

01;05;11

## Морфологическая устойчивость двумерного выделения новой фазы, расположенного на межзеренной границе

© А.В. Коропов

Институт прикладной физики НАН Украины,  
40000 Сумы, Украина  
e-mail: ipfmail@ipfcentr.sumy.ua

(Поступило в Редакцию 12 апреля 2011 г.)

Рассмотрен диффузионный рост двумерного выделения новой фазы, расположенного на межзеренной границе конечной толщины, с учетом диффузионных потоков атомов примеси из глубины зерна к межзеренной границе. Проанализирована устойчивость растущего выделения достаточно малого радиуса относительно произвольных малых возмущений его формы с учетом поверхностной кинетики атомов примеси на поверхности межзеренная граница-выделение. Найдены пороговые радиусы выделения, выше которых нарастают амплитуда искажения формы и амплитуда относительной деформации формы выделения.

### Введение

Экспериментальному и теоретическому исследованиям поведения макроскопических включений в реальных кристаллах посвящено очень большое число работ (см., например, монографии [1–5] и работы [6–12]). К макроскопическим включениям в кристаллической матрице относятся, как известно [1,2,4,5], твердые частицы второй фазы, жидкие включения, вакансионные (незаполненные) поры, полости, заполненные газом. Твердые частицы второй фазы наблюдаются в композиционных материалах, стареющих (расслаивающихся) металлических сплавах [3–9], распадающихся пересыщенных твердых растворах [2,6–8].

Достаточно давно было обнаружено, что макроскопические включения, в частности твердые выделения новой фазы, часто образуются на границах зерен (межзеренных границах) поликристаллов [1–8]. Такие выделения существенно влияют на механические и другие свойства макроскопических образцов, в частности прочностные, на конфигурацию диффузионных потоков атомов примеси или вакансий в образце, на кинетику и скорость диффузионного распада пересыщенного твердого раствора.

При теоретическом описании выделений новой фазы во многих случаях возникают вопросы об их зарождении, кинетике роста или уменьшения в размерах, перемещении как целого относительно решетки за счет направленного диффузионного движения атомов в поле внешних сил, устойчивости их геометрической формы (морфологической устойчивости) и др. [1–12].

С точки зрения радиационной повреждаемости материалов реакторостроения наличие макроскопических включений в материалах влияет на их радиационную стойкость. В частности, выделения вторых фаз влияют на динамический баланс точечных дефектов в материале под облучением за счет ускорения рекомбинации точечных дефектов на межфазных границах и, соответственно на набухание, распределение и параметры пористости [5]. Более конкретно, выделения вторых

фаз дают эффект уменьшения средних концентраций точечных дефектов, тем самым затрудняя зарождение и рост вакансионных пор [5]. При изменении морфологии выделений изменяется их мощность как стоков точечных дефектов, а это, в свою очередь, может отразиться на поведении материала под облучением [5].

В настоящей работе теоретически рассматривается диффузионный рост твердого двумерного выделения новой фазы на межзеренной границе, имеющей конечную толщину  $\delta$ , с учетом поверхностной кинетики роста на боковой поверхности выделения и диффузионных потоков атомов примеси из глубины зерна к межзеренной границе. Кроме того, в линейном приближении анализируется морфологическая устойчивость такого выделения. Высокая симметрия рассматриваемой задачи позволяет получить все окончательные формулы в замкнутом виде, что существенно облегчает их физический анализ.

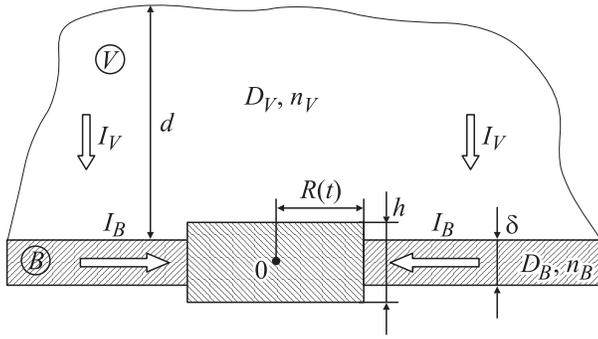
### 1. Основные соотношения

Уравнение диффузии атомов примеси в межзеренной границе, рассматриваемой как однородный изотропный слой толщиной  $\delta$  [13–16], вокруг выделения новой фазы с учетом диффузионных потоков атомов примеси из глубины зерна к межзеренной границе запишем в виде

$$\frac{\partial n_B}{\partial t} = D_B \Delta n_B + \frac{2I_V}{\delta}. \quad (1)$$

