

МОДЕЛИ ФОРМИРОВАНИЯ ПРОТЯЖЕННЫХ ДЕФЕКТОВ ГРАНИЦ КРУЧЕНИЯ

Бразовская О.В.,

Алтайский государственный технический университет им.И.И.Ползунова, г.Барнаул

Аннотация. Предложены два метода моделирования областей границ кручения, в которых может происходить формирование протяженных дефектов. Расчеты проведены для границ кручения бикристалла сверхструктуры L_{12} в плоскостях $\{001\}$ и $\{111\}$.

Введение

В предыдущей работе [1] предложен метод расчета энергии границы бикристалла, позволяющий проводить вычисления с точностью, ограниченной только точностью известных параметров потенциала. Метод заключается в разбиении одного из полукристаллов на столбцы элементарных ячеек и вычислении локальной поверхностной плотности энергии как энергии взаимодействия данного столбца нижнего полукристалла со всеми атомами верхнего. Для определения полной поверхностной плотности энергии используются свойства симметрии кристалла при данном угле разориентировки.

В то же время отметим, что при исследовании межзеренных границ нельзя ограничиться энергетическими расчетами, учитывая пределы применимости существующих моделей. Следует принять во внимание существование в кристалле коллективных эффектов, в значительной мере определяемых его структурой. В этой связи первостепенное значение приобретают исследования структур, возникающих на произвольных межзеренных границах вообще и, в нашем случае, на границе кручения ГЦК бикристалла в частности.

На любой плоскости, секущей кристалл, можно выделить набор прямых, вдоль которых в некоторой периодической последовательности будут располагаться атомы. Пусть на границе бикристалла в результате жесткого поворота половинок бикристалла на некоторый угол две такие прямые оказались почти параллельны. Тогда, если периоды T_1 и T_2 чередования атомов вдоль этих прямых кратны, то несложно перечислить типы относительных взаимных расположений

атомов данных прямых. Таким образом, выделяются группы атомов, имеющие размеры, сравнимые с размером элементарной ячейки. Структуры с размерами, сравнимыми с размерами элементарной ячейки назовем мелкомасштабными. При малых углах разориентировки данных прямых периоды T_1 и T_2 мало отличаются друг от друга. Тогда характерная длина, на которой произойдет существенное изменение взаимного расположения атомов указанных прямых может быть оценена выражением $T_1 T_2 / (T_1 - T_2)$, что может несравнимо превысить размер элементарной ячейки. Структуры с размерами, значительно превышающими размер элементарной ячейки, назовем крупномасштабными. Существенная разница в масштабах исследуемых структур приводит к необходимости использовать качественно различные методы исследования последних. Мелкомасштабные структуры удобны для характеристики локальных приграничных дефектов и выработки алгоритма релаксационных вычислений, крупномасштабные характеризуют области образования протяженных дефектов.

Настоящая работа посвящена анализу и кристаллогеометрическому исследованию крупномасштабных структур, возникающих на произвольных границах кручения ГЦК бикристалла в плоскостях $\{001\}$ и $\{111\}$ с точки зрения образования различных типов дефектов с использованием модели твердых сфер.

Как известно, при малых значениях угла разориентировки α , не превышающих нескольких градусов, применима дислокационная модель границ зерен Рида и Шокли [2], согласно которой граница представляет собой семейство параллельных дислокаций, лежащих в одной плоскости – "дислокационная стенка", или несколько пересекающихся семейств с разными векторами Бюргерса – "дислокационная сетка". Но когда α превышает 10 градусов, дислокации располагаются настолько густо, что их ядра перекрываются, и атомную структуру нельзя представить как ряд параллельных независимых дислока-

ционных ядер, структура которых могла бы быть найдена известными методами моделирования на ЭВМ [2, 3, 4]. Для геометрического описания ряда большеугловых границ оказалась удачной концепция совпадающих узлов, предложенная Кронбергом и Вильсоном [2]. Согласно этой концепции, существует набор взаимных разориентаций соседних зерен 1 и 2 – так называемые специальные разориентации или специальные углы - при которых в наложении решеток 1 и 2 известная доля узлов, обозначаемая $1/\Sigma$, совпадает и образует так называемую решетку совпадающих узлов (PCU).

Что касается большеугловых границ, то трудность описания их с помощью дислокационной модели состоит в том, что расстояние между дислокациями, образующими границу, становится настолько малым, что они теряют свою индивидуальность. Авторы работы [5] также показывают ограниченность дислокационной модели для большеугловых границ зерен.

Рассмотрим образование границы кристалла вблизи специального угла разориентировки. Вблизи специального угла любая кристаллогеометрическая функция угла, найденная в рамках модели твердых сфер по бесконечной площади границы, будет претерпевать разрыв как переход между качественно различными структурами типа структурный порядок – беспорядок. В этом смысле представляет особый интерес исследование областей вблизи точек разрыва при конечной площади границы. Будем исходить из модели формирования кристалла, при которой два зародыша растут до столкновения, образуя границу. При этом, строго говоря, вероятность столкновения с углом разориентировки точно равном специальному углу равна нулю. Отлична от нуля вероятность попадания в некоторый интервал углов, причем эта вероятность пропорциональна величине выбранного интервала. Таким образом, практически все специальные границы в рамках данной модели будут образовываться при исходных углах разориентировки, отличающихся от специальных на некоторый малый угол. Этот процесс должен сопровождаться формированием зернограницных дефектов.

В рамках кристаллогеометрического подхода нельзя априори сказать, будет ли устойчивым тот или иной дефект, образование которого возможно на данном участке границы. Но, как будет показано в настоящей работе, мы имеем возможность рассчитать форму и расположение напряженных областей, в которых следует ожидать зарождения протяженных дефектов.

Модель образования областей неустойчивости приграничных атомов

Рассмотрим участок границы размером 400×400 элементарных ячеек. Размер элементарной ячейки обозначим a . Ограничение некоторым размером анализируемого поля границы является удобным, но не является принципиальным. Данный размер поля позволяет различать отдельные элементарные ячейки, изображаемые точками. В принципе, в случае необходимости, не составит труда увеличить размер анализируемого поля с помощью масштабирования.

