

## **ВКЛАД ГРАНИЦ ЗЕРЕН С СОПРЯГАЮЩИМИСЯ ПЛОСКОСТЯМИ ВО ВНУТРЕННЕЕ ТРЕНИЕ**

В.Г. Кульков

*Филиал ФГБОУ ВО «Национальный исследовательский университет  
«Московский Энергетический Институт» в городе Волжском  
404110, Россия, Волгоградская обл., Волжский, пр-т Ленина, 69  
vikulkov@yandex.ru*

DOI: 10.26456/pcascnn/2023.15.264

**Аннотация:** В нанокристаллических металлах существуют границы зерен, которые под воздействием приложенных вдоль них сдвиговых напряжений движутся вдоль нормали. Такие границы совмещают два вида зернограничной деформации – взаимное проскальзывание зерен вдоль границы и ее миграцию. Такая взаимосвязь легко объясняется в модели межкристаллитных границ с сопрягающимися кристаллографическими плоскостями. Путем решения дифференциального уравнения в условиях действия переменного напряжения находится функциональная зависимость смещения границы от координаты и времени. На основе этого находится величина рассеянной за период колебаний энергии и выражение для внутреннего трения, обусловленного вкладом таких границ. Оно имеет характер пика Дебая. Энергия активации процесса равна энергии активации зернограничной самодиффузии. Предложен атомный механизм движения границы, в основе которого лежат диффузионные процессы между протяженными ступеньками атомного масштаба в границе.

*Ключевые слова:* границы зерен, кристаллиты, сопрягающиеся плоскости, миграция границы, диффузия, вакансии, время релаксации.

### **1. Введение**

Межзеренное проскальзывание принято делить на два вида [1]. Это собственное проскальзывание, когда два сопрягающихся кристаллита взаимно сдвигаются как целое вдоль плоскости границы без изменения их структуры. Процесс осуществляется путем атомных перестроек только в области границы. Второй вид проскальзывания называется наведенным и осуществляется за счет пластического течения в приграничной области кристаллитов. Часто эти процессы идут совместно, в особенности, если граница зерна не является плоской, либо имеются стопоры для развития собственного проскальзывания в чистом виде. Другим способом зернограничной деформации является миграция, когда граница смещается в нормальном к ней направлении. Эти два процесса чаще всего рассматриваются раздельно.

Известны экспериментальные исследования [1-7], в которых эти два процесса на одной и той же границе зерен наблюдаются одновременно. При этом соотношение смещений вдоль и поперек границы может изменяться в зависимости от условий наблюдения и времени или же оставаться строго определенным [8, 9]. Процессы одновременного проскальзывания и миграции интенсивно исследуются методами

молекулярно-динамического моделирования [9-13], либо на основе теоретических моделей [1, 14, 15].

Механизмы взаимосвязи проскальзывания и миграции могут быть, например, следующие. Весьма часто наличие зернограничных дислокаций связано с уступами на границе [1]. Движение таких дислокаций обеспечивает проскальзывание вдоль границы, а движение связанных с ними уступов приводит к миграции [16]. Наведенное проскальзывание приводит к скоплению решеточных дислокаций вблизи границы. Сильно искаженная решетка создает термодинамическую движущую силу миграции границы в эту область. Мигрирующая граница оставляет за собой более совершенную решетку с меньшей свободной энергией [17]. Механизм движения межзеренной границы по результатам компьютерного моделирования представляет собой локальное вращение решетки внутри ядра границы, которое не связано с какой-либо диффузией или скольжением дислокаций [9]. Подобные модели основаны на том, что в области границы происходит преобразование одной ориентации решетки в другую, независимо от типа границы [18]. При этом диффузия на большие расстояния не требуется, но в ядре подвижных зернограничных дислокаций обычно требуется очень локализованная перетасовка атомов.

Среди разнообразных моделей строения границ зерен заслуживает внимания границы с сопрягающимися плоскостями (*matching planes, coincident axial directions*) [19]. На плоскости таких границ следы кристаллографических плоскостей сопрягающихся кристаллитов совпадают. Прямое наблюдение таких границ в электронном микроскопе описано в ряде ранних работ [20-22]. В работе [23] даже выдвигают гипотезу, что доля таких границ среди всех произвольных межзеренных поверхностей раздела довольно высока. Атомный механизм проскальзывания по границе с сопрягающимися плоскостями разработан в [24]. Модель связи проскальзывания с миграцией рассмотрена в [25].

Процессы межзеренного скольжения с одновременной миграцией границы более характерны для материалов с наномасштабным размером зерна [10, 14]. Это связано с тем, что условие сопряжения кристаллографических плоскостей наиболее точно выполняется при плоской конфигурации сегментов симметричной границы. В материалах с обычным размером зерна такие границы встречаются реже, если это не специально приготовленные бикристаллы.

