

УДК 539.21

**ВКЛАД ГРАНИЦ ЗЕРЕН С ФАСЕТИРОВАННОЙ СТРУКТУРОЙ  
ВО ВНУТРЕННЕЕ ТРЕНИЕ****Кульков В.Г.***Филиал НИУ «МЭИ», Волжский, e-mail: vikulkov@yandex.ru*

В работе описаны модели высокотемпературного фона внутреннего трения на границах зерен, имеющих фасетированную структуру. Рассмотрены два основных типа структур, различающиеся по размерности. На основе решения неоднородного уравнения диффузии в условиях действия переменного напряжения найдены скорость смещения зерен и величина фона внутреннего трения. Учен эффект подстройки напряжения при изменяющейся деформации. На температурно-частотной зависимости фона внутреннего трения выделяются два участка с различной эффективной энергией активации. Положение точки излома графика этой зависимости позволяет оценить средний размер фасеток. В спектре внутреннего трения имеются пики. Их возникновение обусловлено следующими двумя причинами. Это межзеренное проскальзывание в пределах фасеток и перераспределение примесных атомов между различно ориентированными фасетками. Приводятся выражения для зависимости внутреннего трения от температуры и частоты в этих двух случаях.

**Ключевые слова:** межзеренная граница, внутреннее трение, высокотемпературный фон, пик внутреннего трения

**CONTRIBUTION OF GRAIN BOUNDARIES WITH A FACETED STRUCTURE IN  
THE INTERNAL FRICTION****Kulkov V.G.***Branch of the Moscow power engineering institute, Volzhskiy, e-mail: vikulkov@yandex.ru*

The paper describes the models of the high-temperature internal friction background at grain boundaries that have a faceted structure. Two basic types of structures that differ in dimension are considered. On the basis of the inhomogeneous diffusion equation solution under the conditions of the action of variable stress, the speed of grain displacement and the magnitude of the internal friction background are found. The effect of stress adjustment under varying deformation is taken into account. On the temperature-frequency dependence of the internal friction background, two regions with different effective activation energies are distinguished. The position of the fracture point of the graph of this dependence makes it possible to estimate the average facet size. The spectrum of internal friction has peaks. Their occurrence is due to the following two reasons. This interspersed slip within the facets and redistribution of impurity atoms between differently oriented facets. Expressions are given for the dependence of internal friction on temperature and frequency in these two cases.

**Keywords:** grain boundary, internal friction, high-temperature background, peak of internal friction

Изучение механизмов внутреннего трения в твердых телах имеет, по меньшей мере, два аспекта практического использования. Во-первых, метод внутреннего трения является очень информативным и тонким методом исследования структуры и свойств конденсированного состояния. Например, этим методом можно определять коэффициенты диффузии примеси в кристаллах в условиях низких и комнатных температур, когда получение этих величин из диффузионного опыта затруднительно и требует высокой точности измерения малых концентраций, а также значительной продолжительности проведения эксперимента. Метод внутреннего трения позволяет определять основные параметры дефектной структуры кристаллов, распределения структурных дефектов по геометрическим признакам, параметры равновесного и неравновесного фазового состояния и т.д. В некоторых случаях этот метод является единственным для измерения отдельных параметров. Во-вторых, понимание механизмов процесса позволяет прогнозировать физические свойства но-

вых материалов и проектировать их состав и структуру с целью получения высоких демпфирующих свойств.

Известно, что границы зерен являются важнейшим типом дефектов в поликристаллических материалах. Их состояние и физические процессы с их участием в значительной степени определяют поведение материала в условиях внешних воздействий полей различной природы. При аналитическом рассмотрении проскальзывания по границам и обусловленного им внутреннего трения сами границы обычно принимаются плоскими. Реальные границы неизбежно содержат различные отклонения от плоской конфигурации. В общем случае при разориентации зерен, близкой к специальной, границы имеют фасетированную структуру. Описание кинетики фазового перехода фасетирования межзеренных границ дано в работах [1 – 3]. Подобная структура поверхностей раздела в металлах приводит к ряду особенностей протекания релаксационных процессов с их участием [4]. Возросший интерес к изучению механизмов

релаксационных процессов в твердом теле актуален не только в связи с развитием физики конденсированного состояния, но также и рядом приложений этой науки к техническим проблемам [5].

Целью настоящей работы является описание механизмов зернограничного внутреннего трения при нагружении материала периодической внешней силой.

