

УДК 539.219.3:620.186.8

**АНАЛИЗ ВЛИЯНИЯ ПАРАМЕТРОВ МИКРОСТРУКТУРЫ НА  
АНОМАЛЬНЫЙ РОСТ ЗЕРЕН В СУБМИКРОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ  
МЕТАЛЛАХ И СПЛАВАХ  
Часть I. ФИЗИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ**

© Владимир Николаевич Перевезенцев, Александр Сергеевич Пупынин  
Институт проблем машиностроения РАН – филиал Федерального исследовательского  
центра «Институт прикладной физики Российской академии наук»,  
Нижний Новгород, Россия  
[pupynin.as@gmail.com](mailto:pupynin.as@gmail.com)

*Аннотация.* Разработана физическая модель аномального роста зёрен при отжиге субмикроструктурных металлов и сплавов, полученных методами интенсивной пластической деформации. В основе модели лежат представления об ускорении диффузии в границах аномально растущего зерна, связанном с переходом быстро мигрирующих границ в сильно неравновесное состояние. Модель позволяет учесть влияние на процесс аномального роста зёрен таких параметров как исходный разброс зерен по размерам, исходная плотность дислокаций в границах зерен и объемная доля частиц второй фазы.

*Ключевые слова:* неравновесные границы зерен, субмикроструктурные материалы, миграция границ, аномальный рост зерен.

Работа выполнена в рамках государственного задания ИПФ РАН на проведение фундаментальных научных исследований на 2013-2020 гг. по теме № 0035-2014-0401.

**ANALYSIS OF INFLUENCE OF PARAMETERS OF  
MICROSTRUCTURE ON ANOMALOUS GROWTH OF GRAINS IN  
SUBMICROCRYSTALLINE METALS AND ALLOYS  
Part I. PHYSICAL MODEL**

© V.N. Perevezentsev, A.S. Pupynin  
Mechanical Engineering Research Institute, Russian Academy of Sciences,  
Nizhny Novgorod, Russia  
[pupynin.as@gmail.com](mailto:pupynin.as@gmail.com)

*Abstract.* A physical model of anomalous growth of grains during annealing of submicrocrystalline metals and alloys obtained by the methods of intense plastic deformation is developed. The model is based on the idea of the acceleration of diffusion within the boundaries of anomalously growing grain, associated with the transition of rapidly migrating boundaries to a highly nonequilibrium state. The model allows to take into account the influence on the process of anomalous grain growth of such parameters as the initial spread of grains in size, the initial dislocation density in the grain boundaries, and the volume fraction of the particles of the second phase.

*Keywords:* nonequilibrium grain boundaries, submicrocrystalline materials, boundary migration, anomalous grain growth.

*Acknowledgements.* The work was carried out within the Russian state task of the Institute of Applied Physics for conducting fundamental scientific research for 2013-2020 on the topic No. 0035-2014-0401.

**Введение.** Экспериментальные данные показывают, что в субмикроструктурных (СМК) металлах, полученных методами интенсивной пластической деформации (ИПД) [1], часто наблюдается аномальный рост зерен [2-4]. При кратковременных отжигах в структуре СМК материала на фоне мелкозернистой «матрицы» возможно появление отдельных зерен, размер которых существенно превышает размер зерен «матрицы». На примере СМК никеля [5] и алюминий-магниевого сплава [6] было показано, что путем кратковременных отжигов можно целенаправленно создавать бимодальную структуру с необходимыми долями мелких и крупных зерен и, как следствие, целенаправленно изменять прочностные и пластические свойства материала [5,6]. Аномальный рост зерен наблюдается также и в ряде алюминиевых сплавов [7]. Формирование бимодальной структуры при отжигах в указанных материалах приводит к увеличению долговечности при испытаниях образцов на малоцикловую усталость по сравнению с образцами непосредственно после равноканального углового прессования (РКУП) [8]. Как свидетельствуют экспериментальные данные [9] и результаты теоретических расчетов [10,11], такой показатель пластичности как однородное удлинение, также зависит от объемной доли крупных зерен. Создавая бимодальную структуру, удаётся, по крайней мере в некоторых случаях, увеличить как прочность, так и показатели пластичности материала. Так, формирование бимодальной структуры в меди после РКУП и последующих кратковременных отжигах (10 мин) ниже температуры начала рекристаллизации [12] приводит к повышению прочности при сжатии и высокой однородности пластического течения материала.