Целью настоящей работы является разработка модели внутреннего трения на границе с сопрягающимися плоскостями.

## **2. Описание модели**

Рассмотрим двумерную картину, где участок межкристаллитной

границы длины  $l$ , ограничен с обеих сторон тройными стыками зерен. Кристаллографические плоскости зерен сопрягаются на плоскости границы, как показано на рис. 1. Выберем систему координат, совмещенную с нижним кристаллитом. Под действием сдвигового напряжения  $\sigma$  верхний кристаллит смещается вправо на расстояние  $a$ . Условие сопряжения зерен требует, чтобы граница сместилась вверх на расстояние  $b$ . Исходное положение кристаллографических плоскостей показано жирными линиями, смещенное – тонкими. Исходная плоскость границы обозначена пунктирной линией, смещенная – штрихпунктирной. Из рисунка видно, что по мере движения верхнего зерна вправо (скольжение) граница смещается вверх (миграция).

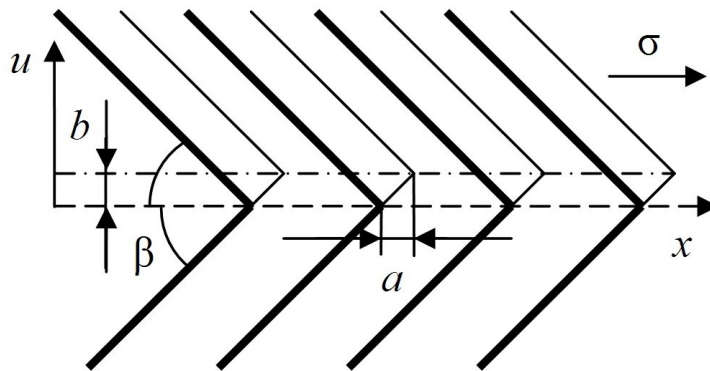


Рис. 1. Граница с сопрягающимися плоскостями.

Поскольку крайние точки границы закреплены, то такое движение является стесненным. Как и в работе [24] можно считать, что смещение кристаллитов осуществляется движением дислокаций. Тогда на рассматриваемом участке возникает двустороннее скопление дислокаций. В описываемом случае оно не является плоским, а выгибается вверх при смещении верхнего кристаллита вправо, и вниз при противоположном направлении. В первом приближении будем рассматривать взаимодействие этих дислокаций аналогично плоскому скоплению [26]. Континуальная плотность дислокаций двустороннего скопления дается выражением

$$n(x) = \frac{2(1-\mu)\sigma}{Gb} \frac{x}{\sqrt{(l/2)^2 - x^2}}, \quad (1)$$

где  $\mu$  – коэффициент Пуассона,  $G$  – модуль сдвига,  $\sigma$  – приложенное напряжение сдвига,  $b$  – модуль вектора Бюргерса дислокаций. Величину локального смещения верхнего кристаллита найдем интегрированием (1):

$$u(x) = \text{tg}\beta \int_{-l/2}^x bn(\xi) d\xi = \frac{2\text{tg}\beta(1-\mu)\sigma}{G} \sqrt{\left(\frac{l}{2}\right)^2 - x^2}. \quad (2)$$

Как видно из (2) в выражение для смещения величина вектора Бюргерса не входит. Это позволяет рассматривать смещение как

непрерывную величину. Линия, описываемая (2) представляет собой верхнюю часть эллипса. Его полуоси равны  $l/2$  и  $(1-\mu)tg\beta l\sigma/G$ . Если  $\sigma \ll G$ , то эллипс очень вытянутый, и приближение плоского скопления правомерно.

Скорость межкристаллитного скольжения, как и скорость миграции при малых напряжениях можно считать линейными функциями величины напряжения [27]. Тогда для скорости миграции границы можно записать уравнение

$$v(x,t) = \frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = I(\sigma_1(t) - \sigma_2(t)). \quad (3)$$

Здесь  $I$  – подвижность границы,  $t$  – время,  $\sigma_1(t)$  и  $\sigma_2(t)$  – внешнее и внутреннее обратное напряжение, действующие на сегменте границы. Внешнее напряжение имеет вид  $\sigma_1(t) = \sigma_0 \exp(i\omega t)$ , где  $\sigma_0$  – амплитуда,  $\omega$  – частота. Внутреннее напряжение будем считать независимым от координаты. Это справедливо для значительной доли рассматриваемого сегмента границы, за исключением областей, прилегающих к граничным точкам. Примем его равным напряжению в средней части сегмента. Согласно (2)  $u(0) = u_0 = \frac{2(1-\mu)tg\beta l\sigma_0}{2G}$ . Это выражение связывает постоянное

