



Оригинальные статьи

Научная статья

УДК 539.2

<https://doi.org/10.17308/kcmf.2022.24/10552>**Миграция несоизмерной межкристаллитной границы и граничная самодиффузия**В. Г. Кульков *Волжский филиал Национального исследовательского университета «Московский энергетический институт»,
просп. Ленина, 69, Волжский 404110, Российская Федерация***Аннотация**

Большинство границ зерен, имеющих в поликристаллических металлах, не являются границами специального типа. Угол их взаимной разориентации является произвольной величиной, а ось поворота произвольно ориентирована к плоскости границы. В таких границах не возникают периодические атомные структуры, такие как решетки совпадающих узлов, чередующиеся многогранники и другие. Их называют границами общего типа, неспециальными, произвольными, несоизмерными. Общая теория релаксационных процессов на таких границах пока недостаточно разработана. Целью работы является разработка модели миграции несоизмерной межкристаллитной границы на атомном уровне и описание процесса самодиффузии вдоль нее.

Вокруг каждого приграничного узла решетки одного из кристаллитов описывается окружность, называемая основной областью. Если в узле находится атом, то попадание в нее атома другого кристаллита исключено. В случае вакантного узла в основной области такой атом может расположиться. Под атомом в плоской картине подразумевается атомный ряд в трехмерном случае. Распределение вакантных узлов растущего кристаллита является равномерным по плоской приведенной основной области. Механизм миграции заключается в осуществлении следующих основных процессов: локальной перестройки атомных конфигураций и самодиффузии атомов в поперечном направлении оси наклона.

Найдены характерные времена этих процессов и выражение для скорости миграции. Мигрирующая граница содержит большое количество делокализованных вакансий. Это приводит к высокой диффузионной подвижности атомов. Большинство вакансий в границе имеет не тепловое происхождение, а определяется только геометрической атомной структурой границы. В этом случае выражение для коэффициента граничной самодиффузии не содержит множителя, зависящего от энергии активации образования вакансий. Это приводит к тому, что коэффициент самодиффузии вдоль мигрирующей границы существенно больше, чем в покоящейся стационарной границе. Модель несоизмерной границы позволяет описать ее миграцию и рассчитать коэффициент самодиффузии.

Ключевые слова: несоизмерные межкристаллитные границы, делокализованные вакансии, граничная самодиффузия, миграционная подвижность

Для цитирования: Кульков В. Г. Миграция несоизмерной межкристаллитной границы и граничная самодиффузия. *Конденсированные среды и межфазные границы*. 2022;24(4): 475–482. <https://doi.org/10.17308/kcmf.2022.24/10552>

For citation: Kul'kov V. G. Migration of an incommensurate intercrystalline boundary and boundary self-diffusion. *Condensed Matter and Interphases*. 2022;24(4): 475–482. <https://doi.org/10.17308/kcmf.2022.24/10552>

 Кульков Виктор Геннадьевич, e-mail: vikulkov@yandex.ru

© Кульков В.Г., 2022



1. Введение

Для описания атомной структуры межкристаллитных границ в металлах и релаксационных процессов с их участием предложено большое количество разнообразных моделей. Среди них можно выделить класс специальных границ. Они разделяют два кристаллита, взаимно развернутых на угол, при котором образуется решетка совпадающих узлов, являющаяся общей для них. Атомное строение таких границ имеет подобие кристаллической структуры и характеризуется периодичностью. Небольшие отклонения от специальной разориентации кристаллитов обеспечиваются введением зернограничных дислокаций. Теория специальных границ хорошо разработана. Однако среди реально существующих в поликристаллических материалах границ их количество невелико и составляет по различным оценкам примерно одну десятую часть. Значительная доля границ не соответствует специальным разориентировкам. Их атомная структура образуется путем сопряжения двух поверхностей, имеющих рациональные индексы Миллера, периоды трансляции которых в одном или двух направлениях являются несоизмеримыми величинами, такими как, например, $\sqrt{2}$ и 1. Это означает, что длины таких отрезков не могут выражаться рациональными числами при их измерении линейкой с одним масштабным отрезком. Наложение таких поверхностей исключает возможность появления периодических структур в границе. Подобные структуры появляются также при сопряжении и некристаллографических плоскостей соседних решеток, среди индексов Миллера которых имеются иррациональные числа. Границы зерен подобного типа называются произвольными, обычными, неспециальными или несоответствующими.

