УДК 539.67

# ВНУТРЕННЕЕ ТРЕНИЕ, ОБУСЛОВЛЕННОЕ ЗЕРНОГРАНИЧНЫМ ПЕРЕРАСПРЕДЕЛЕНИЕМ ПРИМЕСИ В НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОМ МАТЕРИАЛЕ

 В.Г. Кульков

Филиал Московского Энергетического института (ТУ)

*Поступила в редакцию 25.07.05*

В условиях действия периодического внешнего напряжения в объеме нанокристалического образца на различно ориентированных в пространстве сегментах межзеренных границ возникают напряжения разряжения и сжатия. Это приводит к возникновению диффузионных потоков примесных атомов между смежными сегментами. Из решения диффузионной задачи с учетом зависимости ширины границы от концентрации примеси находится величина внутреннего трения.

Объемная доля атомов, принадлежащих зернограничной фазе, в нанокристаллических материалах очень высока и может достигать десятков процентов [1]. По этой причине релаксационные процессы, происходящие на межзеренных границах в таких материалах, имеют решающее значение в определении их макроскопических физических свойств. Для описания зернограничных процессов модельный нанокристаллический агрегат представим состоящим из зерен, имеющих форму простых многогранников. Плоские сегменты границ, ограниченные тройными стыками зерен, различно ориентированы в пространстве. Не рассматривая конкретных видов нагружения, будем считать, что в системе действует переменное внешнее напряжение $\sigma = \sigma_0 \exp(i\omega t - \varphi)$. На сегментах возникают нормальные и касательные компоненты напряжений, скачком изменяющиеся при переходе к смежным сегментам. В результате появления нормальных растягивающих и сжимающих компонент изменяется химический потенциал вакансий, что приводит к возникновению их потоков между сегментами. Для простоты полагаем, что сегменты имеют квадратную форму со стороной $L$. Перераспределение вакансий приводит к эффекту локальной подстройки напряжений [2, 3]. Рассматривая диффузионную задачу для вакансий и учитывая связь их концентрации с нормальной компонентой давления на сегменте, найдем распределение нормального напряжения в зависимости от координат и времени [4]:

$$\sigma_n(x,y,t) = \frac{\gamma\pi^2\sigma_0}{4\Sigma_0^{1/2}}\exp(i\omega t)\times \sum_{m,l}\frac{\exp(-i\varphi_{ml})\sin\frac{\pi m x}{L}\sin\frac{\pi l y}{L}}{ml\left(\left(m^2+l^2\right)^2+Z^2\right)^{1/2}},$$

$$\Sigma_0 = \left(\sum_{m,l}\frac{m^2+l^2}{m^2l^2\left(\left(m^2+l^2\right)^2+Z^2\right)}\right)^2 + \left(\sum_{m,l}\frac{Z}{m^2l^2\left(\left(m^2+l^2\right)^2+Z^2\right)}\right)^2, \quad (1)$$

$$Z = \frac{\omega L^2}{\pi^2 D},\ \operatorname{tg}\varphi_{ml} = \frac{\omega L^2}{D\pi^2\left(m^2+l^2\right)},\quad m,l = 1,3,5,\ldots$$

где $D$ – зернограничный коэффициент самодиффузии, $\gamma$ - геометрический коэффициент, учитывающий ориентацию сегментов.

Примесные атомы, содержащиеся в материале, вследствие эффектов сегрегации часто располагаются преимущественно по границам зерен. В условиях периодического нормального напряжения, действующего на наклонных сегментах границ, происходит перераспределение примесных атомов между ними, что приводит к появлению пика внутреннего трения. Соответствующая этому одномерная модель процесса предложена в [5]. Модифицируем эту модель для случая двумерной диффузии примеси по границам зерен. Уравнение бародиффузии для примеси в этих условиях имеет вид [6]:

$$\frac{\partial C'}{\partial t} = D'\nabla^2 C' - D_1 \nabla C' \nabla \sigma_n - D_1 C' \nabla^2 \sigma_n, \quad (2)$$

где $C'(x,y,t)$ – концентрация примесных атомов на границе, $D'$ – зернограничный коэффи-циент диффузии примеси,

$D_1 = D'\Omega/kT$ – коэффициент бародиффузии, $\Omega$ - атомный объем.

