

На правах рукописи

Демьянов Борис Федорович

**АТОМНАЯ СТРУКТУРА ГРАНИЦ ЗЕРЕН НАКЛОНА В МЕТАЛЛАХ  
И УПОРЯДОЧЕННЫХ СПЛАВАХ НА ОСНОВЕ КУБИЧЕСКОЙ  
РЕШЕТКИ**

Специальность 01.04.07 - физика конденсированного состояния

Автореферат  
диссертации на соискание ученой степени  
доктора физико-математических наук

Барнаул - 2001

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

Научный консультант: доктор физико-математических наук,  
профессор Старостенков М.Д.

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,  
профессор Колобов Ю.Р.

доктор физико-математических наук,  
профессор Конева Н.А.

доктор физико-математических наук,  
профессор Удодов В.Н.

Ведущая организация:

Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, г. Уфа.

Защита состоится " \_\_\_\_ " \_\_\_\_\_ 2001 г. в \_\_\_\_\_ час. на заседании специализированного совета Д212.004.04 при Алтайском государственном техническом университете по адресу: 656099, г. Барнаул, пр. Ленина, 46.

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке Алтайского государственного технического университета.

Автореферат разослан " \_\_\_\_ " \_\_\_\_\_ 2001 г.

Отзывы на автореферат, заверенные гербовой печатью организаций, просим присылать в 2-х экз. на адрес университета.

Ученый секретарь специализированного совета,  
доктор физико-математических наук

Баранов М.А.

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

*Актуальность проблемы.* Подавляющее большинство металлов и сплавов используются в виде поликристаллов, неотъемлемой частью структуры которых являются границы зерен (ГЗ). Большой экспериментальный материал, накопленный к настоящему времени, показывает, что действие ГЗ не ограничивается барьерным эффектом Холла-Петча, ГЗ являются активным элементом дефектной структуры поликристаллов. Будучи протяженными дефектами и образуя связанную систему, ГЗ оказывают существенное влияние на такие важные свойства как пластичность, диффузия, высокотемпературная и структурная ползучести, рекристаллизация, текстурообразование, разрушение и др. (Орлов А.Н., Перевезенцев В.Н., Рыбин В.В., Кайбышев О.А., Валиев Р.З., Бокштейн Б.С., Копецкий Ч.В., Швиндлерман Л.С. и др.).

Установление связи между изменениями структуры ГЗ и свойствами материалов является актуальной задачей. Данная проблема носит комплексный характер и ее решение требует знания не только атомной структуры ГЗ, но и ее перестроек при внешних воздействиях и взаимодействии с другими дефектами кристаллической решетки. В основе влияния ГЗ на свойства поликристаллов лежит ряд фундаментальных зернограничных процессов. К ним, в частности, относятся зернограничное проскальзывание и взаимодействие границ с точечными дефектами. Механизмы этих процессов недостаточно разработаны, для их разработки, в свою очередь, требуется понимание элементарных механизмов перестройки атомной структуры ГЗ. Данная проблема осложняется еще и тем, что эти процессы могут зависеть от конкретной структуры индивидуальной ГЗ.

Значительное различие в структуре и свойствах отдельных ГЗ создает возможность управлять свойствами поликристаллов посредством формирования определенного зернограничного ансамбля (метод "зернограничной инженерии" Ватанабе). В связи с этим, исследование структуры индивидуальных границ является важной задачей, имеющей практическое значение для современной физики металлов.

Прямое экспериментальное наблюдение атомной структуры дефектов, несмотря на развитие высокоразрешающих методов исследования, остается крайне сложной задачей. Поэтому большое значение имеют альтернативные подходы, в частности, интенсивно развиваемый в настоящее время метод компьютерного моделирования. Применение компьютерного моделирования позволяет детально исследовать разнообразные атомные конфигурации границ и провести отбор наиболее вероятных структур используя энергетический критерий.

Актуальность исследований атомной структуры ГЗ возрастает в связи с развитием новых направлений материаловедения и введения в практику материалов, в которых поверхностные свойства играют определяющую роль: субмикрористаллические и нанокристаллические материалы, пластичные керамики, би- и трикристаллы с аттестованной границей раздела.

**Целью работы** является исследование атомной структуры границ зерен наклона общего и специального типов, установление закономерностей перестройки атомной структуры и взаимодействия ГЗ с точечными дефектами.

Для достижения указанной цели в диссертационной работе решаются следующие **задачи**:

1. Разработать физическую модель ГЗ наклона, учитывающую два фундаментальных зернограницных процесса: относительный сдвиг зерен и поглощение (испускание) структурных вакансий.

2. Провести структурно-энергетический анализ атомной структуры ГЗ, построенных с использованием геометрической модели решетки совпадающих узлов (PCY).

3. Рассчитать атомную конфигурацию структурных единиц специальных и общих ГЗ, выявить предпочтительные границы, формирующие структуру общих ГЗ.

4. Исследовать перестройку структуры ГЗ при поглощении и испускании структурных вакансий и в результате относительного сдвига зерен.

5. Рассчитать зависимость энергии ГЗ от угла разориентации соседних зерен.

6. Рассчитать энергию взаимодействия ГЗ с точечными дефектами (вакансиями, атомами примеси) и определить закономерности их распределения вблизи ГЗ.

**Научная новизна.** Физически обоснована структурно-энергетическая модель ГЗ, учитывающая множественность структурных состояний. Изменение структурных состояний ГЗ происходит при относительном сдвиге зерен и поглощении или испускании структурных вакансий. Проведен энергетический анализ специальных ГЗ наклона с осью разориентации [100], построенных по правилам геометрической модели PCY. Предложен параметр  $r_c$ , характеризующий сближение атомов вблизи ГЗ, сформулировано правило, позволяющее получать структурные единицы специальных ГЗ, используя модель PCY как исходную. Рассчитаны атомные структуры стабильных и метастабильных специальных ГЗ с учетом как относительных трансляций зерен, так и изменения числа атомов в структурной единице ГЗ. Рассчитаны спектры энергии состояний ГЗ.

Предложен механизм поглощения и испускания структурных вакансий границами зерен. Обнаружен эффект асимметричности перестройки ГЗ при испускании и поглощении вакансий: перестройка ГЗ при поглощении вакансий требует меньше энергии, чем при ее испускании. Показано, что испускание или поглощение вакансий границей понижает энергетический барьер зернограничного проскальзывания. На основании выполненных расчетов предложен механизм зернограничного проскальзывания. Из анализа рельефа  $\gamma$ -поверхностей ГЗ определены векторы Бюргерса зернограничных дислокаций. Рассчитаны зависимости энергии ГЗ от угла разориентации зерен в атомно-дискретной модели. На зависимостях обнаружен ряд новых особенностей: осциллирующий характер зависимостей; изменение энергии, связанное со сменой типа структурных единиц, составляющих ГЗ и образованием разупорядоченного слоя в упорядоченных сплавах (структурное разупорядочение). Исследованы закономерности формирования вакансионных атмосфер на ГЗ, показано, что энергия взаимодействия вакансий с границей зависит не только от расстояния до дефекта, но и от положения относительно совпадающего узла.

*Достоверность* полученных результатов обеспечивается физической корректностью постановки и решения задач диссертации, использованием апробированных методов, соответствием рассчитанных значений характеристик дефектов их экспериментальным данным, сопоставлением с данными других авторов.

*Практическая значимость работы* заключается в том, что результаты расчетов атомной структуры и перестройки ГЗ могут быть использованы для экспериментального и теоретического исследования зернограничных процессов. Предложенные в работе механизмы перестройки ГЗ могут быть использованы для создания физической теории пластической деформации, которая включает процессы как внутри зерен, так и на границе. Полученные характеристики, такие как энергия взаимодействия вакансий и атомов примеси с границами, величина атомных смещений вблизи ГЗ, зависимость энергии ГЗ от угла разориентации могут использоваться при исследовании процессов сегрегации, диффузии, рекристаллизации, фазовых переходов и др. Полученные с помощью компьютерного моделирования атомная структура ГЗ и варианты ее перестроек могут применяться для анализа электронно-микроскопических изображений высокого разрешения. Рассчитанные энергетические характеристики ГЗ и ее взаимодействия с вакансиями, векторы Бюргерса зернограничных дислокаций могут использоваться при исследовании процессов зернограничного проскальзывания, ползучести, сверхпластичности, взаимодействия ГЗ с дислокациями.

**На защиту выносятся следующие основные положения:**

1. Физическая модель перестройки атомной структуры ГЗ наклона, учитывающая два фундаментальных зернограничных процесса: относительный сдвиг зерен и взаимодействие границ зерен с вакансиями.

2. Структурно-энергетический анализ границ зерен наклона [100] в модели РСУ: а) границы зерен в модели РСУ являются неустойчивыми за исключением ГЗ  $\Sigma 5(012)$  в гцк металлах и сплавах со сверхструктурой  $L1_2$  и ГЗ  $\Sigma 5(013)$  в оцк металлах и сплавах со сверхструктурой B2; б) стабилизация ГЗ достигается относительным сдвигом зерен вдоль плоскости дефекта. Вектор относительного сдвига в общем случае не совпадает с вектором решетки зернограничных сдвигов.

3. Атомная структура стабильных и метастабильных состояний специальных границ зерен: а) атомная конфигурация структурной единицы стабильной ГЗ является предельным переходом от модели РСУ; б) переход из стабильного в метастабильные состояния происходит при относительном сдвиге зерен и (или) изменении числа атомов в структурной единице. Введен параметр перехода  $\tau_c$  от модели РСУ к модели структурных единиц. Для гцк металлов  $\tau_c$  равен 0,7 от величины идеального межатомного расстояния  $\tau_1$ ;

4. Атомная структура общих границ зерен: а) предпочтительными границами, образующими структуру общих ГЗ, являются границы  $\Sigma 5(013)$ ,  $\Sigma 17(014)$ ,  $\Sigma 25(017)$ ,  $\Sigma 65(018)$ ; б) заданная ориентация общей ГЗ обеспечивается переходом структурных элементов предпочтительных границ в метастабильные состояния.

5. Закономерности зернограничного проскальзывания: а) сдвиг зерен осуществляется зернограничными дислокациями, вектор Бюргерса которых определяется потенциальным рельефом сформированным упорядоченной системой структурных единиц ГЗ; б) атомная перестройка структурных единиц при изменении числа атомов понижает энергетический барьер зернограничного проскальзывания.

6. Структурный и адсорбционный механизмы взаимодействия ГЗ с вакансиями. Структурный механизм взаимодействия обеспечивает перестройку ГЗ в метастабильное состояние, вакансия при этом исчезает как самостоятельный дефект. Адсорбционное взаимодействие приводит к образованию вакансионных атмосфер.

**Апробация работы.** Основные результаты работы доложены на международных и российских конференциях: ASI NATO Nanostructured materials: Science and technology, Санкт-Петербург (1997); V международной конференции "Актуальные проблемы материаловедения в металлургии", Новокузнецк (1997); International Conference on Advanced Materials (E-MRS'97 Spring Meeting), Страсбург, Франция (1997); the 4<sup>th</sup> IUMRS International Conference in Asia (MRS-J'97), Чикаго, Япония (1997); XIV

уральской школе "Фундаментальные проблемы физического металловедения перспективных материалов", Ижевск (1998); MRS Spring Meeting'98, Сан-Франциско, США, (1998); третьем Сибирском конгрессе по прикладной и индустриальной математике ИНПРИМ-98, Новосибирск (1998); the 9<sup>th</sup> International Conference Intergranular and Interphase Boundaries in Materials, Прага, Чехия (1998); IV международной школе-семинаре "Эволюция дефектных структур в конденсированных средах", Барнаул (1998); the 5<sup>th</sup> IUMRS International Conference in Asia, Бангалор, Индия (1998); второй конференции "Материалы Сибири", Барнаул, (1998); the 5<sup>th</sup> IUMRS International Conference on Advanced Materials, Пекин, Китай, (1999); VI международной научно-технической конференции "Актуальные проблемы материаловедения", Новокузнецк, (1999); V международной школе-семинаре "Эволюция дефектных структур в конденсированных средах", Барнаул (2000); International Symp. Material Science and Technology, Харбин, Китай (2000); International Conference on Electronic Materials (E-MRS Spring Meeting), Страсбург, Франция (2000); XXXVI Международном семинаре "Актуальные проблемы прочности", Витебск, (2000); European Materials Research Society Spring Meeting Страсбург, Франция (2001); Российско-Китайском семинаре "Nonequilibrium Phase Transition under Ultra-Conditions (NEPTUC)", Китай, (2001).