Модель атомного строения несоответствующей межкристаллитной границы была успешно использована для описания перестроек структуры в процессе межзеренного проскальзывания [1]. Согласно этой модели перестройки атомных конфигураций в приграничной области происходят в некотором эффективном потенциальном поле, имеющимся в этой области и созданном совокупностью всех приграничных атомов. Характеристикой положения каждого атома является скалярная или векторная величина, называемая параметром несоответствия (дистанцией), однозначно определяющая его геометрическое и энергетическое состояние. Она определяет положение каждого атома одного из двух

соединяющихся кристаллитов по отношению к системе координат другого. Несколько иной параметр вводится для описания изменения атомной структуры границ зерен в алюминии и называется параметром порядка [2]. Для атомов, имеющих определенные области изменения параметров несоответствия, в границе образуются двухъямные энергетические конфигурации с различными глубинами ям. Элементарным актом скольжения является перескок атома из одной ямы в соседнюю более глубокую яму. Размеры таких областей зависят от структуры границы и величины действующих в ней напряжений. Результирующая скорость процесса определяется размерами областей, величиной активационного барьера и плотностью состояний. Учет этих факторов для границ с различным видом несоответственности приводит к различным видам функциональной связи скорости проскальзывания с величиной приложенных напряжений [3]. Развитие представлений о несоответствующих структурах позволило описать не только их энергию [4], но и многие зернограничные процессы, такие как образование точечных дефектов, теплоемкость, роль границ как источников вакансий, внутреннее трение [5, 6]. Несопоразмерные границы исследовались методом электронной микроскопии высокого разрешения [7–11] и компьютерного моделирования [12, 13]. Такого типа границы широко распространены и в нанокристаллических материалах [10, 14]. Имеются сведения [15] о том, что наличие несоответственности на межфазной границе между образцом и нанесенной на его поверхность пленкой существенно влияет на ее антиокислительные свойства. Получили распространение взгляды о связи трибологических свойств образцов со строением поверхностных слоев. Связь между микроструктурой и трением позволяет не только оценить минимально возможный коэффициент трения между чистыми металлами и сплавами, но и предполагает возможность создания материалов с низким коэффициентом трения с помощью технологии границ зерен. Связь между механизмами межфазной деформации и режимами трения также может быть интерпретирована в атомистическом смысле через концепцию соизмеримых и несоизмеримых границ раздела [16].

Попытка описания механизма миграции границы предложена в работе [17]. В условиях смещения границы вдоль ее нормали возникает необходимость введения третьей компоненты вектора параметра несоответствия. В общем случае

он определяется как радиус-вектор атома одного зерна в системе координат, связанной с элементарной ячейкой потенциального рельефа другого зерна. Наличие эффективной термодинамической силы миграции означает повышенную свободную энергию атомов одного из зерен по сравнению с атомами соседнего зерна. Релаксация в такой системе приводит к смещению границы раздела в сторону энергетически выгодного положения и росту одного зерна за счет другого. Модель предсказывает функциональную зависимость скорости миграции от величины эффективной термодинамической силы степенного вида с показателями степени, изменяющимися от 1 до 3. Такой эффект неоднократно наблюдался в эксперименте [18, 19]. Общая микроскопическая теория такого релаксационного процесса, как миграция границы, в настоящее время отсутствует. Целью настоящей работы является развитие идей работы [17] и разработка модели миграции несоразмерной межкристаллитной границы наклона на атомном уровне и описание процессов самодиффузии.

2. Модель миграции границы наклона

Определим атомную структуру нерелаксированной границы наклона. Для этого рассмотрим геометрическую картину наложения двух одинаковых простых кубических решеток, взаимно развернутых на неспециальный угол. На рис. 1 изображен результат наложения. Светлые и темные узлы обозначают проекции атомных рядов решеток. После построения прямой, являющейся следом плоскости границы, необходимо оставить по разные стороны узлы только одного цвета. Вокруг каждого такого узла, расположенного вблизи границы, как из центра проводится сфера радиуса, равного межатомному расстоянию. На рис. 1 изображены окружности, являющиеся

сечениями этих сфер плоскостью рисунка. Попадание в них любого другого атома запрещено в модели жестких сфер. Сам же граничный атом, расположенный в центре, может сместиться в затемненную область круга, где нет ограничений со стороны соседних кругов, если в этой части имеются вакантные позиции. По аналогии с [17] назовем внутренность затемненной части круга основной областью. На рис. 1 показаны оси координат x и y , ось наклона z нормальна к ним, а также к плоскости рисунка и имеет символ $[001]$ в любой из решеток. Граница наклона разделяет два кристаллита с разной ориентацией решеток, взаимно развернутых на произвольный угол относительно оси z . Узлы кристаллита 2 изображены черными точками. Считается, что они все заполнены атомами, за исключением узлов, попадающих в основные области. Узлы внутри каждой основной области пусты и являются возможными местами для их заполнения атомами. При этом решетка второго кристаллита дстраивается за счет атомов первого, а вся граница в целом смещается вверх на рис. 1.

