

## СТРУКТУРА, ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ И ДИФфуЗИЯ

УДК 539.219.3.001

### ДИФфуЗИЯ ПО СЕТИ ТРОЙНЫХ СТЫКОВ

© 2023 г. А. Г. Кесарев<sup>а</sup>, \*, В. В. Кондратьев<sup>а</sup>

<sup>а</sup>Институт физики металлов УрО РАН, ул. С. Ковалевской, 18, Екатеринбург, 620990 Россия

\*e-mail: kesarev@imp.uran.ru

Поступила в редакцию 11.11.2022 г.

После доработки 16.01.2023 г.

Принята к публикации 20.01.2023 г.

Рассмотрена диффузия по сети тройных стыков зерен в условиях, когда диффузия по всем другим диффузионным путям пренебрежимо мала. Найден условия, когда такая сеть ведет себя, как однородная среда. Для этого случая найден эффективный коэффициент диффузии в отсутствие текстуры.

*Ключевые слова:* диффузия, тройные стыки, коэффициент диффузии

**DOI:** 10.31857/S0015323022601696, **EDN:** CMZFOZ

#### ВВЕДЕНИЕ

В последние десятилетия нано- и субмикроструктурные (СМК) материалы являются предметом всестороннего изучения из-за необычных механических, физических и химических свойств, которые они демонстрируют. Одним из таких уникальных свойств можно назвать большую скорость диффузии по границам зерен в СМК и наноматериалах, которая значительно влияет на термостабильность и механические свойства таких материалов [1]. Этот феномен до настоящего времени не имеет однозначного объяснения, экспериментальные данные часто противоречивы [1]: имеются как данные о высокой скорости диффузии по границам зерен в наноматериалах, так и о том, что диффузионные свойства этих границ незначительно отличаются от диффузионных свойств границ зерен крупнокристаллических материалов. Этот парадокс частично разрешается представлением о неравновесном состоянии границ зерен в материалах, полученных интенсивной пластической деформацией [2–4], например, с использованием равноканального углового (РКУ) прессования.

Известно, что роль каналов быстрой диффузии могут играть тройные стыки границ зерен [5, 6], в особенности – в нано- и СМК-материалах, где доля тройных стыков может быть высока. Данные о диффузии по тройным стыкам зерен также противоречивы. Так, в [7] анализируются эксперименты по зернограничной диффузии, в рамках предложенной авторами модели, учитывающей тройные стыки зерен, делается вывод, что скорость диффузии по тройным стыкам на 3–5 порядков выше, чем по границам зерен. Компьютерное

моделирование [8], опровергает это представление. Заметим, что компьютерное моделирование ведется для идеального тройного стыка, в то время как СМК и наноматериалы, особенно полученные с использованием механического воздействия, имеют дефектную структуру, причем дефекты локализованы преимущественно на границах, а внутри границ – на тройных стыках. В нанокристаллах, полученных компактированием порошков, остаточная пористость в последнюю очередь должна исчезнуть именно в тройных стыках частиц порошка; в СМК-материалах, полученных интенсивной пластической деформацией (ИПД), в тройных стыках зерен находятся дисклинационные диполи [9], следовательно именно в тройных стыках максимальная концентрация напряжений, наибольший свободный объем, и, таким образом, наибольшая вероятность появления трещин и нанопор, обнаруженных даже в материалах, полученных ИПД [10].

Сеть тройных стыков пронизывает весь образец и, следовательно, является наиболее вероятным претендентом на роль пути для ускоренной диффузии. Мы не утверждаем, что путем ускоренной диффузии должен служить каждый тройной стык – достаточно того, чтобы такие пути образовывали связную сеть. В работе [6] рассматривается модель диффузии в А – режиме, с учетом тройных стыков, а в работе [11] – диффузия вдоль отдельного тройного стыка с учетом оттока в границу и в объем зерна. Заметим, что реальные пути ускоренной диффузии не являются прямолинейными и не направлены перпендикулярно источнику, пересекаются между собой. Левин и Маккалум [12] показали, что в случае зерногранич-

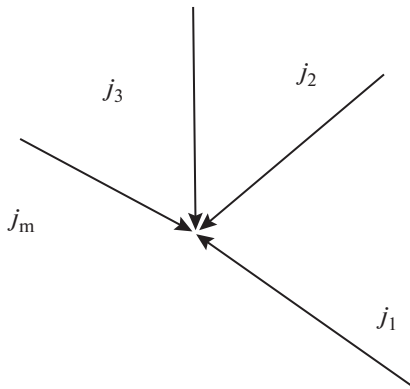


Рис. 1. Модель сети диффузионных путей тройных стыков.

