Министерство науки и высшего образования
Российской Федерации
Федеральное государственное
бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Тверской государственный университет»

**ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ
ИЗУЧЕНИЯ КЛАСТЕРОВ,
НАНОСТРУКТУР
И НАНОМАТЕРИАЛОВ**

МЕЖВУЗОВСКИЙ СБОРНИК НАУЧНЫХ ТРУДОВ

выпуск 10

ТВЕРЬ 2018

УДК 620.22:544+621.3.049.77+539.216.2:537.311.322: 530.145

ББК Ж36:Г5+В379

Ф50

Рецензирование статей осуществляется на основании Положения о рецензировании статей и материалов для опубликования в Межвузовском сборнике научных трудов «Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов».

Официальный сайт издания в сети Интернет:

www.physchemaspects.ru

Ф50 Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов [Текст]: межвуз. сб. науч. тр. / под общей редакцией В.М. Самсонова, Н.Ю. Сдобнякова. – Тверь: Твер. гос. ун-т, 2018. – Вып. 10. – 708 с.

ISBN 978-5-7609-1395-1

Зарегистрирован Федеральной службой по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций, свидетельство о регистрации СМИ ПИ № ФС 7747789 от 13.12.2011.

Сборник составлен из оригинальных статей теоретического и экспериментального характера, отражающих результаты исследований в области изучения физико-химических процессов с участием кластеров, наноструктур и наноматериалов физики, включая межфазные явления и нанотермодинамику. Сборник предназначен для научных и инженерно-технических работников, преподавателей ВУЗов, студентов и аспирантов. Издание подготовлено на кафедре общей физики Тверского государственного университета.

УДК 620.22:544+621.3.049.77+539.216.2:537.311.322: 530.145

ББК Ж36:Г5+В379

ISBN 978-5-7609-1395-1

ISSN 2226-4442

© Коллектив авторов, 2018

© Тверской государственной
университет, 2018

УДК 539.214

МЕЖЗЕРЕННОЕ ПРОСКАЛЬЗЫВАНИЕ ПО ФАСЕТИРОВАННЫМ ГРАНИЦАМ С БИМОДАЛЬНЫМ РАСПРЕДЕЛЕНИЕМ РАЗМЕРОВ ФАСЕТОК

В.Г. Кульков, А.А. Сыщиков

филиал ФГБОУ ВО «Национальный исследовательский университет «МЭИ»

в г. Волжском

404110, Волгоградская область, Волжский, пр. Ленина, 69

vikulkov@yandex.ru

DOI: 10.26456/pcascnn/2018.10.401

Аннотация: Рассматривается скорость взаимного смещения зерен вдоль фасетированной границы с двумя характерными размерами фасеток под действием приложенного сдвигового напряжения. На основе решения стационарного уравнения диффузии вакансий на границе зерен находится распределение их концентрации и нормальных напряжений вдоль фасеток. Наличие фасеток меньшего размера приводит к увеличению скорости межзеренного проскальзывания.

Ключевые слова. Фасетированные границы зерен, межзеренное проскальзывание, вакансии, диффузия.

Основным механизмом сверхпластической деформации поликристаллических металлов является межзеренное проскальзывание [1, 2]. При этом сопрягающиеся зерна взаимно смещаются вдоль границы под действием постоянного напряжения. Принято считать, что материалы, способные к сверхпластической деформации, должны обладать однородной мелкозернистой структурой. Размеры зерен в таких материалах могут иметь масштабы от десятков нанометров до единиц микрон. В ряде работ показано, что бимодальное распределение зерен по размерам приводит к тому, что удастся увеличить как прочность, так и показатели пластичности материала [3-6]. Определенная часть зерен в этих структурах являются крупными, окруженными зернами наномасштабного размера. Механизм увеличения пластичности [5, 7] связывают с генерацией дислокаций в более крупных зернах, последующим движением их к границам зерен малого размера. Эти границы захватывают их и переходят в неравновесное состояние с повышенным свободным объемом. Проскальзывание по таким границам происходит с большей скоростью [8]. Кроме того, наличие бимодального распределения размеров зерен приводит к неравномерному распределению локальных напряжений [9], что ведет к увеличению скорости скольжения в области мелких зерен. Одним из перспективных методов получения подобных структур является кратковременный отжиг нанокристаллического образца непосредственно после равноканального углового прессования [10]. При этом часть зерен рекристаллизуются и становятся более крупными.