### Модели высокотемпературного фона

Примем модель, в которой граница имеет структуру из симметрично чередующихся плоских фасеток, расположенных под углами  $\pm\alpha$  к некоей воображаемой усреднённой плоскости, вдоль которой действует переменное сдвиговое напряжение  $\sigma_0 \exp(i(\omega t - \varphi))$ , где  $\sigma_0$  – амплитуда. Поверхность границы гофрирована, с размером фасеток в одном направлении порядка размера зерна. Такая структура является одномерно фасетированной. Под действием напряжения сегменты поочередно становятся источниками и стоками вакансий в зависимости от времени. Можно считать, что в пределах каждого сегмента действует периодический источник  $A \exp(i\omega t)$ , фаза которого в общем случае не совпадает с напряжением.

Исходя из симметрии задачи, достаточно рассмотреть один такой сегмент-фасетку ширины  $L$ , наклонённый под углом  $\alpha$  к направлению внешнего сдвигового напряжения. Координатные оси выберем в плоскости фрагмента так, что ось  $x$  направлена вдоль отрезка направляющей ломаной линии, а  $y$  – вдоль образующей. Задача диффузии вакансий является одномерной, поскольку мы пренебрегаем потоком их в объём зёрен по сравнению с граничными потоками по причине малости отношения коэффициентов объемной и граничной диффузии.

Для избыточной концентрации вакансий на сегменте  $C_b(x, t)$  можно записать неоднородное уравнение диффузии:

$$\frac{\partial C_b(x, t)}{\partial t} = D_b \frac{\partial^2 C_b(x, t)}{\partial x^2} + A \exp(i\omega t). \quad (1)$$

Здесь  $D_b$  – коэффициент зернограничной диффузии вакансий. Симметрия диктует выполнение граничных условий

$$C_b(0, t) = C_b(L, t) = 0.$$

Решаем задачу методом Фурье. С этой целью представляем постоянную  $A$  в (1) в виде ряда по синусам. Решение (1) имеет вид

$$C_b(x, t) = \exp(i\omega t) \sum_m \frac{4AL^2 \exp(-i\varphi_m) \sin \frac{\pi mx}{L}}{\pi^3 D_b m \sqrt{m^4 + Z^2}},$$

$$m = 1, 3, 5 \dots \quad (2)$$

Здесь введены обозначения:

$$Z = \frac{\omega L^2}{\pi^2 D_b},$$

$$\operatorname{tg} \varphi_m = \frac{\omega L^2}{D_b \pi^2 m^2},$$

$$\sin \varphi_m = \frac{\omega}{\sqrt{D_b^2 \left(\frac{\pi m}{L}\right)^4 + \omega^2}},$$

$$\cos \varphi_m = \frac{D_b \pi^2 m^2}{L^2 \sqrt{D_b^2 \left(\frac{\pi m}{L}\right)^4 + \omega^2}}.$$

При невысоких значениях внешнего напряжения нормальное напряжение  $\sigma_n$  на сегменте линейно связано с избыточной концентрацией вакансий на нём:

$$\sigma_n(x, t) = \frac{C_b(x, t) k T}{C_{0b} \Omega},$$

где  $\Omega$  – атомный объём. С учетом (2) это дает [6]:

$$\sigma_n(x, t) = \exp(i\omega t) \frac{4AL^2 k T}{\pi^3 D_b C_{0b} \Omega} \times \sum_m \frac{\exp(-i\varphi_m) \sin \left(\frac{\pi mx}{L}\right)}{m \sqrt{m^4 + Z^2}}. \quad (3)$$

Скорость движения зёрен определяется плотностью потока  $j$  вакансий из сегмента через обе его границы:

$$v = \frac{j \delta \Omega}{L \sin \alpha}, \quad (4)$$

где  $\delta$  – диффузионная толщина границы. Находя поток и подставляя его в (4), получим

$$v = \frac{A \delta \Omega}{\sin \alpha} \exp(i\omega t) - \frac{i \omega \sigma_0 C_{0b} \delta \Omega^2 \cos \alpha}{k T} \exp(i\omega t - \varphi). \quad (5)$$

Внутреннее трение, обусловленное вкладом одного сегмента длиной  $y$ , равно

$$Q_1^{-1} = \frac{\Delta W_1}{2\pi W}. \quad (6)$$

Здесь в числителе стоит энергия, рассеянная за цикл

$$\Delta W_1 = y \int_0^L \int_0^{T_0} \operatorname{Re}(\sigma(x, t)) \operatorname{Re}(v(t)) dx dt$$