Наличие эффективной движущей силы миграции означает, что каждый атом первого кристаллита имеет избыток энергии W по сравнению с атомами второго кристаллита. Встраивание атома в пустой узел в основной области приводит к рассеянию избыточной энергии. Как видно из рис. 1, возможно наличие пустых узлов в основной области в количестве 0, 1 и 2, что обозначено соответствующими цифрами. Размеры основной области не позволяют разместить в ней большее число узлов. Если все основные области перенести вдоль границы и совместить с одной из них, то придем к понятию приведенной области [3, 17]. В ней можно отметить положение каждого пустого узла и рассматривать плотность их распределения. Характерным для несо-

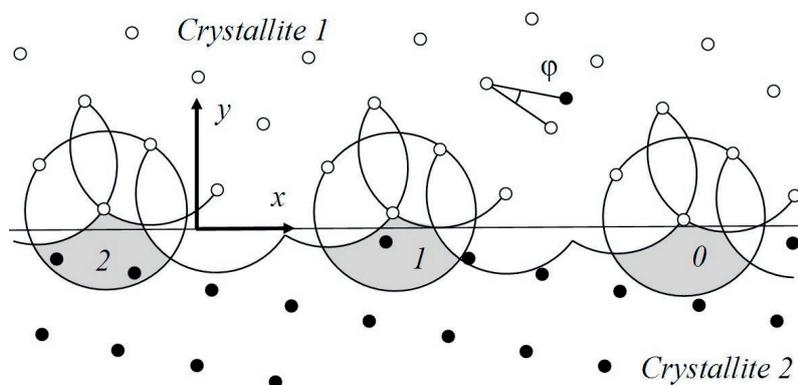


Рис. 1. Картина наложения узлов двух решеток и основные области

размерных структур является равномерное геометрическое распределение узлов в приведенной основной области [1]. Каждый пустой узел в основной области может заполняться только одним атомным рядом, его положение уникально и является своего рода меткой этого ряда. Координаты его полностью аналогичны введенному ранее для несоизмерных структур параметру несоответствия. Реальное расположение атомных рядов вследствие релаксации структуры будет несколько отличаться от положения узлов. Но этими узлами определяются важнейшие характеристики атомных рядов, такие как энергия активации перехода и энергия в конечном расположении. На рис. 2 толстой линией показана приведенная основная область, соответствующая границе, изображенной на рис. 1. Если один из узлов решетки второго кристаллита попадает в зону A , то другой узел попадает в зону A' . Границы зон связаны операцией трансляции на период решетки второго кристаллита. В зоне B может находиться только один узел. Если же в основную область не попадает ни одного узла, то один из узлов решетки должен обязательно попасть в зону C , примыкающую к основной области. Построение зоны C носит вспомогательный характер, поскольку ее узлы заполняются в процессе миграции не могут. Таким образом, если узел решетки второго кристаллита попадает в одну из зон A , B или C , то основная область содержит соответственно 2, 1 или 0 узлов. Площади зон A , A' и C между собой равны $S_0 = S_2$. Площади зон A , B и C обозначены как S_2 , S_1 и S_0 с индексом, указывающим количество узлов. Вероятности попадания узлов в них $w_i = S_i/S$, где $S = S_0 + S_1 + S_2 = 2S_0 + S_1$ – общая площадь приведенной основной области.

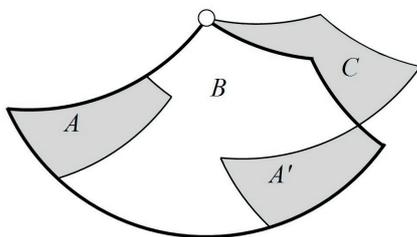


Рис. 2. Приведенная основная область границы наклона

Если основная область содержит только один узел, то застройка вакантного ряда происходит путем термоактивированного перехода атомного ряда первого кристаллита, расположенного в вершине области, с преодолением барьера, рав-