Приведённые выше факты говорят о том, что создание бимодальной структуры является одним из перспективных методов управления прочностными и пластическими характеристиками СМК металлов и сплавов, полученных методами ИПД. В связи с этим становится весьма актуальной разработка адекватной физической модели аномального роста зёрен с целью установления характера влияния на него и на формирующуюся в этих материалах бимодальную структуру режимов отжига и параметров микроструктуры (исходного размера зерна, объёмной доли второй фазы и др.).

Принципиальное отличие предлагаемой в данной работе модели аномального роста зёрен от предложенных ранее моделей [13,14], основанных на анализе движущих сил роста зёрен, заключается в том, что в качестве основной причины аномального роста зёрен рассматривается возможность перехода быстро мигрирующих границ зёрен в сильно неравновесное состояние, характеризующееся аномально высокой скоростью зернограничной диффузии [15-18].

**Описание модели.** Рассмотрим процессы, происходящие при аномальном росте зерен в СМК металлах и сплавах, полученных методами ИПД. При этом следует учесть такую специфическую особенность структуры таких материалов, как наличие предельно высоких значений плотности дислокаций ( $\approx 10^7 - 10^8 \text{ м}^{-1}$ ), накопившихся в границах зерен в процессе предшествующей деформации [19].

Границы растущего зерна «заматают» примыкающие к нему участки границ соседних зерен. При этом принадлежащие последним зернограничные атомы встраиваются в кристаллическую решетку растущего зерна, а их избыточный (по отношению к их объему в кристаллической решетке) объем выделяется в виде вакансий в границах растущего зерна. Важно, что вакансии в неупорядоченной атомной структуре обычной границы при повышенных температурах неустойчивы и делокализуются [17], приводя к увеличению ее неравновесного избыточного («свободного») объема. Помимо рассмотренного увеличения избыточного объема мигрирующей границы может осуществляться и его уменьшение, вызванное термоактивированным процессом возникновения в границе локализованных вакансий и выходом их в объем соседних зерен [16]. Кинетика изменения неравновесного относительного избыточного объема  $f$  границы, мигрирующей со скоростью  $V_m$  описывается уравнением [17,18]:

$$\dot{f} = \varphi \frac{V_m}{a_0} f^* - \frac{\Omega_v}{\delta} [2A_0 \exp(\alpha f) - B(2C^* + \Delta C_1 + \Delta C_2)_{(r=d/2)}], \quad (1)$$

Здесь:  $f$  - неравновесный относительный избыточный объем, приходящийся на один атом границы,  $A_0 = \omega_b/a^2 \exp(-(F_{vf} + \Delta F)/kT + \alpha f^*)$ ,  $\alpha = K_b v_b^0/2kT$ ,  $K_b$  - модуль всестороннего сжатия,  $v_b^0$  - объем зернограницного атома,  $B = a \omega \exp(-\Delta F/kT)$ ,  $F_{vf}$  и  $\Delta F$  - свободная энергия образования решеточной вакансии и энергия активации перескока атома из объема зерна в границу, соответственно;  $\omega_b$  и  $\omega$  - частота колебаний атомов в границе и в объеме зерна;  $a$  - межатомное расстояние;  $\varphi$  - геометрический множитель;  $d_0$  - средний размер зерен матрицы;  $f^*$  - избыточный объем атома равновесной границы [13];  $\Omega_v$  - объем вакансии;  $\delta$  - ширина границы зерна;  $\Delta C_1$  и  $\Delta C_2$  - концентрации неравновесных вакансий внутри растущего зерна и вне его;  $C^*$  - равновесная концентрация вакансий вблизи границы,  $k$  - постоянная Больцмана;  $T$  - температура. Первое слагаемое в (1) описывает увеличение  $f$  за счет «заметания» мигрирующей границей примыкающих к ней участков границ соседних зерен, а второе - его уменьшение за счет обмена вакансиями между границей и объемом зерна. Первое слагаемое в квадратных скобках описывает процесс термофлуктуационного возникновения в границе локализованных вакансий и выхода их в объем как растущего зерна, так и соседних зерен, второе слагаемое - процесс перескока вакансий из объема зерен в границу [21].