на площади сегмента. В знаменателе величина

$$W = \frac{V_0 \sigma_0^2}{2G},$$

где  $G$  – модуль сдвига, равна упругой энергии зерна. Величину  $A$  найдем, учитывая т.н. эффект подстройки напряжений [7]. С этой целью приравняем величину сил внешнего и внутреннего напряжений на сегменте

$$\left| \sigma_0 L \sin 2\alpha \exp(i(\omega t - \varphi)) \right| = \left| \int_0^L \sigma_n(x, t) dx \right|.$$

За объём зерна примем

$$V_0 = \frac{4}{3} \pi R^3,$$

где  $R$  – средний его размер. Учитывая предыдущие формулы, найдем величину внутреннего трения [8]:

$$v = \frac{2D_b C'_b \gamma \delta \Omega (1+i)}{d} \operatorname{ctg}(\gamma(1+i)l) \exp(-i\omega t), \quad (8)$$

$$\sigma(t) = \frac{C'_b d k T}{2C_{ob} \Omega l} (1 + \lambda^{-1} \operatorname{ctg}(\gamma l)) \exp(-i\omega t). \quad (9)$$

Здесь

$$\gamma = \sqrt{\frac{\omega}{2D_b}},$$

$C'_b$  – константа, определяющая амплитуду концентрации на ступеньке,

$$\lambda = d^2 k T / 4D_b \delta \Omega^2 C_{ob} \eta \gamma l,$$

$\eta$  – эффективная вязкость границы.

Повторяя выкладки, подобные приведенным ранее, после преобразований получаем [10] выражение для величины внутреннего трения:

$$Q^{-1} = \frac{2\theta G l \cos(\varphi_2 - \varphi_1) \sqrt{F(2\gamma l)}}{R^2 \eta \omega} \left[ (\sin(2\gamma l) + \lambda F(\gamma l))^2 + \right.$$

$$\left. \left[ \left( \frac{1}{Z} \sum_m \frac{1}{m^4 + Z^2} \right) \times \left( \left( \sum_m \frac{1}{m^4 + Z^2} \right)^2 + \left( \sum_m \frac{Z}{m^2 (m^4 + Z^2)} \right)^2 \right)^{-1} \right] \right]. \quad (7)$$

Геометрический множитель  $k$  учитывает долю принадлежности границы зерну и его реальную форму.

Размеры фасеток на границах зерен могут значительно различаться. Интересен случай бимодального их распределения. Если один вид фасеток имеет малый размер относительно другого, и угол взаимного наклона их близок к прямому, то такие границы называют ступенчатыми. Проскальзывание по ним имеет диффузионный характер [9]. Рассмотрим границу, состоящую из равноотстоящих друг от друга ступенек высоты  $d$  чередующихся знаков. Между ними расположены протяженные плоские участки длины  $2l$ . Переменное сдвиговое напряжение, действующее на них, приводит к тому, что на ступеньках противоположного знака возникают растягивающие и сжимающие напряжения. Это влечет изменение химического потенциала вакансий и их диффузии между ступеньками. Решение диффузионной задачи, подобной описанной выше с периодическими источниками на ступеньках, приводит к выражению для скорости и напряжения:

$$+ (\operatorname{sh}(2\gamma l) + \lambda F(\gamma l))^2 \Big]^{-\frac{1}{2}}. \quad (10)$$

$$\operatorname{tg}\varphi_1 = \frac{\sin 2l\gamma - \operatorname{sh} 2l\gamma}{\sin 2l\gamma + \operatorname{sh} 2l\gamma + 2\lambda F(\gamma l)}, \operatorname{tg}\varphi_2 = \frac{\sin 2l\gamma - \operatorname{sh} 2l\gamma}{\sin 2l\gamma + \operatorname{sh} 2l\gamma}, F(z) = \sin^2 z + \operatorname{sh}^2 z.$$