Оценим, например, какую плотность дислокаций можно обнаружить с помощью поля такого размера. Считая, что через выбранное поле должна пройти хотя бы одна дислокация, и выбирая $a \sim 5 \text{ \AA}$ находим $\rho \sim 10^{10} \text{ см}^{-2}$. Плотность достаточно высока, но реальна [6]. В данном случае рассматривается предельный случай принципиальной возможности появления крупномасштабных структур на границе не претендуя на универсальность описания. Кроме того, это плотность протяженных дефектов на границе, а не в объеме кристалла, а граница может служить как источником, так и стоком дефектов, т.е. иметь плотность дефектов во много раз превышающую их плотность в объеме кристалла.

Рассмотрим более подробно используемую точку зрения на процесс первичного образования границ зерен. В расплаве зарождаются два случайных центра кристаллизации. Зерна, растущие из них в виде правильных кристаллов (в одном из вариантов), сталкиваются, образуя границу. Такая граница геометрически образована сечениями двух кристаллов каждого своей плоскостью с последующей стыковкой полу-

кристаллов и поворотом одного относительно другого.

Представляется очевидным, что образованная таким способом граница будет содержать комбинации всевозможных дефектов, полный анализ которых затруднителен вследствие случайного характера стыковки. Тем не менее, можно, по крайней мере на первом этапе исследований, сделать некоторые выводы о характере зарождающихся дефектов и областях их локализации на основе анализа геометрических особенностей атомной структуры образовавшейся границы. Действительно, если стыковка полукристаллов осуществляется в рамках модели твердых сфер, то могут найтись атомы или группы атомов из ближайшего к области границы слоя, для которых не будет соблюдено условие минимума энергии, а это означает, что эти атомы будут находиться в неустойчивом положении. Следовательно, на данном этапе следует найти некоторый критерий, выполнение которого соответствовало бы образованию того или иного типа дефектов. Поскольку свои выводы мы намерены сделать только на основе кристаллогеометрического анализа границы, т.е. не проводя в силу указанных выше причин релаксационных вычислений, необходимо иметь уверенность в достоверности используемого метода расчета. С этой целью проводится анализ результатов различных, по мере возможности независимых методов исследования. В настоящей работе использованы два метода исследований: а) по пространственному распределению межатомных расстояний на границе и б) с помощью локальных поверхностных плотностей энергии границы. Неустойчивое положение одного из атомов в общем случае не означает образования некоторого дефекта в области локализации данного атома. "Включение" релаксации может вызвать просто некоторое смещение атома до положения равновесия, что приведет к небольшому количественному изменению энергии границы не вызывая существенных изменений в ее структуре. Для возникновения дефекта, как качественно нового образования, необходимо соблюдение следующих условий. Во-первых, должно иметь место не просто смещение атома от положения

равновесия, а экстремальное значение этого смещения. В такой ситуации атом оказывается на гребне потенциального барьера, в области его локализации оказывается более чем одна потенциальная яма, выбор атомом одной из них ведет к появлению "лишней", свободной потенциальной ямы – зарождению дефекта. Во-вторых, появление свободной потенциальной ямы или их набора возможно только при наличии некоторого комплекса близлежащих неустойчивых атомов, поскольку мы имеем дело с кристаллической, т.е. упорядоченной структурой. Один атом не может "упасть" в яму независимо от своих соседей в силу эффекта дальнего порядка в кристаллической структуре.

В качестве последнего положения модели выберем принцип соответствия экспериментальным данным. Такая постановка вопроса может показаться странной. Привычной является следующая структура исследования: модель – расчет – сопоставление с экспериментом. В нашем случае такой подход использовать невозможно. Во-первых, полный расчет зернограничных дефектов встречает трудности даже чисто технического характера – в силу современного уровня вычислительной техники. Во-вторых, в настоящее время неизвестны параметры, которые следует извлечь из расчета для сопоставления с экспериментальными данными. Полный набор взаимных ориентаций полукристаллов при образовании границы описывается точками на поверхности шара. Предварительные исследования указывают на то, что возможные интересующие нас функции указанных двух переменных не являются непрерывными. Приведенного далеко не полного перечня возникающих вопросов достаточно для отказа от использования привычной структуры исследований. В сложившейся ситуации наиболее удачным представляется использование подхода, лежащего в рамках так называемого имитационного моделирования. Экспериментальные данные, а в нашем случае это разрозненные экспериментальные данные для нескольких точек – аргументов (характеризующих взаимные ориентации), включаются в модель на самом раннем этапе для

выбора критического значения параметра, по превышению которого атомы в данной области границы можно считать неустойчивыми. Это позволяет на основе кристаллогеометрического анализа сделать выводы о структуре дефектов на границе двух зерен.

Геометрический метод расчета областей неустойчивости

Информация об областях неустойчивости атомов на границе в простейшем случае должна содержаться в распределении $P(L)$ расстояний между ближайшими атомами на границе. Поскольку энергия границы связана с расстояниями между ближайшими атомами сопряженных плоскостей, вычислим расстояния L от каждого атома одной плоскости до ближайшего к нему атома сопряженной плоскости и построим распределение этих расстояний $P(L)$ (рис. 1).

Ясно, что для специальных углов эти распределения будут иметь вид набора пиков. По мере возрастания Σ распределения теряют свою индивидуальность и в пределе стремятся к распределению для произвольного угла. Заметим, кстати, что распределения для всех произвольных углов, вычисленные в приближении бесконечной границы, совпадают.

Введем критическое значение L_k таким образом, чтобы

$$\int_0^{L_k} P(L)dL \approx \frac{1}{\rho a^2}, \quad (1)$$

где ρ - экспериментальное значение плотности зернограницных дефектов.