Как показано в [15], коэффициент зернограницной диффузии экспоненциально зависит от неравновесного относительного избыточного объема границы:

$$D_b = D_b^* \exp(\alpha f), \quad (2)$$

где  $D_b^*$  - коэффициент диффузии равновесной границы.

Увеличение степени неравновесности границы (т.е. величины  $f$ ) приводит к ускорению диффузии по границам растущего зерна и, как следствие, увеличению их подвижности,  $M_b = D_b \delta b / kT$  ( $b$  - вектор Бюргерса), и скорости миграции  $V_m$ . При дальнейшем рассмотрении следует учесть такую специфическую особенность границ зёрен в СМК материалах, как наличие высокой линейной плотности дислокаций ( $\rho_b \approx 10^7 - 10^8 \text{ m}^{-1}$ ), накопившихся в процессе предшествующей ИПД [19]. В процессе миграции границ аномально растущего зерна и «заметания» ими участков границ соседних зерен расположенные в последних дислокации переходят на границы растущего зерна, изменяя их миграционную подвижность. Как показано в [22], эффективный коэффициент миграционной подвижности такой границы имеет вид:

$$M_{eff} = \frac{M_{\perp} M_b}{M_{\perp} + M_b \rho_b \Delta b_t}, \quad (3)$$

где:  $\Delta b_t$  - тангенциальная составляющая вектора Бюргерса дислокаций,  $M_{\perp} = (2\pi/\ln(d/b))(\bar{D}\Omega/kT\Delta b_t)$  - подвижность дислокаций [21],  $\bar{D} = D_s + \beta\delta D_b/d$  - эффективный коэффициент диффузии,  $D_s$  - коэффициент объемной самодиффузии,  $\beta$  - геометрический множитель,  $\Omega$  - объем атома «матрицы».

Таким образом, скорость аномального роста зерен  $\dot{d}$  можно записать в виде:

$$\dot{d} \approx V_m = M_{eff} (P_{\gamma} - P_Z), \quad (4)$$

где  $P_{\gamma} = \gamma_b/d_0 \Delta d/d_0(1 + \Delta d)$  - движущая сила миграции, обусловленная поверхностным натяжением границ,  $\gamma_b$  - удельная поверхностная энергия границы,  $\Delta d = d - d_0$ ,  $d$  - размер аномально растущего зерна;  $P_Z = 3\gamma_b f_v / 2R_p$  - сила торможения Зинера, действующая на

мигрирующую границу со стороны частиц второй фазы,  $f_v$  и  $R_p$  - объемная доля и радиус частиц второй фазы, соответственно.

В процессе отжига плотность дислокаций в мигрирующей границе меняется со временем. Соответствующее кинетическое уравнение баланса для нее имеет вид:

$$\dot{\rho}_b = \varphi_1 \frac{V_m \cdot d \cdot \rho_{b0}}{d_0^2} - \frac{\rho_b}{t_R}, \quad (5)$$

