

УДК 539.219.3:620.186.8

**АНАЛИЗ ВЛИЯНИЯ ПАРАМЕТРОВ МИКРОСТРУКТУРЫ НА
АНОМАЛЬНЫЙ РОСТ ЗЕРЕН В СУБМИКРОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ
МЕТАЛЛАХ И СПЛАВАХ
Часть 2. РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННЫХ РАСЧЕТОВ**

© 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

Аннотация. В рамках предложенной в части 1 данной статьи физической модели проведено исследование влияния различных параметров структуры (исходного разброса зерен по размерам и объемной доли частиц второй фазы) на закономерности аномального роста зерен в процессе низкотемпературного отжига субмикроструктурных материалов, полученных методами интенсивной пластической деформации. Проанализированы условия, необходимые для аномального роста зерен и формирования в материале бимодальной зеренной структуры.

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 2. RESULTS OF SIMULATION**

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

Abstract. The influence of various parameters of the structure (initial grain size distribution and volume fraction of the second-phase particles) on the regularities of anomalous grain growth during low-temperature annealing of submicrocrystalline materials obtained by intensive plastic deformation is investigated within the framework of the physical model proposed in Part 1 of this article. The necessary conditions for the anomalous grains growth and the formation of a bimodal grain structure in the material are analyzed.

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. В работе [1] была предложена модель аномального роста зерен в субмикрористаллических (СМК) материалах, полученных методами интенсивной пластической деформации (ИПД). Согласно этой модели, по мере роста аномального зерна его границы переходят в сильнонеравновесное состояние, характеризующееся высокими скоростями зернограницной диффузии. Это связано с увеличением неравновесного избыточного объема мигрирующих границ за счет поглощения ими свободного объема примыкающих к нему участков границ зерен окружающего материала. Этот процесс приводит к увеличению подвижности границы и увеличению скорости миграции. Таким образом, чем быстрее движется граница, тем выше ее собственная подвижность. Однако, одновременно с этим происходят и другие процессы, приводящие к уменьшению скорости миграции границ. Один из них связан с уменьшением свободного объема путем эмиссии неравновесных избыточных вакансий из границ в объем зерен, а другой с увеличением плотности дислокаций, заметаемых мигрирующими границами из окружающего объема материала, что приводит к снижению их эффективной подвижности. Система уравнений, описывающая рост зерен с учетом всех вышеперечисленных факторов, имеет вид:

$$\dot{d} \approx V_m = \frac{M_{\perp} M_b}{M_{\perp} + M_b \rho_b \Delta b_t} (P_Y - P_Z), \quad (1)$$

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

$$\dot{\rho}_{b0} = - \frac{\rho_{b0}}{t_{R0}}, \quad (3)$$

$$D_b = D_b^* \exp(\alpha f), \quad (4)$$

$$\dot{f} = \varphi \frac{V_m}{d_0} f^* - \frac{\Omega_v}{\delta} [2A_0 \exp(\alpha f) - B(2C^* + \Delta C_1 + \Delta C_2)_{(r=d/2)}]. \quad (5)$$

где $M_{\perp} = (2\pi/\ln(d/b))(\bar{D}\Omega/kT\Delta b_t)$ - коэффициент подвижности дислокаций в границах зерен, $M_b = D_b \delta b/kT$ - собственная подвижность границ зерен, ρ_b - плотность дислокаций в границах, Δb_t - тангенциальная компонента вектора Бюргера, $P_Y = \gamma_b/d_0 \Delta d/d_0(1 + \Delta d)$ - движущая сила миграции, обусловленная поверхностным натяжением границ, γ_b - удельная поверхностная энергия границы, $\Delta d = d - d_0$, d - размер аномально растущего зерна, d_0 - средний размер зерен матрицы; $P_Z = 3\gamma_b f_v/2R_p$ - сила торможения Зинера, действующая на мигрирующую границу со стороны частиц второй фазы, f_v и R_p - объемная доля и радиус частиц второй фазы, $\bar{D} = D_s + \beta \delta D_b/d$, D_s - коэффициент объемной самодиффузии, β - геометрический множитель, Ω - объем атома «матрицы», D_b - коэффициент зернограницной диффузии, D_b^* - коэффициент диффузии равновесной границы, f - неравновесный относительный избыточный объем, $A_0 = \omega_b/a^2 \exp(-(F_{vf} + \Delta F)/kT + \alpha f^*)$, $\alpha = K_b v_b^0/2kT$, K_b - модуль всестороннего сжатия, v_b^0 - объем зернограницного атома, $B = a \omega \exp(-\Delta F/kT)$, F_{vf} и ΔF - свободная энергия образования решеточной вакансии и энергия активации перескока атома из объема зерна в границу, соответственно; ω_b и ω - частота колебаний атомов в границе и в объеме зерна; a - межатомное расстояние; φ - геометрический множитель; d_0 - средний размер зерен матрицы; f^* - избыточный объем атома равновесной границы, Ω_v - объем вакансии; δ - ширина границы зерна, k - постоянная Больцмана; T - температура.