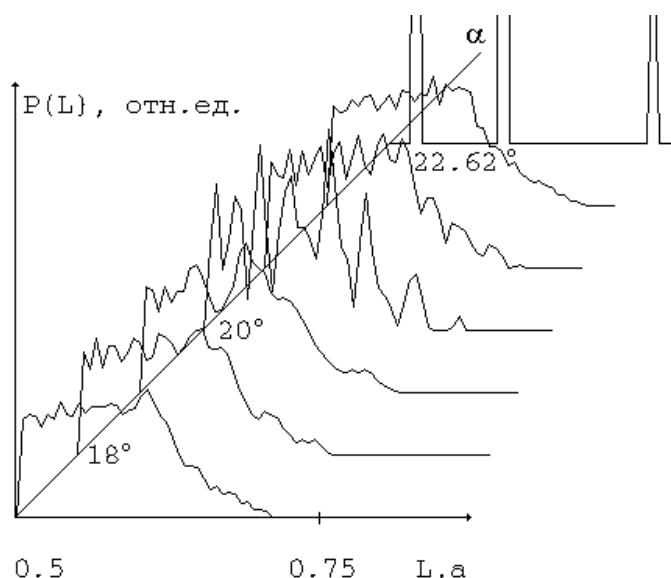


Рис. 1. Распределения $P(L)$ при различных углах разориентировки. Угол $\alpha=22,62^\circ$ – специальный.

Теперь изобразим на рисунке участок границы двух зерен, отмечая точками только те элементарные ячейки, атомы которых удовлетворяют критерию $L_k < L$. Очевидно этому критерию будут удовлетворять те атомы, которые окажутся на экстремально близких расстояниях, существенно меньших радиуса первой координационной сферы. Это еще не означает наличия области неустойчивости. Отдельный атом, оказавшийся в экстремальном положении, может релаксировать к ближайшему равновесному положению не создавая протяженного дефекта. Появления протяженного приграничного дефекта следует ожидать в областях скопления напряженных атомов, что можно будет наблюдать на рисунке, вычлняя группы элементарных ячеек с атомами в напряженных состояниях.

Области неустойчивости границы кручения в плоскости {001}

Группы атомов, находящиеся в напряженных состояниях можно наблюдать уже при анализе мелкомасштабных структур [7]. Действительно, в центре каждого из восьмиугольников мелкомасштабной структуры со специфическими элементами находятся пары атомов, проекции которых в некоторых случаях почти совпадают. Рассмотрим образование крупномасштабных структур. На

рис. 2 приведены картины полей для двух значений произвольных углов. Элементарные ячейки, содержащие атомы в напряженных состояниях, при выбранных углах не составляют сплошных областей, хотя и носят нетривиальный характер. Внешне картина представляется правильной регулярной структурой. Но это впечатление обманчиво. При внимательном рассмотрении нетрудно заметить отличия во взаимном расположении напряженных ячеек. В данном случае можно говорить о квазирегулярности или локально-регулярных областях.

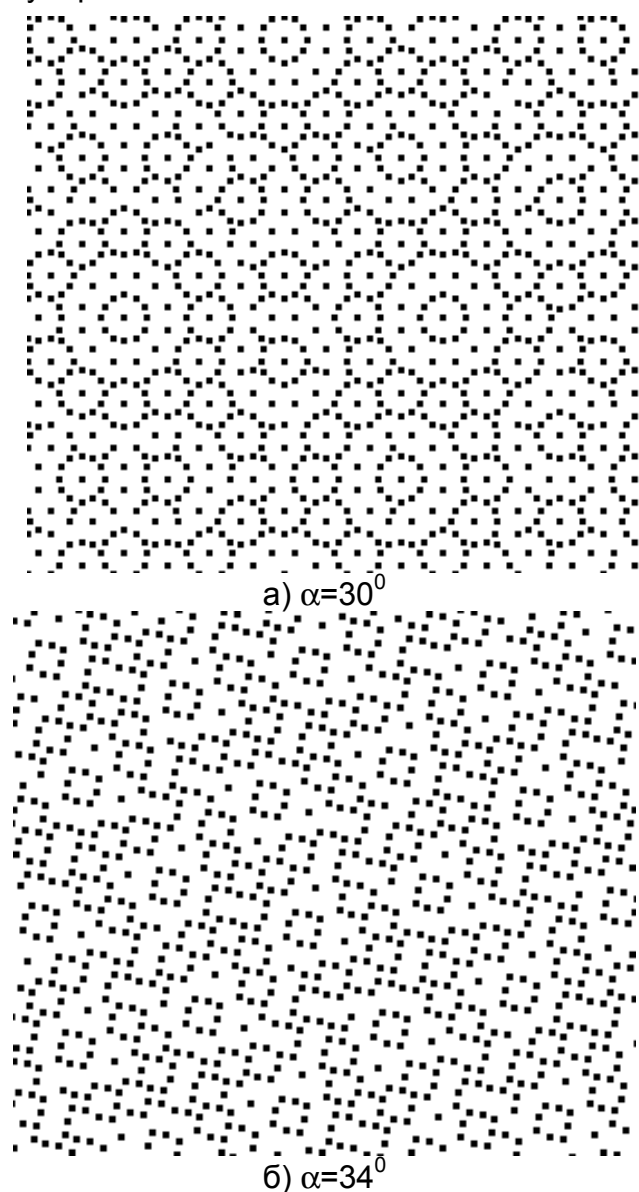


Рис.2. Крупномасштабные структуры, построенные с помощью геометрического метода для двух произвольных углов.

Совершенно иная картина имеет место вблизи специальных углов. На рис. 3 показаны поля, содержащие области неустойчивости вблизи специального угла $36,87^\circ$. На рисунке показаны отклонения от данного угла в сторону уменьшения. Симметричное увеличение угла разориентировки приводит к точно таким же результатам. В отличие от произвольного угла в данном случае ячейки с напряженными парами атомов располагаются компактными группами, следовательно при формировании дефекта их действие должно быть коллективным, а образующийся дефект – протяженным. К сожалению, в рамках данного метода мы не можем указать тип формирующегося дефекта и его размеры. Действительно, критический параметр L_k является варьируемым параметром. Увеличение L_k приводит к увеличению размера напряженных областей. Постоянным остается расстояние между ними. Это означает, что если формирующийся протяженный зернограничный дефект окажется, например, дислокацией, то найденное расстояние между протяженными дефектами по приведенной картине (все поле имеет линейный размер $400a$) можно будет сравнить с плотностью дислокаций, наблюдаемой экспериментально. Здесь, однако, возникнет трудность со стороны эксперимента. Для надежного сравнения наших вычислений с экспериментальными данными потребуется точность определения угла разориентировки $\sim 0,01^\circ$, чего в настоящее время достичь не удастся.