Здесь:  $\varphi_1$  - геометрический множитель,  $t_R = 1/C(kT/G\Omega)(b/\delta)(d^2/D_b\rho_b\Delta b_t)$  - характерное время переползания дислокаций до их аннигиляции с дислокациями другого знака ( $C$  - численный коэффициент,  $G$  - модуль сдвига) [22],  $\rho_{b0}$  - плотность дислокаций в границах зерен «матрицы». Первое слагаемое соответствует увеличению плотности дислокаций за счет «заметания» мигрирующей границей соседних зёрен, а второе – ее уменьшению за счет процессов возврата. Отметим, что величина  $\rho_{b0}$  также не остается неизменной в процессе отжига. В дальнейшем для описания кинетики уменьшения  $\rho_{b0}$  используем уравнение:

$$\dot{\rho}_{b0} = - \frac{\rho_{b0}}{t_{R0}}, \quad (6)$$

где  $t_{R0} = t_R(d = d_0, D_b = D_b^*)$ .

Приведённая система уравнений позволяет адекватно описать процессы, происходящие при миграции границ и росте зёрен при отжиге СМК материалов. В рамках данной модели аномальный рост будут испытывать те зерна, на границах которых действует максимальная движущая сила (изначально наиболее крупные зерна) и которые вследствие этого имеют наибольшую стартовую скорость роста. Высокая начальная скорость миграции этих границ приводит к тому, что скорость увеличения неравновесного свободного объема этих границ выше, чем скорость его уменьшения за счет эмиссии вакансий в объем зерен. В силу этого границы таких зерен продолжительное время имеют более высокую подвижность, чем границы зерен окружающей аномально растущее зерно матрицы. Тем не менее, в процессе отжига происходит накопление в мигрирующих границах дислокаций, заметаемых из окружающего объема при росте зерна. Постепенно этот процесс уменьшает подвижность и скорость мигрирующих границ, при этом их неравновесный объем начинает уменьшаться, скорость границ падает, и, наконец, миграция границ останавливается. В результате возникает бимодальная структура из относительно крупных зерен на фоне мелкозернистой матрицы.

Для проведения численных расчетов кинетики аномального роста зерен систему уравнений (1)-(6) следует дополнить уравнениями диффузии, позволяющими рассчитать входящие в (1) концентрации неравновесных вакансий  $\Delta C_i$  ( $i=1,2$ ) аномально растущего зерна. Анализ результаты численного решения полной системы уравнений будет проведен во второй части данной работы.

### Выводы.

1. Предложена модель аномального роста зерен в процессе отжига субмикроструктурных материалов, полученных методами интенсивной пластической деформации. Модель основана на представлениях о том, что быстро мигрирующие границы переходят в сильно неравновесное состояние, характеризующееся аномально высокими значениями зернограницной диффузии и миграционной подвижности.
2. Получена система уравнений, позволяющая проанализировать влияние параметров структуры (исходные разброс зерен по размерам и плотность дислокаций в границах

зёрен, объемная доля частиц второй фазы) и режима отжига на кинетику изменения размера аномально растущих зерен.