приложенное к границе напряжение со смещением в средней части сегмента. Полагаем, что такая же связь справедлива и для переменного внутреннего обратного напряжения и переменного смещения середины сегмента. Представим смещение в виде  $u(x,t) = \lambda(t)u(x)$ . Здесь первый сомножитель справа имеет смысл отношения смещения точек границы в данный момент времени к статическому смещению, даваемому выражением (2). Тогда  $\sigma_2(t) = \lambda(t)\sigma_0$ . Принимая эти соотношения, уравнение (3) можно представить в виде:

$$\frac{d\lambda(t)}{dt} = \frac{I\sigma_0}{u_0} (\exp(i\omega t) - \lambda(t)). \quad (4)$$

Решением уравнения (4) является функция

$$\lambda(t) = (1 + \omega^2 \tau^2)^{-1/2} \exp(i(\omega t - \phi)). \quad (5)$$

Здесь

$$\tau = \frac{u_0}{I\sigma_0} = \frac{(1-\mu)tg\beta l}{IG} \quad (6)$$

– время релаксации,  $tg\phi = \omega\tau$ . Величина рассеянной за период колебаний энергии, приходящаяся на длину  $l$  в направлении, нормальном к плоскости рис. 1, равна:

$$\Delta W = l \int_0^{2\pi/\omega} dt \int_{-1/2}^{1/2} \text{Re} \sigma(t) \text{Re} v(x,t) dx. \quad (7)$$

Здесь  $\text{Re}$  – действительная часть комплексной величины. С учетом (5) выражение для скорости смещения границы принимает вид:

$$v(x,t) = \frac{d\lambda(t)}{dt} u(x) = i\omega(1 + \omega^2\tau^2)^{-1/2} \exp(i(\omega t - \phi)) u(x). \quad (8)$$

Воспользовавшись (2) и (7), для величины рассеянной энергии получаем выражение

$$\Delta W = \frac{(1-\mu)\text{tg}\beta\pi^2 l^3 \sigma_0^2}{2G} \frac{\omega\tau}{1 + \omega^2\tau^2}. \quad (9)$$

Внутреннее трение найдем по формуле [28]  $Q^{-1} = \Delta W / 2\pi W$ , где  $W$  – максимальная упругая энергия, запасенная в объеме зерна.  $W = \sigma_0^2 V / 2G$ , а  $V$  – объем зерна. Тогда величина внутреннего трения равна

$$Q^{-1} = \frac{\pi(1-\mu)\text{tg}\beta l^3}{2V} \frac{\omega\tau}{1 + \omega^2\tau^2}. \quad (10)$$

Выражение (10) описывает дебаевский пик со временем релаксации  $\tau$ .

Реальные межкристаллитные границы практически никогда не бывают идеально плоскими. В своей структуре они неизбежно содержат различного рода дефекты, отклоняющие от плоскости. Рассмотрим здесь ступеньки, которые переводят плоскость границы в параллельную конфигурацию. Они могут быть разного знака, как показано на рис. 2.

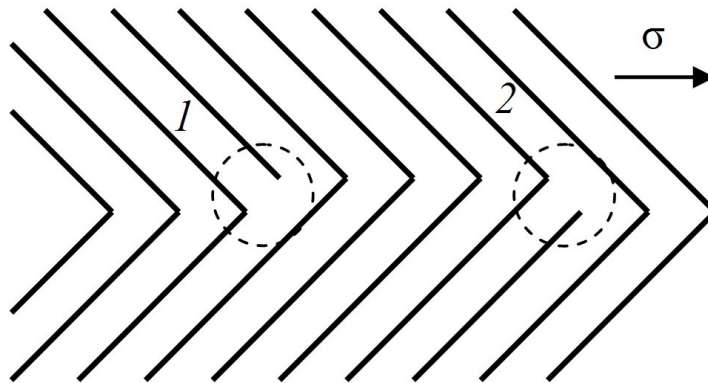


Рис. 2. Ступеньки на границе с сопрягающимися плоскостями.