В выражении (5) величины ΔC_1 и ΔC_2 представляют собой концентрации неравновесных вакансий внутри растущего зерна и вне его; C^* - равновесная концентрация вакансий вблизи границы. Для их определения дополним систему уравнений (1)-(5) стандартными диффузионными уравнениями:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \Delta C_i}{\partial t} = \frac{D_v}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \Delta C_i}{\partial r} \right), \\ -D_v \left(\frac{\partial \Delta C_i}{\partial r} \right)_{r=d/2} = J_i, \\ \left(\frac{\partial \Delta C_1}{\partial r} \right)_{r=0} = 0, \left(\frac{\partial \Delta C_2}{\partial r} \right)_{r=d} = 0, \\ \Delta C_i(r, 0) = 0, \end{array} \right. \quad (6)$$

где D_v - коэффициент объемной диффузии вакансий $J_1 = B(C^* + \Delta C_1)_{r=d/2} - A_0 \exp(\alpha f)$, $J_2 = A_0 \exp(\alpha f) - B(C^* + \Delta C_2)_{r=d/2}$.

В настоящей работе проведен анализ кинетики роста зерен, описываемой данной системой уравнений, исследована ее зависимость от исходного отклонения размера аномально растущих зерен $\Delta d/d_0$, исходной плотности дислокаций в границах зерен ρ_b и объемной доли частиц второй фазы f_v , и определены условия, необходимые для аномального роста зерен и формирования бимодальной структуры.

Результаты анализа кинетики аномального роста зерен и их обсуждение. Численные расчеты кинетики аномального роста зёрен проводились для квазиоднофазной субмикроструктурной меди при низкотемпературном отжиге ($T = 0.4T_m$), при следующих характерных значениях параметров: $d_0 = 2.5 \cdot 10^{-7} m$, $b = 2.56 \cdot 10^{-10} m$, $\delta = 2b$, $\Omega = b^3$, $\omega = 10^{13} s^{-1}$, $H_{vf}^{cr} = 10 kT_m$, $S_{vf}^{cr} = 4 k$, $H_{vm}^{cr} = 8 kT_m$, $S_{vm}^{cr} = 3 k$, $H_b^0 = 1.3 kT_m$, $S_b^0 = k$, $\Delta F = 8 kT_m$ [2], предэкспоненциальный множитель в выражении для коэффициента зернограничной диффузии $D_{b0} = 0.98 \cdot 10^{-7} m^2/s$ [3], энергия активации диффузии в равновесных границах зерен $Q_b = 9.6 kT_m$ [4]. Величина объемной доли частиц второй фазы f_v варьировалась в интервале от 0 до $2.5 \cdot 10^{-2}$, начальная плотность дислокаций $\rho_{b0} = 10^7 m^{-1}$. Для простоты предполагалось, что все частицы имеют одинаковый радиус $R_p = 50 nm$.

