

УДК 621.791.1

## АНАЛИЗ ЭНЕРГИИ ГРАНИЦ ЗЕРЕН В МЕТАЛЛАХ ПРИМЕНИТЕЛЬНО К ПРОЦЕССУ СОЕДИНЕНИЯ МЕТАЛЛОВ ПРИ СВАРКЕ ДАВЛЕНИЕМ

Зыбин И.Н.<sup>1</sup>, Булычев В.В.<sup>1</sup>, Латыпов Р.А.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>ФГБОУ ВПО Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана, Калужский филиал, Калуга, Россия (248000, Калуга, ул. Баженова, д. 2), e-mail: igor.zybin@mail.ru

<sup>2</sup>ФГБОУ ВПО Московский государственный машиностроительный университет (МАМИ), Москва, Россия (125993, Москва, ул. Тверская, д. 11), e-mail: latipov46@mail.ru

---

Проведен анализ теоретических и экспериментальных значений энергии границ зерен в металлах применительно к процессу соединения металлов при сварке давлением. Говорится о зависимости энергии границ зерен от угла разориентации зерен. Эта зависимость имеет осциллирующий характер, отражающий атомно-дискретную структуру дефекта. Экспериментальное определение энергии границ зерен связано с рядом трудностей, а теоретические методы основаны на применении компьютерного моделирования. При теоретическом определении энергии границ зерен существенное влияние на эту энергию оказывает вид принимаемой модели: жесткая модель, модель с учетом вакансионной или атомной релаксации. Представлены теоретические и экспериментальные значения энергии границ зерен в различных металлах, имеющих в основном ГЦК структуру. Сообщается о возможности рассмотрения границ зерен в качестве активных центров, на основе которых происходит взаимодействие соединяемых металлов при сварке давлением. Показано, что для сравнительной оценки энергии границ зерен разных металлов при сварке давлением целесообразно эту энергию определять с учетом энергии поверхности расплава металла.

Ключевые слова: активные центры, энергия границ зерен, сварка давлением.

## THE ANALYSIS OF THE ENERGY OF GRAIN BOUNDARIES IN METALS APPLIED TO THE PROCESS OF JOINING METALS DURING WELDING PRESSURE

Zybin I.N.<sup>1</sup>, Bulychev V.V.<sup>1</sup>, Latypov R.A.<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Bauman Moscow State Technical University (Kaluga Branch), Kaluga, Russia (248000, Kaluga, Bazhenov street, 2), e-mail: igor.zybin@mail.ru

<sup>2</sup> Moscow State Engineering University (MAMI), Moscow, Russia (125993, Moscow, Tverskaya street, 11), e-mail: latipov46@mail.ru

---

The analysis of theoretical and experimental values of the energy of grain boundaries in metals applied to the joining metals during welding pressure. It is told about dependence of the energy of grain boundaries of disorientation angle of grains. This dependence has oscillating character, reflecting the atomic discrete structure of the defect. Experimental determination of the energy of grain boundaries associated with a number of difficulties, and theoretical methods based on the use of computer modeling. At theoretical determination of the energy of grain boundaries the type of the accepted model has essential impact on this energy: rigid model, the model taking into account the vacancy or atomic relaxation. The theoretical and experimental values of the energy of grain boundaries in various metals having mostly FCC structure are presented. The possibility of having grain boundaries as active centres, on the basis of which there is an interaction of the joined metals during welding pressure. It is shown that for the comparative evaluation of the energy of grain boundaries of different metals during welding pressure is advisable to determine this energy with the energy of the surface of the molten metal.

Keywords: active centres, energy of grain boundaries, welding pressure.

При сварке давлением соединение образуется в результате деформационного или термомодеформационного воздействия на соединяемые материалы в зоне контакта. Как отмечается в работах [22,23], независимо от характера и интенсивности этого воздействия природа образования соединения является неизменной. Различия заключаются в кинетике протекания отдельных стадий процесса, которая определяется условиями нагрева,

характером и интенсивностью деформации материалов, степенью локализации деформации и особенностями развития релаксационных процессов в приконтактной зоне.