**Структура и объем работы:** диссертация состоит из введения, семи глав, заключения и приложений. Работа изложена на страницах машинописного текста, содержит 87 рисунков 13 таблиц, список литературы состоит из наименования.

**Публикации.** По теме диссертации опубликовано печатных работ в отечественных и международных изданиях. Список основных публикаций, содержащий 36 наименований приведен в конце автореферата.

## ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

**Во введении** обосновывается актуальность темы, выбор метода исследования, формулируются цели диссертационной работы, представлены защищаемые положения. Дается краткое содержание работы по главам.

**Первая глава** носит обзорный характер. В ней приводятся сведения обосновывающие важную роль ГЗ в формировании физических и механических свойств поликристаллов. В конце главы сформулированы задачи диссертационной работы.

Накопленный к настоящему времени большой экспериментальный материал показывает, что при пластической деформации поликристалла соседние зерна не могут деформироваться независимо друг от друга, согласование совместности деформации осуществляется границами зерен. В этом проявляется их активная роль. ГЗ испускают, поглощают и пропускают

дислокации, внутри самих ГЗ происходят сложные процессы, обеспечивающие аккомодацию формоизменения отдельных зерен. Отмечено, что в ультрамелкозернистых кристаллах с развитой межзеренной поверхностью наблюдается нарушение соотношения Холла-Петча, что может быть объяснено действием ГЗ не только как барьеров, но и как источников, стоков и мест аннигиляции дислокаций. Исследование ультрамелкозернистых материалов выявило особые состояния ГЗ - неравновесные, которые активно обсуждаются в последние годы (Кайбышев О.А., Валиев Р.З., Мулюков Р.Р., Назаров А.А.). Такие ГЗ обладают повышенной подвижностью, повышенной энергией, в них меняется кинетика диффузионных процессов, т.е. неравновесность структуры выступает как один из основных параметров, определяющих свойства реальных кристаллов.

Важным для практики процессом, главную роль в котором играют ГЗ, является структурная сверхпластичность. К фундаментальному механизму, обеспечивающему сверхпластичность, относится зернограничное проскальзывание. Проскальзывание является механизмом, дающим основной вклад в общую деформацию при сверхпластичности, другие процессы, такие как внутризеренная деформация и диффузионная ползучесть, играют аккомодационную роль и определяют кинетику и особенности развития зернограничного проскальзывания (Кайбышев О.А., Валиев Р.З.). Зернограничное проскальзывание осуществляется за счет движения зернограничных дислокаций. Природа зернограничных дислокаций, вектор Бюргерса этих дислокаций и механизм их перемещений по ГЗ в настоящее время остаются дискуссионными.

Другой фундаментальной характеристикой ГЗ является ее способность взаимодействовать с точечными дефектами: вакансиями, примесными атомами, внедренными атомами. ГЗ являются наиболее эффективными источниками и стоками вакансий в поликристаллах, именно они обеспечивают равновесную концентрацию вакансий в зерне. Эффективность действия ГЗ, как источников, так и стоков вакансий зависит от типа границы - общие ГЗ являются высокоэффективными источниками и стоками, тогда как специальные ГЗ обладают слабой эмиссией и адсорбцией. Механизмы взаимодействия и влияние точечных дефектов на структуру и динамику ГЗ в настоящее время недостаточно разработаны. В ряде работ отмечена взаимосвязь диффузии и дислокационных процессов происходящих на ГЗ. Активация зернограничного проскальзывания происходит под воздействием диффузионных потоков примеси (Колобов Ю.Р. с сотр.), в свою очередь бомбардировка границ дислокациями вызывает стимулирование зернограничной диффузии (Чувильдеев В.Н.).



Очевидно, что понимание процессов, происходящих с участием ГЗ, должно быть основано не только на знании атомной структуры ГЗ, но и, что является еще более важным, на учете элементарных механизмов перестройки атомной структуры ГЗ. Существующие атомистические модели, такие как модель решетки совпадающих узлов (PCU) (Kronberg M.L., Wilson F.H.) структурных единиц (Sutton A.P., Vitek V.), являются качественными. В рамках этих моделей можно получить атомную конфигурацию ГЗ, однако, исследование с их помощью перестроек структуры представляется невозможным.

Важнейшей характеристикой ГЗ является энергия их образования. Экспериментальное измерение энергии ГЗ представляет собой чрезвычайно трудную задачу, зачастую решаемую приближенно (Копецкий Ч.В., Фионова Л.К.). Именно этим объясняется немногочисленность имеющихся данных по абсолютным значениям энергии ГЗ. В большинстве случаев измеряются не абсолютные, а относительные значения энергии. Одним из косвенных методов оценки энергии ГЗ является исследование статистики ГЗ в общем зернограничном ансамбле поликристалла. Большинство работ в этом направлении выполнено для металлов (Рыбин В.В., Титовец Ю.Ф., Андреева А.В., Фионова Л.К. и др.), значительно меньше исследований проведено в упорядоченных сплавах (Козлов Э.В., Конева Н.А.). В последнее время получили развитие теоретические дисклинационно-структурные модели, позволяющие рассчитать зависимость энергии ГЗ от угла разориентации (Владимиров В.И., Герцман В.Ю., Назаров А.А., Романов А.Е.). Атомная конфигурация и энергия структурных единиц являются одним из входных параметров этих моделей.

Модельные представления об атомной структуре ГЗ могут быть проверены при сравнении с прямыми изображениями ГЗ, полученными методом высокоразрешающей электронной микроскопии (Krakow W., Cosandey F., Bacía M., Shanzuzzoha M. и др.). Данный метод имеет высокую точность, позволяющую проводить не только качественный анализ атомной структуры, но и получать ее количественные характеристики.

**Во второй главе** рассматриваются основные методы компьютерного моделирования в физике твердого тела. Проводится обоснование выбора метода молекулярной статистики и потенциала межатомного взаимодействия для исследования энергетических и структурных характеристик ГЗ и их взаимодействия с точечными дефектами.

Компьютерное моделирование атомной структуры ГЗ проводилось с использованием парного межатомного потенциала Морза:

$$\varphi_{kl}(r_{ij}) = D_{kl} \beta_{kl} \exp(-\alpha_{kl} r_{ij}) [\beta_{kl} \exp(-\alpha_{kl} r_{ij}) - 2], \quad (1)$$

где  $D_{kl}$ ,  $\alpha_{kl}$ ,  $\beta_{kl}$  - параметры, определяющие взаимодействие между атомами сорта  $k$  и  $l$ ,  $r_{ij}$  - расстояние между атомами. Параметры потенциалов

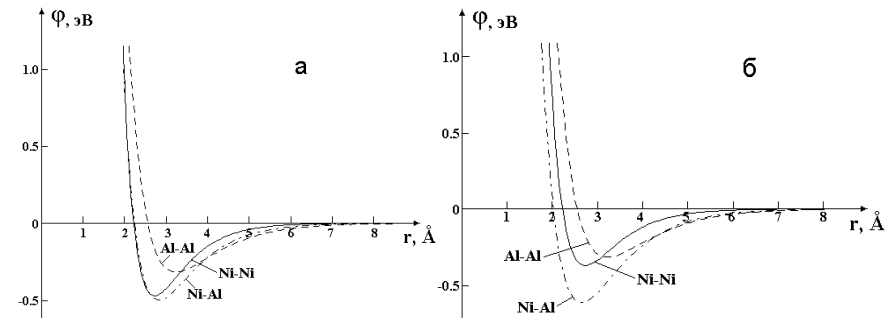


Рис.1. Межатомные потенциалы Морза в  $\text{Ni}_3\text{Al}$  (а) и  $\text{NiAl}$  (б).

находились с использованием экспериментальных характеристик металлов и сплавов по методике разработанной Старостенковым М.Д. с сотрудниками. В гцк металлах параметры потенциалов Морза определялись по значениям параметра решетки, энергии сублимации и объемного модуля упругости. В оцк металлах вместо энергии сублимации использовалась энергия образования вакансии. Потенциалы взаимодействия, связывающие атомы различного сорта, находились из свойств упорядоченных сплавов. При этом, дополнительно использовались энергии упорядочения и энергии антифазных границ. Вид потенциалов Морза на примере интерметаллидов  $\text{Ni}_3\text{Al}$  и  $\text{NiAl}$  показан на рис.1. Используемые в работе межатомные потенциалы ранее были апробированы при расчетах плоских дефектов, таких как дефекты упаковки, антифазные границы, двойниковые границы (Старостенков М.Д., Баранов М.А.) в широком классе металлов и упорядоченных сплавов.

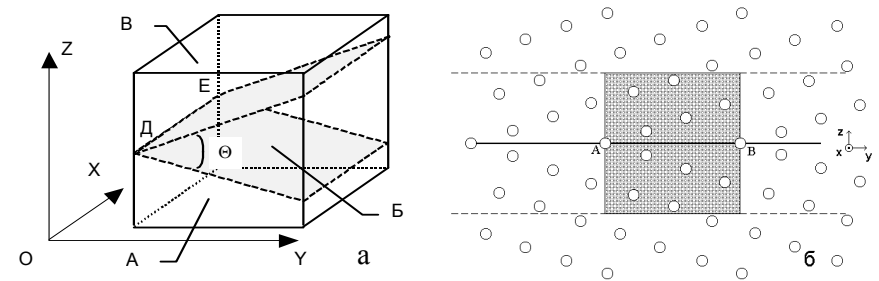


Рис.2. Схема построения границ зерен наклона общего (а) и специального типов (б).

Построение бикристалла, содержащего ГЗ общего типа, происходит следующим образом. Идеальный кристалл разбивается на три части двумя плоскостями, проходящими через ось разориентации ДЕ (рис.2а). Затем из

идеального кристалла удаляется часть Б, после чего части А и В поворачиваются вокруг оси ДЕ и производится сшивка частей бикристалла. Оси координат выбираются следующим образом: ось X – параллельно оси разориентации, ось Y – вдоль плоскости ГЗ, ось Z – перпендикулярно ГЗ. Вдоль осей Y и Z использовались жесткие граничные условия, вдоль оси X - периодические граничные условия. Размеры бикристалла вдоль оси Y составляет 25a, вдоль оси Z - 10a (a - параметр решетки).

Исходная структура специальных ГЗ строилась с использованием модели РСУ (рис.2б). Оси координат ориентированы также, как в случае общих границ. Специальные ГЗ имеют периодическое строение вдоль осей X и Y (на рис.2б период идентичности вдоль оси Y обозначен АВ), поэтому вдоль плоскости дефекта накладывались периодические граничные условия. Вдоль оси Z использовались жесткие граничные условия. Расчетная ячейка специальных ГЗ на рис.2б показана штриховкой.