Ступенька 1 поднимает границу вверх, а ступенька 2 опускает вниз. Условие сопряжения атомных плоскостей границы вне ступенек приводит к тому, что граница здесь смещается вверх согласно рис. 2. Поэтому приложение сдвигового напряжения приводит к появлению области сжатия на ступеньке 1 и растяжения на ступеньке 2  $p = \sigma s / d$ , где  $s$  – расстояние между ступеньками разного знака,  $d$  – высота ступеньки. На рис. 2 показаны единичные ступеньки, они также могут быть и кратными. Вследствие изменения величины химического потенциала на ступеньках изменяется концентрация вакансий вблизи них:

$$C_2 = -C_1 = C_0 \left( \exp\left(\frac{p\Omega}{kT}\right) - 1 \right), \quad (11)$$

где  $\Omega$  – атомный объем,  $C_0$  – равновесная концентрация вакансий в границе. В этом случае возникает диффузионный поток вакансий между ступеньками. Ступеньки работают как источники и стоки вакансий. При этом края оборванных полуплоскостей либо излучают вакансии, либо их присоединяют. Одномерное стационарное уравнение диффузии имеет вид  $d^2C(x)/dx^2 = 0$  с граничными условиями (11). Его решение имеет вид:

$$C(x) = \frac{C_0 p \Omega}{kT} \left( 1 - \frac{2x}{s} \right). \quad (12)$$

Полный поток вакансий между соседними ступеньками равен  $J = -D\delta \text{grad}C(x)$ , где  $D$  – зернограничный коэффициент самодиффузии,  $\delta$  – диффузионная толщина границы. По мере протекания диффузионного процесса происходит либо достройка полуплоскостей на ступеньках, либо их вакансионное растворение. Относительная скорость смещения кристаллитов  $v_x = J\Omega/d$ . Подставляя в это выражение полученные выше соотношения, окончательно получаем скорость миграции границы

$$v = \frac{2 \text{tg} \beta C_0 D \delta \Omega^2}{d^2 kT} \sigma. \quad (13)$$

Из (13) видно, что подвижность границы  $I = \frac{2 \text{tg} \beta C_0 D \delta \Omega^2}{d^2 kT}$ . Подставляя это выражение в (6), получаем выражение для времени релаксации

$$\tau = \frac{(1 - \mu) l d^2 kT}{2 G C_0 D \delta \Omega^2}. \quad (14)$$

### 3. Обсуждение результатов

Выражение (10) описывает дебаевский пик. Его свойства подобны низкотемпературному зернограничному пику [29], который обычно связывается с зернограничным проскальзыванием. В пользу такого заключения говорят следующие факты. Как и у низкотемпературного пика, энергия активации полученного максимума равна энергии активации граничной самодиффузии. Кроме того, увеличение размера зерна, как и увеличение размеров сегментов  $l$  приводит к увеличению температуры максимума  $T_m$ . Это следует из того, что для неизменности левой части выражения (14) необходимо, чтобы температура увеличивалась, поскольку коэффициент диффузии зависит от нее экспоненциально.

Оценим температуру, соответствующую максимуму выражения (10) для меди. При этом  $\omega\tau = 1$ . Выберем частоту колебаний  $f = 0,2$  Гц, что соответствует  $\omega = 1,26$  Гц. Величину  $l$  примем равной размеру зерна  $l = 42$  мкм, диффузионную толщину границы как и высоту ступеньки примем равной параметру решетки  $\delta = d = a = 3,6 \cdot 10^{10}$  м. Далее

$G = 4,6 \cdot 10^{10}$  Па,  $\Omega = a^3 = 4,7 \cdot 10^{-29}$  м<sup>3</sup>,  $k = 1,38 \cdot 10^{-23}$  Дж/К,  $\mu = 0,34$ ,  $C_0 \Omega = 10^{-2}$ . Коэффициент диффузии  $D = D_0 \exp(-Q/kT)$ , где  $D_0 = 9,8 \cdot 10^{-5}$  м<sup>2</sup>/с и  $Q/kT_m = 9,2$  [30], где  $T_m = 1357$  К – температура плавления. Полученная температура равна 507 К. Наблюдаемый при данной частоте низкотемпературный пик в меди имеет температуру 503 К. Не следует слишком серьезно относиться к такому хорошему совпадению, поскольку ряд величин определен весьма приближенно. Тем не менее, сходство описываемого пика с низкотемпературным пиком имеет место.

Ширина реального пика больше дебаевского вследствие наличия распределения сегментов границы  $l$  и высот ступенек  $d$  по размерам. Следует отметить, что истинного проскальзывания вдоль рассмотренной границы не возникает. Взаимное смещение зерен и миграция границы представляют собой два взаимосвязанных аккомодационных процесса.

Практическое значение измерения параметров пика внутреннего трения заключается в том, что его положение позволяет оценивать миграционную подвижность границы зерен по выражению (6). Если подвижность границы имеет диффузионную природу, то можно также оценить зернограничный коэффициент диффузии согласно выражению (14). Причем в обоих случаях время, необходимое для получения оценок, существенно меньше, чем это требовалось бы при проведении рекристаллизационных или диффузионных экспериментов.