В настоящее время сварку давлением без расплавления соединяемых металлов рассматривают, как процесс, включающий три основные стадии: образование физического контакта, активацию контактных поверхностей с последующим образованием между ними химических связей, объемное взаимодействие материалов [18]. Согласно современным представлениям, объемное взаимодействие соединяемых материалов в плоскости контакта и в объеме зоны контакта начинается на активных центрах, представляющих собой поля упругих искажений кристаллической решетки вокруг поверхностных дефектов. Повышенный уровень энергии вокруг дефектов кристаллической решетки способствует преодолению в этих зонах энергетического порога, схватывания и образования очагов схватывания.

### **Постановка задачи исследования**

В работах [3,4,13,19,23] в качестве активных центров рассмотрены дефекты кристаллической решетки в виде краевых дислокаций. В работах [1,18] с данных позиций обсуждаются возможные значения энергий и плотностей вакансий. В работе [21] приведен обзор работ, в которых экспериментально выявлена возможность улучшения свариваемости металлов в твердой фазе путем интенсификации зернограничного проскальзывания, реализуемого в условиях структурной сверхпластичности. При этом роль зернограничного проскальзывания видится, прежде всего, в активизации процессов массопереноса.

В то же время возможность и целесообразность рассмотрения границ зерен в качестве активных центров образования твердофазного соединения остаются мало исследованными. На этом основании представляется целесообразным провести анализ теоретических и экспериментальных подходов к оценкам энергии границ зерен в наиболее распространенных металлах (в основном имеющих ГЦК структуру) и рассмотреть диапазоны полученных численных значений.

### **Результаты исследования**

Как отмечается в работах [11,18], структура границ зерен на атомном уровне является весьма сложной, особенно если учесть, что границы зерен могут обладать кристаллическим упорядоченным строением и могут иметь свои собственные дефекты. Поэтому в настоящее время имеется далеко не полное представление об атомной структуре границ зерен [11,17,31] и их влиянии на физико-механические свойства металлов [11]. Границы зерен являются единственным типом дефектов кристаллического материала, об атомной структуре которых еще нет общепринятых представлений [5].

Экспериментальное измерение энергии границ зерен представляет собой достаточно трудную задачу, зачастую решаемую приближенно [10]. Именно этим объясняется немногочисленность имеющихся данных по абсолютным значениям энергии границ зерен. Иногда достаточно сложно применить экспериментальные методы. Например, в методе тройного стыка при определении энергии в тройном стыке границ необходимо знать энергию хотя бы одной из них. Определение энергии по канавкам травления требует тщательного определения угла канавки, что само по себе достаточно сложно [6]. В большинстве случаев измеряются не абсолютные, а относительные значения энергии [10]. В частности, метод канавки травления дает относительную величину энергии границ зерен, выраженную в единицах энергии внешней поверхности, на которую выходит граница при измерениях [25].

Кроме экспериментальных методов определения энергии границ зерен в настоящее время широко применяются теоретические модели, основанные на применении компьютерного моделирования структуры границ зерен. В частности получили развитие теоретические дисклинационно-структурные модели [10], позволяющие рассчитать зависимость энергии границ от угла разориентации зерен.

Важной характеристикой является зависимость энергии границ зерен от угла разориентации зерен [10]. Эта зависимость характеризует зернограничный ансамбль в поликристалле в целом. Несмотря на наличие экспериментальных данных и большое количество теоретических расчетов в этом направлении, исследование вида этой зависимости и ее особенностей все еще находится на начальной стадии. Это также связано с большой трудоемкостью экспериментального определения спектров разориентировок в поликристаллах. Чаще всего число измерений недостаточно для выявления статистических закономерностей, измерения относятся к нескольким десяткам, в лучшем случае сотням границ [11].

Результаты расчетов зависимости энергии границ зерен в различных металлах от угла разориентации сопрягающихся зерен свидетельствуют об ее осциллирующем характере, что отражает атомно-дискретную структуру дефекта. На зависимостях, как правило, наблюдаются отчетливо выраженные понижения энергии, соответствующие специальным разориентировкам зерен [6,10,12,32]. Иногда для выявления общих закономерностей характера влияния угла разориентации зерен на энергию границ зерен речь ведут об усредненных по кристаллографическим направлениям зерен значениях энергии.