ной диффузии учет этого приводит, к появлению в уравнении диффузии по границам перед коэффициентом зернограничной диффузии множителя  $2/3$  [13]. Кроме того, эффективный коэффициент диффузии в А-режиме, вычисленный в приближении среднего поля (Максвелла), при малой доле границ зерен и большом отношении коэффициентов зернограничной и объемной диффузии также приводит к появлению перед коэффициентом зернограничной диффузии множителя  $2/3$  [5]. Диффузионный эксперимент в СМК- и наноматериалах часто проводится при температурах и временах, когда не удается наблюдать диффузию не только в объеме, но и по обычным границам [14]. Цель данной работы анализ диффузии по сети тройных стыков в Т-режиме, по терминологии [11], т.е., когда диффузией по границам и в объем можно пренебречь, что соответствует условию  $\sqrt{D_g t} \ll \delta$ , где  $D_g$  – коэффициент зернограничной диффузии,  $\delta$  – ширина границы,  $t$  – время отжига, т.е. при достаточно низких температурах и достаточно малых временах. При различии между коэффициентами диффузии по границам и по тройным стыкам 3–5 порядков такой режим может существовать. Так как в экспериментах обычно измеряют макроскопические усредненные характеристики (средняя концентрация в поперечном слое), то необходимо выяснить, в каких случаях сеть тройных стыков можно рассматривать как непрерывную среду, и найти ее эффективные характеристики, измеряемые на опыте с учетом геометрии и топологии сети тройных стыков.

### ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ И ЕЕ ОБЩЕЕ РЕШЕНИЕ

Рассмотрим сеть диффузионных путей с фиксированным коэффициентом диффузии  $D$ , погруженную в среду, диффузией в которой можно пренебречь. Эта область заполняет полупространство, на поверхности которого концентрация

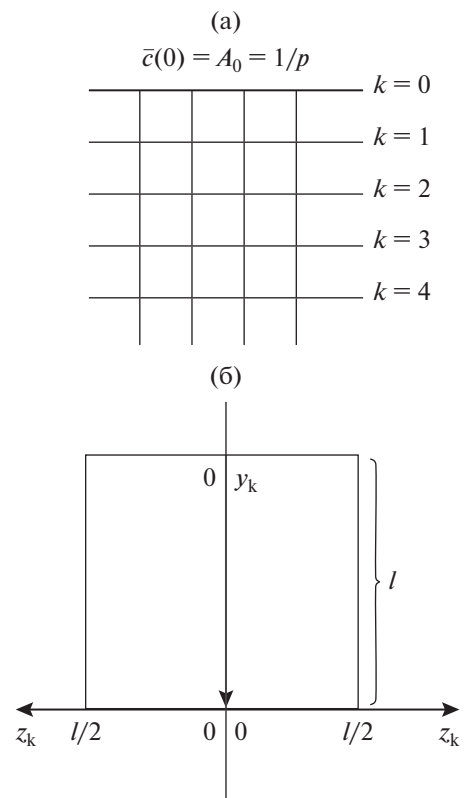


Рис. 2. Плоская модель сети тройных стыков: (а) общий вид, (б) отдельная ячейка.

ция в начальный момент времени скачком увеличивается и поддерживается постоянной в течение всего диффузионного процесса.

Сеть диффузионных путей представляет собой бесконечный граф, состоящий из вершин (узлов) (рис. 1), соединенных ребрами (ветвями), по которым идут диффузионные потоки. При этом выполняется аналог 1-го закона Кирхгофа для электрических цепей: количество вещества, входящее в каждую вершину в единицу времени, равно количеству вещества, выходящего из той же вершины в единицу времени, иначе, суммарный поток, вытекающий в данный узел, равен суммарному потоку, вытекающему из него, т.е. суммарный поток, сходящийся к одному узлу, равен нулю. Очевидно также, что концентрации в каждой ветви, сходящейся к одной и той же вершине, стремятся к одному и тому же значению при движении вдоль каждой из этих ветвей к общей вершине. Решение задачи при произвольной геометрии сетки затруднительно, поэтому ограничимся случаем, когда диффузия вглубь образца идет по ветвям, перпендикулярным поверхности образца и расположенным с одинаковым шагом (вертикальных ветвей, рис. 2а). Узлы соседних вертикальных ветвей, находящиеся на одном и том же расстоянии от поверхности (одинакового уровня), соединены

горизонтальными ветвями. Пересечение вертикальных ветвей с поверхностью может образовывать треугольную, квадратную, гексагональную и т.д. сетку. Все ветви имеют одинаковую длину  $l$ .