На рис. 1 приведены зависимости размера аномально растущих зерен от времени отжига для сплава Cu-Al₂O₃ с различной объёмной долей частиц второй фазы при заданном исходном отклонении $\Delta d/d_0$ размера аномально растущих зерен d от размера зёрен "матрицы" d_0 . Из рис. 1 видно, что аномальный рост зерен начинается после инкубационного периода t_L , протяженность которого зависит от величины $\Delta d/d_0$ и объемной доли частиц второй фазы f_v (рис. 2). Существование инкубационного периода в рассматриваемой модели связано с тем, что для СМК материалов, полученных методами ИПД, характерными являются высокие значения плотности дислокаций в границах зерен $\rho_{b0} \approx 10^7 \div 10^8 m^{-1}$, вследствие чего эффективная подвижность границ зёрен и скорость их миграции на начальной стадии отжига настолько малы, что заметного роста зерен не происходит. На этой стадии отжига плотность дислокаций в границах зерен уменьшается за счет процессов возврата, при этом подвижность и скорость миграции границ постепенно возрастают. При этом запускается процесс увеличения степени неравновесности границ за счет поглощения ими свободного объема участков границ зерен окружающего растущее зерно материала («матрицы»). Отметим, что существенное увеличение неравновесности границы возможно лишь при достаточно высоких скоростях миграции, когда скорость увеличения неравновесного избыточного объема границы за счет поглощения свободного объема «заметаемых» при ее движении участков соседних границ много больше, чем скорость его уменьшения за счет испускания вакансий в объем зерен. Очевидно, что это выполняется в том случае, когда скорость миграции границы по истечении инкубационного периода («стартовая» скорость) достаточно высока. Таким образом, аномальный рост зерен в СМК материалах возможен не всегда, а при соблюдении ряда условий, главным из которых является наличие больших движущих сил для роста зерен при одновременном ограничении подвижности границ за счет

высокой исходной плотности дислокаций, накопленных на границе в процессе предварительной пластической деформации.

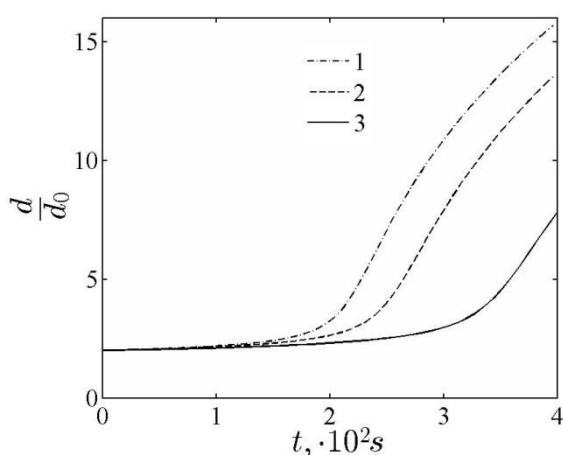


Рис. 1. Зависимость размера anomalously растущих зерен от времени отжига сплава Cu- Al₂O₃ при различной объемной доле частиц второй фазы: 1 – $f_v = 0.5 \cdot 10^{-3}$, 2 – $f_v = 1.25 \cdot 10^{-2}$, 3 – $f_v = 2.5 \cdot 10^{-2}$, $\Delta d/d_0 = 1$, $\rho_{b0} = 10^7 m^{-1}$.

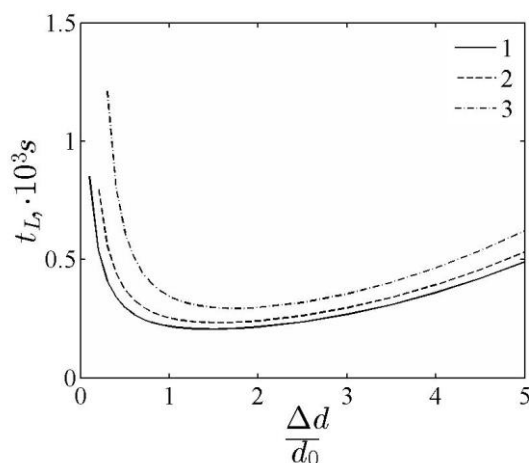


Рис. 2. Зависимость инкубационного периода anomalously роста зерен от исходного относительного отклонения размера зерна $\Delta d/d_0$ для сплава Cu-Al₂O₃ при различной объемной доле частиц второй фазы: 1 – $f_v = 0.5 \cdot 10^{-3}$, 2 – $f_v = 1.25 \cdot 10^{-2}$, 3 – $f_v = 2.5 \cdot 10^{-2}$, ($\rho_{b0} = 10^7 m^{-1}$).