Анализ картин расположения ячеек с атомами в напряженных состояниях показывает, что аналогичная картина наблюдается вблизи всех специальных углов разориентировки при отклонении от специального угла на величину до $0,5^\circ$. При малых углах разориентировки, т.е. вблизи угла 0° аналогичная картина сохраняется при отклонении на углы до 5° . Похожая картина сохраняется и для углов с большими значениями Σ . Точнее говоря, увеличение Σ приводит к сокращению расстояния между соседними напряженными областями, при $\Sigma=73$ для угла $\alpha=41,11^\circ$ области перекрываются, дальнейшее увеличение Σ дает картину, аналогичную картине при произвольных углах разориентировки.

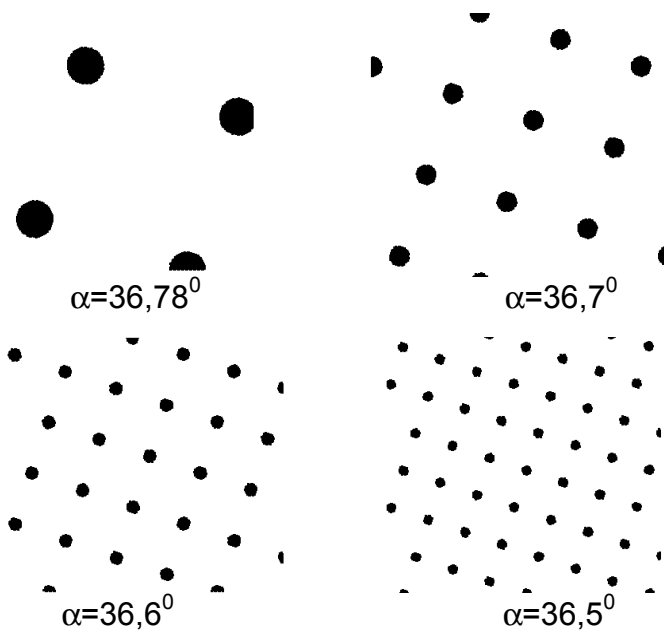


Рис. 3. Крупномасштабные структуры, полученные геометрическим методом вблизи специального угла $\alpha=36,78^\circ$ (уменьшены в 2 раза по сравнению с рис. 2)

Локально-энергетический анализ структуры границы

Усложним подход к исследуемой проблеме. Возникновение областей неустойчивости связано не просто с отклонением атома как геометрической характеристикой, а с энергией этого атома, причем с энергией граничной, т.е. зависящей от энергий окружающих его атомов. Для реализации другого способа нахождения неустойчивых областей мы могли бы пойти по пути вычисления энергий приграничных атомов. Но такой подход нельзя было бы считать принципиально отличающимся от тривиального первого способа, т.к. энергии приграничных атомов существенным образом определяются теми же межатомными расстояниями.

Выбранный в настоящей работе второй способ заключается в следующем. Рассмотрим энергию взаимодействия одного столбца элементарных ячеек нижней половины бикристалла со всеми атомами верхней половины, отнесенную к площади грани элементарной ячейки. Эта величина есть

$$W_i = \frac{E_i}{\sigma} \quad (2)$$

– локальная поверхностная плотность энергии границы. Напомним, что полная поверхностная плотность энергии находится усреднением по локальным плотностям ячеек, составляющих данную границу [1]:

$$W = \frac{1}{N} \sum W_i \quad (3)$$

Все величины W_i составляют поле поверхностных плотностей энергии.

Далее используем процедуру, описанную при изложении первого способа. Прежде всего вычислим распределение вероятностей найти некоторое значение поверхностной плотности энергии $P(W_i)$ и введем критическое значение W_k согласно соотношению

$$\int_{W_k}^{\infty} P(W_i) dW_i = \frac{1}{\rho\sigma} \quad (4)$$

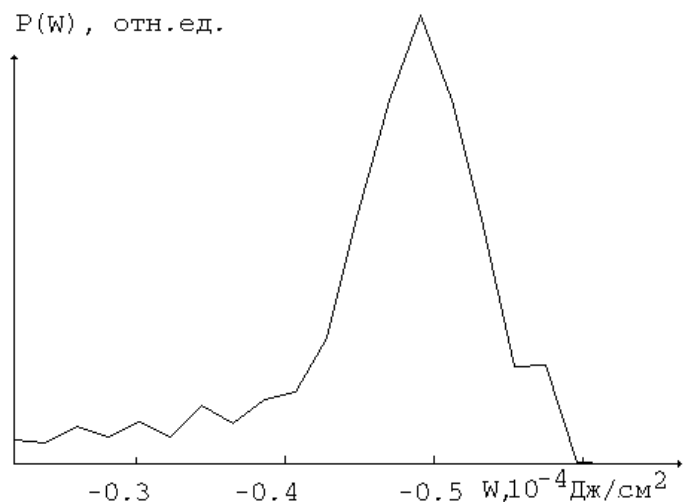


Рис. 4. Распределение по энергиям $P(W)$ для угла $\alpha=43,62^\circ$

Пример распределения $P(W_i)$ близости специального угла $\alpha=43.62^\circ$ кристалла Cu_3Au приведен на рис. 4. Здесь ось энергий направлена в сторону увеличения абсолютных значений. Поскольку локальные плотности до вычитания энергии идеального кристалла отрицательны, максимальным значениям плотностей на нашем графике будут отвечать значения в начале координат. Таким образом, значение максимальной плотности энергии составляет $-0.219 \cdot 10^{-4}$ Дж/см²

вблизи которого в данном случае и выбирается критическое значение.

Теперь построим поле локальных плотностей энергии, превышающих выбранное критическое значение. Так же как и предыдущем случае будем отмечать точками на поле те столбцы, для которых выполняется условие $W > W_k$. На рис.5 показано такое поле для произвольного угла $\alpha = 30^\circ$ в том же сплаве.