ного в среднем W_1 . Наличие барьера определяется необходимостью разрыва связей атомов с ближайшими соседями из своего кристаллита. Переход атомного ряда является процессом консервативным. Он осуществляется по механизму, подобному дислокационному скольжению путем образования и распространения двойных перегибов. Время перехода [20] составляет $\tau_1 = (c_k v_k)^{-1}$, где $c_k = 2a^{-1} \exp(-W_k/kT)$ – концентрация перегибов, v_k – их скорость бокового распространения. Эту величину можно найти из соотношения Эйнштейна $v_k = D_k F_k / kT$, если учесть, что на перегиб действует сила $F_k = Wh/a^2$, а их коэффициент диффузии $D_k = v_0 a^2 \exp(-W_{mk}/kT)$. Здесь W_k и W_{mk} – энергия образования и миграции перегиба, h – его ширина, равная расстоянию смещения ряда, v_0 – дебаевская частота колебаний атома, k – постоянная Больцмана; T – термодинамическая температура, W – разность энергий атомов в кристаллитах 1 и 2. Отсюда легко получить:

$$\tau_1 = \frac{akT}{2v_0 Wh} \exp\left(\frac{W_k + W_{mk}}{kT}\right). \quad (1)$$

Энергию перегиба можно определить [20] из выражения $W_k = 2a\sqrt{2U_p U_0}/\pi$, где $U_p = W_1/a$ – энергия Пайерлса для единицы длины атомного ряда, W_1 – энергия активации перескока атома в новую позицию, ранее введенная как величина барьера, U_0 – энергия единицы длины ряда. Эту величину можно найти, считая ряд в области перегиба растянутым на величину $(l_k^2 + h^2)^{1/2} - l_k$. Тогда $W_k = h^2 \sqrt{\lambda W_1}/\pi l_k$. Здесь l_k – длина перегиба, λ – коэффициент жесткости межатомной связи.

Таким же образом осуществляется застройка одного из двух попавших в основную область узлов. Второй из них застраивается атомами первого кристаллита из другой основной области с отсутствующим в ней «своим» вакантным узлом. Для этого требуется диффузионное перемещение атомов на расстояние между основными областями, содержащими 2 и 0 узлов.

Здесь рассматривается случай достаточно больших величин движущих сил миграции. В этом случае в процесс вовлекаются все приграничные атомы, расположенные по одну сторону границы в слое толщины порядка периода решетки a . Назовем такие атомные ряды активными. Их количество на единицу длины границы $N_1 = a^{-1}$. Плотность распределения узлов в приведенной области на единицу длины границы тогда равна $\rho = a^{-3}$. Количество активных атомных рядов с двумя вакантными узлами в основ-

ной области равно $N_2 = \rho w_2 S$. Имеется такое же количество активных атомных рядов с основными областями без узлов. Атомы первого кристаллита из областей последнего типа переходят в основные области с двумя вакантными узлами и достраивают один из них. В двумерной задаче узлам в основной области соответствуют их ряды в реальной границе вдоль z . Среднее расстояние, преодолеваемое такими атомами вдоль границы, равно:

$$l = \frac{1}{2N_2} = \frac{a^3}{2w_2 S}. \quad (2)$$

Переход атомов происходит диффузионным путем. Время перехода:

$$\tau_2 = l / uF, \quad (3)$$

где $u = D/kT$ – подвижность атомов, D – коэффициент зернограничной диффузии, F – сила, необходимая для перемещения атомов от истока к стоку вдоль границы. Для движущей силы диффузии можно принять выражение $F = W/l$. Из формул (2) и (3), получаем время перехода:

$$\tau_2 = \left(\frac{a^3}{2w_2 S} \right)^2 \frac{kT}{DW}. \quad (4)$$

Оценки показывают, что $\tau_2 \gg \tau_1$, поэтому скорость миграции границы лимитируется диффузионными процессами в границе.

Мигрирующая граница поглощает вакансии, часть из которых перераспределяется в ней и участвует в диффузионных процессах, а часть покидает границу, оставаясь в новом кристаллите. Учитывая то, что основные области расположены плотно в границе, можно считать, что все вакансии поглощаются только тремя типами описанных основных областей. Вакансия, поглощенная атомом, являющимся центром основной области типа А, создает в ней три вакантных узла. Один из них относится к поглощенному атому первого кристаллита, два других расположены в узлах второго кристаллита. Следует заметить, что до того, как вакансия была поглощена, в этой области их не было совсем. Вакансией в границе может считаться тот узел решетки, в котором атому разрешено располагаться без возникновения конфигурации с большой энергией, связанной с вытеснением других атомов из своих позиций. Имевшиеся первоначально узлы в основной области этому условию не удовлетворяют и поэтому вакансиями не являются. Такое понятие зернограничной вакансии следует от-