Избыточные вакансии в объеме зерна имеют тенденцию оседать на границах, где они при определенных условиях могут образовать поры. В [11] предложена двумерная модель внутреннего трения на границах, имеющих параллельные ступеньки и цилиндрические поры диаметра, равного размеру ступенек. Симметрия граничных условий теряется, поэтому граница в условиях действия переменного сдвигового напряжения является источником и стоком вакансий для объемной диффузии. В двух предельных случаях внутреннее трение имеет вид:

$$Q^{-1} = \frac{6\kappa G D_2 l_1^2 C_0 \Omega^2}{d^2 k T R l_2 \omega}, \quad (11)$$

$$Q^{-1} = \frac{6\sqrt{2}\kappa G l_1 C_0 \Omega^2 \sqrt{D_1 D_2}}{d^2 k T R \omega}. \quad (12)$$

Выражение (11) описывает область низких частот или высоких температур  $\omega l_1^2 D_1^{-1} \ll 1$ , а (12) – обратную ситуацию.  $D_1$  и  $D_2$  – зернограничный и объемный коэффициенты диффузии,  $l_1$  – расстояние между ступенькой и порой,  $l_2$  – расстояние от границы до стоков вакансий в объеме.

На основе приведенной модели можно описать высокотемпературный фон внутреннего трения в двумерно фасетированных границах. Необходимо учесть диффузионные потоки в двух независимых направлениях в границе. Если пренебречь объемными диффузионными потоками, то можно ограничиться рассмотрением картины диффузии по развертке граничной поверхности, которая имеет различный вид в соответствующих частных случаях. Решение диффузионной задачи в общем случае приводит [4, 12] к выражению:

$$Q_0^{-1} = \frac{\pi^4 p \gamma^2 C_{0b} \Omega^2 \delta E}{32 k T R} \times \frac{1}{Z \Sigma_0} \sum_{m,n} \frac{m^2 + n^2}{(mn)^2 \left( (m^2 + n^2)^2 + Z^2 \right)}, \quad (13)$$

где  $m$  и  $n$  принимают значения 1, 3, 5, ..., а коэффициент  $p$  учитывает геометрию границы.

### Пики внутреннего трения

В то время как проскальзывание по границе в целом имеет диффузионный характер вследствие наличия на фасетках нормальных составляющих напряжений, проскальзывание по самим фасеткам под действием касательных напряжений имеет консервативный характер. Такое проскальзывание ограничивается линиями сопряжения фасеток, а в центральной их области имеет наибольший размах. В приближении квазиоднородного сдвига, ограниченного линейными дефектами дислокационного типа в линиях, ограничивающих фасетки, можно найти величину внутреннего трения. Его частотная зависимость имеет характер дебаевского пика. Подробное рассмотрение вопроса [12 – 14] приводит к выражению для частотной зависимости величины затухания колебаний

$$Q^{-1} = \frac{p\pi(1-\nu)LE}{RG} \frac{\omega\tau}{1+(\omega\tau)^2},$$

$$\tau = \frac{(1-\nu)\chi^2 S_0^2 n' L}{4GD_b^2 kT}, \quad (14)$$

Здесь  $R$  – размер зерна,  $\nu$  – коэффициент Пуассона,  $G$  – модуль сдвига,  $L$  – ширина фасетки,  $n'$  и  $D_b'$  – концентрация и коэффициент диффузии примеси в границе.

Полученное выражение хорошо согласуется с экспериментально полученным спектром в ультрамелкозернистой меди, приготовленной методом равноканального углового прессования с последующей прокаткой [15].

Границы зерен в реальных материалах очень часто содержат различные примеси. В условиях переменного внешнего напряжения примесные атомы периодически диффузионным путем перераспределяются между различно ориентированными фасетками. Эффективная толщина границ зависит от концентрации в них примесных атомов. Это приводит к появлению специфического пика внутреннего трения. Аналогичный эффект возникает в нанокристаллическом материале [14, 16, 17] при перераспределении примеси между разными гранями кристаллитов. На основе решения уравнения бародиффузии и использования результатов, приведенных выше, найдено выражение для пика внутреннего трения в этом случае.

$$Q^{-1} = \frac{\pi^3 \lambda G \Omega^2 \delta C'_e}{4\sqrt{2} R k T} \times \left( \left( \sum_m \frac{1}{m^4 + Z^2} \right)^2 + \left( \sum_m \frac{Z}{m^2 (m^4 + Z^2)} \right)^2 \right)^{-1} \sum_m \frac{Z'}{(m^4 + Z'^2)(m^4 + Z^2)}. \quad (15)$$

Здесь

$$Z = \frac{\omega R^2}{\pi^2 D_b}, \quad Z' = \frac{\omega R^2}{\pi^2 D'_b},$$

$D'_b$  – зернограничный коэффициент диффузии примеси,  $\lambda = \left( \frac{n_0}{a} \right) \left( \frac{\partial a}{\partial C'_b} \right)$  – размерный фактор, определяемый из концентрационной зависимости постоянной решетки раствора;  $n_0 = \Omega^{-1}$  – количество атомов матрицы в единице объема. Концентрация  $C'_b$  определяется как количество примесных атомов на единицу объема материала границы.