Здесь  $n_B$  — объемная плотность атомов примеси в межзеренной границе (двумерная плотность атомов примеси  $n_S = n_B \delta$ ),  $D_B$  — коэффициент межзеренной диффузии, т.е. объемный коэффициент диффузии атомов примеси в межзеренной границе (слое толщиной  $\delta$ ),  $I_V$  — диффузионный поток атомов примеси из объема зерна к межзеренной границе; множитель 2 при  $I_V/\delta$  учитывает, что диффузионный подвод атомов примеси к межзеренной границе осуществляется с двух сторон.

Будем рассматривать плоское цилиндрическое выделение новой фазы с постоянной высотой  $h > \delta$  и ра-



Схематическое изображение плоского цилиндрического выделения новой фазы, расположенного на межзеренной границе, имеющей конечную толщину  $\delta$ .  $B$  — межзеренная граница,  $V$  — тело зерна.  $I_B$  — диффузионный поток атомов примеси в межзеренной границе,  $n_V$  — плотность атомов примеси в теле зерна. Смысл остальных обозначений объясняется в тексте.

диусом основания  $R = R(t)$ , которое пересекается межзеренной границей, причем плоские грани выделения параллельны межзеренной границе (см. рисунок).

Поток атомов примеси из глубины зерна к межзеренной границе в установившемся (квазистационарном) режиме запишем в виде

$$I_V = D_V \frac{(\bar{n}_V - n_{VB})}{d/2}. \quad (2)$$

Здесь  $D_V$  — коэффициент диффузии атомов примеси в теле зерна,  $d$  — характерный поперечный размер зерна,  $\bar{n}_V$  — плотность атомов примеси в глубине зерна,  $n_{VB}$  — плотность атомов примеси в теле зерна около межзеренной границы. Считаем, что размер зерна  $d$  значительно превосходит размеры выделения:  $d \gg h$ ,  $d \gg R$ . Изменением плотности  $n_B$  по толщине межзеренной границы  $\delta$  можно пренебречь, как это обычно делается [15,16], при выполнении неравенства  $\delta^2/D_B \ll d^2/4D_V$ .

В условиях термодинамического равновесия величина  $n_{VB} \equiv n_{VB}^{eq}$  находится путем приравнивания химического потенциала атома примеси в теле зерна около межзеренной границы  $\mu_{VB}$  и химического потенциала атома примеси в самой межзеренной границе  $\mu_B$  ( $\mu_{VB} = \mu_B$ ). В приближении слабых растворов

$$\mu_{VB} = kT \ln(n_{VB}^{eq}/N_0) + \psi_V(P, T), \quad (3)$$

$$\mu_B = kT \ln(n_B/N_0) + \psi_B(P, T), \quad (4)$$

где  $k$  — постоянная Больцмана,  $N_0$  — плотность узлов кристаллической решетки в материале зерна,  $\psi_{V,B}(P, T)$  — функции, зависящие от давления  $P$  и температуры  $T$  (см. [17]). Окончательно получим

$$n_{VB}^{eq} = C n_B, \quad C = \exp[(\psi_B - \psi_V)/kT]. \quad (5)$$

Более общее граничное условие для нахождения плотности  $n_{VB}$ , а вместе с ней и потока  $I_V$  (формула (2))

сформулируем, учитывая поверхностную кинетику атомов примеси (см. [2]) на поверхности зерно-межзеренная граница. Выражение для потока  $I_V$  в дополнение к выражению (2) запишем в таком виде:

$$I_V = \beta_{VB}(n_{VB} - C n_B), \quad (6)$$

где  $\beta_{VB}$  — поверхностный кинетический коэффициент на поверхности зерно-межзеренная граница, характеризующий скорость перехода атомов примеси из тела зерна в межзеренную границу,  $C n_B$  — равновесное значение плотности  $n_{VB}$  (формула (5)). Из уравнений (2) и (6) находим

$$I_V = \bar{D}_{VB} \frac{(\bar{n}_V - C n_B)}{d/2}, \quad (7)$$

где

$$\bar{D}_{VB} \equiv \frac{D_V \beta_{VB} d/2}{D_V + \beta_{VB} d/2} \quad (8)$$

— эффективный (с учетом поверхностной кинетики на поверхности зерно-межзеренная граница) коэффициент диффузии атомов примеси в теле зерна.

