

УДК 539.21

**МЕЖЗЕРЕННОЕ СКОЛЬЖЕНИЕ ПО ФАСЕТИРОВАННЫМ ГРАНИЦАМ  
В МЕТАЛЛАХ****Кульков В.Г.***Филиал национального исследовательского университета «МЭИ», Волжский,  
e-mail: vikulkov@yandex.ru*

Проскальзывание по фасетированным границам зерен имеет неконсервативный характер. Это обусловлено возникновением на фасетках нормальных компонентов напряжений различного знака. В таких условиях эти участки границ зерен становятся источниками и стоками вакансий. Их потоки между сопрягающимися сегментами границы определяют скорость процесса. Из решения неоднородного диффузионного уравнения для вакансий находится их концентрация, а также скорость межзеренного проскальзывания. В стационарном режиме скорость пропорциональна величине сдвигового напряжения, действующего вдоль границы. Модель может быть использована при рассмотрении одномерно и двумерно фасетированных границ. Учитывается процесс подстройки напряжений в течение времени релаксации. Изменение скорости согласуется с принципом Ле Шателье – Брауна. Численные расчеты показывают изменение распределения концентрации вакансий на сегменте в зависимости от времени.

**Ключевые слова:** зернограницное проскальзывание, уравнение диффузии, фасетки, ступеньки на границах**INTERGRANULAR SLIDING ON FACETING BOUNDARIES  
IN METALS****Kulkov V.G.***Branch of Moscow power engineering institute, Volzhskiy,  
e-mail: vikulkov@yandex.ru*

Sliding on faceting grain boundaries has a non-conservative character. This is due to the appearance on facets of the normal stress components with different signs. These grain boundary areas are becoming sources and sinks of vacancies. Their flows between mating segments boundaries define the speed of the process. From the solution of diffusion equation for the vacancies is determined their concentration, and grain boundary rate sliding. The speed of sliding is proportional to the shear stress acting along grain boundary. The model can be used for considering the one-dimensional and two-dimensional faceted borders. Considered stress adjustment process during relaxation time. Speed change is consistent with the principle of Le Chatelier – Brown. Numerical calculations show the change in the vacancies concentration distribution into the segment, depending on the time.

**Keywords:** grain boundary sliding, diffusion equation, facets, steps on boundaries

Реальные межзеренные границы достаточно редко бывают плоскими в микромасштабе. Они обычно содержат различные отклонения от плоской конфигурации, включая в себя сильно искривлённые участки, изломы, фрагменты с другой ориентацией, имеют развитый неровный рельеф. Многообразие конфигураций такого рода границ обозначается [1] как ступенчатые, искривлённые, фрагментированные, изрезанные, с микрогранями, зигзагообразные, зубчатые, гофрированные, фрактальные, волнообразные, фасетированные. Истинное строение границ может иметь такого рода нерегулярности в одном или в двух измерениях границы. Среди различных физических механизмов образования таких границ можно выделить две группы. Одна включает механизмы, основанные на процессах, проходящих при стремлении системы к равновесию, к другой относятся те, которые протекают в существенно неравновесных условиях. Движущей силой первой группы является уменьшение свободной энергии системы.

Образование фасетированной структуры является зернограницным фазовым переходом первого рода. Его механизмы для различного типа границ были достаточно подробно рассмотрены в работах [1, 2].

Межзеренное скольжение представляет собой взаимное движение зерен вдоль общей границы раздела. Такое движение является консервативным процессом только если межзеренная граница является плоской. В остальных случаях, когда граница искривлена, содержит уступы или фасетирована, движение консервативным не является. Это означает, что такое движение зерен обусловлено переносом вещества диффузионным путем либо между различными участками самой границы, либо между границей и объемными источниками или стоками.

Настоящая работа посвящена описанию механизмов проскальзывания по границам, имеющим различно ориентированные фасетки или ступеньки под действием приложенного извне напряжения.