#### 4. Заключение

Межзеренное проскальзывание с одновременной миграцией границы хорошо объясняется в модели сопрягающихся кристаллографических плоскостей зерен по обе стороны от границы. Неоднородный сдвиг по сегменту границы приводит к ее неоднородной миграции. Внутреннее трение, связанное со смещением такой границы, имеет вид пика и по свойствам подобен низкотемпературному зернограничному пику. Большая ширина пика связана с наличием распределения сегментов границ между тройными стыками зерен по размерам.

#### Библиографический список:

1. Орлов, А.Н. Границы зерен в металлах / А.Н. Орлов, В.Н. Перевезенцев, В.В. Рыбин. – М.: Металлургия, 1980. – 154 с.
2. Глейтер, Г. Большеугловые границы зерен / Г. Глейтер, Б. Чалмерс. – М.: Мир, 1975. – 375 с.
3. Molodov, D.A. Migration of specific planar grain boundaries in bicrystals: application of magnetic fields and mechanical stresses / D.A. Molodov, T. Gorkaya, C. Günster, G. Gottstein // *Frontiers of Materials Science in China*. – 2010. – V. 4. – I. 3. – P. 291-305. DOI: 10.1007/s11706-010-0080-6.
4. Sheikh-Ali, A.D. Sliding behaviour of symmetric tilt near  $\Sigma=25$   $\{1\bar{2}16\}$  boundary in zinc bicrystals / A.D. Sheikh-Ali, J.A. Szpunar // *Materials Science and Engineering: A*. – 1998. – V. 245. – I. 1. – P. 49-54. DOI: 10.1016/s0921-5093(97)00697-7.
5. Sheikh-Ali, A.D. Sliding behaviour of  $\Sigma=9$   $\{1\bar{2}12\}$  symmetric tilt boundary in zinc bicrystals / A.D. Sheikh-Ali, F.F. Lavrentyev, Y.G. Kazarov // *Acta Materialia*. – 1997. – V. 45. – I. 11. – P. 4505-4512. DOI:

10.1016/S1359-6454(97)00119-5.

6. **Sheikh-Ali, A.D.** Coupling of grain boundary sliding and migration within the range of boundary specialness / A.D. Sheikh-Ali // *Acta Materialia*. – 2010. – V. 58. – I. 19. – P. 6249-6255. DOI: 10.1016/j.actamat.2010.07.043.

7. **Gorkaya, T.** Concurrent grain boundary motion and grain rotation under an applied stress / T. Gorkaya, K.D. Molodov, D.A. Molodov, G. Gottstein // *Acta Materialia*. – 2011. – V. 59. – I. 14. – P. 5674–5680. DOI: 10.1016/j.actamat.2011.05.042.

8. **Molodov, D.A.** Mechanically driven migration of  $\langle 100 \rangle$  tilt grain boundaries in Al-bicrystals / D.A. Molodov, T. Gorkaya, G. Gottstein. // *Materials Science Forum*. – 2007. – V. 558-559. – P. 927-932. DOI: 10.4028/www.scientific.net/MSF.558-559.927.

9. **Suzuki, A.** Atomic mechanism of grain boundary migration / A. Suzuki, Y. Mishin // *Materials Science Forum*. – 2005. – V. 502. – P. 157-162. DOI: 10.4028/www.scientific.net/MSF.502.157.

10. **Карькина, Л.Е.** Зернограничное проскальзывание и миграция специальных границ зерен в бикристаллах Al. Атомистическое моделирование / Л.Е. Карькина, И.Н. Карькин, А.Р. Кузнецов, Ю.Н. Горностырев // *Физика твердого тела*. – 2018. – Т. 60. – вып. 10. – С. 1874-1881. DOI: 10.21883/FTT.2018.10.46511.099.

11. **Rahman, M.J.** A comprehensive molecular dynamics study of low angle grain boundary mobility in a pure aluminum system / M.J. Rahman, H.S. Zurob, J.J. Hoyt // *Acta Materialia*. – 2014. – V. 74. – P. 39-48. DOI: 10.1016/j.actamat.2014.03.063.

12. **Cahn, J.W.** Coupling grain boundary motion to shear deformation / J.W. Cahn, Y. Mishin, A. Suzuki // *Acta Materialia*. – 2006. – V. 54. – I. 19. – P. 4953-4975. DOI: 10.1016/j.actamat.2006.08.004.

13. **Maier, A.-K.** Theoretical modelling of grain boundary anelastic relaxations / A.-K. Maier, D. Mari, I. Tkalec, R. Schaller // *Acta Materialia*. – 2014. – V. 74. – P. 132-140. DOI: 10.1016/j.actamat.2014.04.016.

14. **Ovid'ko, I.A.** Free surface effects on stress-driven grain boundary sliding and migration processes in nanocrystalline materials / I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman // *Acta Materialia*. – 2016. – V. 121. – P. 117-125. DOI: 10.1016/j.actamat.2016.08.082.

