

05

Влияние динамического перераспределения примеси на зернограничное внутреннее трение в нанокристаллических материалах

© В.Г. Кульков

Филиал Московского энергетического института (ТУ), Волжский
E-mail: vfmei@vlz.ru

Поступило в Редакцию 18 ноября 2004 г.

Рассматривается релаксационный процесс перераспределения примесных атомов вдоль границ нанокристаллических зерен под действием переменной внешней нагрузки. Из решения бародиффузионного уравнения находится частотный спектр внутреннего трения, имеющий форму пика. Приводится оценка его высоты.

Особые свойства нанокристаллических материалов с точки зрения механической спектроскопии заключаются в значительном повышении фона внутреннего трения в них по сравнению с обычным поликристаллическим состоянием [1]. Это обусловлено тем, что большая относительная доля атомов материала принадлежит зернограничной фазе. Механизмы затухания в них связаны с особенностями зернограничного проскальзывания, диффузионной ползучести и ротационной деформации. Наномасштабный размер зерен может приводить к заметному усилению эффектов, которые в поликристаллическом состоянии с крупными зернами настолько слабы, что практически не проявляются.

Рассмотрим вклад диффузионных перескоков атомов примеси, сегрегированной на межзеренных границах нанокристаллического материала, во внутреннее трение. Модельную структуру материала представим состоящей из плотно прилегающих друг к другу периодически расположенных кубических зерен с размером ребра R . Ось x_0 совместим с диагональю грани куба, а z направим вдоль ребра, нормального к ней (рис. 1). Подобные упрощенные модели структуры используют при рассмотрении различных свойств нанокристаллических материалов [2,3]. Пусть вдоль оси x_0 в плоскости x_0z в системе действует

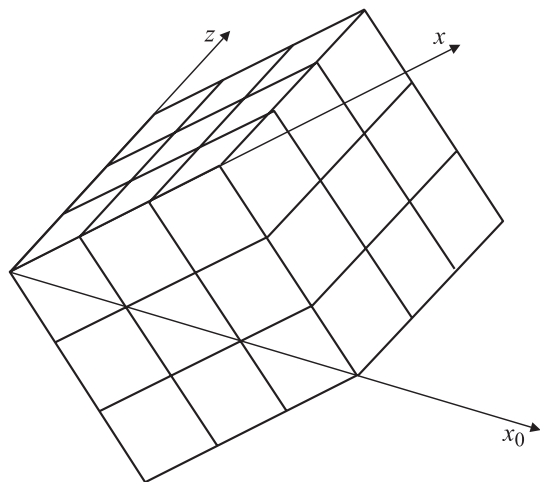


Рис. 1. Модельное представление микроструктуры и выбор осей.

переменное сдвиговое напряжение $\sigma(t) = \sigma_0 \exp(i(\omega t - \varphi))$. На гранях зерен, расположенных под углами $\pm\pi/4$ к оси x_0 , возникают нормальные сжимающие компоненты напряжений $\sigma_n(t) = \pm\sigma(t)$. В системе нарушается равновесие, что вызывает диффузионные потоки вакансий между соседними участками границ. Пренебрегаем здесь диффузией в объем зерна, а также и зернограничной диффузией вдоль граней, нормальных к оси z . Такое приближение допустимо, например, если реальные зерна имеют вытянутую форму вдоль направления z , или вдоль него действует постоянное сжимающее напряжение, экспоненциально уменьшающее коэффициент зернограничной диффузии [4], или соответствующие границы зерен являются специальными. С учетом однородности вдоль z диффузионная задача для одной такой наклонной границы является одномерной по x .

