

УДК 536.425

МОДЕЛЬ ЗЕРНОГРАНИЧНОЙ СЕГРЕГАЦИИ ПРИМЕСИ В НЕОДНОРОДНЫХ ГРАНИЦАХ ЗЁРЕН ДЛЯ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЙ СТАБИЛИЗАЦИИ ПОЛИКРИСТАЛЛА

Марчий Г.В. (Университет ИТМО)

Научный руководитель – кандидат технических наук, Самсонов Д.С.
(ФТИ им. А.Ф. Иоффе)

Введение. Серебряные отражающие покрытия широко применяются в оптике благодаря высокому уровню отражения в большом диапазоне частот. Многие практические приложения требуют стойкости таких покрытий к повышенным температурам, однако серебряные плёнки при нагреве уже до 200-300°C демонстрируют деградацию отражения вследствие образования полостей в толще плёнки вплоть до полной агломерации плёнки [1]. Наблюдаемый эффект объясняется ростом зёрен в поликристаллическом серебре. С точки зрения термодинамики рост зёрен обусловлен уменьшением энергии системы за счёт уменьшения доли границ зёрен, обладающих избыточной по сравнению с внутренностью зерна энергией. Добавление в систему примеси, сегрегирующейся в границах зёрен и уменьшающей их энергию может сделать рост зёрен термодинамически не выгодным. На данный момент существует два подхода для термодинамического описания влияния сегрегации примеси на рост зёрен. Первая модель рассматривает зерна и их границы как однородные области характеризующиеся своими энергиями сегрегации [2]. Минимизируя функционал свободной энергии для такой системы, можно найти равновесную концентрацию примеси в границе зёрен и равновесный размер зёрен при фиксированных полной концентрации примеси и температуре. Данная модель предполагает наличие экспериментально измеренной или каким-либо образом оцененной энергии смешивания и энергии сегрегации. Энергия сегрегации часто бывает неизвестна, а её оценки носят приблизительный характер. Второй подход предполагает использование атомистического моделирования для расчёта энергий сегрегации [3]. При таком рассмотрении оказывается, что границы зёрен не однородны и разным их частям соответствуют разные энергии сегрегации. В то время как в литературе описаны закономерности сегрегации примеси в неоднородных зёрнах и представлены результаты расчёта функции распределения энергий сегрегации в пределе малых концентраций примеси (пренебрегая взаимодействием примесь-примесь), нами не было найдено в источниках выражения для свободной энергии такой системы, что затрудняет применение данной модели к анализу стабильности систем с примесью.

Основная часть. В данной работе выведен вид функционала свободной энергии для системы с неоднородными границами зёрен. Показано, что данный выбор функционала приводит к известной изотерме сегрегации Мак Лина. В том числе рассмотрен случай учёта взаимодействия примесь-примесь в рамках метода среднего поля. Теоретический анализ данной модели показал, что равновесные концентрации внутри зёрен и на их границах не зависят от полной концентрации примеси. Применение данной модели для анализа системы серебро-никель предсказало наличие стабильного состояния с малым размером зерен уже при концентрации никеля около 5% при температурах до 300°C. Показано, что учёт взаимодействия примесь-примесь крайне важен для анализа стабильности данной системы относительно кристаллизации разделённой фазы (кластеризации никеля).

Выводы. Была усовершенствована модель зернограничной сегрегации для неоднородных границ зерен. Впервые был предложен вид функционала свободной энергии для данной системы и показано, что равновесные концентрации примеси в зёрнах и их

границах не зависят от полной концентрации. Получены практические результаты относительно стабильности системы серебро-никель. Ведётся работа по численному расчёту параметров взаимодействия примесь-примесь.

Список использованных источников:

1. Samsonov D.S., Tereschenko I., Mukhin E.E., Gubal A., Kapustin Y., Filimonov V., Babinov N.A., Dmitriev A.M., Nikolaev A., Komarevtsev I., Koval A., Litvinov A.E., Marchii G., Razdobarin A., Snigirev L., Tolstyakov S., Marinin G., Terentev D., Gorodetsky A.E., Zalavutdinov R.K., Markin A.V., Bukhovets V., Arkhipushkin I., Borisov A., Khripunov V.I., Mikhailovskii V., Modestov V., Kirienko I., Buslakov I., Chernakov P.V., Mokeev A., Kempenaars M., Shigin P.A., Drapiko E. Large-scale collecting mirrors for ITER optical diagnostic//Nuclear Fusion, 2022.
2. Murdoch H.A., Schuh C.A. Stability of binary nanocrystalline alloys against grain growth and phase separation//Acta Materialia, 2013, Vol. 61, No. 6, P. 2121-2132.
3. Wagih M., Schuh C.A. Thermodynamics and design of nanocrystalline alloys using grain boundary segregation spectra//Acta Materialia, 2021, Vol. 217, P. 117177.