.Ф., **Векман А.В.**, Старостенков М.Д. Ориентационная зависимость энергии границ зерен наклона в алюминии // *Известия вузов. Физика*. – 2002. – Т.44, №8. Приложение. – С.88-94
32. **Векман А.В.**, Демьянов Б.Ф., Старостенков М.Д. Ориентационная зависимость энергии границ зерен в металлах с объемноцентрированной кубической решеткой // *Известия ВУЗов. Черная металлургия*. – 2001. – №2. – С.39-42
33. **Vekman A.V.**, Demyanov B.F., Starostenkov M.D. Orientational dependence of the grain-boundary energy in metals with a body-centered cubic lattice // *Steel in Translation*. – 2001. – V.31, N2. – P.54-58
34. **Векман А.В.**, Демьянов Б.Ф. Механизмы атомной перестройки границ зерен общего типа в алюминии. / В кн.: *Самораспространяющийся высокотемпературный синтез: Материалы и технологии*. – Новосибирск: Наука, – 2001. – С. 203-216
35. Starostenkov M.D., Demyanov B.F., **Weckman A.V.** Influence of a misorientation angle on an energy of the symmetric grain boundary in fcc metals // *Acta Metallurgica Sinica (English Letters)*. – 2000. – V.13, №2. – P.540-545
36. Старостенков М.Д., Демьянов Б.Ф., **Векман А.В.** Малоугловые границы зерен в упорядоченном сплаве CuAu // *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования*. – 2000. – №4. – С.54-58
37. Starostenkov M.D., Dem'yanov B.F., **Vekman A.V.** Low-angle grain boundaries in an ordered CuAu alloy // *Journal of Surface Investigation: X-Ray, Synchrotron and Neutron Techniques*. – 2001. V.16, N4. – P.645-652
38. Старостенков М.Д., Демьянов Б.Ф., **Векман А.В.** Зависимость энергии границ зерен наклона от угла разориентации в гцк металлах // *Известия ВУЗов. Физика*. – 2000. – №11. С. 76-80
39. Старостенков М.Д., Демьянов Б.Ф., Кустов С.Л., **Векман А.В.**, Свердлов Е.Г., Грахов Е.Л. Структура и свойства границ зерен наклона [100] в металлах и упорядоченных сплавах // *Вестник АлтГТУ*. – 1999. – №1. – С.67-82

40. **Векман А.В.** Исследование зависимости энергии границы зерна наклона в упорядоченном сплаве Au_3Cu . // Вестник АлтГТУ. – 1999. – №2. – С.96-97
41. **Векман А.В.** Исследование специальной границы зерна наклона $\Sigma=13$ в алюминии // Вестник АлтГТУ. – 1999. – №2. – С.98
- Свидетельства о государственной регистрации***
42. Драгунов А.С., Демьянов Б.Ф., **Векман А.В.** Моделирование процессов диффузии в металлических кристаллах, содержащих границу зерен наклона, методом молекулярной динамики // Свидетельство о гос. регистрации программы для ЭВМ №2009612475. Зарегистрировано 18.05.09
- Наиболее значимые доклады, статьи и тезисы
из сборников конференций и симпозиумов***
43. **Weckman A.V.**, Dragunov A.S., Demyanov B.F. Grain boundary self-diffusion in aluminum. Molecular dynamic calculation / XV international conference on intergranular and interphase boundaries in materials must «MIS&S» // Mai 23-27, 2016, Moscow, Russia. – P.103
44. Dragunov A.S., **Weckman A.V.**, Demyanov B.F. Molecular dynamic studies of the vacancies interaction with the grain boundaries / International conference CISIA 2015 // June 28-29, 2015, Bangkok, Thailand. – Part 4. – P.1001-1004
45. Dragunov A.S., **Weckman A.V.**, Demyanov B.F. Computer simulation of grainboundary self-diffusion in aluminum / AIP Conf. Proc. // April 4-7, 2014 Athens, Greece. – V.1618. 924 <http://dx.doi.org/10.1063/1.4897884>
46. Dragunov A.S., **Weckman A.V.**, Demyanov B.F. Computer simulation of grainboundary self-diffusion in aluminium / XXII International Materials Research Congress, symposium 4C, Functional Solid State Materials: Synthesis, Characterization, Theory, and Structure-Property Relationships // August 11-15, 2013, Cancun, Mexico
47. **Векман А.В.**, Драгунов А.С., Адарич Н.В. Компьютерное моделирование внутренних поверхностей раздела в металлах и сплавах / Тезисы докладов II Всероссийской конференции «Многомасштабное моделирование процессов и структур в нанотехнологиях» (ММПСН-2009) // 28-30 мая 2009 г., Москва. – С.146-147
48. Демьянов Б.Ф., **Векман А.В.**, Драгунов А.С. Эффекты плавления металлов по границам зерен / Труды 4-й Всероссийской конф. «Физические свойства металлов и сплавов» (ФСМиС-4) // 21-22 ноября 2007 г., Екатеринбург. – С.216-217
49. Кожанов А.В., **Векман А.В.**, Демьянов Б.Ф. Моделирование границ зерен общего типа в золоте / Сборник докладов международной конференции "Актуальные проблемы физики твердого тела" (ФТТ-2005) // 26-28 октября 2005 г., Минск. – Т2. – С.199-201
50. Starostenkov M.D., Demyanov B.F., **Weckman A.V.** Orientation dependence of general tilt grain boundary [100] energy in system Cu-Au / Book of abstracts IUMRS-ICAM99 // China, Beijing, 13th -17th of June,1999. – P. D-27