УДК 536.2:539.4:620.186

# МОДЕЛЬ РЕКРИСТАЛЛИЗАЦИИ С УЧЕТОМ ИЗОЛИРОВАННЫХ ГРАНИЦ ЗЕРЕН В ПОЛИКРИСТАЛЛАХ*

**С.Е. Савотченко**

Белгородский государственный университет, 308015, г. Белгород, ул. Победы, 85
e-mail: Savotchenko@bsu.edu.ru

Предложена новая феноменологическая модель рекристаллизации поликристаллического материала, учитывающая конечную ширину границ зерен. В рамках данной модели получены аналитические выражения, описывающие распределения концентрации примесей, диффундирующих с поверхностного покрытия как в границе зерна, так и в самом зерне в рекристаллизованной области.

Ключевые слова: феноменологическая модель рекристаллизации поликристаллического материала, теоретические модели зернограничной диффузии и рекристаллизации, начально-краевая задача с подвижной границей.

## ВВЕДЕНИЕ

Изучение процесса рекристаллизации и эволюции кристаллической субструктуры и имеют огромное значение для понимания физических закономерностей свойств поликристаллов [1]. Исследование закономерностей рекристаллизации под воздействием диффузионных потоков изучают, отжигая тугоплавкие материалы с твердофазным покрытием. В экспериментах наблюдается появление слоя рекристаллизованных зерен в приповерхностном объеме металла со стороны покрытия. Происходит движение фронта рекристаллизации в глубь металла с течением времени [2, 3]. Примесь диффундирует из внешней среды, в качестве которой обычно выступает тонкое покрытие. Установлено [4], что во всех сплавах зависимость глубины рекристаллизованного слоя от времени, то есть закон движения фронта рекристаллизации, подчиняется соотношению $\xi(t) \sim t^{1/2}$. В данной работе предлагается модель, в рамках которой указанная зависимость движения фронта рекристаллизации получается аналитически.

К настоящему времени существует много теоретических моделей зернограничной диффузии и рекристаллизации [5-7]. Однако в известных моделях зернограничная диффузия не рассматривается с учетом движения фронта рекристаллизации. В данной работе предлагается модель, в которой учтены одновременно как конечная ширина границы зерна, так и изменение положения фронта рекристаллизации с течением времени.

Предложенная в данной работе модель содержит начально-краевую задачу с подвижной границей, закон движения которой подлежит определению. Такие задачи относятся к задачам стефановского типа и решаются специальными методами математической физики [8, 9].

## ФОРМУЛИРОВКА МОДЕЛИ

Выберем ось $Oy$ перпендикулярно поверхности полубесконечного образца, а ось $Ox$ – вдоль поверхности, так, что тонкое покрытие расположено на поверхности в плоскости $xOz$. Будем считать, что диффузия примесей в образец происходит от поверхности ($y$=0) в глубину равномерно по его объему. В рассматриваемом приближении будем предполагать, что фронт рекристаллизации является плоским и движется по закону $y=\xi(t)$.

Распределение концентрации $C$ примесей в границе зерен толщины $2a$ и в самих зернах $C_g$ в рассматриваемом случае можно считать зависящим от координат $x$ и $y$ и времени $t$.

---

* Работа выполнена при частичной финансовой поддержке грантов БелГУ, РФФИ № 05-02-16663.

Внутри границы зерен в рекристаллизованной области $|x| < a$, $0 < y < \xi(t)$ распределение концентрации определяется как решение двумерного уравнения диффузии:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_b\left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2}\right), \tag{1}$$

где $D_b$ – коэффициент зернограничной диффузии примесей.

В объеме зерен в рекристаллизованной области $|x| > a$, $0 < y < \xi(t)$ распределение концентрации примесей также определяется как решение двумерного уравнения диффузии:

$$\frac{\partial C_g}{\partial t} = D\left(\frac{\partial^2 C_g}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C_g}{\partial y^2}\right), \tag{2}$$

где $D$ – коэффициент объемной диффузии примесей.

Так как на поверхности образца находится тонкая пленка инородного вещества, то диффузия примесей происходит от поверхности, на которой концентрация примесей в границе является постоянной:

$$C(x, 0, t)=C_S, \tag{3}$$

где $C_S$ – концентрация примесей на поверхности образца.

Будем рассматривать такую систему покрытие-подложка, в которой растворимость атомов вещества покрытия в подложке очень низка. Тогда можно считать, что перед движущимся фронтом рекристаллизации примеси практически отсутствуют. Это означает, что на движущейся границе фронта рекристаллизации при $y=\xi(t)$ концентрация примесей в границе пренебрежительно мала и ее можно считать равной нулю:

$$C(x, \xi(t), t)=0. \tag{4}$$

Диффузионный поток примесей в границе через фронт рекристаллизации пропорционален скорости движения фронта:

$$D_b \left.\frac{\partial C}{\partial y}\right|_{y=\xi(t)} = -\gamma\frac{d\xi}{dt}, \tag{5}$$

где $\gamma=\gamma(d, T)$ – коэффициент пропорциональности, определяемый структурными факторами, средним размером рекристаллизованных зерен $d$, в частности, и температурой отжига $T$.