В квазистационарном приближении  $\partial n_B / \partial t = 0$  (см. [6]), и уравнение диффузии атомов примеси в межзеренной границе (1) с потоком  $I_V$ , определяемым формулой (7), примет вид

$$\left( \frac{D_B}{4C\bar{D}_{VB}} d\delta \right) \Delta n_B + \frac{\bar{n}_V}{C} - n_B = 0. \quad (9)$$

Будем считать, что вдали от выделения новой фазы существует термодинамическое равновесие между атомами примеси, находящимися в теле зерна около межзеренной границы, и атомами примеси в самой межзеренной границе. Тогда

$$\bar{n}_V = C \bar{n}_B, \quad (10)$$

где  $\bar{n}_B$  — плотность атомов примеси в межзеренной границе вдали от выделения новой фазы. Уравнение (9) с учетом формулы (10) принимает вид

$$L_B^2 \Delta n_B - n_B + \bar{n}_B = 0, \quad (11)$$

где

$$L_B \equiv \left( \frac{D_B}{4C\bar{D}_{VB}} d\delta \right)^{1/2} \quad (12)$$

— характерный масштаб длины задачи.

Граничные условия к уравнению (11) в случае неискажённого выделения новой фазы формы кругового цилиндра берем такими [18,19]:

$$D_B \frac{\partial n_B}{\partial r} \Big|_{r=R} = \beta_B [n_B(R) - n_{BR}], \quad n_B \Big|_{r \rightarrow \infty} \rightarrow \bar{n}_B. \quad (13)$$

Здесь  $r$  — расстояние от центра выделения в плоскости межзеренной границы,  $n_{BR}$  — термодинамически равновесное значение плотности атомов примеси в межзеренной границе вблизи поверхности межзеренная граница-выделение ( $r = R$ ),  $\beta_B$  — поверхностный

кинетический коэффициент, характеризующий скорость перехода атомов примеси из межзеренной границы в выделение новой фазы. Для величины  $n_{BR}$  имеет место формула

$$n_{BR} = n_{B\infty} \exp(\Gamma_B/R), \quad (14)$$

где  $n_{B\infty}$  — значение  $n_{BR}$  вблизи плоской поверхности межзеренная граница-выделение ( $R \rightarrow \infty$ ),  $\Gamma_B \equiv \equiv \sigma_B \omega / kT$ ,  $\sigma_B$  — удельная межфазная энергия поверхности межзеренная граница-выделение,  $\omega$  — объем, приходящийся на один атом примеси в выделении. Далее будем считать, что межзеренная граница пересыщена атомами примеси, т.е.  $\bar{n}_B > n_{B\infty}$ .

Решение уравнения (11), удовлетворяющее граничным условиям (13), имеет вид

$$\psi_B(r) = \psi_{BR} \frac{K_0(r/L_B)}{F_0(R/L_B)}. \quad (15)$$

Здесь и далее  $\psi_B(r) \equiv n_B(r) - \bar{n}_B$ ,  $\psi_{BR} \equiv n_{BR} - \bar{n}_B$ ,  $K_l(z)$  — функция Макдональда  $l$ -го порядка [20],

$$F_0(z) \equiv K_0(z) + \frac{D_B}{\beta_B L_B} K_1(z). \quad (16)$$

Термодинамически равновесный перепад плотности атомов примеси в межзеренной границе около выделения радиуса  $R$  таков:

$$\begin{aligned} \Delta n_{BR} &\equiv (\bar{n}_B - n_{BR}) \\ &= n_{B\infty} [\exp(\Gamma_B/R^*) - \exp(\Gamma_B/R)] = -\psi_{BR}. \end{aligned} \quad (17)$$

В формуле (17) фигурирует критический радиус выделения

$$R^* = \frac{\Gamma_B}{\ln(\bar{n}_B/n_{B\infty})} \quad (18)$$

(выделение с радиусом  $R > R^*$  растет, а с радиусом  $R < R^*$  уменьшается в размере).

## 2. Линейный анализ морфологической устойчивости выделения

Проведем анализ устойчивости круговой формы выделения в процессе его роста (морфологической устойчивости) аналогично тому, как это было сделано для островков конденсированной фазы при осаждении вещества на поверхности твердого тела [21–23].