Границы зерен в поликристаллических металлах довольно редко бывают плоскими. Чаще всего они имеют извилистую, ступенчатую или фасетированную конфигурацию [11-12]. Каждая из фасеток является фрагментом границы специального типа [13], либо относится к границам произвольного типа, которые характеризуются образованием несоизмеримых атомных структур [14]. Проскальзывание по таким границам имеет диффузионный характер. В работах [15-17] рассматривалось взаимное смещение зерен вдоль границ, имеющих одинаковый размер фасеток. Реальной ситуации соответствует наличие зернограницных фасеток различных величин. В предлагаемой работе рассматривается смещение зерен вдоль границ с двумя характерными их размерами. Такая структура в первом приближении моделирует границу с бимодальным распределением размеров фасеток. К такой конфигурации приводит фасетирование границы, располагающейся под небольшим углом к низкоэнергетической ориентации в плотноупакованной плоскости решетки совпадающих узлов [18-20]. К рассматриваемому далее типу границ приводит стремление системы к минимуму энергии путем фасетирования изначально извилистых, волнистых, полученных при деформировании образцов, границ [21].

Пусть граница имеет вид цилиндрической поверхности, направляющей которой является ломаная с чередующимися звеньями разной длины l_1 и $2l_2$, наклоненными под углами $\pm\alpha = \pi/4$ к средней плоскости залегания границы. Фрагмент ее сечения плоскостью, нормальной к образующей, изображено на рис. 1.

Рис. 1. Фрагмент сечения границы.

К границе приложено напряжение простого сдвига σ . На наклонных фасетках возникают нормальные компоненты, нарушающие равновесность химического потенциала вакансий, что приводит к появлению диффузионных потоков между фасетками [22]. Уравнения диффузии для сегментов OA и AB соответственно имеют вид [16]:

$$\frac{d^2 C_1(x)}{dx^2} + \frac{v \sin \alpha}{D \delta \Omega} = 0, \quad 0 < x < l_1, \quad (1)$$

$$\frac{d^2 C_2(x)}{dx^2} - \frac{v \sin \alpha}{D \delta \Omega} = 0, \quad l_1 < x < l_2, \quad (2)$$

Здесь x – координата вдоль направляющей, отсчитываемая от точки O , $C_1(x)$ и $C_2(x)$ – концентрации вакансий на сегментах, v – скорость взаимного смещения зерен, D – коэффициент зернограницной диффузии вакансий, δ – диффузионная ширина границы, Ω – атомный объем. Граничные условия учитывают симметрию задачи:

$$C_1(0) = 0, \quad C_1(l_1) = C_2(l_1), \quad \frac{dC_1(l_1)}{dx} = \frac{dC_2(l_1)}{dx}, \quad \frac{dC_2(l_1 + l_2)}{dx} = 0. \quad (3)$$

Решением (1) и (2) с условиями (3) являются функции

$$C_1(x) = \frac{v \sin \alpha}{2D \delta \Omega} (-x^2 + 2(l_1 - l_2)x), \quad C_2(x) = \frac{v \sin \alpha}{2D \delta \Omega} (x^2 - 2(l_1 + l_2)x + 2l_1^2). \quad (4)$$

В случае не слишком больших приложенных сил нормальное напряжение на сегментах связано линейно с концентрацией вакансий [15].

$$\sigma_{ni}(x) = \frac{C_i(x)kT}{C_0\Omega}, \quad (5)$$

где C_0 – равновесная концентрация вакансий в ненапряженной границе, k – фактор Больцмана, T – температура. Функции $\sigma_{ni}(x)$ учитывают так называемый эффект подстройки напряжений [16], связанный с перераспределением вакансий и соответствующим изменением локальных напряжений.