В силу симметрии задачи ограничимся рассмотрением отдельного вертикального (перпендикулярного внешней границе) пути, составленного из вертикальных ветвей, из каждого узла выходит  $m$  горизонтальных ветвей, поток через середину каждой горизонтальной ветви равен нулю. Переобозначим систему координат с учетом симметрии. Обозначим  $y_k$  — координату, отсчитываемую в направлении вниз вдоль  $k$ -ой сверху (от границы) вертикальной ветви,  $k$ -ый узел, на котором заканчивается  $k$ -ая вертикальная ветвь,  $z_k$  — координату вдоль каждой горизонтальной ветви, выходящей из  $k$ -го узла, отсчитываемую от него.  $k$ -ая вертикальная ветвь,  $k$ -ый узел и ближайшие к этому узлу половины горизонтальных ветвей, выходящих из этого узла, образуют  $k$ -ую ячейку (рис. 2б). Узел, лежащий на поверхности, имеет уровень  $k = 0$ . Задачу будем решать операционным методом, начальную концентрацию положим равной нулю, на границе поддерживается фиксированная концентрация ( $c$ ), равная 1 (для простоты), что соответствует условию:

$$\bar{c}(0) = A_0 = 1/p. \quad (1)$$

Диффузия в каждой ветви описывается обычным уравнением диффузии с постоянным коэффициентом, решение которого, имеет вид (в изображениях):

$$\bar{c}_k = A_k(p) \operatorname{ch}\left(\sqrt{\frac{p}{D}} y_k\right) + B_k(p) \operatorname{sh}\left(\sqrt{\frac{p}{D}} y_k\right) \quad (2)$$

для вертикальной ветви, и

$$\bar{\sigma}_k = a_k(p) \operatorname{ch}\left(\sqrt{\frac{p}{D}} z_k\right) + b_k(p) \operatorname{sh}\left(\sqrt{\frac{p}{D}} z_k\right) \quad (3)$$

для горизонтальных ветвей. Условие равенства нулю суммарного потока, сходящегося к узлу можно записать в виде

$$mb_{k-1} + B_k = A_{k-1} \operatorname{sh}\left(\sqrt{\frac{p}{D}} l\right) + B_{k-1} \operatorname{ch}\left(\sqrt{\frac{p}{D}} l\right). \quad (4)$$

Кроме того, в силу непрерывности концентрации в каждой ветви

$$A_{k-1}(p) \operatorname{ch}\left(\sqrt{\frac{p}{D}} l\right) + B_{k-1}(p) \operatorname{sh}\left(\sqrt{\frac{p}{D}} l\right) = a_{k-1} = A_k. \quad (5)$$

Равенство нулю потока через середину боковых ветвей легко привести к виду

$$b_k/a_k = -\operatorname{th}\left(\sqrt{\frac{p}{D}} \frac{l}{2}\right). \quad (6)$$

Уравнение (4) с учетом (5), (6) и очевидных соотношений:

$$\operatorname{ch}(\varphi) \operatorname{th}\left(\frac{\varphi}{2}\right) = \operatorname{sh}(\varphi) - \operatorname{th}\left(\frac{\varphi}{2}\right), \quad (7)$$

$$\operatorname{sh}(\varphi) \operatorname{th}\left(\frac{\varphi}{2}\right) = \operatorname{ch}(\varphi) - 1 \quad (8)$$

можно записать в виде:

$$B_k = \left[ (m+1) \operatorname{sh}\left(\sqrt{\frac{p}{D}} l\right) - m \operatorname{th}\left(\sqrt{\frac{p}{D}} \frac{l}{2}\right) \right] A_{k-1} + \left[ (m+1) \operatorname{ch}\left(\sqrt{\frac{p}{D}} l\right) - m \right] B_{k-1}. \quad (9)$$