15. **Berbenni, S.** A micromechanics-based model for shear-coupled grain boundary migration in bicrystals / S. Berbenni, B. Paliwal, M. Cherkaoui // *International Journal of Plasticity*. – 2013. – V. 44. – P. 68-94. DOI: 10.1016/j.ijplas.2012.11.011.

16. **Hadian, R.** Atomistic migration mechanisms of atomically flat, stepped, and kinked grain boundaries / R. Hadian, B. Grabowski, C.P. Race, J. Neugebauer // *Physical Review B*. – 2016. – V. 94. – I. 16. – P. 165413-1-165413-10. DOI: 10.1103/PhysRevB.94.165413.

17. **Горелик, С.С.** Рекристаллизация металлов и сплавов / С.С. Горелик, С.В. Добаткин, Л.М. Капусткина. – М.: МИСИС, 2005. – 432 с.

18. **Caillard, D.** Grain-boundary shear-migration coupling. II. Geometrical model for general boundaries / D. Caillard, F. Momprou, M. Legros // *Acta Materialia*. – 2009. – V. 57. – I. 8. – P. 2390-2402. DOI: 10.1016/j.actamat.2009.01.023.

19. **Ralph, B.** The structure of grain boundaries. A model based on planar watching / B. Ralph, P.R. Howell, T.F. Page // *Physica Status Solidi b*. – 1973. – V. 55. – I. 2. – P. 641-652. DOI: 10.1002/pssb.2220550220.

20. **Gronsky, R.** Direct observations of plane matching by lattice imaging electron microscopy / R. Gronsky, G. Thomas // *Scripta Metallurgica*. – 1977. – V. 11. – I. 9. – P. 791-794. DOI: 10.1016/0036-9748(77)90077-1.

21. **Pumphrey, P.H.** A plane matching theory of high angle grain boundary structure / P.H. Pumphrey // *Scripta Metallurgica*. – 1972. – V. 6. – I. 2. – P. 107-114. DOI: 10.1016/0036-9748(72)90260-8.

22. **Schindler, R.** On grain boundary dislocations in plane matching grain boundaries / R. Schindler, J.E. Clemens, R.W. Balluffi // *Physica Status Solidi a*. – 1979. – V. 56. – I. 2. – P. 749-761. DOI: 10.1002/pssa.2210560243.

23. **Randle, V.** The coincident axial direction (CAD) approach to grain boundary structure / V. Randle, B. Ralph // *Journal of Materials Science*. – 1988. – V. 23. – I. 3. – P. 934-940. DOI: 10.1007/BF01153992.

24. **Федоров, Ю.А.** Межкристаллитное проскальзывание по границе с сопрягающимися плоскостями / Ю.А. Федоров // *Физика металлов и металловедение*. – 1991. – № 7. – С. 67-72.

25. **Даринский, Б.М.** Движение межкристаллитной границы сопрягающихся плоскостей / Б.М. Даринский, В.Г. Кульков // *Сборник научных трудов «Физика и технология материалов электронной техники»*. – Воронеж: Изд-во Воронежского политехнического института, 1992. – С. 114-117.

26. **Хирт, Дж.** Теория дислокаций / Дж. Хирт, И. Лоте. – М.: Атомиздат, 1972. – 599 с.

27. **Кульков, В.Г.** Миграция несоответственной межкристаллитной границы и граничная самодиффузия / В.Г. Кульков // *Конденсированные среды и межфазные границы*. – 2022. – Т. 24. – № 4. – С. 475-482. DOI: 10.17308/kcmf.2022.24/10552.



28. Новик, А. Релаксационные явления в кристаллах / А. Новик, Б. Берри. – М.: Атомиздат, 1975. – 472 с.
29. Блантер, М.С. Метод внутреннего трения в металловедческих исследованиях / М.С. Блантер, Ю.В. Пигузов, Г.М. Ашмарин и др. – М.: Металлургия, 1991. – 248 с.
30. Чувильдеев, В.Н. Неравновесные границы зерен в металлах. Теория и приложения / В.Н. Чувильдеев. – М.: Физматлит, 2004. – 304 с.