**Модели проскальзывания вдоль  
одномерно фасетированных границ**

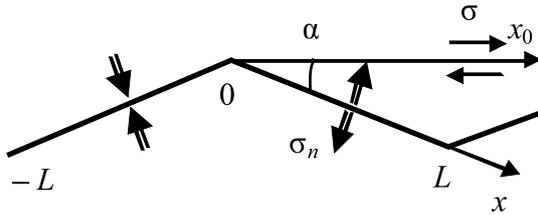


Рис. 1. Одномерно фасетированная граница

Рассмотрим симметричную одномерно фасетированную границу [3], изображенную на рис. 1. Она представляет собой цилиндрическую поверхность с направляющей ломаной линией, содержащей одинаковые звенья длины  $L$ , и образующей, нормальной к плоскости рисунка. Пусть в системе действует внешнее сдвиговое напряжение  $\sigma$  вдоль усредненной плоскости границы, обозначенной направлением оси  $x_0$ . Граничная поверхность гофрирована с углами наклона плоских сегментов  $\pm\alpha$  к оси  $x_0$ . На каждом таком сегменте имеется нормальная компонента напряжения  $\sigma_n = \pm\sigma \sin 2\alpha$ , обозначенная на рис. 1 двойными стрелками. Совместим с отрезком ломаной ось  $x$  так, чтобы его концы соответствовали координатам  $x = 0$  и  $x = L$ . Нормальные напряжения чередующихся знаков на сегментах приводят к аналогичному изменению химических потенциалов вакансий. В системе нарушается равновесие, что вызывает их диффузионные потоки между соседними сегментами. Избыточная в сравнении с равновесной концентрация вакансий  $C_b$  в границе в отсутствие потоков

$$C_b = C_{ob} \exp\left(\frac{\sigma_n \Omega}{kT}\right).$$

При условии малости напряжений

$$\frac{\sigma_n \Omega}{kT} \ll 1$$

она равна

$$C_b = \frac{C_{ob} \sigma_n \Omega}{kT}. \quad (1)$$

Здесь  $C_{ob}$  – равновесная концентрация вакансий в границе,  $\Omega$  – атомный объём. На сегментах происходит генерация и поглощение вакансий. Возникающие диффузионные потоки приводят к массопереносу, и следовательно, к взаимному движению зерен. Вследствие очевидной симметрии достаточно рассмотреть только один сегмент, изображенный на рис. 1. Симметрия задачи

приводит к нулевым граничным условиям для избыточной концентрации на границах сегмента.

Решение стационарного неоднородного уравнения диффузии

$$D_b \frac{\partial^2 C_b(x,t)}{\partial x^2} + A\sigma_n = 0 \quad (2)$$

имеет вид [4]:

$$C_b(x) = \frac{A\sigma_n}{2D_b} x(L-x), \quad A = \frac{12D_b C_{ob} \Omega}{L^2 kT}. \quad (3)$$

Здесь коэффициент  $A$  пропорционален мощности источника вакансий,  $D_b$  – их зернограничный коэффициент диффузии. Выражение (3) получено с учетом т.н. эффекта подстройки напряжений. Он заключается в том, что установившееся распределение вакансий на сегменте пропорционально распределению на нем нормальных напряжений. При этом соблюдается равенство полной силовой нагрузки на сегменте со стороны внешнего напряжения и напряжения, распределенного по сегменту

$$\frac{1}{L} \int_0^L \sigma_n(x) dx = \frac{1}{L} \int_0^L \frac{kT}{C_{ob} \Omega} C_b(x) dx = \sigma_n.$$

Баланс генерации и потоков вакансий приводит к результирующему выражению для скорости межзеренного проскальзывания

$$v_0 = \frac{24D_b C_{ob} \Omega^2 \delta \cos \alpha}{kTL^2} \sigma. \quad (4)$$

Учет диффузионных потоков из границы к объемным стокам в [5] зерне приводит к выражению

$$v = \frac{2C_{ob} D_v \Omega^2 \cos \alpha}{l_v kT} \left( 1 - \frac{2 \operatorname{th} \frac{\Lambda L}{2}}{\Lambda} \right)^{-1} \sigma, \quad \Lambda = \sqrt{\frac{D_v}{D_b \delta l_v}}, \quad (5)$$

где  $D_v$  – коэффициент объемной диффузии вакансий;  $l_v$  – средняя длина пробега вакансий из границы в объём;  $\delta$  – диффузионная толщина границы.

Двумерно фасетированная межкристаллитная граница представляется рельефной поверхностью с пирамидальными выступами по обе стороны от нее. Проскальзывание по границе с симметричным строением, когда в основании пирамид лежат равнобедренные треугольники, а угол наклона фасеток к средней плоскости границы таков, что

они являются квадратами, осуществляется путем диффузионного перераспределения вакансий между областями границы с растягивающими и сжимающими нормальными напряжениями.

Задачу можно считать [4] квазиодномерной. Решение уравнения диффузии приводит к результату:

$$v = \frac{32\sqrt{3}\vartheta C_{0b}\Omega^2 D_b \delta}{b^2 kT} \sigma, \quad (6)$$

где  $b$  – сторона квадратной фasetки, а геометрический коэффициент  $\vartheta \sim 1$ .

