

НАУКОВО-ТЕХНІЧНА ІНФОРМАЦІЯ

О ТЕРМОДИНАМИКЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ СФЕРИЧЕСКИХ ВКЛЮЧЕНИЙ С ДВИЖУЩИМИСЯ ГРАНИЦАМИ ЗЕРЕН

При рассмотрении миграции межзеренных границ в практически однофазных металлических системах с избыточными частицами сферической формы обычно принимают, что захват движущейся границей таких включений термодинамически выгоден, поскольку при этом граница сокращает свою площадь примерно на площадь наибольшего сечения сферического объема и, следовательно, уменьшает на соответствующую величину свободную поверхностную энергию. Однако в силу определенных требований физики явления система должна реагировать на необходимость сохранения объема частицы при попадании последней на границу раздела, а также устанавливать определенный угол контакта матрицы с частицей в плоскости сечения самой частицы у границы раздела (из-за наличия определенного соотношения межфазной и межзеренной энергий, так как эти энергии являются физическими константами для любой конкретной термодинамической системы).

Рассмотрим несколько идеализированную ситуацию. Пусть практически чистая граница имеет ширину порядка трех межатомных расстояний [1]. В этом случае можно допустить, что при встрече такой границы с частицей последняя в соответствии с термодинамическими требованиями легко встраивается в ее «тело» с потерей части площади самой границы (см. рис. 1). Интересно проследить за эволюцией сферической частицы по истечении некоторого времени, независимо от того продолжает ли двигаться граница после акта захвата частицы или практически прекращает свое движение из-за эффекта сильного «механического» торможения.

При попадании сферической частицы на межзеренную границу происходит ее «расползание» по граничной поверхности (в силу необходимости сохранения прежнего объема), что влечет за собой увеличение радиуса для двух сочлененных сферических сегментов в соответствии с требованием установления определенного угла контакта каждого сегмента с границей (угол θ на рисунке 1). В этом случае соотношение между радиусами сферической частицы $r_{сф.}$ и ее же сегментами $R_{спл.сф.}$, когда она приобретает форму сплющенного сфероида, отвечает выражению (см. рисунок 1)

$$r_{сф.} = R_{спл.сф.} \sqrt[3]{\frac{1}{2}(1 - \cos\theta)^2(2 + \cos\theta)}. \quad (1)$$

При этом высота каждого сфероидального сегмента равна $h = R_{спл.сф.}(1 - \cos\theta)$.

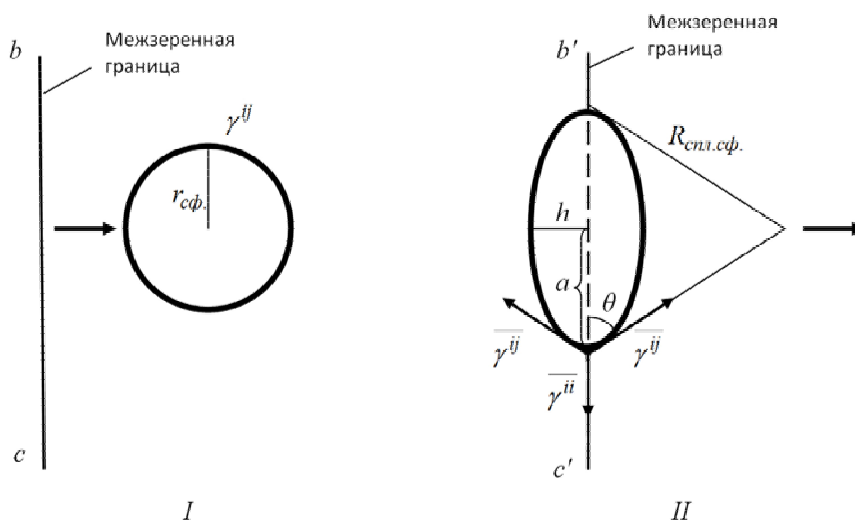


Рис. 1. Изменение формы частицы при ее «захвате» движущейся границей: I – сферическая частица в матрице; II – захваченная межзеренной границей частица после приобретения сфероидальной формы

Термодинамический выигрыш (в результате уменьшения свободной энергии) равен разнице между суммой поверхностных энергий двух сочлененных сплюснутых сегментов, равной $F_{\text{спл.сф.}}$ (без учета энергии их круглых оснований – $F_{\text{кр.}}$) и свободной энергии сферической поверхности первоначального включения $F_{\text{сф.}}$ (до его попадания на границу матричной фазы) будет равен:

$$\Delta F = (F_{\text{спл.сф.}} - F_{\text{кр.}}) - F_{\text{сф.}} = (4\pi R_{\text{спл.сф.}} h \gamma^{ij} - \pi a^2 \gamma^{ii}) - 4\pi r_{\text{сф.}}^2 \gamma^{ij}, \quad (2)$$

где a – радиус основания сегмента, равный $a = R_{\text{спл.сф.}} \sin \theta$;

γ^{ii} – поверхностное натяжение на межзеренной границе раздела;

γ^{ij} – поверхностное натяжение на границе раздела матрица / частица.