личать от избыточного объема, обусловленного несопряжением решеток в области границы. Релаксация в области границы приводит к понятию делокализованной вакансии. В описанной ситуации возникают две вакансии в растущем кристаллите, поскольку максимальное количество атомов, способных расположиться в ней равно двум. Оба они могут заполнить два узла второго кристаллита. Заполнение вакантной позиции первого кристаллита связано с затратой энергии W и восстанавливает атом в исходной позиции, обращая процесс миграции в противоположном направлении, кроме того, другой атом уже в этой основной области разместиться более не сможет. Поэтому такой процесс исключаем из рассмотрения и считаем количество вакансий в этой области, равным двум. Методами молекулярной динамики было установлено, что энергия связи вакансий в кластеры на границе является весьма малой [21], так что они легко диссоциируют. Это можно отнести и к двум рассматриваемым вакансиям, расположенным так, что они образуют дивакансию в границе. Одна из них может уйти в объем второго кристаллита для восполнения в нем равновесной их концентрации. Вторая должна быть замещена атомом по описанной схеме. Эта вакансия покидает исходную позицию и увеличивает общее количество вакансий в зернограничной системе на единицу.

Поглощение вакансии первого кристаллита в основных областях с числами узлов в них равными 1 или 0 по аналогии создает в них одну вакансию или не создает ни одной. При этом появившаяся вакансия способна уйти в растущий кристаллит. Вследствие поглощения вакансии атомом из основной области третьего описанного типа с нулевым количеством узлов исчезает необходимость его диффузионного перехода к вакансии, расположенной в области рассмотренного ранее типа с двумя вакантными узлами. Весь описанный процесс равносильен простому переходу атома первого кристаллита из центра основной области в один из имеющихся в ней узлов. Таким образом, поглощение и эмиссия вакансии границей не изменяет сущности процессов в основных областях и проясняет только механизм перекачки вакансий из одного кристаллита в другой через границу.

Общее количество вакансий в границе, принимающих участие в диффузионных процессах, равно сумме равновесного их количества в покоящейся границе C_0 , вакансий из основной области типа А и поглощенных вакансий в области

без узлов. При смещении границы на расстояние a ею поглощается C_1/a вакансий, приходящихся на единицу ее длины, где C_1 – их концентрация (атомная доля) в первом кристаллите. Они распределяются между тремя описанными типами основных областей. Поэтому область без узлов генерирует $C_1 w_0/a$ вакансий. Независимо от поглощения решеточных вакансий каждая область типа A создает w_2/a вакансий. Поэтому общая их концентрация в границе с учетом того, что $w_2 = w_0$, равна $C_b = C_0 + w_2(1 + C_1)$. Пренебрегая концентрациями в равновесной границе и в объеме кристаллита в сравнении с w_0 , можно считать, что $C_b = w_2$.

Исходя из общих принципов, можно записать следующее выражение для граничного коэффициента самодиффузии:

$$D = \theta a^2 w_2 v_0 \exp\left(-\frac{W_m}{kT}\right). \quad (5)$$

Здесь θ – геометрический множитель порядка единицы, W_m – энергия активации миграции вакансий в границе.

3. Обсуждение результатов

Выше рассматривался процесс смещения границы на расстояние a . Скорость миграции определяется выражением $v = a\tau^{-1}$. В пренебрежении временем τ_1 миграционная подвижность границы $I = v/\sigma$, где $\sigma = Wa^{-3}$ – величина эффективной движущей силы миграции для единицы площади. Воспользовавшись (4), выражение для подвижности можно привести к виду:

$$I = \frac{4Dw_2^2 S^2}{a^2 kT}. \quad (6)$$

При рассмотрении процессов возникновения вакансий в мигрирующей границе был получен результат, согласно которому концентрация вакансий в границе равна $C_b = w_2$. Это очень большая величина. Ею можно объяснить высокую диффузионную подвижность атомов в мигрирующей границе [22, 23]. Следует заметить, что подавляющее большинство вакансий в границе имеет не тепловое происхождение, а определяется только геометрической атомной структурой мигрирующей границы. Выражение для коэффициента граничной диффузии теперь не содержит множителя, зависящего от энергии активации образования вакансий. В рамках такого подхода легко понять наблюдающееся увеличение коэффициента граничной самодиффузии в мигрирующих границах. [24–26]. Структурное