В условиях действия гармонической внешней нагрузки уравнение для избыточной (по сравнению с равновесной) концентрации вакансий C на сегменте имеет вид

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

где D_b — зернограничный коэффициент диффузии вакансий, A — размерный коэффициент. Второе слагаемое справа в (1) представляет

периодически действующий источник вакансий. Фаза его отличается от фазы напряжения на величину φ . Решение такой диффузионной задачи с нулевыми граничными условиями, определяемыми симметрией, приведено в [5]. При невысоких значениях напряжения, когда $\sigma_n \Omega / kT \ll 1$, где Ω — атомный объем, связь избыточной концентрации вакансий с нормальным напряжением на сегменте линейная. Это позволяет найти распределение нормального напряжения на сегменте:

$$\sigma_n(x, t) = \frac{\pi \sigma_0}{2} \left(\sum_m \frac{\sin \frac{\pi m x}{R}}{m^4 + Z^2} \left(m \cos(\omega t) + \frac{Z}{m} \sin(\omega t) \right) \right) \times \left(\left(\sum_m \frac{1}{m^4 + Z^2} \right)^2 + \left(\sum_m \frac{Z}{m^2(m^4 + Z^2)} \right)^2 \right)^{-1/2}. \quad (2)$$

Здесь введены обозначения:

$$Z = \frac{\omega R^2}{\pi^2 D_b}, \quad \operatorname{tg} \varphi_m = \frac{\omega R^2}{D_b \pi^2 m^2}, \quad m = 1, 3, 5, \dots$$

Примесные атомы будут перераспределяться в условиях периодического нормального напряжения (2), действующего на наклонных сегментах границ. Уравнение бародиффузии для них имеет вид [6]:

$$\frac{\partial C'(x, t)}{\partial t} = D' \frac{\partial^2 C'(x, t)}{\partial x^2} - D_1 \frac{\partial \sigma_n(x, t)}{\partial x} \frac{\partial C'(x, t)}{\partial x} - D_1 \frac{\partial^2 \sigma_n(x, t)}{\partial^2 x} C'(x, t). \quad (3)$$

Здесь $C'(x, t)$ — концентрация примесных атомов на границе, D' — зернограничный коэффициент диффузии примеси, $D_1 = D' \Omega / kT$ — коэффициент бародиффузии, Ω — парциальный объем или объем, приходящийся на один атом. Представим концентрацию примеси в виде суммы ее равновесного значения и изменяющейся части: $C'(x, t) = C'_e + C'_n(x, t)$. В условиях малого внешнего напряжения с критерием, приведенным выше, второе слагаемое мало в сравнении с первым, поэтому в (3) можно пренебречь вторым слагаемым справа, а в третьем слагаемом положить $C'(x, t) = C'_e$. Решая измененное таким

образом уравнение (3) с нулевыми граничными условиями для $C'_n(x, t)$ на сегменте, получаем:

$$C'_n(x, t) = \frac{C'_e R^2 \Omega \sigma_0 \omega}{2\pi D_b k T} \sum_m \left[\frac{m}{\sqrt{m^4 + Z'^2} \sqrt{m^4 + Z^2}} \right. \\ \times \left(\left(\sum_m \frac{1}{m^4 + Z^2} \right)^2 + \left(\sum_m \frac{Z}{m^2(m^4 + Z^2)} \right)^2 \right)^{-1/2} \\ \left. \times \exp(i(\omega t - \varphi_m - \psi_m)) \sin \frac{\pi m x}{R} \right]; \quad Z' = \frac{\omega R^2}{\pi D'}. \quad (4)$$

Диффузионная ширина границы зависит от избыточной по сравнению с объемом зерна концентрации примеси в ней. Эта величина изменяется вместе с концентрацией раствора $\Delta\delta/\delta = \lambda C'_n/n_0$. Здесь $\lambda = (n_0/a)(\partial a/\partial C')$ — размерный фактор, определяемый из концентрационной зависимости постоянной решетки раствора, $n_0 = \Omega^{-1}$ — количество атомов матрицы в единице объема. Концентрация C' определяется как количество примесных атомов на единицу объема. Взяв от этого выражения производную по времени, с учетом (4) найдем выражение для скорости взаимного смещения зерен в направлении x : $v = (\lambda\delta/3\sqrt{2}n_0)(\partial C'_n(x, t)/\partial t)$. Потери энергии на одной грани найдем из выражения

$$\Delta W_1 = R \int_0^R \int_0^{2\pi/\omega} \operatorname{Re}(\sigma(t)) \operatorname{Re}(v(x, t)) dx dt. \quad (5)$$