Анализ энергии границ зерен, как правило, начинают с жесткой модели, т.е. анализируют сначала жесткую нерелаксированную зернограничную структуру. В жесткой модели при относительном сдвиге зерен атомы находятся в углах соответствующих решеток,

сдвиг осуществляется вдоль плоскости дефекта. Экспериментальные исследования границ зерен позволили сделать вывод, что реальные позиции атомов в границе не соответствуют узлам решеток, построенных поворотом идеальной решетки на какой-либо угол. Граничные атомы стремятся занять такое положение, которое обеспечивало бы им равновесное состояние. Следовательно, чтобы получить близкую к реальности структуру границы, нужно позволить атомам релаксировать из исходных положений жесткой решетки в позиции, которые будут отвечать минимальной свободной энергии, т.е. атомам предоставляется возможность перемещаться под действием межатомных сил [2,15,27]. В этом случае следует рассматривать модели границ зерен, которые наряду с особенностями строения решетки учитывают и физическую природу материала [2].

Как показано в работе [27], наиболее эффективным способом понижения зернограничной энергии является удаление части атомов, который, по сути, соответствует внесению вакансий в область сопряжения зерен, поэтому такая релаксация называется вакансионной. Однако проведение вакансионной релаксации недостаточно для определения устойчивых конфигураций атомов [32], поскольку, как уже было сказано, в реальных кристаллах под действием межатомных сил наблюдается смещение атомов из узлов кристаллической решетки. Вакансионная релаксация относится к геометрическим методам построения структуры границ зерен, и энергия границ зерен в этом случае остается несколько завышенной [12].

Для учета смещений атомов из узлов кристаллической решетки целесообразно проводить атомную релаксацию, которая чаще осуществляется методом молекулярной статики [5,6,10,12,17,20,27,32], чем молекулярной динамики [29]. Такая релаксация приводит к существенному понижению энергии границ зерен по сравнению с энергией, полученной для жесткой модели [5,6,10,12,20]. Например, при исследовании энергии специальных границ зерен в ГЦК металлах Ni, Cu, Al в работе [20] установлено, что при атомной релаксации уменьшение энергии стабильных состояний границ может быть более чем в 2,5 раза по сравнению с энергией в жесткой модели.

Анализ литературных данных по энергиям границ зерен, полученных теоретическими и экспериментальными методами, представлен ниже в таблице. В таблице в основном представлены данные по высокоугловым границам наклона общего типа.

Теоретические и экспериментальные значения энергии границ зерен в металлах

Металлы	Энергия границ зерен, Дж/м <sup>2</sup>	
	Теоретические данные	Экспериментальные данные
Al	0,5...1 [11], 0,58 (жесткая модель, среднее значение) [6],	0,346 [31], 0,6...0,7; 0,6; 0,38 [28],

	0,41 (релаксированная структура, среднее значение) [6], 0,75 (среднее значение) [12], 0,65...0,85 [32]	0,405 (при T=350°C) [26], 0,625 [30]
Cu	0,89 (жесткая модель, среднее значение) [6], 0,65 (релаксированная структура, среднее значение) [6], 0,77...1,21 (границы кручения) [14]	0,53 [31], 0,55 (при T=1030°C) [26], 0,65 (при T=850°C) [7], 0,61 (при T=850°C) [16], 0,646 [28,30], 0,64 (при T=800°-900°C) [24], 0,595 (при T=1000°) [24], 0,86 (при T=800°) [24], 0,49 (при T=945°) [24], 0,646 (среднее значение) [24], 0,86 (при T=900°) [24], 0,613 [9]
Ni	1,23 (жесткая модель, среднее значение) [6], 0,89 (релаксированная структура, среднее значение) [6], 1,64...1,89 (границы кручения) [14]	0,708 [31], 0,84 [28], 0,728 (при T=1300°C) [26], 0,69 [30], 0,69 (при T=1350°C) [16], 0,62 [9]
Ag		0,366 [31], 0,79 [30], 0,46 (при T=750°C) [7], 0,4 (при T=900°) [24], 0,45 (при T=930°) [8], 0,27 [9]
Au	0,58 (жесткая модель, среднее значение) [6], 0,41 (релаксированная структура, среднее значение) [6]	0,451[31], 0,406 (при T=1035°C) [26], 0,364 [9,30], 0,37 (при T=850°C) [7], 0,35 (при T=850°C) [16], 0,36 (при T=850°) [8]
Fe		0,78 [28],