В стационарном режиме движения приложенная к границе сила воспринимается ею так, что она определяется суммой интегралов от локальных напряжений по размерам сегментов с учетом знака. Можно заметить, что при указанных наклонах фасеток OA и AB они воспринимают приложенное напряжение с разным знаком

$$\int_0^{l_1} \sigma_1(x) dx - \int_{l_1}^{l_1+l_2} \sigma_2(x) dx = l_1 \sigma \sin 2\alpha. \quad (6)$$

Воспользовавшись (4)-(6), получаем:

$$v = \frac{6DC_0\Omega^2\delta(1+3\lambda)\cos\alpha}{kTl_1^2} \sigma, \quad (7)$$

где $\lambda = l_2/l_1$. В случае $l_2 \ll l_1$ можно считать $\lambda \ll 1$ и в выражении для скорости оставить величины первого порядка малости по λ .

В выражении (7) дробь, стоящая перед напряжением σ , имеет смысл вязкости границы. В случае отсутствия фасеток типа AB величина $\lambda = l_1/l_2 = 0$. Тогда (7) принимает вид

$$v = \frac{6DC_0\Omega^2\delta\cos\alpha}{kTl_1^2} \sigma, \quad (8)$$

что совпадает с результатами работ [16] и [17] для границы с одинаковыми размерами фасеток. Если же фасетки типа AB имеются, то скорость, даваемая выражением (7) по величине больше, чем это следует из выражения (8). Последнее получено в предположении отсутствия внутри фасеток длины $2l_1$ других симметрично наклоненных фасеток меньшего размера $2l_2$, играющих роль дополнительных стоков вакансий с более коротким диффузионным путем.

Анализ выражений (4) показывает, что при $\lambda < 0,44$ на малых фасетках размера $2l_2$ сжимающих напряжений не возникает, в то время как их геометрическая ориентация этого требует. Причина этого заключается в том, что соседство с ними фасеток большого размера, являющихся источниками избыточных вакансий, приводит к значительному их потоку в малые фасетки. Поэтому концентрация избыточных вакансий в них остается, как и в больших, положительной, а это соответствует нормальной компоненте растяжения. Иначе говоря, при таком соотношении размеров фасеток концентрация вакансий на малых сегментах становится инверсной по отношению к геометрически необходимой. Такие фасетки не препятствуют взаимному движению зерен, а способствуют ему. В реальных ситуациях следует учесть распределение по размерам обоих типов фасеток. Механизм смещения зерен остается тем же.

В заключение следует отметить общность влияния бимодальных структур на скорость сверхпластической деформации. Это относится как к кооперативному межзеренному скольжению в поликристаллических агрегатах, так и к проскальзыванию по фасетитованным границам зерен.

Библиографический список:

1. **Мулюков, Р.Р.** Сверхпластичность ультрамелкозернистых сплавов: Эксперимент, теория, технологии / Р.Р. Мулюков, Р.М. Имаев, А.А. Назаров и др. – М.: Наука, 2014. – 284 с.
2. **Жиляев, А.П.** Сверхпластичность и границы зерен в ультрамелкозернистых материалах / А.П. Жиляев, А.И. Пшеничнюк. – М.: Физматлит, 2008. – 320 с.
3. **Guo, X.** Micromechanical simulation of fracture behavior of bimodal nanostructured metals / X. Guo, R. Ji, G.J. Weng, L.L. Zhu, J. Lu // Materials Science and Engineering: A. – 2014. – V. 618. – P. 479-489.
4. **Li, Y.S.** Effect of thermal annealing on mechanical properties of a nanostructured copper prepared by means of dynamic plastic deformation / Y.S. Li, Y. Zhang, N.R. Tao, K. Lu // Scripta Materialia. – 2008. – V. 59. – I. 4. – P. 475-478.
5. **Карнавская, Т.Г.** Особенности механического поведения алюминиевого сплава 01570С с бимодальной структурой в условиях динамического нагружения / Т.Г. Карнавская, Е.В. Автократова, А.М. Брагов и др. // Письма в журнал технической физики. – 2012. – Т. 38. – Вып. 13. – С. 48-55.