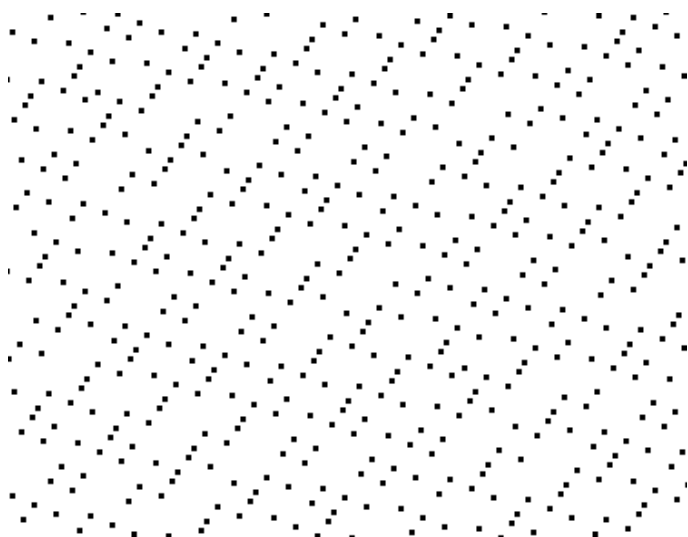


Рис. 5. Крупномасштабные структуры, построенные с помощью локально-энергетического метода для произвольного угла $\alpha = 30^\circ$.

Данная картина не является регулярной структурой так же как и рис. 2, представляющий геометрический метод расчета напряженных областей для этого же угла, но не имеет смысла искать полного сходства рисунков. Отличие от геометрического метода расчета напряженных областей заключается в большем габаритном значении вычисляемой величины. При анализе геометрии кристалла это были отдельные атомы, при анализе локальных плотностей энергии - группы атомов, составляющие столбец элементарных ячеек. Другое отличие заключается в различном поведении соответствующих распределений $P(L)$ и $P(W)$. Распределения локальных энергий отличаются не только для различных типов кристаллов, что было бы естественно ожидать, но и для различных углов разориентировки одного кристалла. Для угла $\alpha = 30^\circ$ распределение локальных поверхностных

плотностей энергии кристалла Cu_3Au приведено на рис 6.

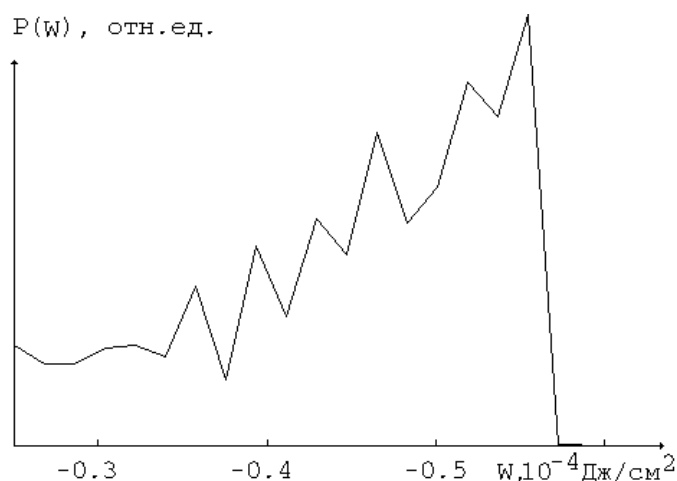


Рис. 6. Распределение по энергиям $P(W)$ для угла $\alpha = 30^\circ$ кристалла Cu_3Au

Оба метода указывают на отсутствие областей с концентрацией ячеек, имеющих критические параметры. По-видимому не следует ожидать обязательного появления таких областей и вблизи каждого из специальных углов. Рассмотрим пространственные распределения вблизи специальных углов разориентировки границы кручения для сплава Cu_3Au .

Наиболее интересным с этой точки зрения оказался угол $\alpha = 16.26^\circ$. Вблизи этого специального угла области напряженного состояния представляют собой полосы, ширина которых постепенно увеличивается по мере удаления от специального угла сторону его уменьшения (рис. 7) и уменьшается при удалении в сторону увеличения значения угла разориентировки. Отклонение на угол, превышающий 1° , приводит к появлению структуры в виде сетки, соответствующей произвольному углу.

Вблизи специального угла $\alpha = 22.62^\circ$ крупномасштабная структура формируется в виде компактных напряженных областей, вид которых коррелирует с соответствующей геометрической структурой. Напомним, что в настоящей работе мы ограничиваем рассмотрение областью некоторых средних углов отклонения от особых точек, которыми являются специальные углы. Значительное удаление от специального угла вызывает

переход к структуре произвольных углов, приближение к особой точке приводит к характерному масштабу структуры, выходящему за рамки выбранных размеров поля, а уменьшение разрешающей способности картины на данном этапе нежелательно.

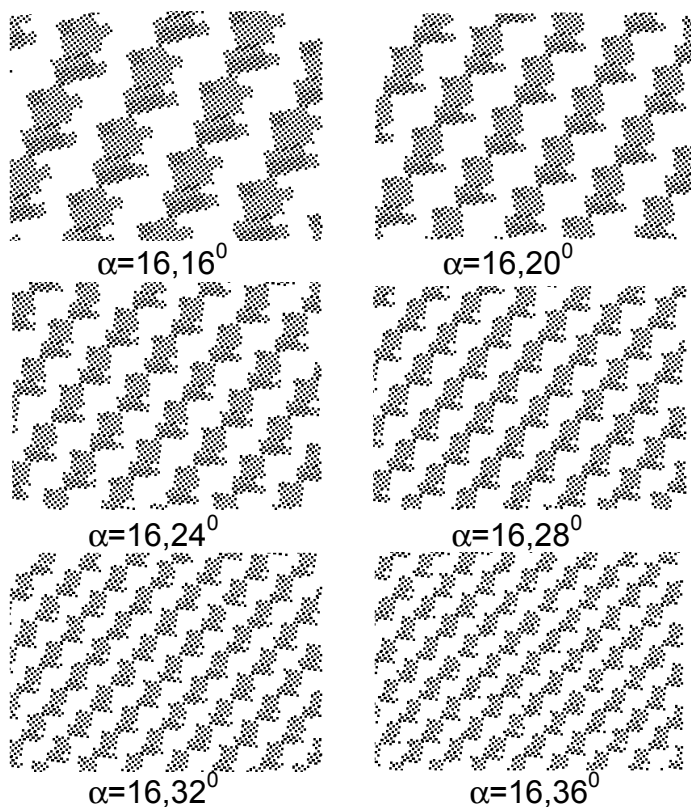


Рис. 7. Крупномасштабные структуры, построенные с помощью локально-энергетического метода вблизи специального угла $\alpha=16,26^\circ$.