### Список литературы

1. Valiev R.Z. Nanomaterial advantage // Nature. – 2002. - Vol. 419. - P.887-888.
2. Lian J., Valiev R.Z., Baudalet B. On the enhanced grain growth in ultrafine grain metals// Acta Met. Mater. – 1995. - V. 43. - P. 4165-4170.
3. Islamgaliev R.K., Amirkhanov N.M., Kurzydowski K.J., Bucki, J.J. Grain Growth in Ultrafine-Grained Copper Processed by Severe Plastic Deformation // In: Investigations and Applications of Severe Plastic Deformation. Eds. Lowe T.C. and Valiev R.Z. - Springer Netherlands, 2000. - P. 297-302.
4. Красильников Н.А., Амирханов Н.М., Исламгалиев Р.К., Валиев Р.З. Влияние степени интенсивной деформации и нагрева на эволюцию структуры композита на основе меди // Изв. Вузов. Физика. - 2002. - № 5. - С.15-22.
5. Krasil'nikov N. A. et al. Tensile strength and ductility of ultra-fine-grained nickel processed by severe plastic deformation // Mater. Sci. Eng. A 397 (2005) - P. 330–337.
6. Zha M. et al. Achieve high ductility and strength in an Al–Mg alloy by severe plastic deformation combined with inter-pass annealing // Mater. Sci. & Eng. A 598 (2014) - P. 141–146.
7. Sabirov I.N., Yunusova N.F., Islamgaliev R.K., Valiev R.Z. High-strength state of a nanostructured aluminum alloy produced by severe plastic deformation // The Physics of Metals and Metallography. - 2002. - Vol. 93, No. 1. - P. 94-99.
8. Mughrabi H. et al. Annealing treatments to enhance thermal and mechanical stability of ultrafine-grained metals // Z. Metallkd. 94 (2003). - 1079-1083.
9. Li Y.S., Zhang Y., Tao N.R., Lu K. Effect of thermal annealing on mechanical properties of a nanostructured copper prepared by means of dynamic plastic deformation // Scripta Mater. 59 (2008). - 475.
10. Zhu L. et al. A statistical model for predicting the mechanical properties of nanostructured metals with bimodal grain size distribution // Acta Mater. 60 (2012). - 5762–5772.
11. Sabirov I. et al. A theoretical study of the structure–property relations in ultra-fine metallic materials with fractal microstructures // Mater. Sci. Eng. A 559 (2013). - 543–548.
12. Jiang Q.-W., Li X.-W. Effect of pre-annealing treatment on the compressive deformation and damage behavior of ultrafine-grained copper // Mater. Sci. Eng. A 546 (2012). - 59–67.
13. Humphreys F. J. A unified theory of recovery, recrystallization and grain growth, based on the stability and growth of cellular microstructures - I. The basic model // Acta Mater. - 1997. - Vol. 45, No. 10. - P. 4231-4240.
14. Humphreys F. J. A unified theory of recovery, recrystallization and grain growth, based on the stability and growth of cellular microstructures - I. The effect of second-phase particles // Acta mater. - 1997. - Vol. 45, No. 10. - P. 5031-5039.
15. Perevezentsev V.N. A unified approach to the description of diffusion in equilibrium and nonequilibrium grain boundaries // The Physics of Metals and Metallography. - 2002. - Vol. 93, Is. 3. - P. 207-210.
16. Perevezentsev V.N., Pupylin A.S., Svirina Yu.V. Analysis of intragranular deformation influence on the grain boundary diffusive properties // Mater. Sci. Eng. A. - 2005. - Vol. 410-411. - P.273-276.
17. Perevezentsev V.N., Pupylin A.S. The theory of anomalous grain growth in submicrocrystalline materials produced by severe plastic deformation // The Physics of Metals and Metallography. - 2006. - Vol. 102, Is. 1. - P. 29-33.

18. *Перевезенцев В.Н., Путьнин А.С.* Анализ закономерностей аномального роста зерен в субмикроструктурных металлах и сплавах, содержащих дисперсные частицы второй фазы // Вопросы материаловедения. - 2006. - № 4(48). - С.5-12.
19. *Valiev, R.Z., Islamgaliev, R.K., Alexandrov, I.V.* Bulk nanostructured materials from severe plastic deformation / Progr. in Mater. Sci. – 2000. - Vol. 45(2). - P. 103-189.
20. Gleiter H. On the structure of grain boundaries in metals / Mater. Sci. Eng. – 1982. - Vol. 52. - P. 91–131.
21. *Perevezentsev V.N., Rybin V.V., Chuvil'deev V.N.* The theory of structural superplasticity – III. Boundary migration and grain growth // Acta Metall. Mater. – 1992. - Vol. 40, No. 5. - P. 907-914.
22. *Perevezentsev V.N., Rybin V.V., Chuvil'deev V.N.* The theory of structural superplasticity – I. The physical nature of the superplasticity phenomenon // Acta Metall. Mater. – 1992. - Vol. 40, No. 5. - P. 887-894.

*Дата поступления: 23 марта 2018 г.*