**Обсуждение результатов**

На рис. 1 приведен график зависимости  $\ln Q^{-1}T$  от  $T^{-1}$  согласно выражению (7). Он имеет два прямолинейных участка, по-разному наклоненных к оси абсцисс. Это соответствует различным энергиям активации процесса.

Такой вид зависимости внутреннего трения можно понять из соображений оценочного характера. Поток вакансий  $J$  из сегмента определяется градиентом их концентрации, который пропорционален

$$J \sim D_b C_b / l \sim D_b \sigma_0 / l T,$$

где  $l$  – диффузионная длина вакансий. Тогда потери  $\Delta W$  за период колебаний  $T_0$  пропорциональны

$$\Delta W \sim J \sigma_0 T_0 \sim D_b T_0 \sigma_0^2 / l T,$$

упругая энергия  $W \sim \sigma_0^2$ . Следовательно,  $Q^{-1} \sim D_b T_0 / l T$ . При низких частотах или вы-

соких температурах диффузия успевает пройти на всем сегменте. поэтому за диффузионную длину можно принять его размер  $L$ , который от периода колебаний не зависит, тогда  $Q^{-1}T \sim D_b T_0 \sim D_b / \omega \sim Z^{-1}$ . В области высоких частот или низких температур основную роль в диффузионных процессах

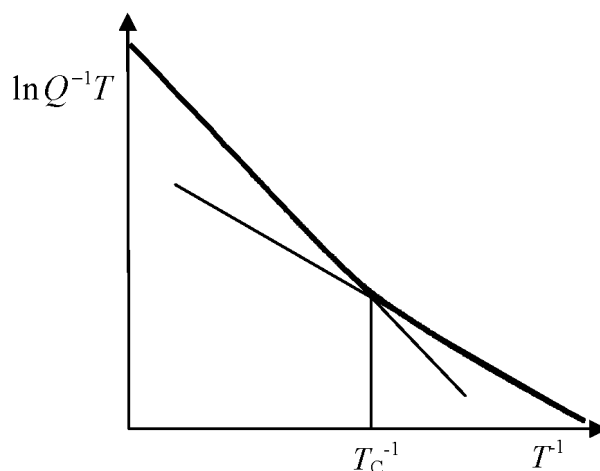


Рис. 1. Температурная зависимость фона ВТ

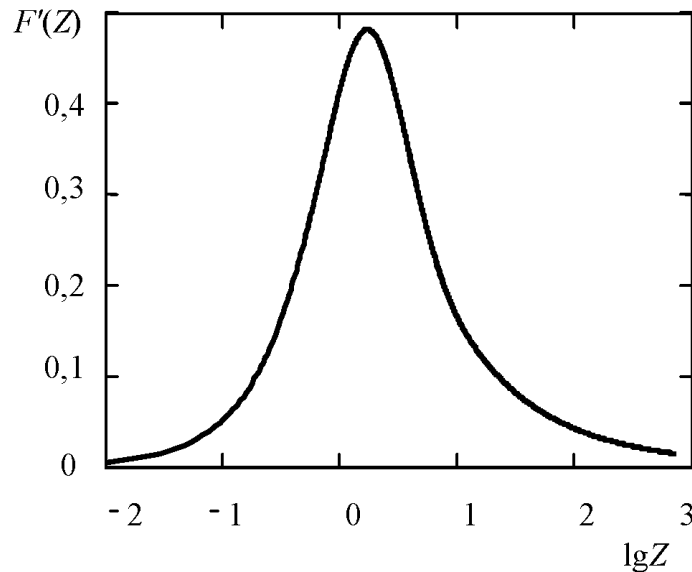


Рис. 2. Пик, связанный с перераспределением примеси

играют области вблизи границ сегмента протяженностью

$$l \sim \sqrt{2D_b T_0}.$$

В этом случае

$$Q^{-1}T \sim \sqrt{D_b T_0} \sim \sqrt{D_b/\omega} \sim T^{-1/2}.$$

Переход от одного участка к другому с разными наклонами не является резким, а происходит в некотором температурном интервале, ширина которого связана с разбросом в размерах фасеток. Оценка их среднего размера дает выражение

$$\langle L \rangle \sim \sqrt{2D_b T_c}.$$

Подобная температурно-частотная зависимость характерна для фона внутреннего трения двумерно фасетированных, а также ступенчатых границ.