Вблизи остальных специальных углов $\alpha=28.07^\circ$, $\alpha=36.87^\circ$ и $\alpha=43.6^\circ$ пространственные распределения имеют вид размытых полос, ориентация которых постепенно меняется при изменении величины отклонения от специального угла. Для двух последних углов крупномасштабная структура скорее имеет вид сеток с квазиупорядоченной структурой. В этих случаях уже нельзя с уверенностью утверждать о формировании протяженных дефектов. Для ответа на такой вопрос следует осуществить следующий шаг исследований – релаксационное моделирование приграничной атомной структуры.

Области неустойчивости границы кручения в плоскости {111}

Рассмотрим крупномасштабные структуры плоскости {111} и сравним их с аналогичными структурами, приведенными в предыдущем параграфе, отмечая общие черты и различия предложенного метода описания для указанных двух плоскостей.

Для геометрического способа описания используем распределение $P(L)$ для плоскости {111}, приведенное на рисунке 8, поскольку распределение в приближении бесконечной площади границы кручения оказывается одинаковым для всех углов, исключая специальные.

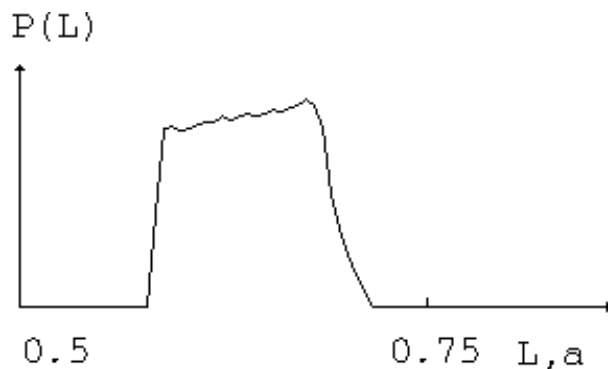
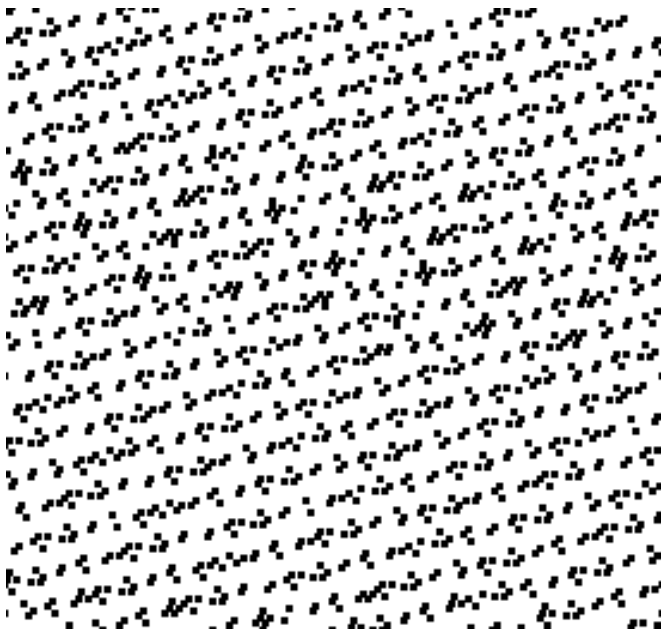
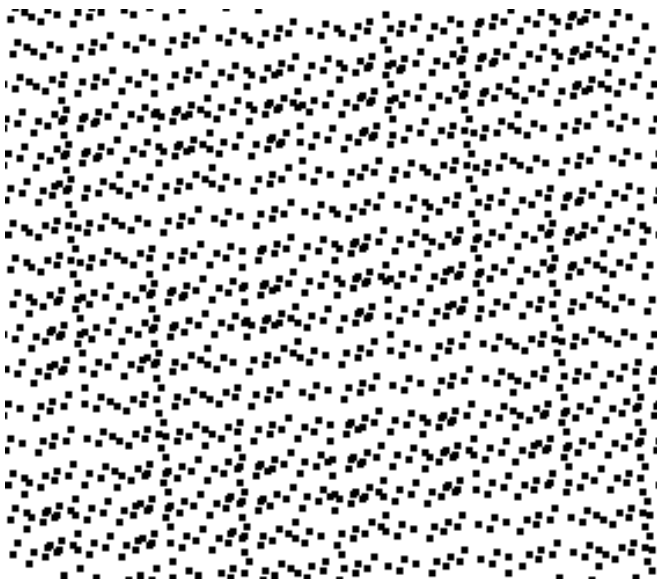


Рис. 8. Распределения $P(L)$ при произвольных углах разориентировки для плоскости {111}.

Для двух значений произвольных углов поля элементарных ячеек, содержащих атомы в состояниях с напряжением, превышающим критическое значение (выражение (1)), приведены на рис 9. Так же как и в предыдущем случае наряду с изолированными точками эти поля содержат линейные цепочки ячеек в напряженном состоянии. На данном этапе исследований у нас нет оснований ассоциировать такие цепочки с какими-либо протяженными дефектами, хотя роль таких цепочек в формировании зернограничных дефектов нетривиальна и нуждается в дополнительном изучении.



$\alpha = 12^\circ$



$\alpha = 20^\circ$

Рис. 9. Крупномасштабные структуры, построенные с помощью геометрического метода для двух произвольных углов для плоскости {111}.

Вблизи специальных углов крупномасштабные структуры имеют вид неоднородных полос (рис. 10).