Представим концентрацию примеси на границе в виде суммы её равновесного значения и изменяющейся части:

$$C'(x,y,t) = C'_{0b} + C'_n(x,y,t).$$

В условиях малого внешнего напряжения

$$\sigma_0\Omega/kT << 1,$$

второе слагаемое мало в сравнении с первым, поэтому в (2) можно пренебречь вторым слагаемым справа, а в третьем слагаемом положить $C'(x,y,t) = C'_{0b}$. Решая измененное таким образом уравнение (2) с нулевыми граничными условиями для $C'_n$ на сегменте, а также воспользовавшись (1), получаем:

$$C'_n(x,y,t) = \frac{\pi^2 \gamma C'_{0b}\Omega\sigma_0}{4kT}\exp(i\omega t)\cdot \Sigma_0^{-1/2} \times$$

$$\times \sum_{m,n} \frac{(m^2+l^2)\sin\frac{\pi m x}{L}\sin\frac{\pi l y}{L}}{ml\sqrt{(m^2+l^2)^2 + Z'^2}\sqrt{(m^2+l^2)^2+Z^2}} \times \quad (3)$$

$$\times \exp(-i(\varphi_{ml} + \psi_{ml})),$$

$$Z' = \frac{\omega L^2}{\pi^2 D'}, \ \operatorname{tg}\psi_{ml} = \frac{\omega L^2}{\pi^2 D'(m^2+l^2)}. \quad (3)$$

Диффузионная ширина границы δ зависит от избыточной по сравнению с объёмом зерна концентрацией примеси в ней. Эта величина изменяется вместе с концентрацией раствора:

$$\Delta\delta/\delta = \lambda C'/n_0.$$

Здесь $\lambda = \left(n_0/a\right)\left(da/dC'\right)$ – размерный фактор, определяемый из концентрационной зависимости постоянной решетки $a$ раствора, $n_0 = \Omega^{-1}$ – количество атомов матрицы в единице объёма. Взяв от этого выражения производную по времени, с учетом (3) найдём выражение для скорости взаимного смещения зерен вдоль нормали к границе:

$$v_n = \left(\lambda\delta/\beta n_0\right)\left(\partial C'_n(x,y,t)/\partial t\right).$$

Внутреннее трение найдем обычным путем из выражения:

$$Q^{-1} = \Delta W/2\pi W,$$

где $W = \sigma_0{}^2 V/2G$ – максимальная упругая энергия в объеме $V$ зерна, $G$ – упругий модуль, $\Delta W$ – энергия, рассеянная за цикл колебаний:

$$\Delta W = \int_0^L\int_0^L\int_0^{2\pi/\omega} \operatorname{Re}(\sigma_n)\operatorname{Re}(v_n)\,dt\,dx\,dy.$$

С учетом приведенных выше выражений получим величину внутреннего трения в этом случае.

$$Q^{-1} = \frac{\pi^4 \beta\gamma^2 \lambda\delta\Omega C'_{0b} G}{64kTL}\Sigma_0^{-1} \times \quad (4)$$

$$\times \sum_{m,l} \frac{(m^2+l^2)Z'}{(ml)^2\left((m^2+l^2)^2 + Z'^2\right)\left((m^2+l^2)^2+Z^2\right)}.$$