Температурно-частотная зависимость внутреннего трения  $F(Z)$  (множителя в (15), зависящего от  $Z$ , пропорционального частоте) для случая  $Z' = Z$  представлена на рис. 2. В отличие от дебаевского пика изображенный здесь пик несколько несимметричен.

## Заключение

В работе рассмотрены основные модели внутреннего трения на границах зерен, имеющих одномерно и двумерно фасетированную структуру. Высокотемпературный фон связан с наличием на фасетках нормальных напряжений и имеет диффузионную природу. На его температурной зависимости имеются области с разными эффективными энергиями активации. Существование пиков внутреннего трения связано с зернограничным проскальзыванием вдоль фасеток или с перераспределением между ними примесных атомов.

## Список литературы

1. Кульков В.Г. Кинетика фасетирования несоизмерной межкуристаллитной границы наклона // Неорганические материалы. – 2005. – Т. 41, № 7. – С. 892–896.
2. Кульков В.Г. Кинетика двумерного фасетирования межкуристаллитных границ // Неорганические материалы. – 2005. – Т. 41, № 11. – С. 1405–1408.
3. Кульков В.Г., Васильева Ю.В. Математическая модель процесса фасетирования межзеренных границ // Альтернативная энергетика и экология. – № 14. – 2013. – С. 40–44.
4. Кульков В.Г. Релаксационные процессы на границах зерен в металлах: монография. – Волжский: Филиал МЭИ в г. Волжском, 2015. – 162 с.

5. Кульков В.Г. Физика конденсированного состояния в электротехническом материаловедении. – СПб.: Изд. «Лань», 2017. – 272 с.
6. Кульков В.Г. Внутреннее трение на межзеренных границах с одномерной фасетированной структурой // Известия ВУЗов. Физика. – 2005. – Т. 48, № 11. – С. 39–43.
7. Кульков В.Г., Жихарева М.Г. Проскальзывание по фасетированным границам зерен с учетом подстройки напряжения // Деформация и разрушение материалов. – 2005. – № 1. – С. 46–48.
8. Кульков В.Г. Внутреннее трение в поликристалле с фасетированными границами // Вестник МЭИ. – 2005. – № 3. – С. 120–123.
9. Кульков В.Г. Межзеренное скольжение по границе с уступами // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 2005. – № 8. – С. 84–87.
10. Кульков В.Г. Внутреннее трение на границах зерен, содержащих протяженные изломы // Вестник Воронежского ГТУ. Сер. Материаловедение. – 2005. – Вып. 1.17. – С. 54–57.
11. Кульков В.Г., Васильева Ю.В. Зернограничное внутреннее трение на ступенчатых границах с микронесплошностями // Перспективные материалы. – 2009. – № 7. – С. 171–175.
12. Кульков В.Г. Спектр внутреннего трения в поликристаллических материалах с фасетированными границами // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2005. – Т. 2, № 1. – С. 70–72.
13. Кульков В.Г. Внутреннее трение на фасетированных границах зерен с примесями // Известия ВУЗов. Физика. – 2005. – Т. 48, № 4. – С. 93–94.
14. Кульков В.Г. Диффузионная модель внутреннего трения в нанокристаллическом материале // Журнал технической физики. – 2007. – Т. 77, № 3. – С. 43–48.
15. Дешевых В.В., Кульков В.Г., Коротков Л.Н., Степанов Н.Д. Низкочастотное внутреннее трение в ультрамелкозернистой меди // Вестник Тамбовского университета. Серия: Естественные и технические науки. – 2013. – Т. 18, вып. 4, ч. 2. – С. 1885–1886.
16. Кульков В.Г. Внутреннее трение, обусловленное зернограничным перераспределением примеси в нанокристаллическом материале // Конденсированные среды и межфазные границы. – 2005. – Т. 7, № 4. – С. 406–408.
17. Кульков В.Г. Влияние динамического перераспределения примеси на зернограничное внутреннее трение в нанокристаллических материалах // Письма в Журнал технической физики. – 2005. – Т. 31, № 8. – С. 32–37.