

05.1

© 1992

МЕЖКРИСТАЛЛИТНОЕ СКОЛЬЖЕНИЕ ВДОЛЬ ГРАНИЦ,
СОДЕРЖАЩИХ ПРИМЕСИ

Б.М. Д а р и н с к и й, В.Г. К у л ь к о в

Известно [1], что введение примесей в поликристаллический материал приводит к уменьшению скорости его пластического течения. Один из механизмов этого явления связан с замедлением процессов межзеренного проскальзывания вдоль границ.

Будем рассматривать границу, образованную контактом плотноупакованных кристаллографических плоскостей соседних зерен. Для таких границ характерны небольшие (в пределах одного межатомного расстояния) смещения атомов в процессе релаксации структуры границы после сопряжения зерен. Считаем, что угол разворота имеет произвольную величину, отличную, однако, от величин, соответствующих специальным разориентациям. Примером такой границы может служить поверхность, образованная сопряжением развернутых плоскостей (100) ОЦК решетки. Граничную плоскость каждого из зерен перед их сопряжением можно представить в виде периодического потенциального поля. Обозначим \vec{r} -вектор, соединяющий центры двух каких-либо близлежащих ям периодического рельефа, принадлежащих разным зернам без учета релаксации и назовем его параметром несоответствия. Если взять одну так называемую приведенную ячейку площади S , принадлежащую периодическому рельефу одного из зерен, и в ней расположить все \vec{r} из ее центра, то очевидно, что в общем случае концы векторов \vec{r} будут равномерно распределены по площади этой ячейки. После соединения зерен происходит релаксация структуры границы, совместное поле наложения будет уже непериодическим, так что примесные атомы будут располагаться в ямах различных глубин, зависящих от \vec{r} .

Одно состояние в приведенной ячейке занимает площадь S/ρ , где ρ -количество ям на единицу площади границы. Исключая из рассмотрения не имеющие смысла ямы с параметром несоответствия, выходящим за пределы приведенной ячейки, приходим к соотношению $\rho = 1/S$. Это соответствует тому, что каждая ячейка рельефа одного из зерен связана таким параметром только с одной ячейкой рельефа другого зерна. В рассматриваемом здесь случае малых концентраций примесных атомов большинство из них будет находиться в глубоких ямах с параметром несоответствия, близким

к нулю. Принимая зависимость энергии атома от r параболической $E = E_0 + \alpha r^2$, что соответствует учету первых членов разложения функции $E(r)$, можем найти плотность состояний

$$g(E) = \frac{\pi}{\alpha S}.$$

Концентрация примесей на границе

$$n = \int_{E_0}^{\infty} g(E) f_0(E) dE, \quad (1)$$

где $f_0(E)$ – вероятность заполнения ям, в качестве которой используем функцию Больцмана

$$f_0(E) = \exp\left(\frac{\mu - E}{kT}\right). \quad (2)$$

Пусть к границе приложено сдвиговое напряжение σ , вызывающее взаимное движение зерен. По мере проскальзывания атомы примеси, находящиеся в ямах, превращаются в своеобразные стопоры, препятствующие смещению зерен в местах их расположения. По истечении некоторого времени τ атом примеси покидает яму, диффузионно удаляясь на расстояние l вдоль границы и устраняя тем самым существовавший стопор. Условие малости концентрации примеси запишем в виде $E_{max} < kT$, где E_{max} – максимальная энергия примесного атома при $T=0$. При отличной от нуля температуре атомы с некоторой вероятностью заполняют состояния в интервале kT , т. е. те ямы, параметр несоответствия которых $r < (kT/\alpha)^{1/2}$. Плотность таких ям в границе равна $g(E)kT$, а среднее расстояние между ними $l = S(\alpha/\pi kT)^{1/2}$. Время τ диффузионного перехода атома примеси из одной такой ямы в другую определится из соотношения Эйнштейна для плоского случая

$$\tau = \frac{l^2}{4D} = \frac{\alpha S^2}{4\pi D kT}, \quad (3)$$

где D – коэффициент граничной диффузии примеси. Таким образом, атомы примеси постоянно мигрируют вдоль границы, давая возможность проскальзыванию зерен.

Введем декартову систему координат в плоскости границы так, чтобы ось x была направлена вдоль скорости проскальзывания v , а начало координат совпадало с центром одной из ячеек какого-либо зерна, т. е. $r^2 = x^2 + y^2$. В установившемся режиме $f(r; t) = f(r + vt)$ и кинетическое уравнение для функции f запишется в виде

$$\frac{\partial f}{\partial x} v + \frac{f - f_0}{\tau} = 0. \quad (4)$$

Поскольку величины σ и v малы, то отличие f от f_0 будет также небольшим и для f из (4) можно записать выражение

$$f - f_0 = v\tau \frac{\partial f_0}{\partial x}. \quad (5)$$

Так как выражение (5) антисимметрично, а выражение для энергии в яме симметрично по x , то интеграл от их произведения по площади приведенной ячейки равен нулю. Это означает, что величина химического потенциала примеси в границе не зависит от скорости скольжения и его величина просто равна равновесному значению в объеме зерна

$$\mu = \mu_0 + kT \ln c, \quad (6)$$

где c — атомная доля примеси в объеме.

Из баланса сил с учетом (5) получаем

$$\sigma = -\frac{1}{S^2} \int \frac{\partial E}{\partial x} v\tau \frac{\partial f_0}{\partial x} ds, \quad (7)$$

где интегрирование проводится по площади приведенной ячейки. Из выражений (1), (3) и (7) с учетом того, что $c \ll 1$, получаем выражения для концентрации примеси в границе и скорости проскальзывания:

$$n = c \frac{\pi kT}{\alpha S^2} \exp\left(\frac{\mu_0 - E_0}{kT}\right),$$

$$v = \frac{2\pi kTD}{\alpha^2 S^2 n} \sigma. \quad (8)$$

Предложенный механизм скольжения зерен по границам, содержащим примеси, аналогичен модели Лоренца [2] протекания электрического тока в металле. Роль напряжения σ там играет напряженность электрического поля, а скорости v — плотность тока. Аналог выражения (5) там утверждает, что в полях малых напряженностей происходит смещение сферы Ферми в импульсном пространстве без заметной деформации ее. Аналогия видна и в выражении (8): скорость прямо пропорциональна напряжению и обратно пропорциональна концентрации примеси, что также подтверждается экспериментальными данными [3, 4].

С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Б е р н ш т е й н М.Л., З а й м о в с к и й В.А. Механические свойства металлов. М.: Металлургия. 495 с.
- [2] Б л е й к м о р Дж. Физика твердого тела / Пер. с англ. М.: Мир, 1988. 608 с.
- [3] Физическое металловедение / Под ред. Р.У. Кана и П. Хаазена Пер. с англ. т. 1, М.: Металлургия, 1987. 639 с.
- [4] Г л е й т е р Г., Ч а л м е р с Б. Большеугловые границы зерен / Пер. с англ. М.: Мир, 1972. 375 с.

Липецкий политехнический
институт

Поступило в Редакцию
15 декабря 1991 г.