Система уравнений (5), (9) позволяет найти пару коэффициентов ( $A_k B_k$ ), если известны значения ( $A_{k-1} B_{k-1}$ ). С учетом условия (1) эта система имеет единственное ограниченное решение:

$$A_k = \lambda^k / p; \quad (10)$$

$$B_k = -A_k \left[ \frac{m - m \operatorname{ch}\left(\sqrt{\frac{p}{D}} l\right)}{2} + \sqrt{\frac{\left[ (m+2) \operatorname{ch}\left(\sqrt{\frac{p}{D}} l\right) - m \right]^2}{4} - 1} \right] / \operatorname{sh}\left(\sqrt{\frac{p}{D}} l\right), \quad (11)$$

где

$$\lambda = \left[ \frac{(m+2) \operatorname{ch}\left(\sqrt{\frac{p}{D}} l\right) - m}{2} + \sqrt{\frac{\left[ (m+2) \operatorname{ch}\left(\sqrt{\frac{p}{D}} l\right) - m \right]^2}{4} - 1} \right]^{-1}. \quad (12)$$

(См. Приложение А). Найдем теперь изображение общего количества примеси в одной ячейке (рис. 2б) с учетом (4), (5):

$$\begin{aligned} \langle \bar{c}_{\text{cell}} \rangle &= \pi r^2 \times \\ &\times \left\{ \int_0^l \left[ A_k(p) \operatorname{ch}\left(\sqrt{\frac{p}{D}} y\right) + B_k(p) \operatorname{sh}\left(\sqrt{\frac{p}{D}} y\right) \right] dy + \right. \\ &+ m \int_0^{l/2} \left[ a_k(p) \operatorname{ch}\left(\sqrt{\frac{p}{D}} z\right) + b_k(p) \operatorname{sh}\left(\sqrt{\frac{p}{D}} z\right) \right] dz \left. \right\} = \\ &= \pi r^2 \sqrt{\frac{D}{p}} [\lambda - 1] B_k(p), \end{aligned} \quad (13)$$

где  $r$  — эффективный радиус тройного стыка.

Все уравнения (10)–(13) в принципе позволяют решить поставленную задачу. Но найти обратное преобразование Лапласа от полученного решения в общем случае не представляется возможным. Так как для эксперимента требуется, чтобы количество примеси в системе было достаточно большим, что соответствует большим временам, когда глубина проникновения примесей значительно превосходит  $l$ , то далее рассмотрим именно этот случай. Известно [15] что оригинал  $f(t)$  и изображение  $F(p)$  связаны следующим соотношением:

$$\lim_{p \rightarrow 0} pF(p) = \lim_{t \rightarrow \infty} f(t). \quad (14)$$

Следовательно, поведение оригинала при больших временах должно определяться поведением изображения при малых значениях параметра  $p$ . Проведем разложение полученного решения по параметру  $p$ . Ограничившись первыми двумя членами, находим изображение общего количества примеси в одной ячейке при достаточно больших временах (Приложение В):

$$\begin{aligned} \langle c_{\text{кcell}} \rangle \approx & l \frac{\pi r^2 (m+2)}{2} \operatorname{erfc} \left\{ \frac{kl}{2} \sqrt{\frac{(m+2)}{2Dt}} \right\} - \\ & - \frac{l^2 \pi r^2}{2} \sqrt{\frac{(m+2)}{2\pi Dt}} \exp \left\{ -\frac{k^2 l^2 (m+2)}{8Dt} \right\}. \end{aligned} \quad (15)$$

Первый член разложения описывает диффузию в однородной среде с эффективным коэффициентом диффузии  $D_{\text{эф}} = 2D/(m+2)$ . Полученный результат очевиден: при больших временах сеть ведет себя как однородный материал (квазистационарный режим).

### КВАЗИСТАЦИОНАРНЫЙ РЕЖИМ

Рассмотрим теперь диффузию по системе тройных стыков в квазистационарном режиме, когда концентрация в тройных стыках определяется только расстоянием от источника  $c = c(y)$ . Пути могут идти под произвольными углами (рис. 3а). Материал считаем безтекстурным, следовательно, изотропным. Величина потока вдоль произвольного участка пути (достаточно малого, чтобы его считать прямолинейным) равна

$$j_s = -D \frac{\partial c}{\partial s} = -D \frac{\partial c}{\partial y} \frac{dy}{ds} = -D \frac{\partial c}{\partial y} \cos \alpha, \quad (16)$$