состояние границ зерен в процессе их миграции является существенно неравновесным [24]. В некоторой степени его можно сравнить с покоящимися неравновесными границами зерен в свежеприготовленных ультрамелкозернистых материалах. Как известно, они содержат значительный избыточный свободный объем в виде делокализованных вакансий [27]. Энергия активации диффузии в таких границах может быть в два раза меньше, чем в границах с равновесной структурой [28]. Неравновесность мигрирующих границ связывается многими авторами с увеличением свободного объема в границе, являющимся либо результатом поглощения избыточных вакансий в объеме исчезающего зерна, либо захватом дислокаций с их последующей диссоциацией [27, 29]. В настоящей работе описан механизм генерации вакансий внутри границы без учета всех этих процессов. Здесь степень неравновесности границы определяется только локальными атомными перестройками. Перечисленные выше эффекты могут оказывать дополнительное воздействие, приводящее к увеличению степени неравновесности. Увеличение избыточного объема в границе неизбежно приводит к ее уширению.

Проведем оценку отношения коэффициентов граничной самодиффузии в мигрирующей и покоящейся границах. Примем для последнего выражение $D_e = \lambda a^2 v_0 \exp(-(W_f + W_m)/kT)$, где W_f и W_m – энергии образования и миграции зернограничных вакансий, λ – коэффициент. С учетом (5) это отношение имеет величину $n = D/D_e = w_2 \exp(W_f/kT)$. Здесь принято $\theta \approx \lambda$. Принимая $w_2 \approx 0.1$; $W_f \approx 0.4W_b$, где $W_b = W_f + W_m$ – энергия активации зернограничной самодиффузии; $W_b/kT_m = 9$ [27]; $T_m/T = 0.5$, T_m – температура плавления; получаем $n \approx 1.3 \cdot 10^2$, что согласуется с экспериментальными данными для мигрирующей границы $n \sim 10^2$ [24]. В работе [30] экспериментально измеренное значение коэффициента диффузии Sa в кальцит при температуре 900 °C на мигрирующей границе на пять порядков превысило его значение для стационарной границы. Следует отметить принципиальную разницу неравновесности структур в рассматриваемых случаях движущейся границы при ее миграции и неподвижной границы в наноструктурных системах. При остановке границы неравновесная концентрация вакансий в ней по истечении некоторого времени релаксации примет значение, характерное для покоящейся границы. Такая неравновесность имеет

динамический характер, когда вакансии непрерывно генерируются в движущейся границе и исчезают. Неодновременность протекания этих процессов приводит к избыточному количеству вакансий в границе. Покоящиеся границы зерен могут называться неравновесными, если они обладают избыточным свободным объемом, повышенной энергией или являются источниками дислокаций [31–34]. Неравновесность границ часто связывают с наличием дальнедействующих полей напряжений, в то время как в мигрирующей границе согласно описанной модели их нет.

4. Заключение

На основе представлений об атомном строении несоизмерной межкристаллитной границы наклона развита модель ее миграции. Показано, что перестройка атомных конфигураций в области границы носит как локальный, так и нелокальный характер с участием процессов диффузии. Релаксация атомной структуры приводит к тому, что концентрация вакансий в мигрирующей границе превышает таковую в неподвижной границе. Это влечет увеличение коэффициента самодиффузии вдоль такой границы.

Заявленный вклад авторов

Кульков В. Г. – идея, разработка модели, написание статьи.

Конфликт интересов

Автор заявляет, что у него нет известных финансовых конфликтов интересов или личных отношений, которые могли бы повлиять на работу, представленную в этой статье.

Список литературы

1. Даринский Б. М., Сайко Д. С., Федоров Ю. А. Скольжение по границе, образующей несоизмеримую структуру. Известия вузов. Физика. 1987;30(9): 53–57. Режим доступа: <https://www.elibrary.ru/item.asp?id=36961888>
2. Żydek A., Wermiński M. and Trybula M. Description of grain boundary structure and topology in nanocrystalline aluminum using Voronoi analysis and order parameter. *Computational Materials Science*. 2021;197: 110660. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2021.110660>
3. Даринский Б. М., Кульков В. Г. Межкристаллитное скольжение вдоль границ, образованных плотноупакованными плоскостями. Поверхность. Физика, химия, механика. 1993;75(5): 153–156. Режим доступа: <https://www.elibrary.ru/item.asp?id=36705071>

4. Штремель М. А., Маркович А. Л. Энергия несоизмеримых границ зерен. *Физика металлов и металловедение*. 1991;71(6): 25–32.