Считая возмущение круговой формы выделения малым, представим его как суперпозицию круговых гармоник  $\exp(il\varphi)$ ,  $l \geq 1$ :

$$R(\varphi, t) = R(t) + \sum_{l \geq 1} \xi_l(t) \exp(il\varphi). \quad (19)$$

Здесь  $R(\varphi, t)$  — вид возмущенной границы выделения в полярной системе координат с началом в центре выделения,  $l$  — номер гармоники,  $\xi_l$  — малая амплитуда возмущения, соответствующая  $l$ -й гармонике ( $\xi_l \ll R$ ),

$\varphi$  — полярный угол. В записи (19) пренебрегаем искажениями формы выделения, которые фактически являются цилиндрическими,  $\sim \exp(iqz)$  вдоль оси цилиндра  $z$ . Такое пренебрежение предполагает, что высота выделения  $h$ , во всяком случае, значительно меньше его радиуса  $R$  ( $h \ll R$ ). Ограничиваясь только линейным анализом устойчивости, в дальнейших формулах члены, содержащие  $\xi_l/R \ll 1$  в степени выше первой, будем опускать. Так как все уравнения задачи линейны, достаточно исследовать возмущение формы выделения, описываемое единственной круговой гармоникой  $\exp(il\varphi)$ , а не их суперпозицией  $\sum_l \xi_l \exp(il\varphi)$ .

Кривизна границы выделения для возмущения вида  $\xi_l \exp(il\varphi)$  такова:

$$K = \frac{1}{R} + (l^2 - 1) \frac{\xi_l}{R^2} \exp(il\varphi), \quad (20)$$

где  $1/R$  — значение кривизны для выделения невозмущенной круговой формы. Граничное условие, аналогичное первому из условий (13), следует записать на истинной, т.е. возмущенной границе выделения  $R(\varphi, t) = R(t) + \xi_l(t) \exp(il\varphi)$ . Это условие имеет вид

$$D_B \frac{\partial n_B}{\partial r} \Big|_{r=R(\varphi, t)} = \beta_B [n_B - n_{B\infty} \exp(\Gamma_B K)]_{r=R(\varphi, t)}. \quad (21)$$

Решение уравнения диффузии атомов примеси (11), удовлетворяющее условию (21) на возмущенной границе выделения и условию  $\psi_B \rightarrow 0$  при  $r \rightarrow \infty$ , таково:

$$\begin{aligned} \psi_B(\rho, \varphi) = \psi_{BR} \frac{K_0(\rho)}{F_0(a)} + \left[ \psi_{BR} \frac{F_1(a)}{F_0(a)} a \right. \\ \left. + (l^2 - 1) \frac{\Gamma_B n_{BR}}{R} \right] \frac{K_l(\rho)}{F_l(a)} \frac{\xi_l}{R} \exp(il\varphi). \end{aligned} \quad (22)$$

Здесь  $\rho \equiv r/L_B$ ,  $a \equiv R/L_B$ , а введенные функции  $F_l(a)$  определяются соотношениями

$$F_l(a) \equiv K_l(a) + \frac{D_B}{\beta_B L_B} |K'_l(a)|. \quad (23)$$

Скорость перемещения границы выделения (ее  $r$ -я компонента) имеет вид

$$V_r = \frac{D_B \omega \delta}{h} \frac{\partial \psi_B}{\partial r} \Big|_{r=R(\varphi, t)}. \quad (24)$$

С другой стороны, очевидно,

$$V_r = \frac{\partial R(\varphi, t)}{\partial t} = \dot{R}(t) + \dot{\xi}_l(t) \exp(il\varphi). \quad (25)$$

Приравняв выражение (24) с найденной функцией  $\psi_B(\rho, \varphi)$  (формула (22)) и выражение (25), получим формулу

$$\dot{R}(t) = \frac{D_B \omega \delta}{h L_B} \frac{K_1(a)}{F_0(a)} \Delta n_{BR} \quad (26)$$

и формулы для инкремента амплитуды  $\xi_l(t)$ :

$$v_l \equiv \frac{d}{dt} \ln[\xi_l(t)] = \frac{\dot{\xi}_l}{\xi_l}, \quad (27)$$

$$v_l = \frac{D_B \omega \delta}{h L_B} \left[ G_B \phi_l(a) - (l^2 - 1) \frac{\Gamma_B n_{BR}}{R^2} \frac{|K'_l(a)|}{F_l(a)} \right]. \quad (28)$$