Энергия образования ГЗ определялась как разность энергии кристалла, содержащего ГЗ, и энергии идеального кристалла, отнесенной к площади расчетной ячейки:

$$E_{ГЗ} = \frac{E^{деф} - E^{ид}}{S}, \quad (2)$$

где  $E^{ид}$  - энергия идеального кристалла,  $E^{деф}$  - энергия кристалла, содержащего ГЗ,  $S$  - площадь расчетной ячейки. Количество атомов  $N$ , участвующих в расчетах  $E^{деф}$  и  $E^{ид}$ , одинаково и не изменяется в процессе расчета. Энергии кристалла, содержащего дефект, и идеального кристалла определялись как сумма потенциальных энергий всех атомов входящих в расчетную ячейку:

$$E^{деф} = \sum_{i=1}^N E_i^{деф}, \quad E^{ид} = \sum_{i=1}^N E_i^{ид}. \quad (3)$$

Потенциальная энергия  $i$ -го атома расчетной ячейки в кристалле с дефектом  $E_i^{деф}$  определяется как сумма энергий парных взаимодействий этого атома со всеми атомами, принадлежащими сфере заданного координационного радиуса:

$$E_i^{деф} = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^k \phi(r_{ij}), \quad (4)$$

где  $i$  - номер атома, для которого рассчитывается сумма парных взаимодействий,  $j$  - номер атома, принадлежащего сфере заданного координационного радиуса,  $r_{ij}$  - расстояние между атомами,  $k$  - количество атомов, принадлежащих сфере заданного координационного радиуса. Расчет  $E_i^{ид}$  проводился по такой же формуле. В диссертационной работе радиус действия межатомного потенциала Морза был принят равным радиусу

третьей координационной сферы. Минимизация энергии кристалла с дефектом осуществлялась методом молекулярной статики.

Анализ устойчивых состояний ГЗ при относительном сдвиге зерен выполнялся методом построения  $\gamma$ -поверхности, предложенным Витеком (Vitek V. Phil. Mag., 1968, v.18, p.773). В методе Витека  $\gamma$ -поверхность представляет собой зависимость энергии плоского дефекта от вектора сдвига одной части кристалла относительно другой.

Энергия взаимодействия точечного дефекта с ГЗ ( $E_{ВЗ}$ ) определялась как

$$E_{ВЗ} = E_{ГЗ+ТД} - (E_{ГЗ} + E_{ТД}), \quad (5)$$

где  $E_{ГЗ}$  - энергия ГЗ;  $E_{ТД}$  - энергия образования точечного дефекта в идеальном кристалле, определяемая как разность энергии кристалла, содержащего точечный дефект и энергии идеального кристалла;  $E_{ГЗ+ТД}$  - энергия комплекса "ГЗ + точечный дефект", определяемая как разность

Таблица 1. Кристаллогеометрические характеристики границ зерен специального типа.

$\Sigma$	hkl	$\Theta, ^\circ$	$\Gamma_{\min}/\Gamma_1$	
			гцк	оцк
5	012	53,13	0,63	0,52
5	013	36,87	0,45	0,74
13	015	22,62	0,28	0,46
13	023	67,38	0,39	0,32
17	014	28,07	0,34	0,28
17	035	61,93	0,24	0,40
25	017	16,26	0,20	0,33
25	034	73,74	0,28	0,24
29	025	43,60	0,26	0,22
37	016	18,92	0,23	0,19
41	019	12,68	0,16	0,25
53	027	31,89	0,19	0,16
61	0 1 11	10,39	0,13	0,21
65	018	14,25	0,17	0,14
65	0 3 11	30,51	0,12	0,20
73	038	41,11	0,16	0,14
85	0 1 13	8,80	0,11	0,18
85	029	25,06	0,15	0,13
89	0 3 13	25,99	0,11	0,17
97	0 5 13	42,07	0,10	0,16
101	0 1 10	11,42	0,14	0,11

энергии кристалла, содержащего точечный дефект вблизи ГЗ и энергии идеального кристалла.

Объектом исследования являются ГЗ наклона с осью разориентации [100]. Расчеты общих ГЗ проведены в интервале углов разориентации от  $5^\circ$  до  $45^\circ$ . Исследованы специальные ГЗ с  $\Sigma \leq 101$  из них подробно исследуются ГЗ с  $\Sigma \leq 25$ . Основное внимание уделено металлам с гцк решеткой и упорядоченным сплавам со сверхструктурой  $L1_2$ . Полученные результаты сравниваются с расчетами этих же границ в оцк металлах и упорядоченных сплавах со сверхструктурой B2. Расчеты ГЗ проведены в гцк и оцк металлах Al, Ni, Au, Cu,  $\alpha$ -Fe, W и в сплавах со сверхструктурой  $L1_2$   $Cu_3Au$ ,  $Au_3Cu$ ,  $Ni_3Al$ ,  $Ni_3Fe$  и со сверхструктурой B2  $NiAl$ ,  $FeAl$ .

Кристаллогеометрические характеристики исследованных в работе специальных ГЗ приведены в таблице 1. В таблице 1 приведены: обратная плотность совпадающих узлов  $\Sigma$ , индексы Миллера плоскости границы (hkl), угол разориентации  $\Theta$ . В дальнейшем для сокращенного обозначения специальных границ будем использовать индексы плоскости или величину  $\Sigma$ .

В третьей главе приведены результаты структурно-энергетического анализа ГЗ, имеющих структуру в модели РСУ. Подробно исследованы ГЗ с малыми значениями  $\Sigma$  не превышающими 25 ( $\Sigma \leq 25$ ).

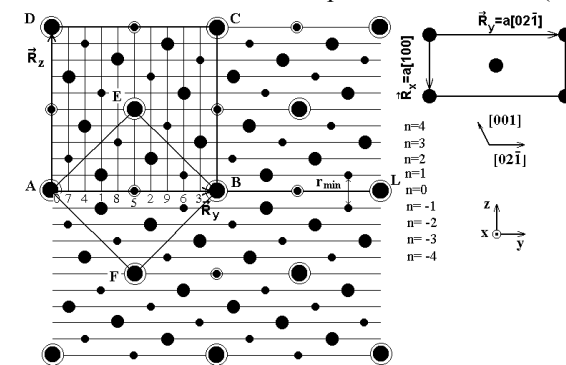


Рис.3. Структура границы зерен  $\Sigma 5(012)$  в гцк металлах в модели РСУ. В правом верхнем углу показана плоская элементарная ячейка. АЕВФ - элементарная ячейка РСУ, ADCB - решетка зернограницных сдвигов,  $n$  - номер атомной плоскости.

Структура границ в модели РСУ представлена рис.3 на примере ГЗ (012) в гцк металлах. Плоскость симметрии AL является плоскостью границы зерен. Атомы, находящиеся в узлах РСУ, выделены окружностями. Элементарная ячейка РСУ обозначена как АЕВФ. На этом же рисунке показана структура плоской элементарной ячейки, являющейся структурным элементом, определяющим периодичность расположения атомов в плоскости ГЗ в модели РСУ.

Построение ГЗ наклона в модели РСУ сопровождается сближением атомов, находящихся в смежных плоскостях по обе стороны от границы, на расстояние  $r_{\min}$ , меньшее радиуса первой координационной сферы  $r_1$ . Численные значения  $r_{\min}$ , выраженные в долях радиуса 1-й координационной сферы, для металлов с гцк и оцк решетками приведены в таблице 1. Отношение  $r_{\min}/r_1$  может служить параметром, характеризующим отклонение межатомного расстояния в области границы от соответствующего идеальной решетке. Несмотря на высокую когерентность сопряжения решеток на границах в модели РСУ, их энергия из-за сближения атомов может быть высокой. Вейнсом, Глейтером и Чалмерсом (Weins M.J., Gleiter H., Chalmers V. J. Appl. Phys., 1971, v.42, p.2639) высказано предположение о необходимости существования на ГЗ относительного сдвига зерен, позволяющего развести сближенные атомы.

Исследование ГЗ в модели РСУ с учетом относительных сдвигов в работе проводилось методом построения  $\gamma$ -поверхностей. Использовались две расчетные модели: жесткая и релаксированная. В жесткой модели при относительном сдвиге зерен атомы остаются в узлах соответствующих решеток, сдвиг осуществляется вдоль плоскости дефекта. Именно такое построение соответствует геометрической модели РСУ. В релаксированной модели атомам предоставляется возможность перемещаться под действием межатомных сил.

На рис.4 в качестве примера приведены  $\gamma$ -поверхности и их проекции на плоскость дефекта для ГЗ  $\Sigma 17(014)$  в гцк и оцк металлах. На рис.4а показаны  $\gamma$ -поверхности, рассчитанные в жесткой модели, на рис.4б - в релаксированной. Наибольший интерес на  $\gamma$ -поверхности представляют минимумы т.к. они характеризуют устойчивые атомные структуры. Введем следующие обозначения. Состояние ГЗ, соответствующее наиболее глубокому минимуму энергии, будем считать стабильным в данной модели и обозначим латинской буквой S, остальные минимумы, соответствующие метастабильным состояниям, обозначим буквами греческого алфавита:  $\alpha$ ,  $\beta$  и т.д.

Исходная структура ГЗ в модели РСУ на  $\gamma$ -поверхности соответствует точке с координатами  $X=Y=0$ . Анализ показал, что для всех границ этой точке на  $\gamma$ -поверхности, построенной в жесткой модели, соответствует максимум. Это означает, что атомная структура ГЗ в модели РСУ является неустойчивой. Стабилизация достигается относительным сдвигом зерен вдоль плоскости дефекта и переходом в устойчивое состояние, которое на  $\gamma$ -поверхности соответствует минимуму.

После проведения атомной релаксации вид  $\gamma$ -поверхностей существенно изменился (рис.4б). Значительно уменьшилась энергия, изменилось число и взаимное расположение минимумов. На релаксированных  $\gamma$ -поверхностях в

а б

Рис.4. Энергетические  $\gamma$ -поверхности ГЗ  $\Sigma 17(014)$  и их проекции на плоскость границы в гцк и оцк металлах, рассчитанные в жесткой (а) и релаксированной (б) моделях.

в точке  $X=Y=0$  также наблюдается максимум, т.е. ГЗ в модели РСУ являются неустойчивыми даже после атомной релаксации. Исключение составляют ГЗ  $\Sigma 5(012)$  в гцк металлах и сплавах со сверхструктурой  $L1_2$  и ГЗ  $\Sigma 5(013)$  в оцк металлах и сплавах со сверхструктурой B2.

Исследование рельефа показало, что для всех металлов с одинаковым типом решетки  $\gamma$ -поверхности имеют подобный вид. В сплавах ситуация значительно сложнее. Расчеты показывают, что каждому сплаву, в отличие от металлов, соответствует собственная  $\gamma$ -поверхность с характерным расположением и числом устойчивых состояний. Сказанное иллюстрирует рис.5, на котором приведены  $\gamma$ -поверхности ГЗ  $\Sigma 17(014)$  для сплавов  $Cu_3Au$ ,  $Ni_3Fe$  и интерметаллида  $Ni_3Al$ . Различие  $\gamma$ -поверхностей связано с тем, что атомам сплава может быть приписан некоторый эффективный радиус.

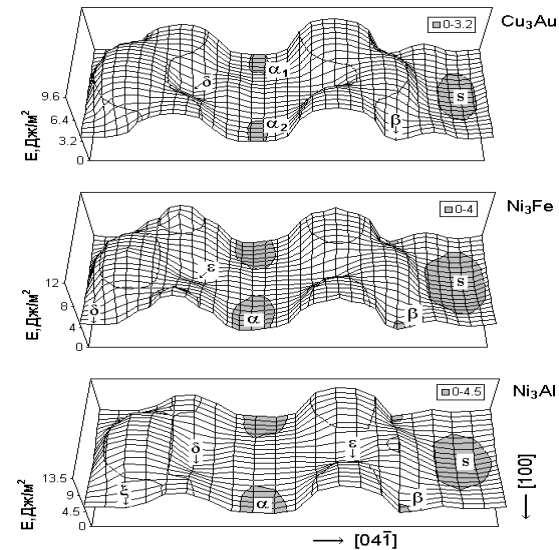


Рис.5. Энергетические  $\gamma$ -поверхности ГЗ  $\Sigma 17(014)$  в сплавах со сверхструктурой  $L1_2$ , рассчитанные с учетом атомной релаксации.

зависящий от характера межатомного взаимодействия. Энергетический рельеф на границе, возникающий при укладке разновеликих сфер, может иметь различный вид, зависящий от соотношения эффективных размеров атомов.