		0,77 (при T=1380°C, $\gamma$ -Fe) [26], 0,52 ( $\gamma$ -Fe) [26], 0,79 (при T=1100°C, $\alpha$ -Fe) [7], 0,85 (при T=1100°C, $\gamma$ -Fe) [7], 0,47 (при T=1500 K, $\delta$ -Fe) [16], 0,78 (при T=1100 K, $\gamma$ -Fe) [16], 0,47 (при T=1470°C, $\alpha$ -Fe) [16], 0,8 (при T=825°C, $\alpha$ -Fe) [16], 0,85 [24], 0,7 ( $\alpha$ -Fe) [9]
--	--	--

Анализ теоретических и экспериментальных данных, представленных в таблице, свидетельствует о значительном их разбросе. Это может быть связано не только с разными температурными условиями определения энергии границ зерен, но и с рядом других факторов, таких как ориентационные отношения между зернами, ориентации границы и т.д.

Для сравнительного анализа соотношений энергий границ различных металлов, что важно при рассмотрении вопросов свариваемости при сварке давлением, представляется целесообразным использовать соотношение [31]:

$$\gamma_b^L(T \approx T_m) = 0,4\gamma_L(T_m),$$

где  $\gamma_b^L(T)$  – свободная энергии границ зерен при температуре  $T$ ,  $\gamma_L(T_m)$  – энергия поверхности расплава при  $T = T_m$  ( $T_m$  – температура плавления).

Сравнение  $\gamma_b^L$  и  $\gamma_b(T \approx T_m)$  показало [31], что представленная формула позволяет достаточно точно оценивать значения  $\gamma_b(T \approx T_m)$  для большинства ГЦК металлов (исключения составляют Pb и Nb).

Таким образом, из представленного материала можно видеть, что значения энергии зерен металлов весьма высоки, что указывает на необходимость ее учета в общем балансе энергии активации соединения металлов.

### **Выводы**

1. Границы зерен должны давать определенный вклад в энергию активации процесса образования соединения при сварке давлением и могут быть рассмотрены в качестве активных элементов дефектной структуры материалов, на основе которых происходит развитие взаимодействия соединения материалов.

2. Для сравнительной оценки энергии границ зерен разных металлов при сварке давлением, что важно при рассмотрении вопросов их свариваемости, эту энергию целесообразно определять в соответствии с энергией поверхности расплава данного металла.

## Список литературы

1. Анализ методик расчета энергии вакансии в металлах применительно к моделированию процессов сварки давлением / Р.А. Латыпов, В.В. Булычев, И.Н. Зыбин и др. // Современные проблемы науки и образования. – 2014. – № 6 (Электронный журнал).
2. Батайкина И.А. Моделирование структурных границ зерен и физических процессов, связанных с ними: автореф. дис. ... канд. физ. мат. наук. – Саранск, 1997. – 18 с.
3. Булычев В.В., Латыпов Р.А. Оценка прочности соединения однородных металлов при электроконтактной приварке // Сварочное производство. – 2012. – № 6. – С. 17-21.
4. Булычев В.В., Латыпов Р.А. Формирование очагов схватывания однородных металлов при электроконтактной приварке // Сварочное производство. – 2012. – № 5. – С. 30-35.
5. Векман А.В. Атомная структура и энергия общих границ зерен наклона типа [100] в кубических решетках: дис... канд. физ. мат. наук. – Барнаул, 2000. – 182 с.
6. Векман А.В. Энергия границ зерен наклона в металлах и сплавах с ГЦК решеткой // Известия Томского политехнического университета. – 2008. – Т. 313, № 3. – С. 96-100.
7. Гельман А.С. Основы сварки давлением. – М.: Машиностроение, 1970. – 312 с.
8. Глейтер Г., Чалмерс Б. Большеугловые границы зерен / пер. с англ. – М.: Мир, 1975. – 376 с.
9. Грабский М.В. Структура границ зерен в металлах / пер. с польск. – М.: Metallurgia, 1972. – 160 с.
10. Демьянов Б.Ф. Атомная структура границ зерен наклона в металлах и упорядоченных сплавах на основе кубической решетки: автореф. дис. ... д-ра физ.-мат. наук. – Барнаул, 2001. – 39 с.
11. Демьянов Б.Ф., Векман А.В., Драгунов А.С. Атомная структура и свойства границ зерен в металлах // Наука – Алтайскому краю: сб. науч. статей. – Барнаул: Алтайский дом печати, 2010. – Вып. 4. – С. 208-215.
12. Драгунов А.С. Влияние атомной структуры на механизмы самодиффузии по границам зерен наклона в алюминии: автореф. дис. ... канд. физ.-мат. наук. – Барнаул, 2012. – 24 с.
13. Каракозов Э.С. Сварка металлов давлением. – М.: Машиностроение, 1986. – 280 с.
14. Карькина Л.Е., Яковенкова Л.И. Моделирование атомной структуры дефектов в кристаллах. – Екатеринбург: УрО РАН, 2011. – 463 с.
15. Каур И., Густ В. Диффузия по границам зерен и фаз / пер. с англ. – М.: Машиностроение, 1991. – 448 с.
16. Келли А., Гровс Г. Кристаллография и дефекты в кристаллах / пер. с англ. – М.: Мир, 1974. – 504 с.