6. **Lapovok, R.** Enhanced superplasticity in a magnesium alloy processed by equal channel angular pressing with a back pressure / R. Lapovok, Y. Estrin, M.V. Popov, T.G. Langdon // *Advanced Engineering Materials*. – 2008. – V. 10. – I. 5. – P. 429-433.
7. **Пойда, А.В.** Особенности развития зернограницного проскальзывания в условиях проявления сверхпластичности в сплаве с бимодальной структурой / А.В. Пойда, А.В. Завдовеев, В.П. Пойда, В.В. Брюховецкий, Д.Е. Милая // *Доповіді Національної академії наук України*. – 2016. – № 2. – С. 54-61.
8. **Чувильдеев, В.Н.** Неравновесные границы зерен в металлах. Теория и приложения / В.Н. Чувильдеев. – М.: Физматлит, 2004. – 304 с.
9. **Dey, N.** The effects of grain size distribution on cavity nucleation and creep deformation in ceramics containing viscous grain boundary phase / N. Dey, K.J. Hsia, D.F. Socie // *Acta Materialia*. – 1997. – V. 45. – I. 10. – P. 4117-4129.
10. **Перевезенцев, В.Н.** Анализ влияния параметров микроструктуры на аномальный рост зерен в субмикрокристаллических металлах и сплавах Часть I. Физическая модель / В.Н. Перевезенцев, А.С. Пупынин // *Вестник научно-технического развития*. – 2018. – № 3 (127). – С. 22-27.
11. **Кульков, В.Г.** Кинетика фасетирования несоразмерной межкристаллитной границы наклона / В.Г. Кульков // *Неорганические материалы*. – 2005. – Т. 41. – № 7. – С. 892-896.
12. **Кульков, В.Г.** Кинетика двумерного фасетирования межкристаллитных границ / В.Г. Кульков // *Неорганические материалы*. – 2005. – Т. 41. – № 11. – С. 1405-1408.
13. **Орлов, А.Н.** Границы зерен в металлах / А.Н. Орлов, В.Н. Перевезенцев, В.В. Рыбин. – М.: Металлургия, 1980. – 154 с.
14. **Darinskii, B.M.** Structure of grain boundaries of a general type and mechanisms of the grain boundary internal friction peak / B.M. Darinskii, Yu.E. Kalinin, S.V. Mushtenko, D.S. Sajko // *Solid State Phenomena*. – 2003. – V. – 89. – P. 203-232.
15. **Кульков, В.Г.** Взаимное движение зёрен вдоль границ с симметричными изломами / В.Г. Кульков // *Конденсированные среды и межфазные границы*. – 2001. – Т. 3. – № 4. – С. 373-374.
16. **Кульков, В.Г.** Проскальзывание по фасетированным границам зерен с учетом подстройки напряжения / В.Г. Кульков, М.Г. Жихарева // *Деформация и разрушение материалов*. – 2005. – № 1. – С. 46-48.
17. **Кульков, В.Г.** Межкристаллитное проскальзывание вдоль фасетированных границ зерен / В.Г. Кульков // *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования*. – 2005. – № 11. – С. 108-112.
18. **Страумал, Б.Б.** Фазовые переходы на границах зерен / Б.Б. Страумал. – М.: Наука, 2003. – 327 с.
19. **Straumal, B.B.** Faceting and roughening of the asymmetric twin grain boundaries in zinc / B.B. Straumal, V.G. Sursaeva, S.A. Polyakov // *Interface Science*. – 2001. – V. 9. – I. 3-4. – P. 275-279.
20. **Medlin, D.L.** Defect character at grain boundary facet junctions: Analysis of an asymmetric $\Sigma=5$ grain boundary in *Fe* / D.L. Medlin, K. Hattar, J.A. Zimmerman, F. Abdeljawad, S.M. Foiles // *Acta Materialia*. – 2017. – V. 124. – P. 383-396.
21. **Кульков, В.Г.** Релаксационные процессы на границах зерен в металлах: монография / В.Г. Кульков. – Волжский: ВФ МЭИ, 2015. – 162 с.
22. **Бокштейн, Б.С.** Диффузия в металлах / Б.С. Бокштейн. – М.: Металлургия, 1978. – 248 с.