Чтобы ответить на вопрос возможно ли, пользуясь векторами решетки зернограничных сдвигов (РЗС) (Орлов А.Н., Рыбин В.В., Перевезенцев В.Н., ФТТ, 1975, т.17, с.1662), определить вектор относительного сдвига и найти равновесную структуру границ зерен,

было проведено сопоставление минимумов на рассчитанных  $\gamma$ -поверхностях с узлами РЗС. На рис.3 участок РЗС обозначен ADCB. Цифрами отмечены номера узлов РЗС. Проведенный анализ показывает, что вектор относительного сдвига в общем случае не совпадает с векторами РЗС.

На рис.6 приведены графики зависимости относительных значений энергии ГЗ, структура которых соответствует на  $\gamma$ -поверхности стабильному состоянию S, от величины  $r_{\min}/r_1$  в Ni и Ni<sub>3</sub>Al. Значения энергии поделены на энергию ГЗ (012). Зависимость 1 получена в жесткой модели, зависимость 2 получена в модели, учитывающей атомную релаксацию. Видно, что в жесткой модели существует корреляция между величиной энергии и степенью сближения атомов. Это позволяет сделать заключение о том, что энергия ГЗ в жесткой модели определяется главным образом геометрическими факторами такими как сближение атомов при формировании ГЗ наклона. После проведения атомной релаксации такая зависимость отсутствует, энергии всех ГЗ имеют близкие значения.

**В четвертой главе** исследована структура границ зерен общего типа.

Полученные в последние годы электронномикроскопические изображения высокого разрешения показывают, что в области ГЗ может



Рис.6. Зависимость относительной энергии  $E_{ГЗ}/E_{012}$  от величины  $r_{min}/r_1$  в Ni и  $Ni_3Al$ .  $\circ$  - жесткая модель,  $\Delta$  - полная атомная релаксация.

изменяться количество атомов по сравнению с моделью РСУ. Изменение числа атомов, также как и относительный сдвиг, может рассматриваться как один из механизмов релаксации структуры ГЗ. Для описания ГЗ с переменным числом атомов удобно использовать модель структурных единиц (Sutton A.P., Vitek V.). В модели структурных единиц общая граница может быть представлена как чередование слегка деформированных структурных элементов так называемых предпочтительных специальных границ. Под структурным элементом (структурной единицей) специальной ГЗ понимается группа атомов, образующая период ее идентичности. Из геометрического рассмотрения неясно, структурные единицы каких границ следует взять в качестве составляющих, кроме того неизвестна атомная конфигурация самих структурных единиц предпочтительных границ.

На рис.7 показана структура ГЗ с произвольным углом разориентации  $\Theta$ , построенная в геометрической модели. Построение ГЗ производится таким образом, чтобы в структуре присутствовал хотя бы один атомный ряд, состоящий из совпадающих узлов. На рис.7 совпадающий узел обозначен буквой А. В общем случае ГЗ построенные в геометрической модели являются аперриодическими. Второй совпадающий узел может находиться на

большом расстоянии от первого или совсем отсутствовать. Однако, достаточно часто встречаются узлы, расстояние между которыми настолько мало, что их можно рассматривать как один совпадающий узел. Совпадающие узлы такого типа образуют квазипериодическую структуру.

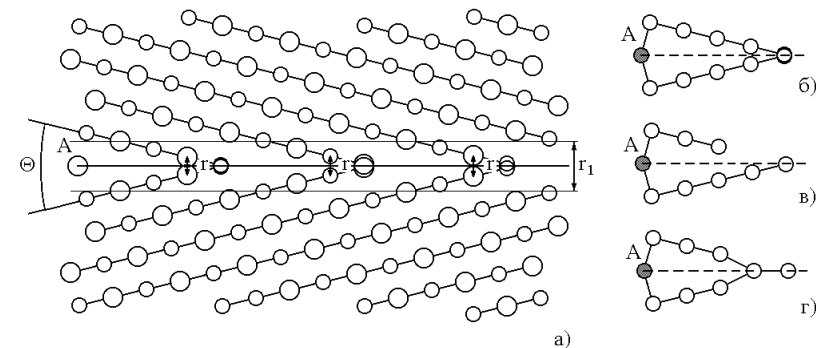


Рис.7. Структура ГЗ наклона общего типа (а) и структурные единицы до релаксации (б) и после релаксации (б) и после вакансионной релаксации с локализованной вакансией (в) и с распределенной вакансией (г).

В области произвольной ГЗ наклона имеются атомы, расстояние между которыми существенно меньше межатомного расстояния в идеальной решетке. Минимизация энергии в этом случае может быть проведена путем удаления части атомов из области границы. Удаление атома эквивалентно введению вакансии в область ГЗ. В диссертационной работе использовалась следующая процедура введения вакансий. Исходная структура ГЗ с произвольным углом разориентации строилась в жесткой модели, как показано на рис.7. Определялись пары атомов, расстояние между которыми меньше некоторого заданного значения  $\Gamma$  (рис.7б). Один из сблизившихся атомов удалялся, на его месте образовывалась вакансия (рис.7в). Затем второй атом смещался в симметричное положение на плоскость границы (рис.7г). Вакансия при этом исчезает как самостоятельный дефект. Следуя работе (Guyot P., Simon J.P. Phys. Stat. Sol., 1976, v.38, p.207) вакансии на ГЗ, находящиеся в таких состояниях, будем называть соответственно локализованными и распределенными вакансиями. Для каждой конфигурации атомов, возникающей при введении вакансий проводились расчеты зернограничной энергии. На следующем шаге значение  $\Gamma$  увеличивалось, и процедура релаксации проводилась вновь. Описанную выше процедуру будем называть вакансионной релаксацией. Как заключительный этап минимизации энергии кристалла с дефектом после вакансионной релаксации использовалась атомная релаксация.

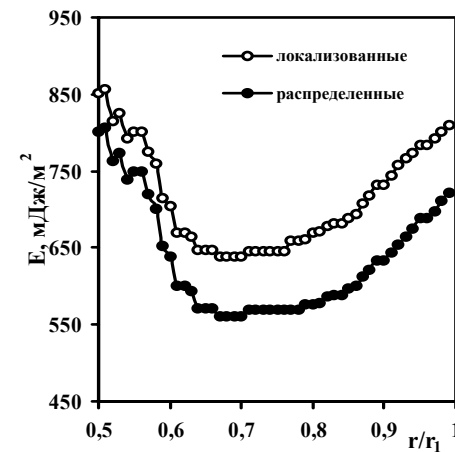


Рис.8. Изменение энергии общей ГЗ с углом раз-ориентации  $\Theta=35^\circ$  в процессе вакансионной релаксации. Приведены зависимости для ГЗ с локализованными и распределенными вакансиями.

Графики изменения энергии ГЗ в процессе последовательного удаления атомов, для границы с углом разориентации  $\Theta=35^\circ$  в алюминии приведены на рис.8. На горизонтальной оси отложены значения  $r/r_1$ . Величина  $r$

характеризует толщину приграничного слоя из которого удалялись атомы, а отношение  $r/r_1$  показывает толщину слоя в долях кратчайшего межатомного расстояния в идеальной решетке ( $r_1$  - радиус первой координационной сферы). На рис.8 приведены зависимости энергии ГЗ как с локализованными, так и с распределенными вакансиями. Обе зависимости имеют вид кривых с минимумом. Вначале введение вакансий понижает энергию ГЗ, затем, при избыточном количестве вакансий, энергия возрастает. Как видно из графиков, энергия границы с распределенными вакансиями во всем диапазоне величин  $r/r_1$  лежит ниже энергии ГЗ с локализованными вакансиями, т.е. образование распределенной вакансии на границе выгоднее, чем локализованной.

Рассмотрим более подробно структуру ГЗ общего типа, рассчитанную с использованием методики вакансионной релаксации, на примере границы с углом разориентации  $\Theta=35^\circ$  (рис.9). После проведения процедуры релаксации четко выявились структурные элементы ГЗ, которые выделены на рисунке линиями.

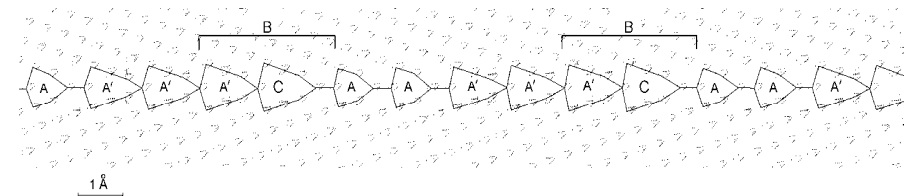


Рис.9. Структурные единицы ГЗ общего типа с углом разориентации  $\Theta=35^\circ$ .

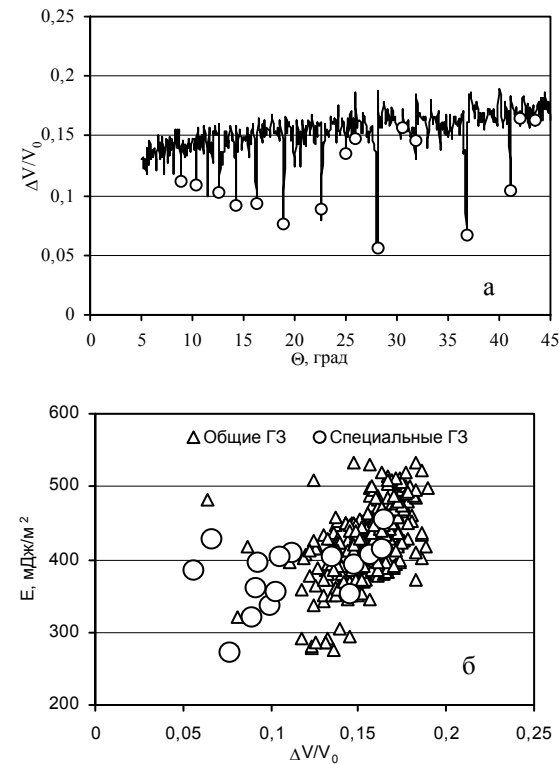


Рис.10. Графики зависимости относительного избыточного объема  $\Delta V/V_0$  от угла разориентации (а) и энергии границы  $E$  от величины относительного избыточного объема в алюминии (б).

ГЗ  $\Theta=35^\circ$  имеет разориентацию промежуточную между разориентацией специальных ГЗ  $\Sigma 53(027)$  ( $\Theta=31,89^\circ$ ) и  $\Sigma 5(013)$  ( $\Theta=36,87^\circ$ ). В соответствии с моделью структурных единиц данная ГЗ будет состоять из смеси в определенной пропорции структурных элементов этих специальных границ. На рис.9 структурные единицы специальной ГЗ  $\Sigma 5$  отмечены символом А. Граница  $\Sigma 5$  присутствует в двух состояниях. Первое состояние, обозначенное А, соответствует стабильной структуре. Второе состояние, обозначенное А', является метастабильным состоянием. Состояния А и А' отличаются количеством атомов в структурной единице. Структурные элементы в

метастабильных состояниях обеспечивает заданную ориентацию общей ГЗ. Структурная единица границы  $\Sigma 53$  отмечена символом В. Граница  $\Sigma 53$  является неустойчивой и, в свою очередь, распадается на ГЗ  $\Sigma 5(013)$  и  $\Sigma 17(014)$ . ГЗ  $\Sigma 17$  отмечена на рис.9 символом С. Из приведенного рассмотрения можно сделать вывод, что специальные ГЗ  $\Sigma 5(013)$  и  $\Sigma 17(014)$  относятся к предпочтительным, а  $\Sigma 53(027)$  - нет. Подобным методом в работе были исследованы общие ГЗ с углами разориентации  $\Theta=5^\circ$  и  $\Theta=15^\circ$ . Показано, что предпочтительными также являются ГЗ  $\Sigma 65(018)$  и  $\Sigma 25(017)$ .

Введение вакансий в область границы зерен приводит к образованию избыточного (свободного) объема в центральной части границы. Величину избыточного объема  $\Delta V$  можно оценить по количеству удаленных на поверхность кристалла атомов по формуле  $\Delta V = V_a \cdot N$ , где  $V_a$  – объем, приходящийся на один атом,  $N$  – количество удаленных атомов.