Следует специально отметить, что между поверхностными энергиями γ^{ii} и γ^{ij} существует связь, обусловленная наличием угла θ .

$$\gamma^{ii} = 2\gamma^{ij} \cos \theta. \quad (3)$$

Относительное уменьшение поверхностной энергии отвечает зависимости от угла θ следующего вида:

$$\frac{\Delta F}{F_{\text{сф.}}} = \frac{(4\pi R_{\text{спл.сф.}} h \gamma^{ij} - \pi a^2 \gamma^{ii}) - 4\pi r_{\text{сф.}}^2 \gamma^{ij}}{4\pi r_{\text{сф.}}^2 \gamma^{ij}} = \frac{1 - \cos \theta - \frac{1}{4} \cdot \frac{\gamma^{ii}}{\gamma^{ij}} \sin^2 \theta}{\left[\frac{1}{2} (1 - \cos \theta)^2 (2 + \cos \theta) \right]^{\frac{2}{3}}} - 1. \quad (4)$$

С учетом этой зависимости были выполнены количественные оценки (см. табл. 1) результирующего уменьшения свободной поверхностной энергии системы матрица-частица. Проведем общий анализ полученных результатов.

Таблица 1 – Расчетные значения использованных данных

№	θ	γ^{ii}/γ^{ij}	$\Delta F/F_{\text{сф.}}$
1	Условно 90° ($R=h=a=r$)	1	-0,25
2	85°	0,174	-0,045
3	80°	0,347	-0,094
4	75°	0,518	-0,147
5	70°	0,684	-0,203
6	60°	1	-0,321
7	45°	$\sqrt{2}$	-0,512
8	30°	$\sqrt{3}$	-0,705
9	0°	2	-1

Из расчетов следует, что упомянутый выше эффект расплзания частицы по обе стороны поверхности раздела (с учетом «встраивания» участка межзеренной границы в тело частицы) является термодинамически обоснованным (кроме интервала табличных значений 2...5).

Примем во внимание следующий казался бы вполне очевидный случай сохранения сферической формы включения на границе матрицы при условии равенства поверхностных энергий γ^{ii} и γ^{ij} ($\theta = 90^\circ$). При этом действительно существует определенный термодинамический выигрыш за счет уменьшения поверхностных энергий (позиция 1 в табл. 1). Однако после преобразования сферической частицы в сфероидальную (с углом контакта $\theta = 60^\circ$), в случае

того же равенства межфазной и межзеренной энергий, термодинамический выигрыш для системы уже является существенно большим (табл. 1, позиция б).

Поскольку в результате лучшей припасовки атомов более сложного по составу и строению включения к атомной структуре матричной фазы, практически всегда справедливо неравенство $\gamma^{ii} / \gamma^{ij} \geq 1$ [2]. Поэтому можно исключить приведенные в таблице варианты 2...5, как не вполне отвечающие общей термодинамической ситуации при наличии практически чистых матричных границ.

Подытоживая все вышесказанное, важно отметить, что термодинамический выигрыш при попадании сферической частицы на границу может существенно возрасти (см. табл. 1). Поэтому, из-за эффекта контактного «смачивания» (т. е. установления определенного угла контакта на границе раздела фаз) необходимо всегда учитывать это обстоятельство при рассмотрении вопросов о возможности отрыва границ раздела от попавших на них в процессе миграции включений сферической формы, поскольку сопротивление такому отрыву будет сильно зависеть от типа контактной трансформации сферических частиц, захваченных движущейся границей.

Список литературы

1. Мак Лин Д. Границы зерен в металлах / Мак Лин Д. – М. : Metallurgizdat, 1960. – 322 с.
2. Дурягіна З. А. Структурно-енергетичний стан внутрішніх та зовнішніх меж поділу у металевих системах (монографія) / З. А. Дурягіна, В. Ю. Ольшанецький, Ю. І. Кононенко. – Львів : Видавництво Львівської політехніки, 2013. – 456 с.

Одержано 15.12.2016

© **Д-р техн. наук В. Е. Ольшанецкий, Ю. И. Кононенко**

Запорожский национальный технический университет, г. Запорожье

Ol'shanetskii V., Kononenko Yu. Thermodynamics of spheroidal interaction inclusions with moving boundaries grains