В начальный момент времени примеси в зернах отсутствуют, поэтому справедливо начальное условие:

$$C_g(x, y, 0)=0. \tag{6}$$

В обычной экспериментальной ситуации глубина проникновения диффузанта (примесей) в объем материала намного превышает диффузионную ширину границы зерен [5, 6]. Следовательно, распределение концентрации примесей в границе зерна, в основном, меняется в направлении от поверхности образца. Поэтому второй производной по переменной $x$ в уравнении (1) можно пренебречь.

В силу сделанных предположений концентрация примесей в граничных точках также не должна зависеть от $x$, поэтому будут справедливы условия:

$$C_g(\pm a, y, t)=C(y, t). \tag{7}$$

В силу того, что рассматривается наиболее распространенный экспериментальный случай, соответствующий режиму $B_2$ классификации зернограничной диффузии [6], то распределение концентрации примесей в зерне считается сильно меняющимся при удалении от границы зерна и слабо – при удалении от поверхности. Тогда в уравнении диффузии (2) можно пренебречь второй производной по переменной $y$ [5].

В силу симметрии системы вдоль оси $Ox$ можно рассматривать распределение примесей в зернах только в области $x > a$, а в область $x < -a$ – продолжить полученное решение четным образом.

Таким образом, собирая сделанные здесь предположения, получим математическую формулировку предлагаемой модели в виде, распадающемся на две связанные задачи:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial C}{\partial t} = D_b \dfrac{\partial^2 C}{\partial y^2}, \quad 0 < y < \xi(t), \ t > 0 \\ C(y=0,t) = C_S, \quad t > 0 \\ C(y=\xi(t),t) = 0, \quad t > 0 \\ D_b \left.\dfrac{\partial C}{\partial y}\right|_{y=\xi(t)} = -\gamma \dfrac{d\xi}{dt}, \quad t > 0 \end{cases} \tag{8}$$

$$\begin{cases} \dfrac{\partial C_g}{\partial t} = D \dfrac{\partial^2 C_g}{\partial x^2}, \ x > a, \ 0 < y < \xi(t), \ t > 0 \\ C_g(x,y,0) = 0, \ x > a, \quad 0 < y < \xi(t), t > 0 \\ C_g(a,y,t) = C(y,t), \ x > a, \ 0 < y < \xi(t), \ t > 0 \end{cases} \tag{9}$$

Сформулированная математическая модель процесса рекристаллизации (8)-(9) представляет собой краевую задачу с подвижной границей (8), закон движения которой подлежит определению, а также задачу на полуоси (9) с заданным граничным распределением концентрации, которое определяется как решение задачи (8).

## РАСПРЕДЕЛЕНИЯ КОНЦЕНТРАЦИИ ПРИМЕСЕЙ И ЗАКОН ДВИЖЕНИЯ ФРОНТА РЕКРИСТАЛЛИЗАЦИИ

Задача (8) является классической задачей Стефана [8, 9], и ее решение можно записать в виде:

$$C(y,t) = C_S \left\{ 1 - \frac{\operatorname{erf}(y/2\sqrt{D_b t})}{\operatorname{erf}(\beta)} \right\}, \tag{10}$$

$$\xi(t) = 2\beta\sqrt{D_b t}\ , \tag{11}$$

$$\beta \operatorname{erf}(\beta) e^{\beta^2} = \frac{C_S}{\gamma\sqrt{\pi}}, \tag{12}$$

где $\operatorname{erf}(z) = \dfrac{2}{\sqrt{\pi}} \displaystyle\int_0^z e^{-y^2} dy$ – интеграл ошибок.

Выражение (10) представляет собой распределение концентрации примесей в границе зерен в рекристаллизованной области. Выражение (11) представляет собой закон движения фронта рекристаллизации, где параметр $\beta$ определятся как корень трансцендентного уравнения (12). Из (11) можно получить скорость движения фронта рекристаллизации:

$$V(t) = \frac{d\xi}{dt} = \beta \left( \frac{D_b}{t} \right)^{1/2}. \tag{13}$$

Полученные кинетические зависимости глубины рекристаллизованного слоя (11) и скорости рекристаллизации (13) соответствуют зависимостям, наблюдаемым в экспериментах [1, 4].

При малых значениях параметра β уравнение (11) может быть решено аналитически. Действительно, используя при $\beta << 1$ разложения $\exp(\beta^2)\sim 1$ и $\mathrm{erf}(\beta) \approx 2\beta/\sqrt{\pi}$, из (12) можно получить решение в явном виде:

$$\beta = (C_S / 2\gamma)^{1/2}. \tag{14}$$

Предположим, что коэффициент γ прямо пропорционален среднему размеру зерна $d$ после рекристаллизации, которое будем считать не зависящим от времени отжига:

$$\gamma = \kappa d, \tag{15}$$

где κ – коэффициент пропорциональности, учитывающий первоначальную микроструктуру образца. Скомбинировав выражения (11), (12) и (15), получим зависимость положения фронта рекристаллизации от среднего размера зерна:

$$\xi(t) = \left(\frac{2C_S D_b t}{\kappa d}\right)^{1/2}. \tag{16}$$

Воспользовавшись выражениями (13) и (16), можно получить зависимость скорости движения фронта рекристаллизации от среднего размера зерна:

$$V(t) = \left(\frac{C_S D_b}{2\kappa d t}\right)^{1/2}. \tag{17}$$

Выражения (16) и (17) соответствуют представлениям о том, что глубина рекристаллизованного слоя и скорости рекристаллизации уменьшаются с увеличением среднего размера рекристаллизованных зерен.