На рис.10 приведены зависимость относительного избыточного объема от угла разориентации и зависимость энергии границы от величины относительного избыточного объема в алюминии, рассчитанные для общих и специальных ГЗ. Специальные границы зерен обозначены кружками. Зависимость энергии ГЗ от  $\Delta V/V_0$  прослеживается достаточно надежно только для специальных границ: с возрастанием избыточного объема энергия ГЗ также растет. Значения энергии общих ГЗ образуют компактную область с центром соответствующим среднему значению относительного объема 0,16. Результаты расчетов избыточного объема согласуются с работами Вольфа (Wolf D.), в которых показано, что между энергией специальных ГЗ и избыточным объемом имеется линейная зависимость. Хорошо согласуются с литературными данными и значения относительного объема.

Одной из важнейших характеристик зернограничного ансамбля является зависимость энергии ГЗ от угла разориентации  $\Theta$ . Рассчитанные в работе

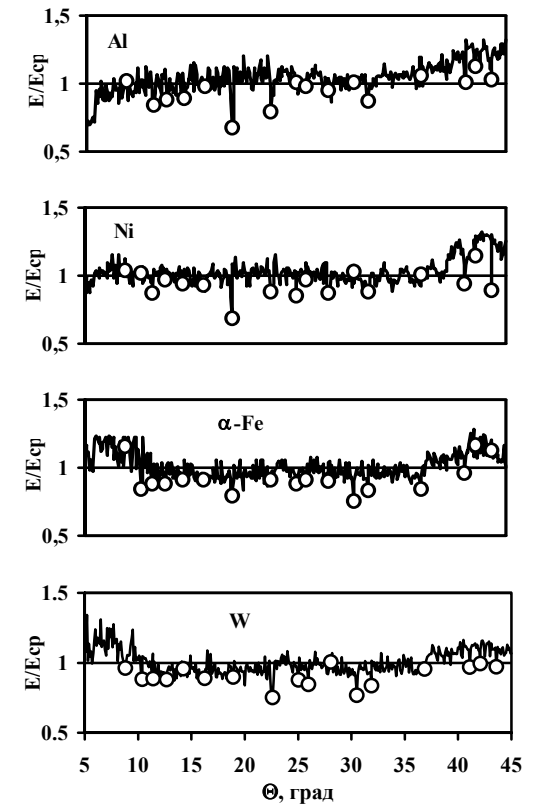


Рис.11. Графики зависимости относительной энергии ГЗ  $E/E_{cp}$  от угла разориентации  $\Theta$  в металлах.

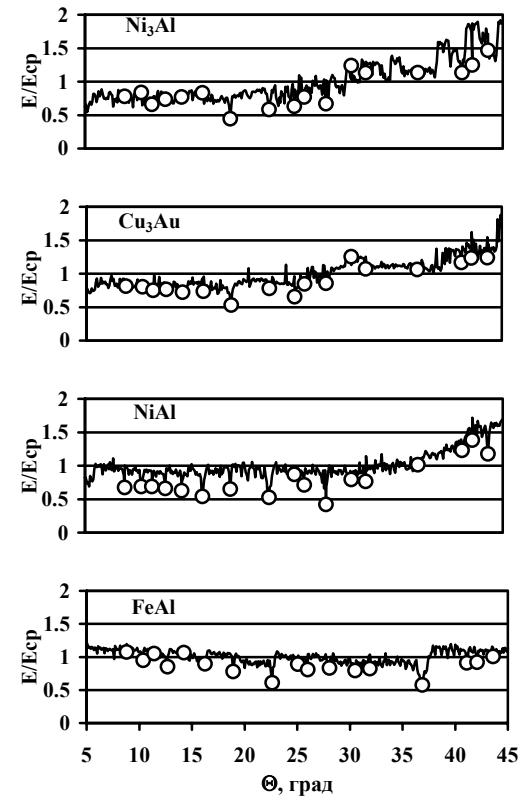


Рис.12. Графики зависимости относительной энергии ГЗ  $E/E_{cp}$  от угла разориентации  $\Theta$  в упорядоченных сплавах и интерметаллидах.

изменение энергии. Первая область находится вблизи угла разориентации  $30^\circ$ , изменение энергии наблюдается только в сплавах. Вторая область находится вблизи угла разориентации  $40^\circ$ , изменение энергии происходит как в металлах, так и в сплавах. Можно сделать следующее предположение относительно данных эффектов. Изменение энергии вблизи угла  $40^\circ$ , может быть объяснено сменой типа структурных единиц при переходе через угол разориентации  $45^\circ$ . Значения энергии плавно возрастают начиная от угла разориентации  $40^\circ$  и достигают своего максимального значения вблизи угла  $45^\circ$ . В сплавах структурные единицы различаются содержанием атомов

графики зависимости относительной энергии (по отношению к среднему значению энергии  $E_{cp}$ ) от угла разориентации для некоторых металлов и сплавов приведены на рис.11 и 12. Расчеты проведены в диапазоне углов от  $5^\circ$  до  $45^\circ$  с шагом  $0,1^\circ$ . Графики имеют осциллирующий характер, что может быть связано с дискретностью изменения структуры дефекта при увеличении угла разориентации. На графиках наблюдаются отчетливо выраженные понижения энергии, соответствующие специальным разориентировкам зерен. Положения специальных ГЗ отмечены маркерами в виде кружков. На зависимостях энергии от угла разориентации в гцк металлах и сплавах со сверхструктурой  $L1_2$  имеются две области, в которых наблюдается

компонент, образуя чередующиеся неконсервативные антифазные границы разного типа. Можно предположить, что при углах больше  $30^\circ$  описание области ГЗ как чередование АФГ теряет смысл, так как размер структурных единиц становится мал и составляет группы с числом атомов около 10. Такую структуру можно рассматривать как "разупорядоченный" слой в области границы. Появление разупорядоченного слоя изменяет энергию ГЗ в сплавах.

**В пятой главе** исследуется атомная структура специальных границ. Кристаллогеометрические характеристики специальных границ с плотностью совпадающих узлов  $\Sigma \leq 101$  приведены в таблице 1.

Расчеты атомной структуры специальных границ зерен также как и общих проводились с использованием методики вакансионной релаксации. На рис.13 показаны графики изменения энергии ГЗ в алюминии в процессе вакансионной релаксации. В верхнем правом углу рисунка отдельно изображены зависимости энергии ГЗ  $\Sigma 5(013)$  и  $\Sigma 97(0 5 13)$  от величины  $r/r_1$ . Зависимости имеют четко выраженный ступенчатый характер, связанный с правильной геометрической структурой специальных ГЗ. Каждая ступенька появляется при введении одной вакансии. Как следует из приведенных зависимостей, для образования стабильной структуры ГЗ  $\Sigma 5$  требуется введение одной вакансии, а для границы  $\Sigma 97$  необходимо ввести шесть вакансий.

Подробное исследование участка вблизи минимальных значений энергии ГЗ, отмеченного на рис.13 прямоугольником, показало, что стабилизация структуры всех границ наступает после удаления одного из пары атомов,

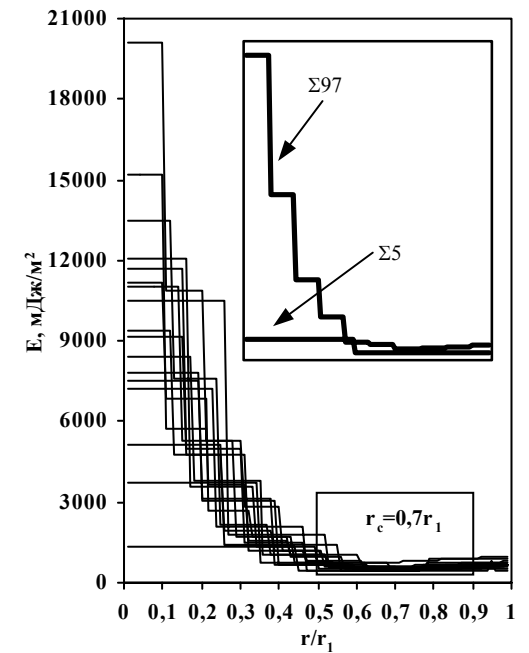


Рис.13. Графики изменения энергии специальных ГЗ в процессе вакансионной релаксации.

сблизившихся на расстояние меньше или равное  $r \leq 0,7 \cdot r_1$ . Величина  $r_c = 0,7 \cdot r_1$  может служить параметром, позволяющим произвести построение структурных единиц ГЗ, используя модель РСУ как исходную.

Проведенные расчеты позволяют предложить следующую методику построения структурных единиц специальных ГЗ. Вдоль границы, построенной по правилам модели РСУ, выделяется слой толщиной  $r_c = 0,7 \cdot r_1$ , расположенный таким образом, чтобы плоскость ГЗ была в центре. Каждая симметрично расположенная пара атомов, попавшая в выделенный слой, заменяется одним, который помещается в плоскость ГЗ. Затем проводится атомная релаксация структуры с учетом сил межатомного взаимодействия.

На рис.14 показаны атомные структуры ГЗ  $\Sigma 5(012)$ ,  $\Sigma 5(013)$ ,  $\Sigma 13(015)$  и  $\Sigma 17(014)$  рассчитанные для Al. Атомы на рисунках имеют позиции после вакансионной релаксации. Стрелки на рисунках показывают величину и

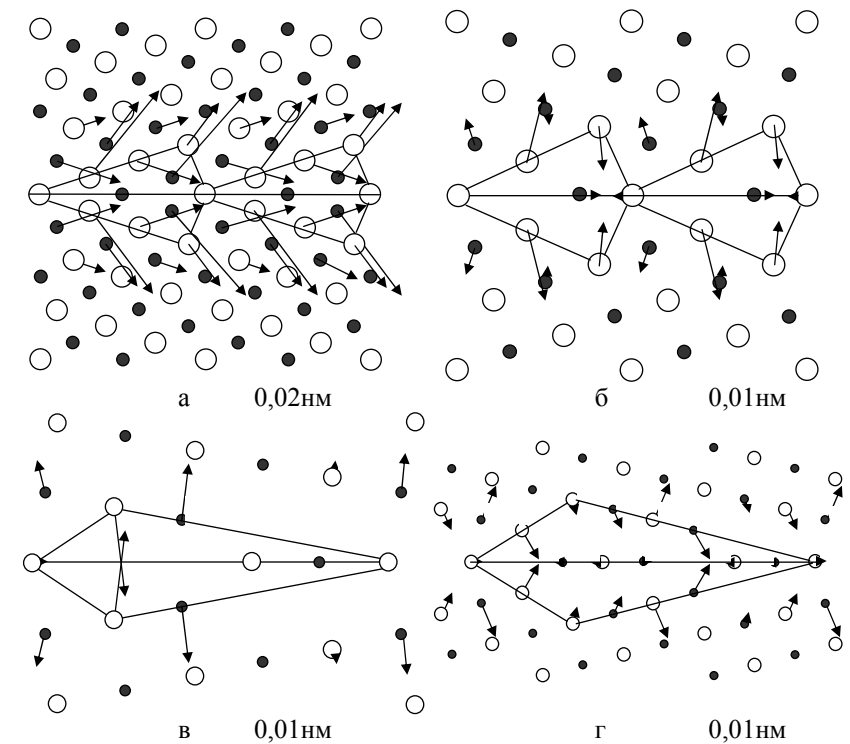


Рис.14. Атомная структура ГЗ  $\Sigma 5(012)$  (а),  $\Sigma 5(013)$  (б),  $\Sigma 13(015)$  (в) и  $\Sigma 17(014)$  (г) в алюминии.



направление атомных смещений после проведения атомной релаксации. Структура ГЗ  $\Sigma 5(012)$  совпадает со структурой в модели РСУ. Для получения стабильной конфигурации структурных единиц ГЗ  $\Sigma 5(013)$  необходимо ввести одну вакансию, т.е. удалить один атом. Для получения структурных единиц ГЗ  $\Sigma 13(015)$  и  $\Sigma 17(014)$ , требуется удалить 2 атома.