Здесь

$$G_B \equiv \left. \frac{\partial n_B}{\partial r} \right|_{r=R} = \frac{\Delta n_{BR}}{L_B} \frac{K_1(a)}{F_0(a)} \quad (29)$$

— величина градиента плотности атомов примеси на границе невозмущенного выделения,

$$\phi_l(a) \equiv \frac{F_1(a)}{K_1(a)} \frac{|K'_l(a)|}{F_l(a)} - \frac{|K'_1(a)|}{K_1(a)}. \quad (30)$$

Относительная деформация формы выделения определяется отношением  $\xi_l/R$ . Исходя из формул (26)–(29), запишем выражение для инкремента величины  $\xi_l/R$ :

$$\mu_l \equiv \frac{d}{dt} \ln \left[ \frac{\xi_l(t)}{R(t)} \right] = \frac{\dot{\xi}_l}{\xi_l} - \frac{\dot{R}}{R}, \quad (31)$$

$$\mu_l = \frac{D_B \omega \delta}{h L_B} \left\{ G_B \left[ \phi_l(a) - \frac{1}{a} \right] - (l^2 - 1) \frac{\Gamma_B n_{BR}}{R^2} \frac{|K'_l(a)|}{F_l(a)} \right\}. \quad (32)$$

Запишем и проанализируем соотношения (28) и (32) для случая выделения достаточно малого радиуса ( $R \ll L_B$ ):

$$v_l = (l - 1) \frac{D_B \omega \delta}{h R} \frac{1}{1 + l D_B / \beta_B R} \left[ G_B - l(l + 1) \frac{\Gamma_B n_{BR}}{R^2} \right], \quad (33)$$

$$\mu_l = \frac{D_B \omega \delta}{h R} \frac{1}{1 + l D_B / \beta_B R} \left\{ \left[ l \left( 1 - \frac{D_B}{\beta_B R} \right) - 2 \right] \times G_B - l(l^2 - 1) \frac{\Gamma_B n_{BR}}{R^2} \right\}, \quad (34)$$

$$G_B = \frac{\Delta n_{BR}}{K_0 R + D_B / \beta_B}, \quad (35)$$

где  $K_0 \equiv K_0(R/L_B)$ . Отметим, что в случае  $R \ll L_B$

$$K_0(R/L_B) = -[\ln(R/2L_B) + \gamma] + O[(R/2L_B)^2 \ln(R/2L_B)], \quad (36)$$

где  $\gamma = 0.5772 \dots$  — постоянная Эйлера [20].

Как видно из формулы (33), инкремент  $v_l$  содержит два члена, имеющих разную физическую природу. Первый член, пропорциональный градиенту плотности атомов примеси  $G_B$ , ведет к нарастанию амплитуды гармоники  $\xi_l(t)$ . Это нарастание связано с тем, что выступ на границе растущего выделения имеет возможность „собрать“ больше атомов примеси, чем окружающие его участки границы, и поэтому может опережать выделение в своем росте. Второй член, пропорциональный удельной межфазной энергии границы  $\sigma_B$  ( $\Gamma_B \sim \sigma_B$ ), приводит к уменьшению амплитуды  $\xi_l(t)$ . Действительно, поскольку у выступов плотности атомов примеси

выше, чем у впадин, существуют потоки атомов примеси от выступов к впадинам, которые уменьшают амплитуду искажения, сглаживая (выравнивая) границу. Вопрос же об устойчивости круговой формы выделения сводится к тому, какой из двух эффектов окажется сильнее.

Множитель  $(l - 1)$  в формуле (33) приводит к тому, что  $v_l = 0$  при  $l = 1$ . Это связано с тем, что в линейном приближении по  $\xi_l/R \ll 1$  первая гармоника возмущения ( $l = 1$ ) просто приводит к сдвигу окружности (границы выделения) на  $\xi_1$ , не вызывая искажения формы выделения.