**References:**

1. Orlov A.N., Perevezentsev V.N., Rybin V.V. *Granitsy zeren v metallakh [Grain boundaries in metals]*, Moscow, Metallurgiya Publ., 1980, 154 p. (In Russian).
2. Gleiter H., Chalmers B. *High-angle grain boundaries*, New York, Pergamon Press, 1972, 274 p.
3. Molodov D.A., Gorkaya T., Günster C., Gottstein G. Migration of specific planar grain boundaries in bicrystals: application of magnetic fields and mechanical stresses, *Frontiers of Materials Science in China*, 2010, vol. 4, issue 3, pp. 291-305. DOI: 10.1007/s11706-010-0080-6.
4. Sheikh-Ali A.D., Szpunar J.A. Sliding behaviour of symmetric tilt near  $\Sigma=25 \{1\bar{2}16\}$  boundary in zinc bicrystals, *Materials Science and Engineering: A*, 1998, vol. 245, issue 1, pp. 49-54. DOI: 10.1016/S0921-5093(97)00697-7.
5. Sheikh-Ali A. D., Lavrentyev F. F., Kazarov Y. G. Sliding behaviour of  $\Sigma=9 \{1\bar{2}12\}$  symmetric tilt boundary in zinc bicrystals, *Acta Materialia*, 1997, vol. 45, issue 11, pp. 4505-4512. DOI: 10.1016/S1359-6454(97)00119-5
6. Sheikh-Ali A.D. Coupling of grain boundary sliding and migration within the range of boundary specialness, *Acta Materialia*, 2010, vol. 58, issue 19, pp. 6249-6255. DOI: 10.1016/j.actamat.2010.07.043.
7. Gorkaya T., Molodov K.D., Molodov D.A., Gottstein G. Concurrent grain boundary motion and grain rotation under an applied stress, *Acta Materialia*, 2011, vol. 59, issue 14, pp. 5674-5680. DOI: 10.1016/j.actamat.2011.05.042.
8. Molodov D.A., Gorkaya T., Gottstein G. Mechanically driven migration of  $\langle 100 \rangle$  tilt grain boundaries in Al-bicrystals, *Materials Science Forum*, 2007, vol. 558-559, pp. 927-932. DOI: 10.4028/www.scientific.net/MSF.558-559.927.
9. Suzuki A., Mishin Y. Atomic mechanism of grain boundary migration, *Materials Science Forum*, 2005, vol. 502, pp. 157-162. DOI: 10.4028/www.scientific.net/MSF.502.157.
10. Kar'kina L.E., Kar'kin I.N., Kuznetsov A.R., Gornostyrev Y.N. Grain-boundary shear-migration coupling in al bicrystals. Atomistic modeling, *Physics of the Solid State*, 2018, vol. 60, issue 10, pp. 1916-1923. DOI: 10.1134/S1063783418100104.
11. Rahman M.J., Zurob H.S., Hoyt J.J. A comprehensive molecular dynamics study of low angle grain boundary mobility in a pure aluminum system, *Acta Materialia*, 2014, vol. 74, pp. 39-48. DOI: 10.1016/j.actamat.2014.03.063.
12. Cahn J.W., Mishin Y., Suzuki A. Coupling grain boundary motion to shear deformation, *Acta Materialia*, 2006, vol. 54, issue 19, pp. 4953-4975. DOI: 10.1016/j.actamat.2006.08.004.
13. Maier A.-K., Mari D., Tkalcec I., Schaller R. Theoretical modelling of grain boundary anelastic relaxations, *Acta Materialia*, 2014, vol. 74, pp. 132-140. DOI: 10.1016/j.actamat.2014.04.016.
14. Ovid'ko I.A., Sheinerman A.G. Free surface effects on stress-driven grain boundary sliding and migration processes in nanocrystalline materials, *Acta Materialia*, 2016, vol. 121, pp. 117-125. DOI: 10.1016/j.actamat.2016.08.082.
15. Berbenni S., Paliwal B., Cherkaoui M. A micromechanics-based model for shear-coupled grain boundary migration in bicrystals, *International Journal of Plasticity*, 2013, vol. 44, pp. 68-94. DOI: 10.1016/j.ijplas.2012.11.011.
16. Hadian R., Grabowski B., Race C.P., Neugebauer J. Atomistic migration mechanisms of atomically flat, stepped, and kinked grain boundaries, *Physical Review B*, 2016, vol. 94, issue 16, pp. 165413-1-165413-10. DOI: 10.1103/PhysRevB.94.165413.
17. Gorelik S.S., Dobatkin S.V., Kaputkina L.M. *Rekristallizatsiya metallov i splavov [Recrystallization of metals and alloys]*, Moscow, MISIS Publ., 2005, 432 p. (In Russian).
18. Caillard D., Momprou F., Legros M., Grain-boundary shear-migration coupling. II. Geometrical model for general boundaries, *Acta Materialia*, 2009, vol. 57, issue 8, pp. 2390-2402. DOI: 10.1016/j.actamat.2009.01.023.
19. Ralph B., Howell P.R., Page T.F. The structure of grain boundaries. A model based on planar watching, *Physica Status Solidi b*, 1973, vol. 55, issue 2, pp. 641-652. DOI: 10.1002/pssb.2220550220.
20. Gronsky R., Thomas G. Direct observations of plane matching by lattice imaging electron microscopy, *Scripta Metallurgica*, 1977, vol. 11, issue 9, pp. 791-794. DOI: 10.1016/0036-9748(77)90077-1.
21. Pumphrey P.H. A plane matching theory of high angle grain boundary structure, *Scripta Metallurgica*, 1972,