сий из области границы в объём. из соотношения Эйнштейна имеем

$$S = \sqrt{2D_b \tau_1} = \sqrt{\frac{2D_b}{v_0} \exp\left(\frac{\Delta W_1}{2kT}\right)}.$$

В случае  $d \ll 2S$  ступеньку с прилегающими к ней с двух сторон участками границы протяженностью  $S$  заменим плоским источником ширины  $2S$  с концентрацией вакансий в нём  $C_b$ . Такой источник имеет пластинчатую конфигурацию шириной  $2S$ . Дальнейшее рассмотрение определяется со-

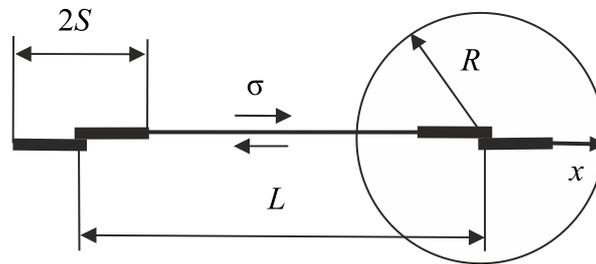


Рис. 2. Ступенчатая граница

Представляет интерес рассмотрение границы, содержащей ступеньки малого размера, соединяющие между собой протяженные плоские сегменты (рис. 2). Такая конфигурация является предельным случаем строения фasetированной границы, когда плоскость исходной нефasetированной структуры располагалась под малым углом к плотноупакованным плоскостям решетки совпадающих узлов, либо была ей параллельна. Эффективное напряжение сжатия или растяжения на ступеньке равно

$$p = \frac{\sigma L}{d},$$

где  $d$  – ее высота. Вакансии поддерживают квазиравновесие с их источником (ступенькой) на расстоянии  $S$ . Величину  $S$  можно определить как среднеквадратичное расстояние, доступное для вакансии за время  $\tau$ , пока она не испарится в объём.

$$\tau_1 = \tau_0 \exp\left(\frac{\Delta W_1}{kT}\right),$$

где  $\tau_0 = 1/v_0$ ,  $v_0$  – характерная частота колебаний атомов (порядка дебаевской);  $\Delta W_1$  – энергия активации движения вакан-

отношениями величин расстояния  $L$  между ступеньками в границе, расстояния  $R$  между ступенькой и вакансионными стоками в объеме зерна, а также ширины источника  $2S$  (рис. 2). В связи с этим рассмотрим различные возможные ситуации [6].

1  $L \gg R > S$ . Задача решается в координатах эллиптического цилиндра с фокусами, расположенными на краях источника. Скорость определяется выражением

$$v = \frac{2\pi C_{0b} L \Omega^2 D_v}{d^2 k T \operatorname{arsh} R/S} \sigma. \quad (7)$$

При выполнении соотношения  $R \gg S$  (7) принимает вид

$$v = \frac{2\pi C_{0b} L \Omega^2 D_v}{d^2 k T \ln 2R/S} \sigma.$$

2  $S < L < R$ . Имеем дело с диффузией в объеме зерна между положительным и отрицательным источниками вакансий. Такую конфигурацию по аналогии с дислокациями можно назвать диполем. Скорость определяется выражением:

$$v = \frac{2\pi C_{ob} L \Omega^2 D_v}{d^2 kT \operatorname{arch} \frac{L}{S}} \sigma. \quad (8)$$

3.  $L < 2S$ . В этом случае вакансии движутся от источника к стоку вдоль границы, не успевая удалиться в объём. Уравнение Лапласа сводится к одномерному

$$\frac{d^2 C_b(x)}{dx^2} = 0$$

с граничными условиями:

$$C_b(0) = \frac{C_{ob} p \Omega}{kT}, \quad C_b(L) = -\frac{C_{ob} p \Omega}{kT}.$$

Скорость, выраженная через потоки в обе стороны от ступеньки, даётся выражением:

$$v = \frac{4\delta \Omega^2 D_b C_{ob}}{kT d^2} \sigma. \quad (9)$$

В предложенной модели считается, что скорость проскальзывания определяется процессами самодиффузии вблизи ступенек. Если скорость процессов атомных перестроек при скольжении по плоским участкам границы соизмерима со скоростью релаксации вблизи ступенек, то нужно также учитывать ее вклад. Из баланса сил заключаем, что величина внешнего напряжения  $\sigma$  равна сумме величин напряжения