Условие нарастания  $l$ -й гармоники  $v_l > 0$ , следующее из формулы (33), запишем в виде

$$G_B > l(l + 1) \frac{\Gamma_B n_{BR}}{R^2} \quad (37)$$

или с учетом формул (14), (17), (35)

$$\frac{R}{R^*} > l(l + 1) \left( K_0 + \frac{D_B}{\beta_B R} \right) \frac{\exp(\Gamma_B/R)}{\exp(\Gamma_B/R^*) - \exp(\Gamma_B/R)} \frac{\Gamma_B}{R^*} \quad (38)$$

и будем считать, что  $R > R^*$ . Тогда при  $R \rightarrow R^* + 0$  правая часть неравенства (38) неограниченно возрастает за счет стремления знаменателя к  $+0$ , в то время как его левая часть  $R/R^* \rightarrow 1 + 0$ , т.е. неравенство (38) заведомо не выполняется. Это означает, что при  $R \rightarrow R^* + 0$  форма выделения устойчива, а неустойчивость круговой формы выделения может наступить только на некотором конечном удалении  $R$  от  $R^*$  ( $R > R^*$ ).

Найдем порог возникновения такой неустойчивости формы выделения, т.е. пороговый радиус выделения  $R_{C1}(l)$ , выше которого  $\xi_l(t)$  нарастает ( $v_l > 0$ ), где  $l > 1$ . Для этого будем приближенно решать следующее уравнение:

$$\frac{R}{R^*} = l(l + 1) \left( K_0 + \frac{D_B}{\beta_B R} \right) \frac{\exp(\Gamma_B/R)}{\exp(\Gamma_B/R^*) - \exp(\Gamma_B/R)} \frac{\Gamma_B}{R^*}. \quad (39)$$

Уравнение (39) в случае малых пересыщений

$$\Delta_B \equiv \frac{\bar{n}_B - n_{B\infty}}{n_{B\infty}} \ll 1, \quad (40)$$

$$\frac{\Gamma_B}{R^*} = \Delta_B \ll 1, \quad \frac{\Gamma_B}{R} < \frac{\Gamma_B}{R^*} \ll 1 \quad (41)$$

принимает вид

$$\frac{R}{R^*} - 1 = l(l + 1) \left( K_0 + \frac{D_B}{\beta_B R} \right). \quad (42)$$

В пренебрежении зависимостью  $K_0$  от  $R$  (см. (36)) уравнение (42) сводится к квадратному относительно  $R$ , а его единственное физическое решение таково:

$$R_{C1}(l) = \frac{1}{2} [l(l + 1)K_0 + 1]R^* + \left\{ \frac{1}{4} [l(l + 1)K_0 + 1]^2 + l(l + 1) \frac{D_B}{\beta_B R^*} \right\}^{1/2} R^*. \quad (43)$$

Из формулы (43) видно, что  $R_{C1}(l)$  возрастает с ростом  $l$ . Тогда неустойчивость круговой формы выделения по мере его роста впервые наступает на второй гармонике ( $l = 2$ ). Соответствующий пороговый радиус равен

$$R_{C1}(2) = \left(3K_0 + \frac{1}{2}\right) R^* + \left[\left(3K_0 + \frac{1}{2}\right)^2 + \frac{6D_B}{\beta_B R^*}\right]^{1/2} R^*. \quad (44)$$

Если рост выделения лимитируется диффузией атомов примеси ( $D_B/\beta_B \rightarrow 0$ ), то формулы (43) и (44) принимают вид

$$R_{C1}(l) = [l(l+1)K_0 + 1]R^*, \quad (45)$$

$$R_{C1}(2) = (6K_0 + 1)R^*. \quad (46)$$

Для случая малых пересыщений (40), (41) найдем также пороговый радиус выделения  $R_{C2}(l)$ , выше которого нарастает относительная деформация формы выделения  $\xi_l/R$  ( $\mu_l > 0$ ). Этот радиус определяется уравнением, следующим из формул (34), (35),

$$\frac{R}{R^*} - 1 = \frac{l(l^2 - 1)}{l(1 - D_B/\beta_B R) - 2} \left(K_0 + \frac{D_B}{\beta_B R}\right). \quad (47)$$

В пренебрежении зависимостью  $K_0$  от  $R$  уравнение (47) сводится при  $l > 2$  к квадратному относительно  $R$ :

$$(l-2)R^2 - \left[l(l^2-1)K_0R^* + (l-2)R^* + l\frac{D_B}{\beta_B}\right]R - l(l^2-2)\frac{D_B R^*}{\beta_B} = 0. \quad (48)$$