17. Кожанов А.В., Векман А.В., Демьянов Б.Ф. Моделирование границ зерен общего типа в золоте // Актуальные проблемы физики твердого тела: материалы междунар. науч. конф. – Минск. – 2005. – Т. 2. – С. 199-201.
18. Конюшков Г.В., Мусин Р.А. Специальные методы сварки давлением. – Саратов: Ай Пи Эр Медиа, 2009. – 632 с.
19. Красулин Ю.Л., Назаров Г.В. Микросварка давлением. – М.: Металлургия, 1976. – 160 с.
20. Кустов С.Л. Структурно-энергетические характеристики специальных зерен наклона в металлах и упорядоченных сплавах на основе ГЦК-решетки: автореф. дис. ... канд. физ.-мат. наук. – Барнаул, 1999. – 21 с.
21. Лутфуллин Р.Я. Сверхпластичность и твердофазное соединение наноструктурированных материалов. Ч. I. Влияние размера зерна на твердофазную свариваемость сверхпластичных сплавов // Письма о материалах. – 2011. – Т.1. – С. 59-64.
22. Люшинский А.В. Диффузионная сварка разнородных материалов. – М.: Издат. центр “Академия”, 2006. – 208 с.
23. Мазур А.И., Алехин А.И., Шоршоров М.Х. Процессы сварки и пайки в производстве полупроводниковых приборов. – М.: Радио и связь, 1981. – 224 с.
24. Мак Лин Д. Границы зерен в металлах / пер. с англ. – М.: Изд-во литературы по черной и цветной металлургии, 1960. – 323 с.
25. Место границ наклона в полном энергетическом спектре границ зерен в поликристалле / Б.Б. Страумал, П.В. Проценко, А.Б. Страумал и др. // Письма в ЖЭТФ. – 2012. – Т. 96, вып.9. – С. 651-656.
26. Миссол В. Поверхностная энергия раздела фаз в металлах / пер. с польск. – М.: Металлургия, 1978. – 176 с.
27. Моделирование зерен нанометрового размера в металлической матрице / А.В. Векман, Н.В. Адарич, А.С. Драгунов и др. // Вестник Югорского государственного университета. – 2011. – Вып. 2 (21). – С. 3–7.
28. Орлов А.Н., Перевезенцев В.Н., Рыбин В.В. Границы зерен в металлах. – М.: Металлургия, 1980. – 156 с.
29. Ракитин Р.Ю. Исследование механизмов диффузии по границам зерен наклона в ГЦК металлах: автореф. дис. ... канд. физ.-мат. наук. – Барнаул, 2006. – 22 с.
30. Хирт Дж., Лоте И. Теория дислокаций / пер. с англ. – М.: Атомиздат, 1972. – 600 с.
31. Чувильдеев В.Н. Неравновесные границы зерен в металлах. Теория и приложения. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2004. – 304 с.

32. Энергетический спектр границ зерен наклона в алюминии / А.В. Векман, А.С. Драгунов, Н.В. Адарич и др. // Ползуновский альманах. – 2008. – № 3. – С. 49-52.

**Рецензенты:**

Сидоров В.Н., д.т.н., профессор, заведующий кафедрой, МГТУ им. Н.Э. Баумана, Калужский филиал, г. Калуга;

Антонюк Ф.И., д.т.н., профессор, МГТУ им. Н.Э. Баумана, Калужский филиал, г. Калуга.