- vol. 6, issue 2, pp. 107-114. DOI: 10.1016/0036-9748(72)90260-8.
22. Schindler R., Clemans J.E., Balluffi R.W. On grain boundary dislocations in plane matching grain boundaries, *Physica Status Solidi a*, 1979, vol. 56, issue 2, pp. 749-761. DOI: 10.1002/pssa.2210560243.
23. Randle V., Ralph B. The coincident axial direction (CAD) approach to grain boundary structure, *Journal of Materials Science*, 1988, vol. 23, issue 3, pp. 934-940. DOI: 10.1007/BF01153992.
24. Fedorov Y.A. Mezkhristallitnoe proskal'zyvanie po granitse s sopryagayushchimisya ploskostyami [Intercrystallite gliding on boundary with conjugate planes], *Fizika metallov i metallovedenie [The Physics of Metals and Metallography]*, 1991, no. 7, pp. 67-72. (In Russian).
25. Darinskii B.M., Kul'kov V.G. Dvizhenie mezhkristallitnoi granitsy sopryagayushchikhsya ploskosti [Movement of the intercrystalline boundary of the matching planes], *Sbornik nauchnykh trudov «Fizika i tekhnologiya materialov elektronnoi tekhniki» [Collection of scientific papers «Physics and technology of electronic equipment materials»]*, Voronezh, VPI Publ., 1992, pp. 114-117. (In Russian).
26. Hirth J., Lothe J. *Theory of Dislocations*, New York, John Wiley & Sons Publ., 1982, 857 p.
27. Kul'kov V.G. Migratsiya nesorazmernoi mezhkristallitnoi granitsy i granichnaya samodiffuziya, [Migration of a disproportionate intercrystalline boundary and boundary self-diffusion], *Kondensirovannyye sredy i mezhfaznye granitsy [Condensed Matter and Interphases]*, 2022, vol. 24, no. 4, pp. 475-482. DOI: 10.17308/kcmf.2022.24/10552. (In Russian).
28. Nowick A.S., Berry B.S. *Anelastic Relaxation in Crystalline Solids*, New York, London, Academic Press Publ., 1972, 677 p. DOI: 10.1016/B978-0-12-522650-9.X5001-0.
29. Blunter M.S., Piguzov Yu.V., Ashmarin G.M. et al. *Metod vnutrennego treniya v metallovedcheskikh isledovaniyakh [The method of internal friction in metal studies]*, Moscow, Metallurgiya Publ., 1991, 248 p. (In Russian).
30. Chuvil'deev V.N. *Neravnovesnye granitsy zeren v metallakh. Teoriya i prilozheniya [Nonequilibrium grain boundaries in metals. Theory and Applications]*, Moscow, Fizmatlit Publ., 2004, 304 p. (In Russian).

*Original paper*

## CONTRIBUTION OF GRAIN BOUNDARIES WITH MATCHING PLANES TO INTERNAL FRICTION

V.G. Kul'kov

*Branch of the National Research University «Moscow Power Engineering Institute» in Volzhsky  
Volzhsky, Russia*

DOI: 10.26456/pcascnn/2023.15.264

**Abstract:** In nanocrystalline metals, there are grain boundaries that, under the influence of shear stresses applied along them, move along the normal. Such boundaries combine two types of the grain boundary deformation – mutual grain slippage along the boundary and its migration. This relationship is easily explained in the model of intercrystalline boundaries with mating crystallographic planes. By solving the differential equation under the action of alternating voltage, the functional dependence of the boundary displacement on the coordinate and time is found. Based on this, the value of the energy dissipated during the oscillation period and the expression for the internal friction caused by the contribution of such boundaries are found. It has the character of a Debye peak. The activation energy of the process is equal to the activation energy of the grain boundary self-diffusion. An atomic mechanism of the boundary motion is proposed, which is based on diffusion processes between extended steps of atomic scale in the boundary.

**Keywords:** *grain boundaries, crystallites, matching planes, boundary migration, diffusion, vacancies, relaxation time.*

*Кульков Виктор Геннадьевич – д.ф.-м.н., профессор филиала ФГБОУ ВО «Национальный исследовательский университет «Московский Энергетический Институт» в городе Волжском.*

*Viktor G. Kul'kov – Dr.Sc., Professor, Branch of the National Research University «Moscow Power Engineering Institute» in Volzhsky.*

Поступила в редакцию/received: 12.08.2023; после рецензирования/reviced: 04.09.2023; принята/accepted: 08.09.2023.