Вблизи некоторых углов полосы вырождаются в эллиптические структуры при совпадающих значениях L_k для этих углов – рис. 11.

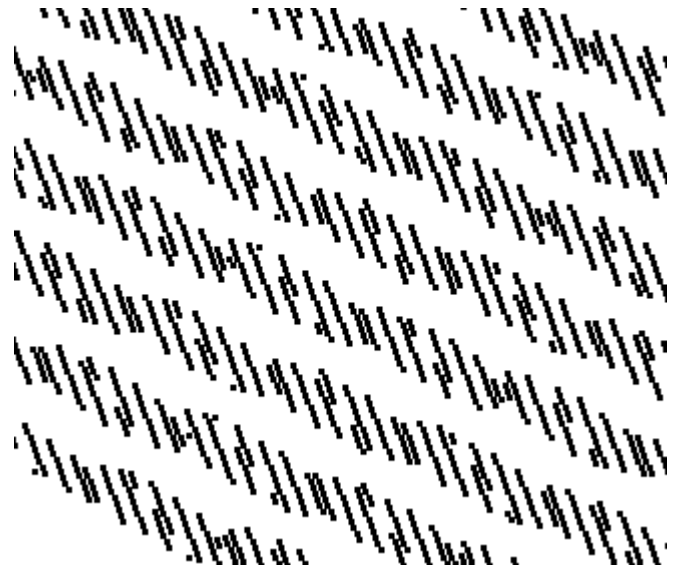


Рис. 10. Крупномасштабные структуры, построенные с помощью геометрического метода для $\alpha=27,6^\circ$ вблизи специального угла $\alpha=27,79^\circ$ – плоскость {111}.

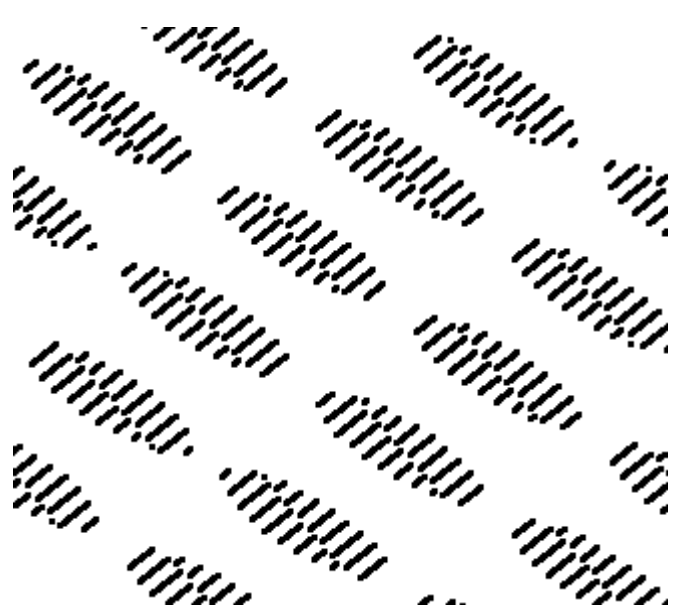
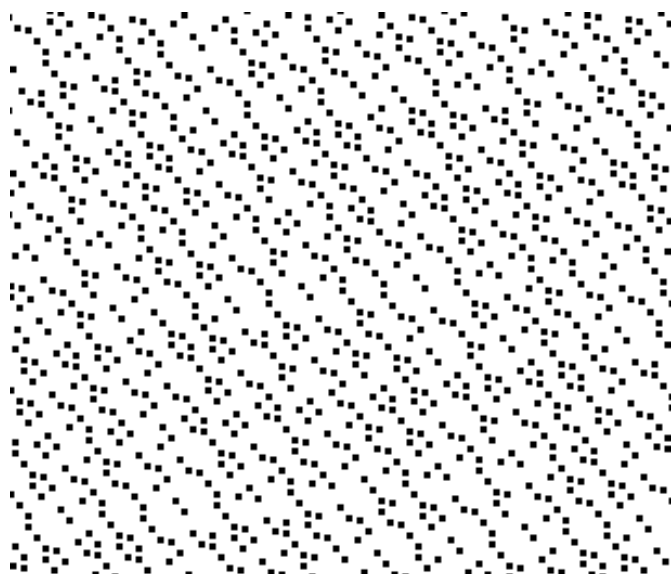


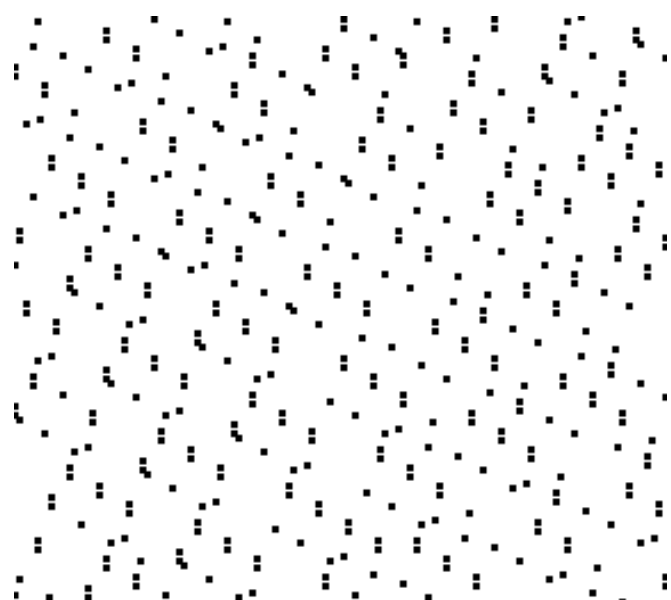
Рис. 11. Крупномасштабные структуры, построенные с помощью геометрического метода для $\alpha=21,6^\circ$ вблизи специального угла $\alpha=21,79^\circ$ –плоскость {111}.

Переход к структуре произвольного угла происходит уже для специальных углов со значением $\Sigma=37$. В отличие от предыдущей плоскости крупномасштабные структуры плоскости {111} не являются сплошными. Тем не менее это компактные области, дополнительный анализ, проведенный по их энергетической структуре, позволит сделать более обоснованные выводы о возможности

появления протяженных зернограницных дефектов.