где  $s$  – натуральный параметр пути,  $\alpha$  – угол между осью  $y$  и направлением пути. Составляющая потока вдоль оси  $y$  равна

$$j_y = -D \frac{\partial c}{\partial y} \left( \frac{dy}{ds} \right)^2 = -D \frac{\partial c}{\partial y} \cos^2 \alpha. \quad (17)$$

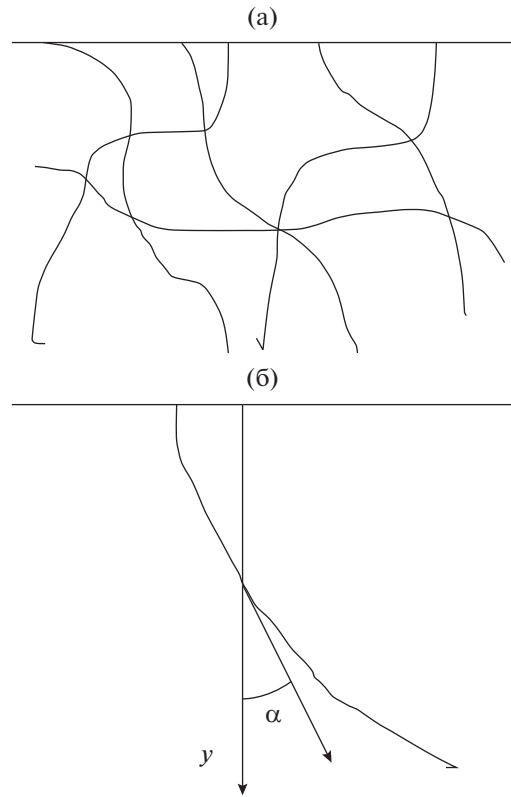


Рис. 3. Истинный вид тройных стыков: (а) общий вид (б) к выводу формул (16), (17).

Заметим, что

$$\left( \frac{dz}{ds} \right)^2 + \left( \frac{dx}{ds} \right)^2 + \left( \frac{dy}{ds} \right)^2 = 1, \quad (18)$$

и в силу изотропии материала для средних величин можно записать

$$\left\langle \left( \frac{dx}{ds} \right)^2 \right\rangle + \left\langle \left( \frac{dy}{ds} \right)^2 \right\rangle + \left\langle \left( \frac{dz}{ds} \right)^2 \right\rangle = 1, \quad (19)$$

где угловые скобки означают усреднение по всевозможным ориентировкам тройных стыков. Используя (17)–(19) можно записать связь между градиентом концентрации и средним потоком

$$\langle j_y \rangle = -D_{\text{эф}} \frac{\partial c}{\partial y}, \quad (20)$$

где эффективный коэффициент диффузии равен  $D_{\text{эф}} = D/3$ . Сопоставление (20) и (16) дает возможность выбрать правильную модель диффузии по сети тройных стыков и конкретизировать вид решений (10), (11) и (15). Приравнявая значения эффективных коэффициентов диффузии, входящих в выражения (15) и (20), находим  $m = 4$ , что

соответствует модели кубических зерен. Тогда решение (15) принимает вид:

$$\langle c_{\text{кcell}} \rangle \approx 3 \operatorname{erfc} \left\{ \frac{kl}{2} \sqrt{\frac{3}{Dt}} \right\} - \frac{l^2}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi Dt}} \exp \left\{ -\frac{3k^2 l^2}{Dt} \right\}. \quad (21)$$

Поделив уравнение (21) на объем ячейки и отбросив поправочный член, найдем среднюю слоювую концентрацию для слоя толщины  $l$ :

$$\langle c \rangle = \eta \operatorname{erfc} \left\{ \frac{y}{2\sqrt{D_{\text{eff}}t}} \right\}, \quad (22)$$

где  $D_{\text{eff}} = D/3$  – эффективный коэффициент диффузии,  $y = kl$  – макроскопическая координата, отсчитываемая от поверхности полупространства и перпендикулярная этой поверхности,  $\eta = 3\pi l^2/r^2$  – объемная доля тройных стыков. Формула (22) применима, если толщина слоя кратна  $l$ , либо значительно превосходит  $l$ , но из-за хаотической упаковки зерен в реальном материале формулу можно применять и в общем случае.