Проведенные расчеты обнаружили, что состояние решетки вблизи ГЗ характеризуется сложными трехмерными смещениями атомов. Детальный анализ атомных смещений показал, что в направлении перпендикулярном оси разориентации вдоль плоскости ГЗ происходит чередование областей сжатия и растяжения. Атомная конфигурация рассчитанных границ хорошо совпадает со структурами, полученными экспериментально методом

электронной микроскопии. Хорошее согласие получено с экспериментальными изображениями ГЗ  $\Sigma 5(012)$  (Krakow W. Phil. Mag., 1991, v.63, p.233),  $\Sigma 5(013)$  (Cosandey F., Chen Siu-Wai, Stadelman P. Scr. Met., 1988, v.22, p.1093),  $\Sigma 17(014)$  (Krakow W. Acta Met., 1990, v.38, p.1031).

На рис.15 приведены графики зависимости относительной энергии специальных ГЗ от величины  $\Sigma$  в гцк и оцк металлах рассчитанной с применением вакансионной релаксации. Энергии границ нормированы на значение энергии ГЗ  $\Sigma 5(013)$ . Между энергией специальных границ и обратной плотностью совпадающих узлов отсутствует четкая зависимость. В гцк металлах линия усредненной зависимости (тренда) лежит ниже значения

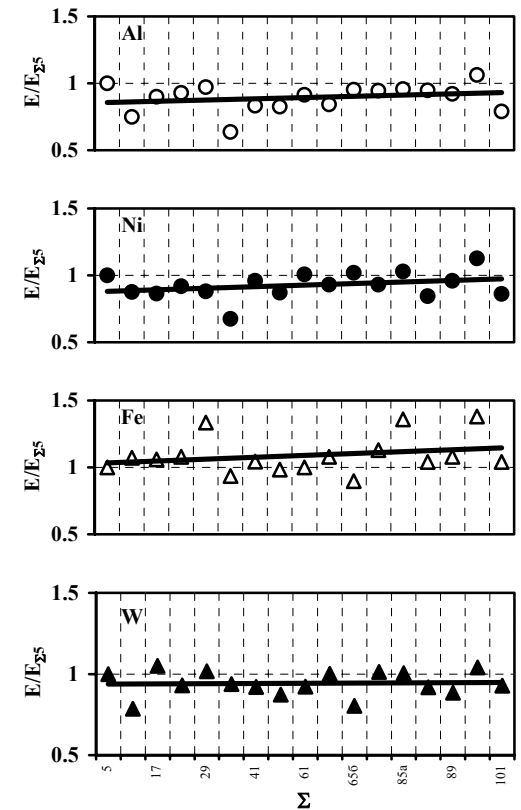


Рис.15. Относительная энергия специальных ГЗ в металлах.

относительной энергии равно единице. Это означает, что ГЗ  $\Sigma 5$  имеет энергию выше, чем большинство специальных границ. Полученные результаты хорошо согласуются с экспериментальными данными по статистике границ зерен, в которых отмечается низкая частота появления ГЗ  $\Sigma 5$  в общем зернограничном ансамбле в гцк металлах, что связывается с ее высокой энергией (Фионова Л.К., Копецкий Ч.В., Рыбин В.В.). В  $\alpha$ -Fe энергия ГЗ  $\Sigma 5$  ниже, чем энергия большинства границ, а в W - выше.

**В шестой главе** приводятся результаты расчетов атомной структуры метастабильных состояний ГЗ и исследуются перестройки ГЗ из одного структурного состояния в другое.

Наиболее простая перестройка атомной структуры ГЗ может происходить при поглощении или испускании вакансий. Перестройка ГЗ происходит при поглощении или испускании так называемых зерногранично-структурных вакансий, которые являются составными элементами структуры ГЗ (Покропивный В.В., Ягодкин В.В., ФММ, 1983, т.56, с.392). Будем называть данные вакансии структурными; основным признаком структурных вакансий является исчезновение вакансии как самостоятельного дефекта в результате взаимодействия с ГЗ.

На рис.16 схематически показаны атомные конфигурации структурных единиц ГЗ в стабильном и метастабильных состояниях после поглощения и испускания структурных вакансий. Введены следующие обозначения. Стабильное состояние, которое в данной модели соответствует структуре ГЗ с распределенными вакансиями, обозначено  $S^D$  (рис.16а). При переходе вакансии из распределенного в локализованное состояние граница переходит в состояние  $S^L$  (рис.16б). Индексы D и L обозначают распределенное и локализованное состояние вакансий на ГЗ. Границы, содержащие избыточное число вакансий или атомов, находятся в метастабильном состоянии  $m_v$  или  $m_a$ , соответственно. Индексы v и a обозначают избыточное количество вакансий и атомов на ГЗ. В работе проведены расчеты энергии различных атомных конфигураций, возникающих при изменении количества атомов на ГЗ по сравнению со стабильной структурой. Спектры энергии состояний ГЗ, рассчитанные для Al, приведены на рис.17.

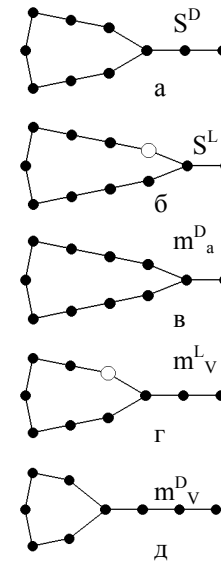
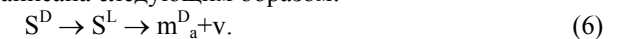


Рис.16. Изменение атомной конфигурации структурных единиц в результате поглощения и испускания структурных вакансий.

Рис.17. Спектры энергетических состояний ГЗ  $\Sigma 5(012)$ ,  $\Sigma 5(013)$ ,  $\Sigma 13(015)$  и  $\Sigma 17(014)$  в Al. Значения энергии  $E_m$  приведены в относительных единицах, за единицу принята величина энергии стабильного состояния  $E_s$ .

Экспериментально установлено, что в условиях существования неравновесной концентрации вакансий в поликристалле (например, при нагреве или охлаждении), ГЗ являются источниками (стоками) вакансий (Gleiter H., Jaeger H.). Исследования проведенные в настоящей работе показывают, что при испускании (поглощении) вакансии границей происходит перестройка ее атомной структуры.

Реакция перестройки границы в результате испускания структурной вакансии  $v$  может быть записана следующим образом:



Для того чтобы граница могла испустить вакансию необходим переход вакансии из распределенного состояния  $S^D$  (рис.16а) в локализованное  $S^L$  (рис.16б). Локализованная вакансия является самостоятельным дефектом и может мигрировать вглубь кристалла по обычному механизму обмена

местами. На месте вакансии появится атом и, после испускания вакансии, граница переходит в метастабильное состояние с избытком атомов  $m_a^D$  (рис.16в).

Реакция перестройки границы в результате поглощения вакансии может быть записана в виде:



При поглощении вакансий необходимо, чтобы из зерна в область стабильной границы попала вакансия и заняла позицию как показано на рис.16г. Последующий переход вакансии из локализованного состояния в распределенное приводит к образованию новой структуры  $m_v^D$  (рис.16д). При этом как самостоятельный дефект вакансия исчезает. Следует отметить, что описанные выше реакции показывают только изменение структуры ГЗ при поглощении или испускании структурных вакансий. Для исследования процесса перемещения вакансии из границы в зерно и обратно необходимо дополнительно учитывать энергию активации перескока вакансии в области ГЗ из одного узла в другой.

Поведение ГЗ как источников и стоков вакансий зависит от конкретной границы. Как видно из рис.17 ГЗ  $\Sigma 5(012)$  совсем неспособна испустить структурную вакансию. Поглощенная же вакансия будет оставаться локализованной, т.к. для перехода ее в распределенное состояние требуется дополнительная энергия, т.е. ГЗ (012) не может ни поглощать ни испускать структурные вакансии. Перестройка других границ может осуществляться как при поглощении, так и при испускании структурной вакансии.

Важным свойством специальных границ

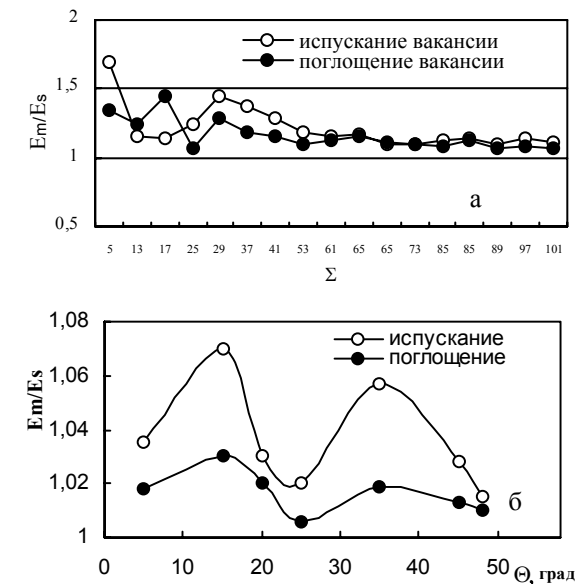


Рис.18. Относительная энергия специальных (а) общих (б) ГЗ в метастабильных состояниях ( $E_m$ ) после испускания и поглощения структурных вакансий. За единицу принято значение энергии стабильного состояния  $E_s$ .

является асимметрия спектров структурных состояний ГЗ, возникающих при поглощении и испускании структурных вакансий. Например, для ГЗ (013) и (015), как видно из рис.17, структура границы, образующейся после поглощения вакансии имеет меньшую энергию, чем структура после испускания вакансии, для ГЗ (014) соотношение обратное.

Относительное изменение энергии специальных и общих ГЗ при переходе из стабильного состояния в метастабильное в результате поглощения и испускания структурных вакансий приведены на рис.18. Изменение энергии ГЗ в результате поглощения и испускания вакансий существенно различается для ГЗ с  $\Sigma \leq 3$ , остальные границы имеют близкие энергии как после поглощения, так и после испускания вакансий. В большинстве ГЗ при поглощении вакансии изменение энергии меньше, чем при ее испускании. Для общих границ также наблюдается существенная асимметрия спектров: после испускания вакансий энергия ГЗ возрастает на величину в два-три раза большую, чем после их поглощения.

Другим процессом, в котором атомная перестройка ГЗ играет важную роль, является зернограничное проскальзывание. Один из видов зернограничного проскальзывания - "чистое" проскальзывание - представляет собой сдвиг одного зерна относительно другого вдоль плоскости ГЗ (Кайбышев О.А., Валиев Р.З.). Исследование зернограничного проскальзывания вдоль ГЗ  $\Sigma 5(012)$ ,  $\Sigma 5(013)$ ,  $\Sigma 13(015)$  и  $\Sigma 17(014)$  было проведено в Al методом построения  $\gamma$ -поверхностей. На рис.19 в качестве примера приведены  $\gamma$ -поверхности, полученные для ГЗ  $\Sigma 5(012)$  и  $\Sigma 5(013)$  находящихся как в стабильном S, так и в метастабильных состояниях с избытком атомов  $m_a$  (ГЗ  $\Sigma 5(012)$  не имеет состояния  $m_a$ ) и с избытком вакансий  $m_v$ . Для стабильных состояний дополнительно приведены контурные графики, являющиеся проекцией  $\gamma$ -поверхности на плоскость ГЗ.

Из рассмотрения рельефа  $\gamma$ -поверхностей видно, что зернограничное проскальзывание может осуществляться при переходе непосредственно из одного стабильного состояния в другое ( $S \rightarrow S$ ), а также через метастабильное состояние  $\alpha$  ( $S \rightarrow \alpha \rightarrow S$ ). Критерием выбора предпочтительного варианта зернограничного проскальзывания является величина потенциального барьера. Энергетическая  $\gamma$ -поверхность может рассматриваться как рельеф Пайерлса. Из анализа рельефа  $\gamma$ -поверхности можно определить направления сдвига и векторы Бюргера зернограничных дислокаций.