вязкого сопротивления проскальзыванию  $\sigma'$  и напряжения от ступенек

$$\sigma = \sigma_p + \sum_i p_i d_i n_i,$$

где  $n_i$  – количество ступенек величины  $d_i$  на единицу длины границы вдоль  $x$ . Первое слагаемое определяется выражением  $\sigma_p = \eta' v^m$ , где  $\eta'$  – эффективная вязкость плоских участков границы, а  $m$  – скоростная чувствительность напряжения. Напряжение на ступеньке линейно связано со скоростью проскальзывания:  $P_i = \eta_i v$  с вязкостью  $\eta_i$ . Тогда из баланса сил имеем

$$\sigma = \eta' v^m + v \sum_i d_i \eta_i n_i.$$

Решив это уравнение относительно  $v$ , можно найти скорость взаимного смещения зёрен. В зависимости от соотношения величин  $\eta'$  и  $\eta_i$  скорость смещения зёрен определяется либо процессами на плоских участках, либо диффузионными процессами на ступеньках, либо вкладом обоих.

Превышение уровня растягивающих напряжений вблизи ступенек одного знака порогового значения может приводить к релаксации системы путем образования протяженной вдоль ступеньки цилиндрической поры [7]. Величина приложенного к границе порогового сдвигового напряжения

$$\sigma_c = \left( \frac{4D_b C_{ob} \Omega^2 \delta \eta}{d^2 kT} + 1 \right) \sqrt{\frac{2(2Ed(\pi\gamma - \gamma_0) + \pi\gamma^2)}{\pi L^2}},$$

где  $\gamma_0$  и  $\gamma$  – удельные поверхностные энергии межзеренной границы и свободной поверхности поры;  $E$  – модуль Юнга;  $d$  – высота ступенек и диаметр поры;  $L$  – расстояние между ступеньками и чередующимися с ними порами.

Скорость проскальзывания определяется суммарным потоком вакансий к ступеньке из объема и вдоль границы:

$$v = \frac{2C_{ob} \Omega^2}{dkT} \left( p \left( \frac{D_b \delta}{L} + \frac{D_v L}{R} \right) + \frac{2\gamma}{d} \left( \frac{D_b \delta}{L} - \frac{D_v L}{R} \right) \right). \quad (10)$$

Сравнительная оценка слагаемых в (10) позволяет записать выражение для скорости проскальзывания в виде

$$v = \left( \frac{d^2 kT}{4C_{ob} \Omega^2} \left( D_b \delta + \frac{D_v L^2}{R} \right)^{-1} + \eta \right)^{-1} \sigma.$$

Легко понять, что в таком процессе объем поры увеличивается [7] со скоростью

$$\frac{dV}{dt} = \frac{4C_{ob} D_v \Omega^2 L^2 (\sigma - \eta v)}{kTRd}. \quad (11)$$

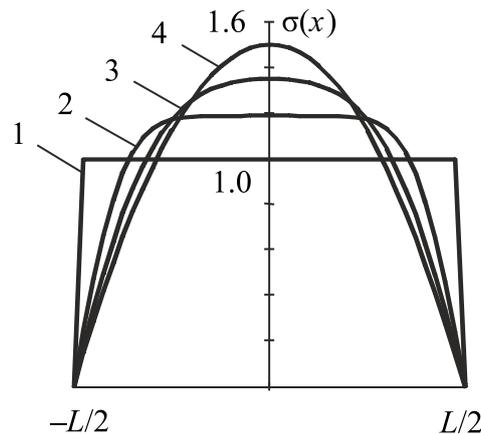


Рис. 3. Распределение вакансий на сегменте

Рассмотренные до сих пор процессы являлись стационарными, когда режим проскальзывания считался установившимся и в дальнейшем от времени не зависел. Интересно проследить за изменением основных параметров проскальзывания в зависимости от времени. С этой целью необходимо решить нестационарное уравнение диффузии вакансий с их источниками на фасетированной границе

$$\frac{\partial C_b(x,t)}{\partial t} = D_b \frac{\partial^2 C_b(x,t)}{\partial x^2} + A\sigma_n.$$

Здесь обозначения такие же, как и в (2). Решение релаксационного уравнения для зернограничной концентрации вакансий для одного сегмента имеет вид

$$C_b(x,t) = \frac{A\sigma_n}{2D_b} x(L-x) \left( 1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau_b}\right) \right) + \frac{C_{0b}\sigma_n\Omega}{kT} \exp\left(-\frac{t}{\tau_b}\right), \quad (12)$$

где  $\tau_b = \frac{L^2}{\pi^2 D_b}$  – время релаксации. Числен-

ное решение нестационарного уравнения диффузии было получено в [8]. На рис. 3 представлен результат этого решения в виде графиков координатной зависимости концентрации вакансий на сегменте для различных моментов времени. Начальное распределение в момент приложения нагрузки обозначено цифрой 1, промежуточные – 2, 3 стационарное – 4. Как видно из рисунка стационарное распределение имеет параболическую форму, что согласуется с (12).