### ОБСУЖДЕНИЕ

Найдем условия квазистационарного режима. Считая, что погрешность решения (22) имеет порядок первой поправки, потребуем, чтобы отношение первой поправки к основному члену в уравнении (21) не превосходило  $\varepsilon$ . Используя формулу (П. 3) из нашей работы [16]:

$$\operatorname{erfc}(u) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{\exp(-u^2)}{u + \sqrt{u^2 + \alpha(u)}}, \quad (23)$$

где  $4/\pi < \alpha(u) < 2$ , запишем искомое условие в виде:

$$\frac{(u + \sqrt{u^2 + \alpha(u)})u}{6k} = \frac{l(u + \sqrt{u^2 + \alpha(u)})}{4\sqrt{3Dt}} < \varepsilon, \quad (24)$$

где  $u = y/(2\sqrt{D_{\text{eff}}t})$ . Заметим, что для проведения диффузионного эксперимента концентрация примеси должна превосходить некоторую величину  $\Delta$ . Известно, что один из наиболее чувствительных методов исследования диффузии в твердых телах – метод радиоактивных изотопов позволяет использовать концентрации значительно меньше 1ppm. Поэтому положим  $10^{-8} \leq \Delta \leq 10^{-1}$ . Тогда  $0 \leq u \leq 4.06$  (т.к.  $\operatorname{erfc}(4.06) = 9.4 \times 10^{-9}$ ). Тогда условие (24) заведомо выполняется для истинной диффузионной длины:

$$2\sqrt{Dt} > 2.413 \frac{l}{\varepsilon}. \quad (25)$$

Например, если положить  $\varepsilon = 10\%$ , то диффузионная длина должна превосходить  $24l$ , а при  $\varepsilon = 1\%$  –  $241l$ .

### ВЫВОДЫ

1. Сеть тройных стыков при достаточно больших временах, когда диффузионная длина значительно (на два порядка) превосходит линейный размер ячейки сети, ведет себя, как однородная среда, диффузионные свойства которой определяются долей диффузионных путей и эффективным коэффициентом диффузии.

2. В отсутствие текстуры эффективный коэффициент диффузии составляет одну треть от истинного.

3. Для данного случая найдено выражение для средней слоювой концентрации.

Работа выполнена в рамках государственного задания по теме “Давление” Г. р. № 122021000032-5.

### ПРИЛОЖЕНИЕ А

Уравнения (5), (9) позволяют найти  $(A_k B_k)$ , если известны значения  $(A_{k-1} B_{k-1})$ . Эти уравнения можно записать в следующей матричной форме:

$$\begin{pmatrix} A_k \\ B_k \end{pmatrix} = \Lambda \begin{pmatrix} A_{k-1} \\ B_{k-1} \end{pmatrix}, \quad (A1)$$

где матрица

$$\Lambda = \begin{pmatrix} \operatorname{ch}\left(\sqrt{\frac{p_l}{D}}\right) & \operatorname{sh}\left(\sqrt{\frac{p_l}{D}}\right) \\ (m+1)\operatorname{sh}\left(\sqrt{\frac{p_l}{D}}\right) - (m+1)\operatorname{ch}\left(\sqrt{\frac{p_l}{D}}\right) - & \\ -m\operatorname{th}\left(\sqrt{\frac{p_l}{D}}\right) & -m \end{pmatrix}. \quad (A2)$$

Приведем ее к диагональному виду, при котором

$$A_k = \lambda A_{k-1}, \quad B_k = \lambda B_{k-1}. \quad (A3)$$

Для этого рассмотрим характеристический многочлен:

$$\begin{aligned} |\Lambda - \lambda E| &= (m+1)\operatorname{ch}^2\left(\sqrt{\frac{p_l}{D}}\right) - m\operatorname{ch}\left(\sqrt{\frac{p_l}{D}}\right) - \\ &- \left[ (m+2)\operatorname{ch}\left(\sqrt{\frac{p_l}{D}}\right) - m \right] \lambda + \lambda^2 - \\ &- (m+1)\operatorname{sh}^2\left(\sqrt{\frac{p_l}{D}}\right) + m \left[ \operatorname{ch}\left(\sqrt{\frac{p_l}{D}}\right) - 1 \right] = \\ &= \lambda^2 - \left[ (m+2)\operatorname{ch}\left(\sqrt{\frac{p_l}{D}}\right) - m \right] \lambda + 1 = 0. \end{aligned} \quad (A4)$$