В случае  $l = 2$  уравнение (48) имеет, очевидно, единственный отрицательный корень, что нефизично. Таким образом, нарастание относительной деформации формы выделения  $\xi_l/R$  может наступить, начиная с третьей гармоники. Действительно, при  $l \geq 3$  уравнение (48) имеет единственное физическое решение

$$R_{C2}(l) = U_l R^* + (U_l^2 + V_l)^{1/2} R^*, \quad (49)$$

где

$$U_l \equiv l \frac{(l^2 - 1)K_0 + D_B/\beta_B R^*}{2(l-2)} + \frac{1}{2}, \quad (50)$$

$$V_l \equiv \frac{l(l^2 - 2)}{l-2} \frac{D_B}{\beta_B R^*}. \quad (51)$$

При  $l = 3$  формулы (49)–(51) дают

$$R_{C2}(3) = \left(12K_0 + \frac{1}{2} + \frac{3}{2} \frac{D_B}{\beta_B R^*}\right) R^* + \left[\left(12K_0 + \frac{1}{2} + \frac{3}{2} \frac{D_B}{\beta_B R^*}\right)^2 + 21 \frac{D_B}{\beta_B R^*}\right]^{1/2} R^*. \quad (52)$$

Поставим теперь вопрос о наиболее быстро растущей гармонике возмущения круговой формы выделения при  $R > R_{C1}(l)$ . В случае  $lD_B/\beta_B R \ll 1$ , где  $l \gg 1$  (развитая

неустойчивость), как можно показать из формул (17), (33), (35), для номера  $l^*$  наиболее быстро растущей гармоники и соответствующей длины волны гармоники  $\lambda^* = 2\pi R/l^*$  имеют место формулы

$$l^* = \left[R \frac{\exp(\Gamma_B/R^*) - \exp(\Gamma_B/R)}{3 \exp(\Gamma_B/R)\Gamma_B K_0}\right]^{1/2}, \quad (53)$$

$$\lambda^* = 2\pi \left[\frac{3 \exp(\Gamma_B/R)\Gamma_B K_0 R}{\exp(\Gamma_B/R^*) - \exp(\Gamma_B/R)}\right]^{1/2}. \quad (54)$$

В случае малых пересыщений (40), (41) формулы (53), (54) дают

$$l^* = \left(\frac{R/R^*}{3K_0}\right)^{1/2} \sim \left(\frac{R}{R^*}\right)^{1/2}, \quad (55)$$

$$\lambda^* = 2\pi(3K_0 R R^*)^{1/2} \sim (R R^*)^{1/2}. \quad (56)$$

Предполагаемое условие  $l^* \gg 1$  ( $l^* > 10$ ), как следует из формулы (55), в случае малых пересыщений достаточно хорошо выполняется при  $R/R^* > 1.5 \cdot 10^3$ . Поскольку наиболее быстро растущей гармоникой произвольного возмущения формы выделения является гармоника с номером  $l^*$ , то относительный вклад этой гармоники в разложении искажения в ряд (19) увеличивается. Вследствие этого на боковой поверхности выделения будет возникать волнообразное искажение с длиной волны  $\sim \lambda^*$ .

## Заключение

Таким образом, теоретически рассмотрен диффузионный рост двумерного выделения новой фазы, расположенного на межзеренной границе конечной толщины  $\delta$ , с учетом диффузионных потоков атомов примеси из глубины зерна к межзеренной границе.

Проведен линейный анализ устойчивости круговой формы выделения малого радиуса ( $R \ll L_B$ ) в процессе его роста ( $R > R^*$ ) относительно произвольных малых возмущений его формы  $\sum_l \xi_l \exp(il\varphi)$ ,  $\xi_l \ll R$  (формула (19)) с учетом поверхностной кинетики атомов примеси на боковой поверхности выделения (граничное условие (21)). Обсуждаемые далее результаты (если специально не оговорено иное) получены в случае малых пересыщений твердого раствора атомов примеси в межзеренной границе ( $\Delta_B \ll 1$ ).

Найдены пороговый радиус выделения  $R_{C1}(l)$ , выше которого нарастает амплитуда возмущения формы выделения  $\xi_l(t)$  (формула (43)), и пороговый радиус  $R_{C2}(l)$ , выше которого нарастает амплитуда относительной деформации формы выделения  $\xi_l(t)/R(t)$  (формулы (49)–(51)). Неустойчивость круговой формы выделения при произвольном значении  $D_B/\beta_B$  впервые наступает на второй гармонике ( $l = 2$ ), а соответствующий пороговый радиус  $R_{C1}(2)$  дается формулой (44). Нарастание же относительной деформации формы выделения

$\xi_l/R$  начинается на третьей гармонике ( $l = 3$ ), величина  $R_{C2}(3)$  определяется формулой (52). Как следует из формул (43) и (49)–(51), возрастание роли поверхностной кинетики в переносе атомов примеси к выделению (рост отношения  $D_B/\beta_B$ ) приводит к увеличению пороговых радиусов  $R_{C1}(l)$  и  $R_{C2}(l)$ .