References:

1. **Mulyukov, R.R.** Sverhplastichnost' ul'tramelkozernistykh splavov: Eksperiment, teoriya, tekhnologii / R.R. Mulyukov, R.M. Imaev, A.A. Nazarov i dr. – M.: Nauka, 2014. – 284 p.
2. **Zhilyaev, A.P.** Sverhplastichnost' i granicy zeren v ul'tramelkozernistykh materialakh / A.P. Zhilyaev, A.I. Pshenichnyuk. – M.: Fizmatlit, 2008. – 320 p.
3. **Guo, X.** Micromechanical simulation of fracture behavior of bimodal nanostructured metals / X. Guo, R. Ji, G.J. Weng, L.L. Zhu, J. Lu // *Materials Science and Engineering: A*. – 2014. – V. 618. – P. 479-489.
4. **Li, Y.S.** Effect of thermal annealing on mechanical properties of a nanostructured copper prepared by means of dynamic plastic deformation / Y.S. Li, Y. Zhang, N.R. Tao, K. Lu // *Scripta Materialia*. – 2008. – V. 59. – I. 4. – P. 475-478.
5. **Karnavskaya, T.G.** Osobennosti mekhanicheskogo povedeniya alyuminievogo splava 01570S s bimodal'noj strukturoj v usloviyah dinamicheskogo nagruzheniya / T.G. Karnavskaya, E.V. Avtokratova, A.M. Bragov i dr. // *Pis'ma v zhurnal tekhnicheskoy fiziki*. – 2012. – V. 38. – I. 13. – P. 48-55.
6. **Lapovok, R.** Enhanced superplasticity in a magnesium alloy processed by equal channel angular pressing with a back pressure / R. Lapovok, Y. Estrin, M.V. Popov, T.G. Langdon // *Advanced Engineering Materials*. – 2008. – V. 10. – I. 5. – P. 429-433.
7. **Pojda, A.V.** Osobennosti razvitiya zernogranichnogo proskal'zyvaniya v usloviyah proyavleniya sverhplastichnosti v splave s bimodal'noj strukturoj / A.V. Pojda, A.V. Zavdoveev, V.P. Pojda, V.V. Bryuhoveckij, D.E. Milaya // *Dopovidi Nacional'noj akademii nauk Ukraini*. – 2016. – no. 2. – P. 54-61.
8. **Chuvil'deev, V.N.** Neravnovesnye granicy zeren v metallah. Teoriya i prilozheniya / V.N. Chuvil'deev. – M.: Fizmatlit, 2004. – 304 p.
9. **Dey, N.** The effects of grain size distribution on cavity nucleation and creep deformation in ceramics containing viscous grain boundary phase / N. Dey, K.J. Hsia, D.F. Socie // *Acta Materialia*. – 1997. – V. 45. – I. 10. – P. 4117-4129.
10. **Perevezencev, V.N.** Analiz vliyaniya parametrov mikrostruktury na anomal'nyj rost zeren v submikrokristallicheskih metallah i splavah Chast' I. Fizicheskaya model' / V.N. Perevezencev, A.S. Pupynin // *Vestnik nauchno-tekhnicheskogo razvitiya*. – 2018. – no. 3 (127). – P. 22-27.
11. **Kul'kov, V.G.** Kinetika fasetirovaniya nesorazmernoj mezhkristallitnoj granicy naklona / V.G. Kul'kov // *Neorganicheskie materialy*. – 2005. – V. 41. – no. 7. – P. 892-896.
12. **Kul'kov, V.G.** Kinetika dvumernogo fasetirovaniya mezhkristallitnykh granic / V.G. Kul'kov // *Neorganicheskie materialy*. – 2005. – V. 41. – no. 11. – P. 1405-1408.
13. **Orlov, A.N.** Granicy zeren v metallah / A.N. Orlov, V.N. Perevezencev, V.V. Rybin. – M.: Metallurgiya, 1980. – 154 p.
14. **Darinskii, B.M.** Structure of grain boundaries of a general type and mechanisms of the grain boundary internal friction peak / B.M. Darinskii, Yu.E. Kalinin, S.V. Mushtenko, D.S. Sajko // *Solid State Phenomena*. – 2003. – V. – 89. – P. 203-232.
15. **Kul'kov, V.G.** Vzaimnoe dvizhenie zyoren vdol' granic s simmetrichnymi izlomami / V.G. Kul'kov // *Kondensirovannye sredy i mezhfaznye granicy*. – 2001. – V. 3. – no. 4. – P. 373-374.
16. **Kul'kov, V.G.** Proskal'zyvanie po fasetirovannym granicam zeren s uchedom podstroyki napryazheniya / V.G. Kul'kov, M.G. ZHihareva // *Deformaciya i razrushenie materialov*. – 2005. – no. 1. – P. 46-48.