С учетом найденного распределения концентрации примесей в зерне (10) решение задачи (9) можно записать в виде:

$$C_g(x,y,t) = \frac{x-a}{2\sqrt{\pi D}} \int_0^t \frac{1}{\tau^{3/2}} \exp\left\{-\frac{(x-a)^2}{4D\tau}\right\} C(y,t-\tau)\,d\tau. \tag{18}$$

Подставляя в (18) зависимость (10), получим выражение

$$C_g(x,y,t) = C_S \mathrm{erfc}\left(\frac{x-a}{2\sqrt{Dt}}\right) - \frac{x-a}{2\mathrm{erf}(\beta)\sqrt{\pi D}} \int_0^t \frac{\mathrm{erf}(y/2\sqrt{D_b(t-\tau)})}{\tau^{3/2}} \exp\left\{-\frac{(x-a)^2}{4D\tau}\right\} d\tau, \tag{19}$$

где erfc(z)=1–erf(z).

Первое слагаемое в (18) представляет собой распределение концентрации примесей, диффундирующих из постоянного источника на границе зерна. Второе слагаемое в (18) описывает изменение концентрации не только по направлению от границы зерна, но и по направлению от поверхности.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Следует отметить, что предложенная в данной работе модель может применяться при достаточно больших временах. В данной модели учитывается одновременно конечная ширина границы зерен и движение фронта рекристаллизации. Сформулированная модель представляет собой согласованные начально-краевые задачи, одна из которых является задачей с подвижной границей, а другая – задачей на полуоси. Для поставленных начально-краевых задач получены решения в аналитическом виде. Указаны закон и скорость движения фронта рекристаллизации, которые согласуются с наблюдаемыми в экспериментах видами соответствующих кинетических зависимостей.

### Литература

1. Колобов Ю.Р. Диффузионно-контролируемые процессы на границах зерен и пластичность металлических поликристаллов / Ю.Р. Колобов. – Новосибирск, 1998. – 184 с.

2. Повышение термической стабильности композиционных материалов на основе никеля, упрочненных волокнами вольфрама и молибдена путем направленного легирования матрицы /

В.Е. Панин, Е.Ф. Дударев, В.Е. Овчаренко, И.И. Кочепасов // Структура и свойства жаропрочных металлических материалов. – М.: Наука, 1973. – С. 103-107.

3. Гегузин Я.Е. О рекристаллизационном укрупнении зерен в системе вольфрам-никель / Я.Е. Гегузин, Ю.И. Клинчук // ФММ. – 1974. – Т. 37. – Вып.5. – С. 1099-1101.

4. Почивалов Ю.И. О закономерностях активированной рекристаллизации сплавов молибдена / Ю.И. Почивалов, Ю.Р. Колобов, А.Д. Коротаев // ФММ. – 1982. – Т.54. – Вып.2. – С. 296-301.

I. Kaur, Y. Mishin, W. Gust Fundamentals of Grain and Interphase Boundary Diffusion. – New York: Wiley, 1995. – 265 p.

5. L. Klinger, E. Rabkin. Beyond the Fisher Model of Grain Boundary Diffusion Effect of Structural Inhomogeneity in the Bulk. // Acta Mater. – 1999. – Vol.47. – N3. – P. 725-734.

6. W.L. Wang, Y.T. Chou, Sanbou Lee. A Note on Grain Boundary diffusion in Thin Films. // Scripta Materialia. – 1999. – Vol.41. – N10. – P. 1061-1065.

7. Карташов Э.М. Аналитические методы в теории теплопроводности твердых тел / Э.М. Карташов. – М.: Высш. шк., 2001. – 550 с.

8. Кудинов В.А. Аналитические решения задач тепломассопереноса и термоупругости для многослойных конструкций / В.А. Кудинов, Э.М. Карташев, В.В. Калашников. – М.: Высш. шк., 2005. – 430 с.

## MODEL OF RECRISTALISATION TAKING INTO ACCOUNT THE ISOLATED SCOPES OF GRAINS IN POLYCRISTALS

**S.E. Savotchenko**

Belgorod state university, 308015, Belgorod, Pobeda street', 85, e-mail: Savotchenko@bsu.edu.ru

The new fenomenological model of recristalisation of polycristall material, taking into account the eventual width of scopes of grains, is offered. Within the framework of this model analytical expressions, describing distributing of concentration of admixtures, diffusible from superficial coverage, are got, both in the border of grain and in grain in a recristaled area.

Key words: fenomenological model of recristalisation of polycristall material, initial-regional task with a moving boundary.