$\alpha = 12^\circ$

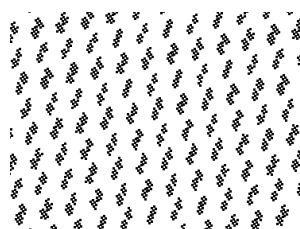


$\alpha = 20^\circ$

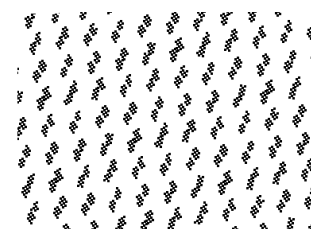
Рис. 12. Крупномасштабные структуры, построенные с помощью локально-энергетического метода для двух произвольных углов – плоскость {111}.

Характер поведения локально-энергетических крупномасштабных структур плоскости {111} аналогичен поведению таких же структур предыдущей плоскости. Для произвольных углов они имеют вид сеток точечных напряжений, что должно вызывать образование точечных дефектов. На рис. 12 приведены поля энергий, превышающих критическое значение, для тех же углов, что и

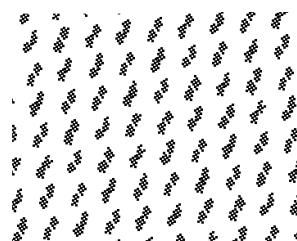
геометрические структуры, приведенные на рис. 9. Поскольку эти два метода отражают различные связи приграничных атомов, не следует ожидать полной идентичности образующихся структур, тем более что не существует однозначной зависимости между L_k и W_k . Важно в данном случае, что ни та ни другая картины не показывают появления сгущений закритических точек, т.е. говорят об одинаковом характере возникающих зернограницных дефектов.



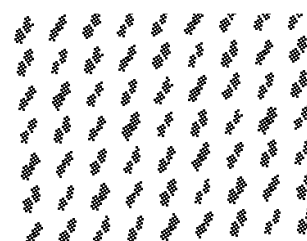
$\alpha = 21,69^\circ$



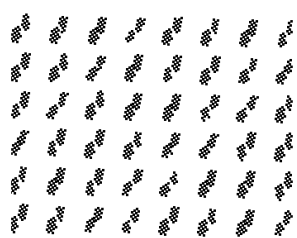
$\alpha = 21,73^\circ$



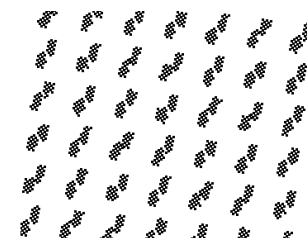
$\alpha = 21,74^\circ$



$\alpha = 21,81^\circ$



$\alpha = 21,85^\circ$



$\alpha = 21,89^\circ$

Рис. 13. Крупномасштабные структуры, построенные с помощью локально-энергетического метода вблизи специального угла $\alpha=21,79^\circ$ – плоскость {111}.

Из всех специальных углов четкие сгущения закритических точек энергетических крупномасштабных структур наблюдаются только для одного $\alpha=21,79^\circ$, имеющего минимальное значение $\Sigma=7$ (рис. 13). Причем характер изменения взаимного расположения структур при увеличении угла разориентировки аналогично поведению соответствующих структур плоскости {001} вблизи специальных углов $\alpha=16,26^\circ$ и $\alpha=28,07^\circ$ –

структура “не замечает” специального угла, которому она обязана своим образованием. Высокая плотность закритических точек вблизи данного угла, полученная двумя методами, позволяет с уверенностью направить в его окрестности усилия по поиску протяженных зернограничных дефектов.

Окрестности остальных специальных углов имеют поля энергетических закритических точек в виде разрозненных сеток, – поведение, соответствующее произвольным углам разориентировки.

Заключение

Таким образом, результаты расчетов, описанных в настоящей работе, позволяют уже на данном этапе исследований предположить формирование протяженных приграничных дефектов вблизи специальных углов $16,26^\circ$ и $22,62^\circ$ плоскости $\{001\}$ и $21,79^\circ$ плоскости $\{111\}$ при первичном формировании кристалла. Нетривиальный характер крупномасштабных структур указывает на необходимость посвятить им самостоятельное исследование.

Обнаружено, что расположение сгущений закритических точек не зависит от точных значений L_k и W_k . Точные значения L_k и W_k определяют только размеры соответствующих областей, но для выяснения точных размеров напряженных областей метод не предназначен. Области сгущений закритических точек в данном представлении располагаются в области отклонений $\pm 0,5^\circ$ от специальных углов со значениями $\Sigma < 70$ для плоскости $\{001\}$ и $\Sigma < 35$ для плоскости $\{111\}$.

Наблюдается нетривиальный характер изменения сгущений закритических точек в зависимости от угла разориентировки вблизи некоторых специальных углов; имеет место аналогия с полосчатым контрастом.

Литература

1. Старостенков М.Д., Бразовская О.В. Границы кручения в сплавах сверхструктуры $L1_2$. // Вестник АлтГТУ. 1999. № 1.– С. 110–123.
2. Атомная структура межзеренных границ. / Сборник статей. Вступ. ст. и ред. перевода А.Н.Орлова.- М.: Мир, 1978.- 291 с.
3. Коттерил Р., Дояма М. Энергия и атомная конфигурация полной и расщепленной дислокаций // Актуальные вопросы теории дислокаций. Сб. статей.- М.: Мир, 1968.- С. 135-168.
4. Орлов А.Н. Введение в теорию дефектов.- М.: Высшая школа, 1983.- 144 с.
5. Gleiter H. On the structure of grain boundaries in metals // Atom.Fract.Proc. NATO Adv.Res.Inst. Calcatoggio, 22-31 May, 1981, New-York, P. 433-461.
6. Новиков И.И., Розин К.М. Кристаллография и дефекты кристаллической решетки. – М.: Металлургия, 1990. – 335 с.
7. Старостенков М.Д., Бразовская О.В. Структурно-энергетические характеристики границы кручения бикристалла сверхструктуры $L1_2$ / Препринт АлтГТУ № 1.96.– Барнаул, 1996.– 31 с.