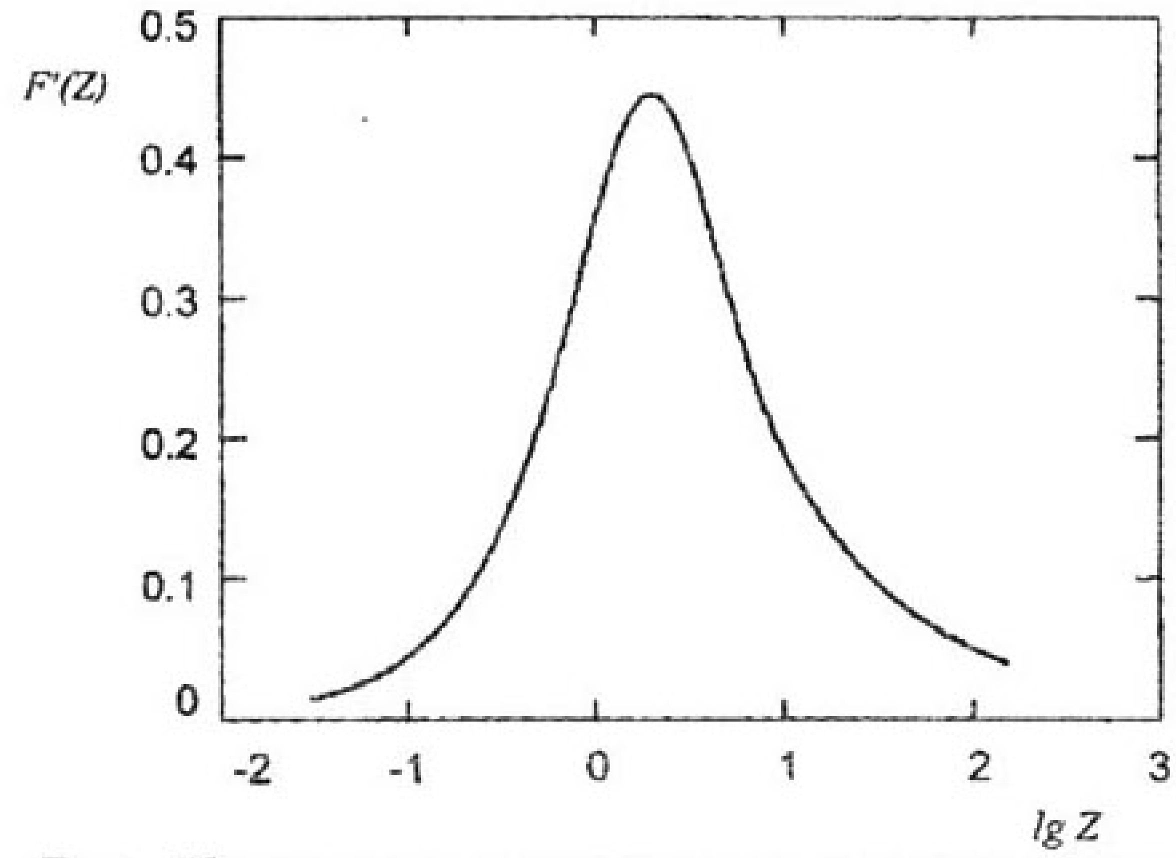


**Рис.** Частотная зависимость зернограничного примесного внутреннего трения.

Коэффициент β учитывает реальную геометрию зеренной структуры и выражает отношение площади сегментов границы к объему зерен. Выражение (4) описывает пик внутреннего трения, связанного с релаксацией зернограничного распределения примеси. На рисунке представлен результат расчета зависимости величины примесного внутреннего трения $F'(Z)$ (множители в (4), зависящие от $Z$) для случая $Z'=Z$. Для оценки величины пика используем типичные для нанокристаллических металлов значения параметров: $\delta/L=0{,}02$; $C_e'/n_0=C'_{0b}\Omega=0{,}01$; $G\Omega/kT_m=50$ [7]; $T/T_m=0{,}5$, где $T_m$ – температура плавления; $\lambda=0{,}7$ [8]. Подставляя эти значения в (4) получаем оценку $Q^{-1}\sim 4\cdot 10^{-2}$. Следует заметить, что здесь речь может идти только о верхней оценке, реальная величина, по-видимому, меньше из-за меньшей величины размерного фактора и модуля сдвига на границах зерен. Кроме того, возможны трудности экспериментального наблюдения подобных пиков вследствие очень высокого уровня фона внутреннего трения и низкой разрешимости пиков по этой причине.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Гусев А.И.* // УФН. 1998. Т. 168. № 1. С. 55-83.

2. *Кульков В.Г., Жихарева М.Г.* // Деформация и разрушение материалов. 2005. № 1. С. 46-48.

3. *Кульков В.Г.* // Конденсированные среды и межфазные границы. Т. 3. № 4. 2001. С. 373-374.

4. *Кульков В.Г.* // Вестник МЭИ. 2005. № 3. С. 120-123.

5. *Кульков В.Г.* // Письма в ЖТФ. 2005. Т. 31. № 8. С. 32-37.

6. *Бункин Н.Ф., Лобеев А.В., Ляхов Г.А.* // УФН. 1997. Т. 167. № 10. С. 1069-1085.

7. *Чувильдеев В.Н.* Неравновесные границы зерен в металлах. Теория и приложение. М.: Физматлит. 2004. 304 с.

8. Метод внутреннего трения в металловедческих исследованиях / Под ред. М.С. Блантера и Ю.В. Пигузова. М.: Металлургия. 1991. 248 с.