Граница зерен  $\Sigma 5(012)$  (рис.19а) не имеет сдвиговых промежуточных состояний, поэтому зернограничное проскальзывание вдоль этой ГЗ осуществляется полными зернограничными дислокациями с векторами Бюргера  $\mathbf{b} = a[100]$  или  $\mathbf{b} = \frac{a}{2}[12\bar{1}]$  (направления зернограничного проскальзывания на рис.19 показаны стрелками).

Рис.19. Энергетические  $\gamma$ -поверхности стабильного состояния S и метастабильных состояний с избытком атомов  $m_a$  и избытком вакансий  $m_v$ , рассчитанные для ГЗ  $\Sigma 5(012)$  (а) и  $\Sigma 5(013)$  (б).

Вдоль ГЗ  $\Sigma 5(013)$  (рис.19б) а также вдоль ГЗ  $\Sigma 17(014)$  и  $\Sigma 13(015)$  сдвиг происходит через промежуточное состояние  $\alpha$ , поэтому полная зернограничная дислокация, имеющая вектор Бюргера  $b=a[100]$ , расщепляется на частичные. Дислокационные реакции расщепления полной зернограничной дислокации на частичные для ГЗ в стабильном состоянии можно записать следующим образом:

$$\begin{aligned}
 \text{ГЗ } \Sigma 5(013): \quad & a[100] \rightarrow \frac{a}{6} [\bar{3}31] + \frac{a}{6} [3\bar{3}1], \\
 \text{ГЗ } \Sigma 17(014): \quad & a[100] \rightarrow \frac{a}{8} [\bar{4}41] + \frac{a}{8} [4\bar{4}1], \\
 \text{ГЗ } \Sigma 13(015): \quad & a[100] \rightarrow \frac{a}{10} [\bar{5}51] + \frac{a}{10} [5\bar{5}1].
 \end{aligned} \tag{8}$$

Сечения  $\gamma$ -поверхностей вдоль направлений сдвига для трех состояний ГЗ: стабильного  $S$ , с избытком вакансий  $m_v$  и с избытком атомов  $m_a$  показаны на рис.20. Видно, что переход ГЗ в метастабильное состояние в результате изменения числа атомов может понизить потенциальный барьер зернограничного проскальзывания.

Например, при испускании вакансии граница  $\Sigma 17(014)$  переходит в состояние  $m_a$ , ее энергия при этом возрастает до  $1,14 E_S$ , где  $E_S$  - энергия стабильного состояния (см. также рис.17). Барьер зернограничного проскальзывания уменьшается с  $2,7 E_S$  до  $2,0 E_S$ . Таким образом, в

результате такой перестройки энергия ГЗ увеличивается на 14% тогда как потенциальный барьер уменьшается на 26%. В связи с этим, для определения векторов Бюргера дислокаций, участвующих в зернограничном проскальзывании, необходимо рассматривать также те  $\gamma$ -поверхности, которые соответствуют метастабильным состояниям ГЗ с пониженным потенциальным барьером. Для этих состояний ГЗ дислокационные реакции могут быть записаны следующим образом:

$$\begin{aligned}
 \text{ГЗ } \Sigma 5(013), \text{ Состояние } m_v: & \quad a[100] \rightarrow \frac{a}{3} [1\bar{3}1] + \frac{a}{3} [13\bar{1}], \\
 \text{ГЗ } \Sigma 17(014), \text{ Состояние } m_a: & \quad a[100] \rightarrow \frac{a}{6} [3\bar{4}1] + \frac{a}{6} [23\bar{1}], \\
 \text{ГЗ } \Sigma 13(015), \text{ Состояние } m_v: & \quad a[100] \rightarrow \frac{a}{5} [2\bar{5}1] + \frac{a}{5} [25\bar{1}].
 \end{aligned} \tag{9}$$

Рис.20. Профили сечения  $\gamma$ -поверхностей ГЗ  $\Sigma 5(013)$ ,  $\Sigma 17(014)$  и  $\Sigma 13(015)$  вдоль направлений зернограничного проскальзывания.

Проведенные исследования позволяют предложить следующий механизм зернограничного проскальзывания. Под действием внешних напряжений ГЗ переходит из состояния  $S^D$  в состояние  $S^L$ . Число атомов в области ГЗ не изменяется, однако, появляется вакансия, как самостоятельный дефект. ГЗ будет оставаться в этом состоянии некоторое время, пока вакансия не переместится вглубь зерна. Место вакансии займет атом и структура ГЗ будет иметь избыточное количество атомов, т.е. перейдет в состояние  $m_a$ . Барьер зернограничного проскальзывания в результате испускания структурной вакансии может понизиться и в этой локальной области произойдет относительное смещение зерен. Затем ГЗ может снова перейти в стабильное состояние  $S$ , поглотив вакансию. В результате на ГЗ будут существовать две области, разделенные зернограничной дислокацией: область претерпевшая зернограничное проскальзывание и исходная ГЗ. Подобная схема зернограничного проскальзывания может быть применена и в случае поглощения вакансии.

Предложенный механизм не связан с неконсервативным движением (переползанием) зернограничных дислокаций (традиционный механизм зернограничного проскальзывания), а определяется диффузионной перестройкой атомной структуры ГЗ и понижением в результате этого барьера Пайерлса при консервативном скольжении зернограничных дислокаций.

**Седьмая глава** посвящена исследованию закономерностей взаимодействия ГЗ с точечными дефектами - вакансиями и атомами примеси. Расчеты проводились с использованием стабильной атомной структуры специальных ГЗ  $\Sigma 5(012)$ ,  $\Sigma 5(013)$ ,  $\Sigma 13(015)$  и  $\Sigma 17(014)$ , полученной в главе 5. Для расчетов использовался метод пробной вакансии предложенный Покропивным В.В. и Ягодкиным В.В. (ФММ, 1983). Пробные вакансии помещались в узлы кристаллической решетки, расположенные на разных расстояниях от ГЗ в соответствии со схемой, приведенной на рис.21.

Графики зависимости энергии взаимодействия ГЗ с вакансиями от положения вакантного узла относительно плоскости границы в Al, Ni и  $Ni_3Al$  представлены на

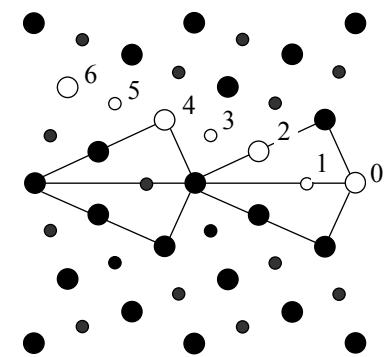


Рис.21. Схема введения пробной вакансии в область стабильной ГЗ (013). Вакансия последовательно вводилась в пронумерованные узлы.





рис.22. Отрицательные значения энергии соответствуют притяжению вакансий, положительные - отталкиванию. Зависимость энергии взаимодействия от положения вакансии относительно границы имеет сложный вид. Основной особенностью данной зависимости является ее осциллирующий характер. Видно, что зависимости энергии взаимодействия вакансии от расстояния до ГЗ в Al и Ni подобны. В Ni<sub>3</sub>Al значения энергии взаимодействия расположены между значениями энергии взаимодействия в металлах.

Представляется удобным охарактеризовать взаимодействие ГЗ с вакансиями посредством введения средней энергии взаимодействия. Рассчитанные значения средней энергии взаимодействия приведены в таблице 2.

При выполнении расчетов, вакансии в области ГЗ оставались локализованными, т.е. исследовалось адсорбционное взаимодействие вакансий с ГЗ. Адсорбционное взаимодействие является механизмом, обеспечивающим образование вакансионных атмосфер на ГЗ.

Таблица 2. Средняя энергия взаимодействия (эВ) вакансий с ГЗ.

ГЗ	Σ5 (012)	Σ5 (013)	Σ17 (014)	Σ13 (015)
Al	0,29	0,28	0,22	0,24
Ni	0,89	0,83	0,36	0,76
Ni <sub>3</sub> Al	0,65	0,42	0,15	0,23

Для исследования взаимодействия ГЗ с примесями использовался тот же подход, который был применен для вакансий. Расчеты проведены для ГЗ в Al и Ni. Примесями являются Ni и Cr в Al и Al и Cr в Ni. Графики зависимости энергии взаимодействия примесей с ГЗ в Al и Ni приведены на рис.23.

Анализ зависимостей, представленных на рис.23, показывает, что сегрегационные свойства приграничной области кристаллической решетки весьма неоднородны. Энергия взаимодействия примеси с ГЗ зависит как от типа атомов, являющихся примесью, так и от положения атомов примеси относительно ГЗ. В Al сегрегация атомов Ni происходит преимущественно в плоскостях смежных с плоскостью ГЗ, в Ni атомы Al могут сегрегировать по всей области ГЗ. Cr слабо взаимодействует с ГЗ как в Al так и в Ni.

### Основные результаты и выводы

1. На основании анализа энергетических  $\gamma$ -поверхностей, рассчитанных для специальных ГЗ в модели РСУ, установлено: а) ГЗ в модели РСУ являются неустойчивыми (за исключением ГЗ  $\Sigma 5(012)$  в гцк металлах и сплавах со сверхструктурой  $L1_2$  и ГЗ  $\Sigma 5(013)$  в оцк металлах и сплавах со сверхструктурой  $B2$ ), их стабилизация достигается за счет относительного сдвига зерен; б) вектор относительного сдвига в общем случае не совпадает с вектором решетки зернограницных сдвигов; в) рельеф  $\gamma$ -поверхностей в металлах с одинаковым типом решетки подобен, в сплавах рельеф  $\gamma$ -поверхностей индивидуален для каждого сплава.

2. ГЗ общего типа имеют квазипериодическую структуру и могут быть представлены как чередование структурных единиц предпочтительных границ. Специальные ГЗ  $\Sigma 5(013)$ ,  $\Sigma 17(014)$ ,  $\Sigma 25(017)$  и  $\Sigma 65(018)$  являются предпочтительными границами. Ориентация общей ГЗ обеспечивается, во-первых, соотношением числа структурных единиц разных предпочтительных границ, во-вторых, тем, что часть из них может находиться в метастабильном состоянии с избыточным числом атомов или вакансий.

3. Зависимости энергии ГЗ от угла разориентации в гцк металлах и сплавах со сверхструктурой  $L1_2$  имеют изменения значений энергии связанные: а) со сменой типа структурных единиц, образующих ГЗ вблизи угла  $\Theta=45^\circ$ ; б) со структурным разупорядочением в сплавах при углах  $\Theta>30^\circ$ .

4. В гцк металлах атомная конфигурация структурных единиц ГЗ  $\Sigma 5(012)$  совпадает со структурой в модели РСУ, для построения ГЗ  $\Sigma 5(013)$  требуется удаление одного атома, для  $\Sigma 13(015)$  и  $\Sigma 17(014)$  - по два атома по сравнению с моделью РСУ.

5. Состояние решетки вблизи ГЗ характеризуется сложными трехмерными смещениями атомов. В направлении перпендикулярном оси разориентации вдоль плоскости ГЗ происходит чередование областей сжатия и растяжения.

6. Границы зерен имеют несколько устойчивых состояний: стабильное, характеризующееся минимальной энергией, и метастабильные. Перестройка атомной структуры ГЗ из стабильного в метастабильные состояния происходит при относительном сдвиге зерен и (или) изменении числа атомов в структурной единице. Энергетические спектры состояний ГЗ являются асимметричными относительно перестроек при поглощении и испускании структурных вакансий.