17. **Kul'kov, V.G.** Mezkhristallitnoe proskal'zyvanie vdol' fasetirovannykh granic zeren / V.G. Kul'kov // Poverhnost'. Rentgenovskie, sinhrotronnye i nejtronnye issledovaniya. – 2005. – no. 11. – P. 108-112.
18. **Straumal, B.B.** Fazovye perekhody na granicah zeren / B.B. Straumal. – M.: Nauka, 2003. – 327 p.
19. **Straumal, B.B.** Faceting and roughening of the asymmetric twin grain boundaries in zinc / B.B. Straumal, V.G. Sursaeva, S.A. Polyakov // Interface Science. – 2001. – V. 9. – I. 3-4. – P. 275-279.
20. **Medlin, D.L.** Defect character at grain boundary facet junctions: Analysis of an asymmetric $\Sigma=5$ grain boundary in *Fe* / D.L. Medlin, K. Hattar, J.A. Zimmerman, F. Abdeljawad, S.M. Foiles // Acta Materialia. – 2017. – V. 124. – P. 383-396.
21. **Kul'kov, V.G.** Relaksacionnye processy na granicah zeren v metallah: monografiya / V.G. Kul'kov. – Volzhskij: VF MEI, 2015. – 162 p.
22. **Bokshtejn, B.S.** Diffuziya v metallah / B.S. Bokshtejn. – M.: Metallurgiya, 1978. – 248 p.

INTERGRANULAR SLIPPAGE ON FACETING BOUNDARIES WITH A BIMODAL DISTRIBUTION OF FACET DIMENSIONS

V.G. Kul'kov, A.A. Syshchikov

Branch of the «National Research University «Moscow power engineering institute», Volzhskiy

DOI: 10.26456/pcascnn/2018.10.401

Abstract: The speed of mutual displacement of the grains along faceting boundary with two characteristic sizes of facets under the external shear stress is considered. Based on the solution of the stationary equation of diffusion of vacancies at the grain boundary, the distribution of their concentration and normal stresses along the facets is found. The presence of smaller facets leads to an increase in the speed of intergranular slippage.

Keywords. Faceted grain boundaries, intergranular slippage, vacancies, diffusion.

Кульков Виктор Геннадьевич – д.ф.-м.н., профессор, заведующий кафедрой общей физики филиала ФГБОУ ВО «Национальный исследовательский университет «МЭИ» в г. Волжском

Сыщиков Александр Александрович – аспирант ФГБОУ ВО «Национальный исследовательский университет «МЭИ», г. Москва

Viktor G. Kul'kov – Dr. Sc., Head of the Department of General Physics, Volzhsky Branch of National Research University «Moscow Power Engineering Institute»

Aleksandr A. Syshchikov – postgraduate student, National Research University «Moscow Power Engineering Institute»