Уравнение (A4) имеет решения

$$\lambda_{1,2} = \frac{(m+2) \operatorname{ch}\left(\sqrt{\frac{pl}{D}}\right) - m}{2} \pm \sqrt{\operatorname{Discr}}, \quad (\text{A5})$$

где

$$\operatorname{Discr} = \frac{\left[(m+2) \operatorname{ch}\left(\sqrt{\frac{pl}{D}}\right) - m\right]^2}{4} - 1. \quad (\text{A6})$$

Заметим, что знак “+” соответствует  $|\lambda| > 1$ , т.е. решению, неограниченно растущему по мере удаления от источника. Такое решение не имеет физического смысла. Собственное значение, удовлетворяющее условию  $|\lambda| < 1$  с использованием (A5), (A6) и теоремы Виета можно записать в виде (12). Пространство решений уравнения (A1), определяется вырожденной однородной системой уравнений с матрицей  $(\Lambda - \lambda E)$ . Разрешая первое из уравнений этой системы для случая (12) относительно  $B_k$ , находим уравнение (11).

#### ПРИЛОЖЕНИЕ В

Проведем разложение полученного решения по параметру  $p$ , ограничившись первыми двумя членами. Разложим сперва дискриминант (A6)

$$\begin{aligned} \operatorname{Discr} &= \frac{\left[(m+2) \operatorname{ch}\left(\sqrt{\frac{pl}{D}}\right) - m\right]^2}{4} - 1 = \\ &= (m+2) \frac{pl^2}{2D} \left[1 + \frac{(3m+8)p^2l^4}{24D^2} + \dots\right]. \end{aligned} \quad (\text{B1})$$

Тогда, используя выражение (12) и (B1), оценим  $\lambda$ :

$$\begin{aligned} \lambda &= \frac{1}{(m+2) \left(1 + \frac{pl^2}{2D} + \frac{p^2l^4}{24D^2} + \dots\right) - m} + \sqrt{\operatorname{Discr}} = \\ &\approx \frac{1}{1 + \sqrt{(m+2) \frac{pl^2}{2D} + (m+2) \frac{l^2p}{4D}}}. \end{aligned} \quad (\text{B2})$$

Интерес представляют расстояния, значительно превосходящие  $l$ . Множитель  $\lambda^k$  можно записать в виде:

$$\begin{aligned} \lambda^k &\approx \exp\left\{-k \ln\left[1 + \sqrt{(m+2) \frac{pl^2}{2D} + (m+2) \frac{l^2p}{4D}}\right]\right\} \approx \\ &= \exp\left\{-k \sqrt{(m+2) \frac{pl^2}{2D}}\right\}. \end{aligned} \quad (\text{B3})$$

Выражение (11) заменим следующим приближенным:

$$\begin{aligned} B_k &= -A_k \left[ \frac{m}{2} \left(1 - 1 - \frac{l^2p}{2D} - \frac{p^2l^4}{24D^2}\right) + \sqrt{(m+2) \frac{pl^2}{2D}} \right. \\ &\times \left. \left(1 + \frac{(3m+8)p^2l^4}{48D^2} + \dots\right) \right] / \left[ \sqrt{\frac{pl}{D}} + \frac{l^2p}{6D} \sqrt{\frac{pl}{D}} \right] \approx \\ &\approx -A_k \sqrt{\frac{(m+2)}{2}} \left[1 - \frac{m}{4} l \sqrt{\frac{2p}{(m+2)D}}\right]. \end{aligned} \quad (\text{B4})$$

Теперь, используя формулы (12), (15), (B3), (B4), найдем изображение общего количества примеси в одной ячейке:

$$\begin{aligned} \langle \bar{c}_{\text{кcell}} \rangle &= -\frac{1}{p} \sqrt{\frac{D}{p}} \sqrt{\frac{(m+2)}{2}} \left[1 - \frac{m}{4} l \sqrt{\frac{2p}{(m+2)D}}\right] \times \\ &\times \left[1 - l \sqrt{\frac{p(m+2)}{2D}} - (m+2) \frac{l^2p}{4D} + (m+2) \frac{l^2p}{2D} - 1\right] \times \\ &\times \exp\left\{-k \sqrt{(m+2) \frac{pl^2}{2D}}\right\} \approx \frac{l(m+2)}{p} \times \\ &\times \left[1 - l \sqrt{\frac{p}{2(m+2)D}}\right] \exp\left\{-k \sqrt{(m+2) \frac{pl^2}{2D}}\right\}. \end{aligned} \quad (\text{B5})$$

Используя формулы для обратного преобразования Лапласа [17]:

$$\frac{e^{-\alpha\sqrt{p}}}{p} \rightarrow \operatorname{erfc}\left(\frac{\alpha}{2\sqrt{t}}\right), \quad \frac{e^{-\alpha p}}{\sqrt{p}} \rightarrow \frac{1}{\sqrt{\pi t}} \exp\left(\frac{\alpha}{4t}\right), \quad (\text{B6})$$

находим количество примеси в ячейке (15).