Нормальные компоненты напряжений на смежных фасетках имеют чередующийся знак. Химический потенциал примесных атомов на границе имеет различную величину, что приводит к перераспределению примеси между фасетками [9, 10]. В стационарном режиме проскальзывания наличие таких атомов приводит к изменению эффективной вязкости границ в консервативном процессе скольжения. В динамическом режиме, когда граница подвержена действию периодически изменяющегося сдвигового напряжения, процессы перераспределения примесных атомов могут привести к появлению пика внутреннего трения [11, 12]. Такой эффект проявляется в металлах с ультрамелким или наномасштабным размером зерен.

### Заключение

Проскальзывание вдоль фасетированных границ зерен неизбежно связано с возникновением нормальных напряжений и диффузионных потоков вакансий между фасетками. Полученные выражения для разных конфигураций границ показывают, что величина скорости проскальзывания является линейной функцией приложенных напряжений. Так происходит, пока величина напряжений достаточно мала  $\frac{\sigma_n \Omega}{kT} \ll 1$ .

Рассмотрение больших напряжений требует использования экспоненциальной зависимости концентрации вакансий от напряжений, как это указывалось в тексте перед формулой (1). При таких напряжениях эффективность границ как источников вакансий ограничена. В связи с этим возникают

нелинейные эффекты, и скорость перестает линейно зависеть от напряжений.

Нестационарный режим проскальзывания сразу после приложения постоянного напряжения является хорошей иллюстрацией принципа Ле Шателье – Брауна. Первоначальное ступенчатое напряжение на фасетках вызывает большие потоки вакансий, которые приводят к перераспределению как вакансий, так и напряжений на них. Такой эффект подстройки напряжений уменьшает отклик системы на внешнее воздействие путем снижения величины скорости проскальзывания.

#### Список литературы

1. Кульков В.Г. Релаксационные процессы на границах зерен в металлах: монография. – Волжский: Филиал МЭИ в г. Волжском, 2015. – 162 с.
2. Кульков В.Г. Кинетика фазового перехода фасетирования межзеренных границ // Международный журнал прикладных и фундаментальных исследований. – 2016. – № 12, Ч. 2. – С. 233–236.
3. Кульков В.Г. Кинетика фасетирования несоизмерной межкристаллитной границы наклона // Неорганические материалы. – 2005. – Т. 41, № 7. – С. 892–896.
4. Кульков В.Г. Межкристаллитное проскальзывание вдоль фасетированных границ зерен // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 2005. – № 11. – С. 108–112.
5. Кульков В.Г. Взаимное движение зёрен вдоль границ с симметричными изломами // Конденсированные среды и межфазные границы. – 2001. – Т. 3, № 4. – С. 373–374.
6. Кульков В.Г. Межзеренное скольжение по границе с уступами // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 2005. – № 8. – С. 84–87.
7. Кульков В.Г., Васильева Ю.В. Образование микронесплошностей в процессе скольжения по ступенчатой границе зерен // Тяжелое машиностроение. – 2009. – № 6. – С. 32–35.
8. Кульков В.Г., Жихарева М.Г. Проскальзывание по фасетированным границам зерен с учетом подстройки напряжения // Деформация и разрушение материалов. – 2005. – № 1. – С. 46–48.
9. Даринский Б.М., Кульков В.Г. Межкристаллитное скольжение вдоль границ, содержащих примеси // Письма в Журнал технической физики. – 1992. – Т. 18, № 2. – С. 65–68.
10. Даринский Б.М., Кульков В.Г., Шаршаков И.М. Влияние межзеренного проскальзывания на концентрацию примеси в границе // Известия АН. Сер. физическая. – 1993. – Т. 57, № 1. – С. 129–130.
11. Кульков В.Г. Внутреннее трение, обусловленное зернограничным перераспределением примеси в нанокристаллическом материале // Конденсированные среды и межфазные границы. – 2005. – Т. 7, № 4. – С. 406–408.
12. Кульков В.Г. Внутреннее трение на фасетированных границах зерен с примесями // Известия ВУЗов. Физика. – 2005. – Т. 48, № 4. – С. 93–94.