В случае развитой неустойчивости формы выделения (неустойчивости на гармониках с номерами  $l \gg 1$ ) при произвольных пересыщениях твердого раствора атомов примеси в межзеренной границе  $\Delta_B$  найдены номер наиболее быстро растущей гармоники  $l^*$  (формула (53)) и соответствующая длина волны гармоники  $\lambda^*$  (формула (54)). Предполагается при этом, что  $lD_B/\beta_B R \ll 1$ . В случае малых пересыщений ( $\Delta_B \ll 1$ )  $l^*$  и  $\lambda^*$  представлены соответственно формулами (55) и (56).

Автор благодарен В.Е. Сторижко за поддержку тематики данной работы.

## Список литературы

- [1] Гегузин Я.Е., Кривоглаз М.А. Движение макроскопических включений в твердых телах. М.: Металлургия, 1971. 344 с.
- [2] Гегузин Я.Е. Диффузионная зона. М.: Наука, 1979. 344 с.
- [3] Чуистов К.В. Старение металлических сплавов. Киев: Наукова думка, 1985. 232 с.
- [4] Зеленский В.Ф., Неклюдов И.М., Черняева Т.П. Радиационные дефекты и набухание металлов. Киев: Наукова думка, 1988. 296 с.
- [5] Воеводин В.Н., Неклюдов И.М. Эволюция структурно-фазового состояния и радиационная стойкость конструкционных материалов. Киев: Наукова думка, 2006. 376 с.
- [6] Слезов В.В., Сагалович В.В. // УФН. 1987. Т. 151. Вып. 1. С. 67–104.
- [7] Kirchner H.O.K. // Metall. Trans. 1971. Vol. 2. N 10. P. 2861–2864.
- [8] Vengrenovitch R.D. // Acta Metall. 1982. Vol. 30. N 6. P. 1079–1086.
- [9] Венгреневич Р.Д., Москалюк А.В., Ярема С.В. // ФТТ. 2007. Т. 49. Вып. 1. С. 13–18.
- [10] Кукушкин С.А., Кузьмичев С.В. // ФТТ. 2008. Т. 50. Вып. 8. С. 1390–1394.
- [11] Васильев Л.С., Ломаев И.Л., Елсуков Е.П. // ФММ. 2009. Т. 107. № 2. С. 152–162.
- [12] Коропов А.В. // ФТТ. 2004. Т. 46. Вып. 8. С. 1460–1464.
- [13] Fisher J.C. // J. Appl. Phys. 1951. Vol. 22. N 1. P. 74–77.
- [14] Мишин Ю.М., Разумовский И.М. // ФММ. 1982. Т. 53. Вып. 4. С. 756–763.
- [15] Бокштейн Б.С., Копецкий Ч.В., Швиндлерман Л.С. Термодинамика и кинетика границ зерен в металлах. М.: Металлургия, 1986. 224 с.
- [16] Бокштейн Б.С., Ярославцев А.Б. Диффузия атомов и ионов в твердых телах. М.: МИСИС, 2005. 362 с.
- [17] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика. Ч. 1. М.: Физматлит, 2005. 616 с.
- [18] Коропов А.В., Остапчук П.Н., Слезов В.В. // ФТТ. 1991. Т. 33. № 10. С. 2835–2844.
- [19] Коропов А.В., Сагалович В.В. // Поверхность. Физика, химия, механика. 1987. № 6. С. 50–55.
- [20] Справочник по специальным функциям / Под ред. М. Абрамовица, И. Стиган. М.: Наука, 1979. 832 с.
- [21] Kukushkin S.A., Osipov A.V. // Phys. Rev. E. 1996. Vol. 53. N 5. P. 4964–4968.
- [22] Кукушкин С.А., Осипов А.В. // УФН. 1998. Т. 168. № 10. С. 1083–1116.
- [23] Коропов А.В. // ФТТ. 2008. Т. 50. Вып. 11. С. 2093–2097.