Максимальная упругая энергия, запасенная в объеме R^3 зерна, равна $W = R^3 \sigma_0^2/2G$, где G — модуль сдвига. Внутреннее трение с учетом вклада каждой грани, приходящейся на одно зерно, равно $Q_1^{-1} = \Delta W_1/2\pi W$, что дает:

$$Q^{-1} = \frac{\pi^3 \lambda G \Omega^2 \delta C'_e}{4\sqrt{2} R k T} \left(\left(\sum_m \frac{1}{m^4 + Z^2} \right)^2 + \left(\sum_m \frac{Z}{m^2(m^4 + Z^2)} \right)^2 \right)^{-1} \sum_m \frac{Z'}{(m^4 + Z'^2)(m^4 + Z^2)}. \quad (6)$$

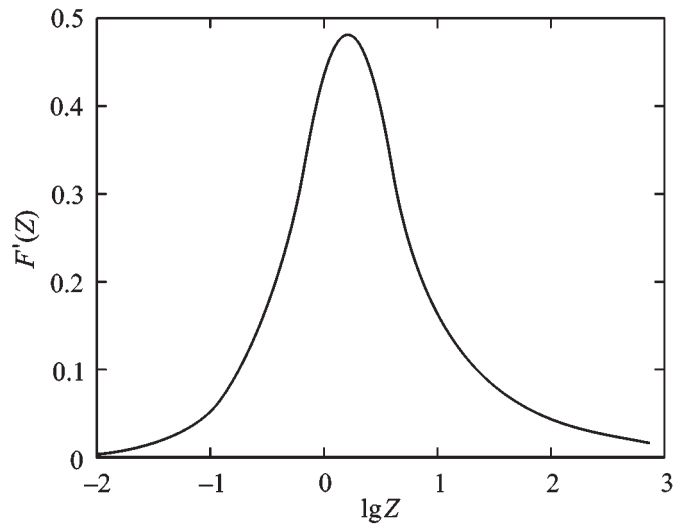


Рис. 2. Частотная зависимость внутреннего трения.

Выражение (6) описывает только релаксацию зернограничного распределения примеси без учета фона. Частотная зависимость примесного внутреннего трения $F(Z)$ (множители в (6), зависящие от Z , пропорционального частоте) в случае $Z' = Z$ представлена на рис. 2. Для оценки величины пика используем типичные для нанокристаллических металлов значения параметров: $\delta/R = 0.02$; $C'_e/n_0 = C'_e\Omega = 0.01$; $G\Omega/kT_m = 50$ [4]; $T/T_m = 0.5$; $\lambda = 0.7$ [7]. Подставляя эти значения в (6), 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 фона внутреннего трения [1]. Механизм возникновения пика подобен известной релаксации Горского [8], возникающей вследствие диффузии примесных атомов в неоднородно растянутом образце. Различие состоит в том, что в случае релаксации Горского диффузия происходит во всем объеме образца на расстояния порядка его размеров. В предлагаемой здесь модели в диффузионные процессы вовлекается лишь зернограничная

область, а диффузионная длина порядка размера зерен. Последнее обстоятельство приводит к значительно меньшему времени релаксации процесса.

Список литературы

- [1] *Гусев А.И.* // УФН. 1998. Т. 168. № 1. С. 55–83.
- [2] *Гуткин М.Ю., Овидько И.А.* // Успехи механики. 2003. № 1. С. 68–125.
- [3] *Wang J., Wolf D., Phillpot S.R., Gleiter H.* // Nanostr. Mater. 1995. V. 6. N 5–8. P. 747–750.
- [4] *Чувильдеев В.Н.* Неравновесные границы зерен в металлах. Теория и приложение. М.: Физматлит, 2004. 304 с.
- [5] *Кульков В.Г.* // XXIV Российская школа по проблемам науки и технологий. Краткие сообщения. Екатеринбург: УрО РАН, 2004. С. 58–60.
- [6] *Путилин В.А., Камашев А.В.* // Письма в ЖТФ. 1997. Т. 23. В. 5. С. 84–87.
- [7] *Метод внутреннего трения в металловедческих исследованиях* / Под ред. М.С. Блантера и Ю.В. Пигузова. М.: Металлургия, 1991. 248 с.
- [8] *Новик А., Берри Б.* Релаксационные явления в кристаллах. М.: Атомиздат, 1975. 472 с.