Помимо рассмотренного процесса, приводящего к увеличению подвижности границ растущего зерна, осуществляется и другой процесс - увеличение плотности дислокаций в границах при «заметании» дислокаций мигрирующими границами из окружающего объема «матрицы». Этот процесс приводит к замедлению скорости миграции границ и роста зёрен. Как показывает анализ, это приводит к тому, что по истечению определённого времени отжига рост зёрен замедляется настолько, что скорость релаксации неравновесного избыточного объема границ зёрен за счёт испускания ими неравновесных вакансий начинает преобладать над скоростью его увеличения, подвижность границ падает и, наконец, становится сопоставимой с подвижностью границ зёрен «матрицы».

На рис. 3 представлены зависимости размера anomalously растущих зерен d по истечении заданного времени отжига ($t = 4 \cdot 10^2 s$) от исходного отклонения их размера от среднего размера зерен «матрицы» $\Delta d/d_0$ при различных значениях объемной доли частиц второй фазы f_v . Видно, что при увеличении величины f_v происходит уменьшение конечного размера anomalously растущих зерен. Вид представленных зависимостей указывает на то, что изначально крупные зерна растут медленнее на поздней стадии процесса роста зерен по сравнению с более мелкими anomalously растущими зернами. Такое поведение можно объяснить тем, что границы более крупных зерен на начальной стадии отжига обладают более высокой «стартовой» скоростью; в то же время возврат дефектной структуры в соседних зернах не успевает завершиться за время инкубационного периода, и мигрирующая граница эффективно замедляется за счет увеличения плотности дислокаций. Границы более мелких зерен вследствие их более низкой «стартовой» скорости миграции и более продолжительного инкубационного периода двигаются через объем поликристалла, в котором процесс возврата дефектной структуры привел к значительному понижению плотности дислокаций, в силу чего эффективный коэффициент подвижности этих границ оказывается выше. Вследствие этого, anomalously растущие зерна, «стартовавшие» в различные моменты времени, по истечении определенного времени отжига достигают близких по величине размеров. При этом в материале формируется бимодальная структура,

состоящая из относительно крупных близких по размерам зерен на фоне мелкозернистой «матрицы».

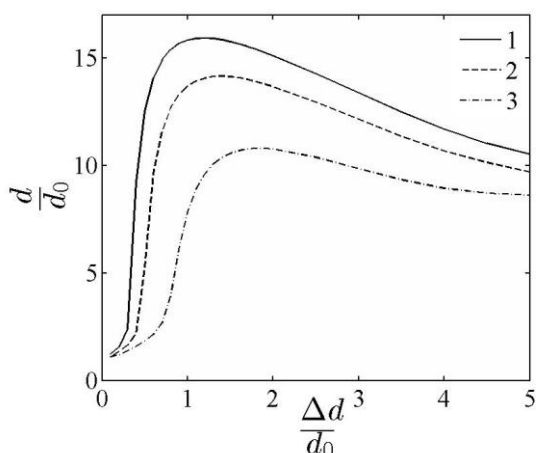


Рис. 3. Зависимость конечного размера зерна при заданном времени отжига от величины $\Delta d/d_0$ для сплава Cu-Al₂O₃ при различной объемной доле частиц второй фазы: 1 - $f_v = 0.5 \cdot 10^{-3}$, 2 - $f_v = 1.25 \cdot 10^{-2}$, 3 - $f_v = 2.5 \cdot 10^{-2}$, $\rho_{b0} = 10^7 m^{-1}$.

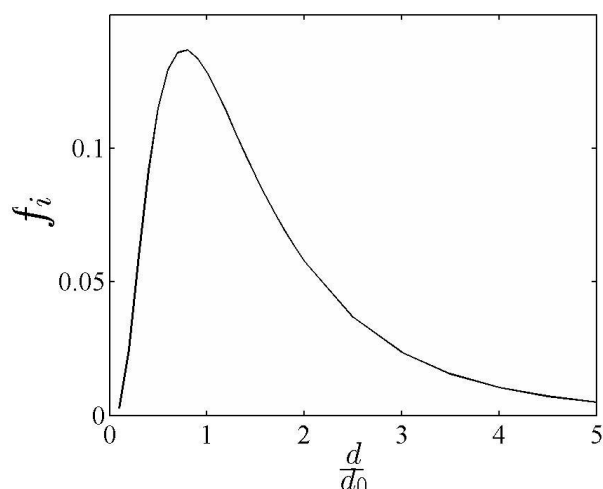


Рис. 4. Функция распределения зерен по размерам в меди ($f_v = 0$), полученной методом РКУП [5]. Средний размер зерна: $d_0 = 2.5 \cdot 10^{-7} m$