7. На основе анализа рельефа  $\gamma$ -поверхностей ГЗ  $\Sigma 5(012)$ ,  $\Sigma 5(013)$ ,  $\Sigma 17(014)$  и  $\Sigma 13(015)$  в Al определены векторы Бюргера зернограничных дислокаций. Зернограничное проскальзывание вдоль ГЗ (012) осуществляется полными зернограничными дислокациями с векторами Бюргера  $\mathbf{b}=\mathbf{a}\langle 100 \rangle$  и  $\mathbf{b}=\frac{\mathbf{a}}{2}\langle 121 \rangle$ . При зернограничном проскальзывании вдоль ГЗ  $\Sigma 5(013)$ ,  $\Sigma 17(014)$  и  $\Sigma 13(015)$  полные зернограничные дислокации расщеплены на частичные с векторами Бюргера  $\mathbf{b}=\frac{\mathbf{a}}{6}\langle 331 \rangle$ ,  $\mathbf{b}=\frac{\mathbf{a}}{8}\langle 441 \rangle$  и  $\mathbf{b}=\frac{\mathbf{a}}{10}\langle 551 \rangle$ , соответственно.

8. Перестройка ГЗ в метастабильное состояние после поглощения или испускания вакансии может понизить барьер зернограничного проскальзывания. На основе этого эффекта предложен механизм зернограничного проскальзывания вдоль специальных ГЗ, включающий перестройку участка ГЗ в метастабильное состояние и последующий относительный сдвиг зерен вдоль метастабильного участка ГЗ за счет облегченного движения зернограничных дислокаций.

9. Осаждение вакансий на ГЗ  $\Sigma 5(012)$  происходит преимущественно в плоскостях соседних с ГЗ. На ГЗ  $\Sigma 5(013)$ ,  $\Sigma 17(014)$  и  $\Sigma 13(015)$  осаждение вакансий является выгодным в плоскости дефекта и на третьей плоскости от ГЗ. Значения средней энергии взаимодействия вакансий с ГЗ  $\Sigma 5(012)$ ,  $\Sigma 5(013)$ ,  $\Sigma 17(014)$  и  $\Sigma 13(015)$  лежат в интервале 0,29-0,22 эВ, 0,89-0,36 эВ и 0,65-0,15 эВ, в Al, Ni и Ni<sub>3</sub>Al соответственно.

10. Энергия взаимодействия примеси с ГЗ зависит как от типа атомов, являющихся примесью, так и от положения атомов примеси относительно ГЗ. В Al сегрегация атомов Ni происходит преимущественно в плоскостях смежных с плоскостью ГЗ, в Ni атомы Al могут сегрегировать по всей области ГЗ. Cr слабо взаимодействует с ГЗ как в Al так и в Ni.

## Основные публикации по теме диссертации.

1. Старостенков М.Д., Демьянов Б.Ф., Горлов Н.В. Атомистическое исследование термических антифазных границ в упорядоченных сплавах со сверхструктурой  $L1_2$ // Ред. журн. Изв. вузов. Физика.-Томск, 1984.- 12 с. Деп. в ВИНТИ №6528-84.
2. Царегородцев А.И., Горлов Н.В., Демьянов Б.Ф., Старостенков М.Д. Атомная структура АФГ и ее влияние на состояние решетки вблизи дислокации в упорядоченных сплавах со сверхструктурой  $L1_2$ // ФММ.- 1984.- т.58, вып.2.- с.336-343.
3. Старостенков М.Д., Демьянов Б.Ф. Антифазная граница - сверхструктурный дефект упаковки// Ред. журн. Изв. вузов. Физика.-Томск, 1984.- 10 с. Деп. в ВИНТИ №7710-84.
4. Демьянов Б.Ф., Старостенков М.Д., Горлов Н.В. Атомная конфигурация плоских дефектов в упорядоченных сплавах со сверхструктурой  $L1_2$ // Ред. журн. Изв. вузов. Физика.-Томск, 1984.- 16 с. Деп. в ВИНТИ №7260-84.
5. Горлов Н.В., Демьянов Б.Ф., Старостенков М.Д. Атомная конфигурация антифазных границ в сплавах со сверхструктурой  $L1_2$ // Изв.вузов. Физика.- 1985.- N2.- с.43-47.
6. Старостенков М.Д., Демьянов Б.Ф., Горлов Н.В. Атомистическое изучение дефектов упаковки в упорядоченной фазе  $Ni_3Fe$ // Изв.вузов. Черная металлургия.- 1985.- N10.- с.74-78.
7. Старостенков М.Д., Демьянов Б.Ф. Энергия образования и атомная конфигурация АФГ в плоскости куба в упорядоченных сплавах со сверхструктурой  $L1_2$ // Металлофизика.- 1985.- № 3.- с.128-130.
8. Старостенков М.Д., Горлов Н.В., Демьянов Б.Ф. Взаимодействие точечных дефектов с антифазной границей типа  $1/2 \langle 110 \rangle \{111\}$  в упорядоченном сплаве со сверхструктурой  $L1_2$ // Ред. журн. Изв. вузов. Физика.-Томск, 1986.- 21 с. Деп. в ВИНТИ № 988-В.
9. Старостенков М.Д., Демьянов Б.Ф., Горлов Н.В. Моделирование  $\gamma$ -поверхности скольжения в упорядоченном сплаве со сверхструктурой  $L1_2$ // Ред. журн. Изв. вузов. Физика.-Томск, 1986.- 18 с. Деп. в ВИНТИ №2402-В.
10. Старостенков М.Д., Горлов Н.В., Царегородцев А.И., Демьянов Б.Ф. Состояние решетки упорядоченных сплавов со сверхструктурой  $L1_2$  вблизи дефектов упаковки// ФММ.- 1986.- т.62, вып.1.- с.5-12.
11. Старостенков М.Д., Горлов Н.В., Демьянов Б.Ф. Атомная конфигурация термических АФГ в упорядоченных сплавах со сверхструктурой  $L1_2$ // Изв. СО АН СССР. Сер. техн. наук.- 1986.- вып.3, № 16.- с.101-104.
12. Старостенков М.Д., Горлов Н.В., Демьянов Б.Ф. Состояние решетки вблизи антифазной границы в упорядоченной фазе  $Ni_3Fe$ // Изв. вузов. Черная металлургия.- 1986.- № 8.- с.68-71.

13. Старостенков М.Д., Горлов Н.В., Демьянов Б.Ф. Зависимость стабилизирующего сдвига на антифазной границе  $1/2 \langle 110 \rangle \{111\}$  от степени упорядочения в сплавах со сверхструктурой  $L1_2//$  ФММ.- 1986.- т.64, вып.5.- с.1034-1038.
14. Старостенков М.Д., Горлов Н.В., Демьянов Б.Ф. Сегрегация вакансий на антифазной границе в упорядоченном сплаве со сверхструктурой  $L1_2//$  Изв. вузов. Физика.- 1986.- № 11.- с.116-118.
15. Старостенков М.Д., Горлов Н.В., Демьянов Б.Ф. Зависимость стабилизирующего сдвига на антифазной границе  $1/2 \langle 110 \rangle \{111\}$  от степени упорядочения в сплавах со сверхструктурой  $L1_2//$  Изв. вузов. Черная металлургия.- 1986.- № 12.- с.55-59.
16. Старостенков М.Д., Демьянов Б.Ф., Рябов С.Б. Расчет локальных деформаций вблизи АФГ в зависимости от степени упорядочения// Физические свойства металлов и сплавов.- Свердловск: изд. УПИ.- 1986.- с.21-26.
17. Старостенков М.Д., Горлов Н.В., Демьянов Б.Ф. Атомная конфигурация антифазных границ в сплавах со сверхструктурой  $L1_2//$  Изв. вузов. Физика.- 1987.- №7.- с.49-53.
18. Поляков В.В., Сыров Г.В., Демьянов Б.Ф. Влияние пористости на пластическую деформацию железа// Поверхность. Рентг., синхр. и нейтр. иссл.- 1996.- №6.- с. 50-53.
19. Поляков В.В., Сыров Г.В., Демьянов Б.Ф. Особенности пластической деформации пористых металлов// Митом.- 1996.- №3.- с.21-23.
20. Starostenkov M.D., Demyanov B.F., Kustov S.L., Sverdlova E.G., Grakhov E.L. Computer modelling of grain boundaries in  $Ni_3Al//$  Comp. Mat. Sci.- 1998.- v.10, N.- p.436-439.
21. Старостенков М.Д., Демьянов Б.Ф., Кустов С.Л., Грахов Е.Л. Межзеренные границы наклона  $\Sigma=5$  в сплаве  $Ni_3Fe//$  ФММ.- 1998.- т.85, вып.5.- с.43-50.
22. Starostenkov M.D., Demyanov B.F., Grakhov E.L., Kustov S.L., Sverdlova E.G. Properties of tilt grain boundaries in ordered alloys// Nanostructured Materials.- 1998.- v.10, N3.- p.493-501.
23. Starostenkov M.D., Dem'yanov B.F., Sverdlova E.G., Grakhov E.L. Energies of the tilt grain boundaries in ordered alloy  $NiAl//$  МФИНТ.- 1998.- т.20, №8.- с.55-59.
24. Starostenkov M.D., Demyanov B.F., Kustov S.L., Sverdlova E.G., Grakhov E.L. Computer modelling of grain boundaries in  $Ni_3Al//$  Comp. Mat. Sci.- 1999.- v.14, N1-4.- p.146-151.
25. Старостенков М.Д., Демьянов Б.Ф., Кустов С.Л., Векман А.В., Грахов Е.Л., Сverdlova E.G. Структура и свойства границ зерен наклона  $[100]$  в металлах и упорядоченных сплавах// Вестник АлтГТУ.- 1999.- №1.- с.67-82.

26. Starostenkov M.D., Demyanov B.F., Kustov S.L., Sverdlova E.G., Grakhov E.L. Computer simulation of tilt grain boundaries in alloys with  $L1_2$  and  $B2$  superlattices // Materials Science Forum. - 1999. - vols.294-296. - p.215-218.
27. Демьянов Б.Ф., Грахов Е.Л., Старостенков М.Д., Взаимодействие вакансий со специальными границами зерен в алюминии // ФММ.- 1999.- т.88, №3. - с.37-42.
28. 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 Met. Sinica (English Letters).- 2000.- v.13, №2.- p.540-545.
29. Starostenkov M.D., Demyanov B.F., Kuklina E.A., Sverdlova E.G. Grain boundary reorganization in intermetallic compounds NiAl and FeAl // Acta Met. Sinica (English Letters).- 2000.- v.13, №2.- p.546-550.
30. Starostenkov M.D., Demyanov B.F., Kustov S.L., Grakhov E.L. Atomic structure of grain boundaries in alloys with  $L1_2$  superlattice // Proc. Int. Symp. Material Science and Technology, Harbin, China.- 2000.- v.1.- p.67-68.
31. Старостенков М.Д., Демьянов Б.Ф., Кустов С.Л., Грахов Е.Л., Сverdlova E.G. Атомная структура границ зерен наклона [100] в металлах и упорядоченных сплавах// Тр. XXXVI Международного семинара "Актуальные проблемы прочности".- Витебск.- 2000.- Ч.1.-с.210-216.
32. Старостенков М.Д., Демьянов Б.Ф., Векман А.В. Малоугловые границы зерен в упорядоченном сплаве CuAu// Поверхность.- 2000.- №4.- с.54-58.
33. Старостенков М.Д., Демьянов Б.Ф., Кустов С.Л., Куклина Е.А. Определение векторов Бюргера зернограницных дислокаций в границах зерен наклона//Изв. вузов. Физика.- 2000.- т.43, №11 (приложение).- с.81-85.
34. Старостенков М.Д., Демьянов Б.Ф., Векман А.В. Зависимость энергии границ зерен наклона от угла разориентации в гцк металлах//Изв. вузов. Физика.- 2000.- т.43,№11 (приложение).- с.76-80.
35. Демьянов Б.Ф., Старостенков М.Д., Кустов С.Л., Куклина Е.А. Компьютерное моделирование границ наклона в алюминии// Изв. вузов. Черная металлургия.- 2000.-№12.-с.44-46.
36. Векман А.В., Демьянов Б.Ф., Старостенков М.Д. Ориентационная зависимость энергии границ зерен в металлах с объемноцентрированной кубической решеткой // Изв. вузов. Черная металлургия.- 2001.-№2.-с.39-42.