5. Darinskii B. M., Kalinin Yu. E., Mushtenko S. V., Saiko D. S. Structure of grain boundaries of a general type and mechanism of grain boundary internal friction peak. *Solid State Phenomena*. 2003;89: 203–232. <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/SSP.89.203>

6. Darinskii B. M., Kalinin Y. E., Sajko D. S. Atomic structure of the intercrystalline general type boundaries. Mechanisms of the grain boundary peak of internal friction. Premelting. *Solid State Phenomena*. 2006;115: 73–86. <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/SSP.115.73>

7. Gautam A., Radetic T., Lancon F., Dahmen U. Quantitative study of an incommensurate grain boundary using aberration corrected microscopy. *Microscopy and Microanalysis*. 2011;17(S2): 1338–1339. <https://doi.org/10.1017/S1431927611007562>

8. Gautam A, Ophus C, Lancon F, Radmilovic V., Dahmen U. Atomic structure characterization of an incommensurate grain boundary. *Acta Materialia*. 2013;61(13): 5078–5086. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2013.04.028>

9. Deymier P. A., Shamsuzzoha M., Weinberg J. D. Experimental evidence for a structural unit model of quasiperiodic grain boundaries in aluminum. *Journal of Materials Research*. 1991;6(7): 1461–1468. <https://doi.org/10.1557/JMR.1991.1461>

10. Lancon F., Ye J., Caliste D., Radetic T., Minor A. M., Dahmen U. Superglide at an internal incommensurate boundary. *Nano Letters*. 2010;10(2): 695–700. <https://doi.org/10.1021/nl903885p>

11. Wang Sh., Yu Yue, Zhang Sh., Zhang Sh., Xu H., Zou X., Zhang J., Atomic-scale studies of overlapping grain boundaries between parallel and quasi-parallel grains in low-symmetry monolayer ReS₂. *Matter*. 2020;3(6): 2108–2123. <https://doi.org/10.1016/j.matt.2020.09.015>

12. Rouviere J., Lancon F., Rousseau K., Caliste D., Jouneau P., Fourne F. Structure of an incommensurate 90° Si grain boundary resolved with the help of a Cs-corrector for illumination. *Journal of Physics: Conference Series*. 2010;209: 012041. <https://doi.org/10.1088/1742-6596/209/1/012041>

13. Sutton A. P. An analytic model for grain-boundary expansions and cleavage energies. *Philosophical Magazine A*. 1991;63(4): 793–818. <https://doi.org/10.1080/01418619108213914>

14. Farkas D., Froseth A., Swygenhoven H. Grain boundary migration during room temperature deformation of nanocrystalline Ni. *Scripta Materialia*. 2006;55(8): 695–698. <https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2006.06.032>