Анализ кинетики изменения функции распределения аномально растущих зерен по размерам был проведен на примере СМК меди (со средним размером зерна $d_0 = 2.5 \cdot 10^{-7} m$), полученной методом равноканального углового прессования (РКУП) (число проходов 12, маршрут В_с) [5]. Исходная функция распределения зёрен по размерам f_i СМК меди показана на рис. 4. При анализе предполагалось, что в процессе отжига отсутствуют «столкновения» аномально растущих зерен между собой. Результаты численного анализа представлены на рис. 5. Как и следовало ожидать, при увеличении времени отжига происходит постепенное увеличение доли крупных зерен и формирование четко выраженной бимодальной структуры, содержащей крупные зерна на фоне мелкозернистой матрицы.

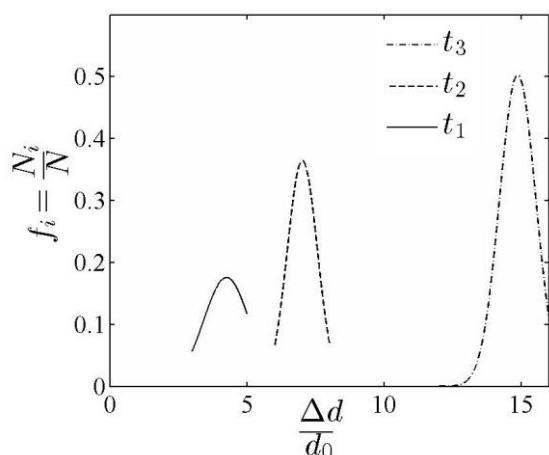


Рис. 5. Эволюция функции распределения аномально растущих зерен по размерам d в меди ($f_v = 0$). Начальная плотность дислокаций $\rho_{b0} = 10^7 m^{-1}$, N_i - число зерен с размером d_i , N - общее число зерен. $t_1 = 200 s$, $t_2 = 240 s$, $t_3 = 400 s$.

Выводы

1. Показано, что аномальный рост зерен в субмикроструктурных материалах, полученных методами интенсивной пластической деформации, обусловлен переходом границ растущего зерна в неравновесное состояние и, как следствие, резким повышением их миграционной подвижности.
2. Проанализирована кинетика аномального роста зерна в процессе отжига меди и квазиоднофазного сплава Cu-Al₂O₃ с субмикроструктурной структурой при различных начальных значениях отклонения размера растущего зерна от размера зерен «матрицы» Δd и объемной доли частиц второй фазы f_v . Установлено, что увеличение Δd и уменьшение f_v приводит к уменьшению инкубационного периода аномального роста зерен.
3. На примере меди проанализирована эволюция функции распределения аномально растущих зерен по размерам. Показано, что возможность формирования в субмикроструктурных материалах четко выраженной бимодальной структуры связана с тем, что аномально растущие зерна, «стартовавшие» в различные моменты времени, по истечении определенного времени отжига достигают приблизительно одинакового размера.

Список литературы

1. *Перевезенцев В.Н., Пупынин А.С.* Анализ влияния параметров микроструктуры на аномальный рост зерен в субмикроструктурных металлах и сплавах. Часть I. Физическая модель // Вестник научно-технического развития. - 2018. - № 3 (127). С.22-27.
2. *Perevezentsev V.N., Pupyinin 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.
3. *Surholt T., Herzig Chr.* Grain boundary self-diffusion in Cu polycrystals of different purity / Acta Metall. Mater. – 1997. - Vol. 45, No. 9. - P. 3817-3823.
4. *Frost H. J., Ashby M. F.* Deformation-Mechanisms Maps (Pergamon, Oxford, 1982).
5. *Zhao Y.-H. et al.* Simultaneously increasing the ductility and strength of ultra-fine grained pure copper // Adv. Mater. - 2006. - Vol. 18. - P. 2949–2953.

Дата поступления: 23 марта 2018 г.