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Колобов Ю.Р., Липницкий А.Г., Иванов М.Б., Голосов Е.В. Роль диффузионно-контролируемых процессов в формировании структуры и свойств металлических наноматериалов // Композиты и наноструктуры. 2009. № 2. С. 5–23.
2. Грабовецкая Г.П., Мишин И.П., Раточка И.В., Псахье С.Г., Колобов Ю.Р. Зернограничная диффузия никеля в субмикрористаллическом молибдене, полученном интенсивной пластической деформацией // Письма в ЖТФ. 2008. Т. 34. Вып. 4. С. 1–7.
3. Колобов Ю.Р., Грабовецкая Г.П., Иванов К.В., Гирсова Н.В. Влияние состояния границ и размера зерен на механизмы ползучести субмикрористаллического никеля // ФММ. 2001. Т. 91. № 5. С. 107–112.
4. Осинников Е.В., Мурзинова С.А., Истомина А.Ю., Попов В.В., Столбовский А.В., Фалахутдинов Р.М. Зернограничная диффузия  $^{57}\text{Co}$  в ультрамелкозернистом никеле, полученном, интенсивной пластической деформацией // ФММ. 2021. Т. 122. № 10. С. 1049–1053.
5. Мерер Х. Диффузия в твердых телах Пер. с англ. Долгопрудный: Интеллект, 2011. 536 с.

6. *Chen Y., Shutz C.A.* Geometric considerations for diffusion in polycrystalline solids // *J. Appl. Phys.* 2007. V. 101. P. 063524.
7. *Chen Y., Shutz C.A.* Contribution of triple junction to diffusion anomaly in nanocrystal in materials // *Scripta Mater.* 2007. V. 57. P. 253–256.
8. *Колобов Ю.Р., Липницкий А.Г., Неласов И.В., Грабовецкая Г.П.* Исследование и компьютерное моделирование процесса межзеренной диффузии в субмикро- и нанокристаллических материалах // *Изв. Вузов. Физика.* 2008. Т. 51. № 4. С. 47–60.
9. *Nazarov A.A., Romanov A.E., Valiev R.Z.* Models of the defect structure and analysis of the mechanical behavior of nanocrystals // *Nano Structured Mater.* 1995. V. 6. P. 775–778.
10. *Ribbe J., Baither D., Schmitz G., Divinski S.V.* Ultrafast diffusion and internal porosity in ultrafine-grained copper-lead alloy prepared by equal channel angular pressing // *Scripta Mater.* 2009. V. 61. P. 129–132.
11. *Klinger L.M., Levin L.A., Petelin A.L.* The model of triple Junction Diffusion // *Defect and Diffusion Forum.* 1997. V. 143–147. P. 1523–1526.
12. *Levine H.S., MacCallum C.J.* Grain Boundary and Lattice Diffusion in Polycrystalline Bodies // *J. Appl. Phys.* 960. V. 31. № 4. P. 595–599.
13. *Каур И., Густ В.* Диффузия по границам зерен и фаз. М.: “Машиностроение”, 1991. 447 с.
14. *Грабовецкая Г.П., Раточка И.В., Колобов Ю.Р., Пучкарева Л.Н.* Сравнительные исследования зернограницной диффузии меди в субмикро- и крупнокристаллическом никеле // *ФММ.* 1997. Т. 83. № 3. С. 112–115.
15. *Лаврентьев М.А., Шабат Б.В.* Методы теории функций комплексного переменного. М.: Наука. Главная редакция физико-математической литературы, 1973. 595 с.
16. *Кесарев А.Г., Кондратьев В.В., Ломаев И.Л.* К теории атомной диффузии после ионной имплантации // *ФММ.* 2018. Т. 119. № 11. С. 1160–1165.
17. *Диткин. В.А., Прудников А.П.* Справочник по операционному исчислению. М.: Высшая Школа, 1965. 466 с.