15. Wang L., Qi J., Zhang S., Ding M., Wei W., Wang J., Zhang Zh., Qiao R, Zhang Zh., Li Z., Liu K.,

- Fu Yu., Hong H., Liu C., Wu M., Wang W., He Yu., Cu Yi., Li Q., Bai X., Liu K. Abnormal anti-oxidation behavior of hexagonal boron nitride grown on copper. *Nano Research*. 2022. <https://doi.org/10.1007/s12274-022-4388-1>
16. Chandross M., Argibay N. Friction of metals: A review of microstructural evolution and nanoscale phenomena in shearing contacts. *Tribology Letters*. 2021;69:119. <https://doi.org/10.1007/s11249-021-01477-z>
17. Kul'kov V. G., Polyakov A. S. Migration of an incommensurate high_angle grain boundary. *Russian Metallurgy (Metally)*. 2012;(4): 263–268. <https://doi.org/10.1134/S0036029512040064>
18. Gupta V. K., Madhuri M. K., Gupta S. P. Diffusion induced grain boundary migration in the Cu-Cd system. *Acta Materialia*. 2003;51(17): 4991–5000. [https://doi.org/10.1016/S1359-6454\(03\)00325-2](https://doi.org/10.1016/S1359-6454(03)00325-2)
19. Viswanathan R., Bauer C. L. Kinetics of grain boundary migration in copper bicrystals with [001] rotation axes. *Acta Metallurgica*. 1973;21(8): 1099–1109. [https://doi.org/10.1016/0001-6160\(73\)90026-6](https://doi.org/10.1016/0001-6160(73)90026-6)
20. Хирт Дж., Лоте И. Теория дислокаций. М.: Атомиздат; 1972. 599 с.
21. Li X., Liu W., Xu Y., Liu C. S., Fang Q. F., Pan B. C., Wang Zh. Energetic and kinetic behaviors of small vacancy clusters near a symmetric $\Sigma 5(310)/[001]$ tilt grain boundary in bcc Fe. *Journal of Nuclear Materials*. 2013;440(1–3): 250–256. <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2013.05.021>
22. Smidoda K., Gottschalk W., Gleiter H. Diffusion in migrating interfaces. *Acta Metallurgica*. 1978;26(12): 1833–1836. [https://doi.org/10.1016/0001-6160\(78\)90095-0](https://doi.org/10.1016/0001-6160(78)90095-0)
23. Красильников В. В., Савотченко С. Е. Закономерности зернограничной диффузии при неравновесности границ зерен и их миграция в наноструктурных материалах. *Известия РАН. Серия физическая*. 2009;73(9):1348–1354. Режим доступа: <https://elibrary.ru/item.asp?id=12901667>
24. Горелик С. С., Добаткин С. В., Капуткина Л. М. *Рекристаллизация металлов и сплавов*. М.: МИСИС; 2005. 432 с.
25. Prokoshkina D., Klinger L., Moros A., Wilde G., Rabkin E., Divinski S.V. Effect of recrystallization on diffusion in ultrafine-grained Ni. *Acta Materialia*. 2014;69: 314–325. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2014.02.002>
26. Чувильдеев В. Н., Нохрин А. В., Пирожникова О. Э., Грязнов М. Ю., Лопатин Ю. Г., Мышляев М. М., Копылов В. И. Анализ изменения диффузионных свойств неравновесных границ зерен при рекристаллизации и сверхпластической деформации субмикроструктурных металлов и сплавов. *Физика твердого тела*. 2017;59(8): 1561–1569. <https://doi.org/10.21883/FTT.2017.08.44759.420>
27. Чувильдеев В. Н. *Неравновесные границы зерен в металлах. Теория и приложения*. М.: Физматлит, 2004, 304 с.
28. Kim H. K. Activation energies for the grain growth of an AZ31 Mg alloy after equal channel angular pressing. *Journal of Materials Science*. 2004;39(23): 7107–7109. <https://doi.org/10.1023/B:JMSS.0000047560.93940.45>
29. *Физическое металловедение. Т. 3: Физико-механические свойства металлов и сплавов*. Под ред. Р. У. Кана и П. Хаазена: М.: Металлургия; 1987. 663 с.
30. McCaig A., Covey-Crump S. J., Ben Ismail W., Lloyd. G. Fast diffusion along mobile grain boundaries in calcite. *Contributions to Mineralogy and Petrology*. 2007;153: 159–175. <https://doi.org/10.1007/s00410-006-0138-8>
31. Tucker G. J., McDowell D. L. Non-equilibrium grain boundary structure and inelastic deformation using atomistic simulations. *International Journal of Plasticity*. 2011;27(6): 841–857. <https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2010.09.011>
32. Nazarov A. A., Murzaev R. T. Nonequilibrium grain boundaries and their relaxation under oscillating stresses in columnar nickel nanocrystals studied by molecular dynamics. *Computational Materials Science*. 2018;151: 204–213. <https://doi.org/10.1016/j.comatsci.2018.05.015>
33. Wang Yu., Fu R., Jing L., Sang D., Li Yi. Tensile behaviors of pure copper with different fraction of nonequilibrium grain boundaries. *Materials Science and Engineering: A*. 2018;724: 164–170. <https://doi.org/10.1016/j.msea.2018.03.086>
34. Chuvil'deev V. N., Kopylov V. I., Zeiger W. A theory of non-equilibrium grain boundaries and its applications to nano- and micro-crystalline materials processed by ECAP. *Annales de Chimie Science des Materiaux*. 2002;27(3): 55–64. [https://doi.org/10.1016/S0151-9107\(02\)80007-1](https://doi.org/10.1016/S0151-9107(02)80007-1)

Информация об авторе

Кульков Виктор Геннадьевич, д. ф.-м. н., доцент, профессор Волжского филиала Национального исследовательского университета «Московский энергетический институт» (Волжский, Российская Федерация).

<https://orcid.org/0000-0001-8449-026X>
vikulkov@yandex.ru

Поступила в редакцию 13.06.2022; одобрена после рецензирования 18.07.2022; принята к публикации 15.09.2022; опубликована онлайн 25.12.2022.